Teória kondenzovaných látok

verzia 23.10.2020

Richard Hlubina Univerzita Komenského Bratislava, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

Predhovor

Toto je **predbežná verzia** skriptu k predmetu PhD štúdia *Teória kondenzovaných látok*. Vzniká prepracovaním môjho staršieho textu *Kvantová teória mnohočasticových systémov*, pretože časť materiálu z tohto textu som presunul do novovzniknutého predmetu magisterského štúdia *Fyzika mnohých častíc*.

Čo už treba vedieť

V týchto prednáškach predpokladám aspoň pasívnu znalosť tém skúmaných v predmete Fyzika mnohých častíc. Z technického hľadiska nevyžadujem žiadne špeciálne poznatky, okrem znalosti formalizmu druhého kvantovania a metódy Hartreeho-Focka.

Čo sa možno naučíte

Cieľom týchto prednášok je popísať niektoré základné teoretické techniky používané v teórii kondenzovaných látok a ozrejmiť, v akých situáciách ich možno použiť. Druhou úlohou je demonštrovať použitie spomínaných techník pri štúdiu konkrétnych fyzikálnych problémov. Väčšina príkladov sa venuje supratekutosti, supravodivosti a neusporiadaným systémom.

Plán výkladu

Prvé tri kapitoly predstavujú torzo, ktoré zostalo po vypustení materiálu už použitého vo Fyzike mno-hých častíc. V tejto časti plánujem urobiť väčšiu reorganizáciu materiálu (zatiaľ sú to skôr poznámky pre mňa):

- veľká zjednotená teória, ktorá obsahuje väzbu na EM pole (aj s relativistickymi korekciami?!); klasifikácia izotrópnych materiálov podľa EM vlastností; spontánne narušenie symetrie a jeho dôsledky (sumár); modelové hamiltoniány a princíp adiabatickej kontinuity
- pojem matice hustoty, súvis s DMRG, variačný princíp (optimalizácia modelových hamiltoniánov)
- teória lineárnej odozvy s aplikáciami v teórii supratekutosti a supravodivosti (nmr a tlmenie ultrazvuku)

Modelový hamiltonián, ktorý je často exaktne riešiteľný, popisuje najjednoduchšie systémy s danou symetriou. Napríklad model neinteragujúcich elektrónov je najjednoduchším modelom obyčajného (t.j. nemagnetického, nesupravodivého, atď.) kovu. Podobne, BCS hamiltonián je najjednoduchším modelom supravodiča. Reálne kovy, supravodiče, atď. treba popisovať komplikovanejšími modelmi, ale verí sa, že odchýlky reálnych hamiltoniánov od modelových hamiltoniánov možno popísať pomocou poruchovej teórie. Túto vieru niekedy nazývajú predpokladom adiabatickej kontinuity. V nasledujúcich štyroch prednáškach popíšeme techniky, pomocou ktorých možno skúmať odchýlky od efektívnych hamiltoniánov.

V prednáške 4 zavádzame tzv. kauzálne a Matsubarove Greenove funkcie. Ukazujeme, ako možno Greenove funkcie určiť pomocou metódy pohybových rovníc. Túto techniku aplikujeme na problém pohybu elektrónov v neusporiadaných systémoch.

V prednáške 5 stručne vyložíme poruchovú teóriu pre coulombovský plyn elektrónov v jazyku Feynmanových diagramov. V prednáške 6 túto techniku aplikujeme na výpočet dielektrickej funkcie a energie základného stavu Coulombovho plynu.

V prednáške 7 ukážeme, ako možno technikou Feynmanových diagramov študovať zviazaný systém elektrónov a fonónov. Skonštruujeme Migdalovu-Eliašbergovu teóriu reálnych supravodičov.

Vo zvyšných prednáškach sa venujeme niektorým špeciálnejším problémom. Táto časť skrípt je ešte stále vo výstavbe. Zatiaľ sú spracované nasledovné témy:

V prednáške 8 popisujeme nehomogénne supravodiče pomocou rovníc Bogoľubova-de Gennesa. V rámci teórie BTK podrobnejšie skúmame transportné vlastnosti rozhrania supravodič-kov.

V prednáške 9 vykladáme metódy štúdia coulombovského plynu v externom potenciáli pomocou funkcionálu hustoty. Zmienime sa aj o metóde pseudopotenciálov.

V prednáške 10 študujeme Andersonov prechod kov-izolant. Prezentujeme diagramatický odhad veľkosti kritickej neusporiadanosti a škálovaciu teóriu prechodu kov-izolant.

V prednáške 11 ukazujeme, že každý problém možno v zásade previesť na diagonalizáciu matice. Touto technikou možno v princípe študovať aj problémy, v ktorých poruchová teória zlyháva.

V budúcnosti by som rád hovoril aj o iných neporuchových metódach, napríklad o stochastických metódach (Monte Carlo) a o numerickej renormalizačnej grupe. Výklad analytických techník by som rád doplnil o diskusiu tzv. Wardových identít, ako aj o základy techniky funkcionálneho integrálu.

Odkazy na iné texty

V prednáške sa odvolávam na nasledovné texty z nižších úrovní:

"Úvod do fyziky tuhých látok": prednáška číslo n citovaná ako I.n

"Elektrické a optické vlastnosti tuhých látok": prednáška číslo n citovaná ako II.n

"Fyzika mnohých častíc": prednáška číslo n citovaná ako III.n

Poďakovanie

Ďakujem všetkým, ktorí akýmkoľvek spôsobom prispeli k vylepšeniu tohto textu. Osobitne by som sa chcel poďakovať V. Černému a P. Markošovi za cenné diskusie a pripomienky.

Obsah

1	Teória lineárnej odozvy; korelačné funkcie	5
2	Supratekuté hélium: excitačné spektrum	13
3	Supravodivosť	18
4	Greenove funkcie	25
5	Poruchová teória a Feynmanove diagramy	36
6	Coulombovský plyn elektrónov	45
7	Zviazaný systém elektrónov a fonónov	56
8	Nehomogénna supravodivosť	67
9	Metódy výpočtu pásových štruktúr	76
10	Andersonov prechod kov-izolant	81
11	Neporuchové metódy: exaktná diagonalizácia	88
12	Dodatok	93
13	Literatúra	95

1 Teória lineárnej odozvy; korelačné funkcie

V tejto prednáške ukážeme, ako možno počítať odozvu makroskopického systému na malé aplikované polia. Ukážeme, že funkcie odozvy úzko súvisia s koreláciami v rovnovážnom systéme. Literatúra: Rickayzen, NP1, Sethna, Chaikin-Lubensky, pozri tiež III.10.

Matica hustoty

V kvantovej mechanike nesie úplnú informáciu a stave fyzikálneho systému vektor $|\psi\rangle$ príslušného Hilbertovho priestoru. Strednou hodnotou ľubovoľnej veličiny popísanej oprátorom \hat{A} systému v stave $|\psi\rangle$ je $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$. Alternatívne môžeme systém v stave $|\psi\rangle$ popísať operátorom $\hat{\varrho} = |\psi\rangle \langle \psi|$, tzv. maticou hustoty. Strednú hodnotu merania veličiny \hat{A} potom dostaneme nasledovne:

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\hat{\varrho}\hat{A},$$

kde TrX je stopa operátora, t.j. suma diagonálnych elementov TrX = $\sum_{n} \langle n|X|n \rangle$, kde $|n\rangle$ je úplný ortonormálny systém stavov. Takáto definícia reprodukuje štandardný výsledok, pretože

$$\mathrm{Tr}\hat{\varrho}\hat{A} = \sum_{n} \langle n|\psi\rangle \langle \psi|\hat{A}|n\rangle = \sum_{n} \langle \psi|\hat{A}|n\rangle \langle n|\psi\rangle = \langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle,$$

kde sme v poslednom kroku využili úplnosť systému stavov $n, \sum_n |n\rangle \langle n| = 1.$

Operátor $P_{\psi} = |\psi\rangle\langle\psi|$ je tzv. projektor, t.j. operátor, pre ktorý platí $P_{\psi}^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = P_{\psi}$. Nech λ je vlastným číslom projektora príslušným k vlastnému vektoru $|a\rangle$. Potom musí platiť $\lambda^2|a\rangle = P_{\psi}^2|a\rangle = P_{\psi}|a\rangle = \lambda|a\rangle$, čiže $\lambda^2 = \lambda$. Preto vlastné hodnoty projektora sú 0 alebo 1. Ak je matica hustoty projektorom, t.j. ak $\hat{\varrho}^2 = \hat{\varrho}$, potom príslušný stav nazývame čistým stavom.

Pojem matice hustoty možno použiť aj na popis systémov pri konečnej teplote. Vtedy totiž predpokladáme, že systém sa môže nachádzať v stavoch $|n\rangle$ s pravdepodobnosťami $|c_n|^2$, pričom $\sum_n |c_n|^2 = 1$. Takúto situáciu možno popísať maticou hustoty

$$\hat{\varrho} = \sum_{n} |c_n|^2 |n\rangle \langle n|$$

Naozaj, v takomto prípade $A = \text{Tr}\hat{\varrho}\hat{A} = \sum_{n} |c_{n}|^{2} \langle n|\hat{A}|n\rangle$, ako by aj malo byť.¹ Prejdime teraz od bázy $|n\rangle$, v ktorej je matica hustoty diagonálna, do všeobecnej bázy $|i\rangle$, pričom $|n\rangle = \sum_{i} a_{ni}|i\rangle$. V takejto báze máme

$$\hat{\varrho} = \sum_{ij} \varrho_{ij} |i\rangle (j|,$$

pričom $\rho_{ij} = \sum_n |c_n|^2 a_{ni} a_{nj}^*$. Maticové elementy ρ_{ij} musia preto spĺňať nasledovné podmienky:

$$\varrho_{ii} = \sum_{n} |c_n|^2 |a_{ni}|^2 \ge 0, \quad \text{Tr}\hat{\varrho} = \sum_{n} |c_n|^2 \sum_{i} |a_{ni}|^2 = \sum_{n} |c_n|^2 = 1.$$

Okrem toho musí byť matica ρ_{ij} pozitívne definitná. Naozaj, skúmajme strednú hodnotu projektora P_{ψ} v stave popísanom všeobecnou maticou hustoty $\hat{\rho}$. Keďže vlastné hodnoty projektora sú nezáporné, musí platiť $\text{Tr}\hat{\rho}P_{\psi} = \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0$. Keďže nerovnosť platí pre všetky stavy $|\psi\rangle$, matica ρ_{ij} musí byť pozitívne definitná.

Pohybová rovnica pre maticu hustoty. Predpokladajme, že hamiltonián študovaného systému je H. Schrödingerove rovnice pre stavy $|m\rangle$ a $\langle n|$ potom možno písať v tvare $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|m\rangle = H|m\rangle$ a $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle n| = \langle n|H$. Pohybová rovnica pre maticu hustoty má preto tvar²

$$i\hbar\dot{\varrho} = \sum_{m,n} \varrho_{mn} i\hbar\frac{\partial}{\partial t} (|m\rangle\langle n|) = \sum_{m,n} \varrho_{mn} (H|m\rangle\langle n| - |m\rangle\langle n|H)$$

¹Keby sme príslušný stav popísali vlnovou funkciou $|\psi\rangle = \sum_{n} c_n |n\rangle$, stredná hodnota operátora \hat{A} by bola $A = \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle n | A | m \rangle$, t.j. obsahovala by aj nefyzikálne interferencie medzi stavmi $|n\rangle$ a $|m\rangle$, napr. medzi živou a mŕtvou mačkou.

²Odteraz kvôli jednoduchosti zápisu nepíšeme striešky nad operátormi.

kde sme naviac predpokladali, že koeficient
y ϱ_{mn} nezávisia od času. Pohybovú rovnicu možno zapísať v kompaktnom tvare

$$\left|i\hbar\dot{\varrho} = [H,\varrho].\right| \tag{1}$$

Špeciálnym príkladom matice hustoty je matica hustoty kánonického súboru $\rho = \frac{1}{Z}e^{-H/T}$, kde $Z = \text{Tr}e^{-H/T}$. V báze vlastných stavov hamiltoniánu H majú maticové elementy tejto matice tvar $\rho_{mn} = \langle m | \rho | n \rangle = \frac{1}{Z}e^{-E_n/T}\delta_{mn}$, t.j. matica hustoty je diagonálna.

Kubova formula

Naším cieľom bude štúdium nasledovnej úlohy. Skúmajme systém s hamiltoniánom H, na ktorý je aplikované vonkajšie pole popísané hamiltoniánom H'(t). Pýtajme sa, ako sa zmení stredná hodnota veličiny M pod vplyvom poruchy H'(t). Budeme pritom predpokladať, že porucha je slabá a obmedzíme sa na skúmanie zmeny $\delta M(t)$ do prvého rádu podľa H'(t).

Matica hustoty $\varrho(t)$ má spĺňať pohybovú rovnicu $\dot{\varrho} = \frac{1}{i\hbar}[H + H'(t), \varrho]$ a stredná hodnota veličiny *M* bude v čase *t* nadobúdať hodnotu $M(t) = \text{Tr}\varrho(t)M$. Našou úlohou teda najprv bude nájsť $\varrho(t)$.

Predpokladajme, že hamiltonián neporušeného systému H nezávisí od času a definujme časový vývoj operátora A v tzv. interakčnej reprezentácii:

$$\widetilde{A}(t) = e^{iHt/\hbar} A(t) e^{-iHt/\hbar}.$$

Prepísaním pohybovej rovnice pre ρ do interakčnej reprezentácie dostávame $\tilde{\dot{\rho}}(t) = \frac{1}{i\hbar}[H + \widetilde{H'}(t), \widetilde{\rho}(t)]$, kde sme využili, že $\widetilde{AB} = \widetilde{AB}$ a $\widetilde{H} = H$. Na druhej strane, počítaním časovej derivácie operátora $\widetilde{\rho}(t)$ dostávame $\dot{\widetilde{\rho}}(t) = \tilde{\dot{\rho}} - \frac{1}{i\hbar}[H, \widetilde{\rho}(t)]$, kde prvý člen pochádza zo závislosti $\rho(t)$ od času. Vylúčením $\tilde{\dot{\rho}}$ z oboch výrazov dostávame pohybovú rovnicu pre $\tilde{\rho}$ v interakčnej reprezentácii:

$$\dot{\widetilde{\varrho}}(t) = \frac{1}{i\hbar} \left[\widetilde{H'}(t), \widetilde{\varrho}(t) \right].$$

Výhodou tejto rovnice je, že časový vývoj podľa H je zahrnutý automaticky. Pohybovú rovnicu pre $\tilde{\varrho}$ možno zapísať v integrálnom tvare:

$$\widetilde{\varrho}(t) = \widetilde{\varrho}(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left[\widetilde{H'}(t'), \widetilde{\varrho}(t') \right].$$

Derivovaním podľa t sa ľahko overí, že integrálna rovnica reprodukuje diferenciálnu rovnicu. Integrálna rovnica naviac automaticky spĺňa počiatočnú podmienku v čase t_0 . Predpokladajme, že pred časom t_0 na študovaný systém nepôsobila porucha a preto $\varrho(t_0) = \varrho_0$, kde ϱ_0 je rovnovážna matica hustoty kánonického (alebo grandkánonického) súboru s hamiltoniánom H, $\varrho_0 = \frac{1}{Z}e^{-H/T}$. Všimnime si, že $\tilde{\varrho_0} = \varrho_0$.

Integrálnu pohybovú rovnicu možno jednoducho riešiť poruchovou metódou. Naozaj, dosaď me za $\tilde{\varrho}(t')$ na pravej strane integrálnej rovnice integrálnu rovnicu písanú pre $\tilde{\varrho}(t')$:

$$\widetilde{\varrho}(t) = \varrho_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left[\widetilde{H'}(t'), \varrho_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' \left[\widetilde{H'}(t''), \widetilde{\varrho}(t'') \right] \right].$$

Ak teraz dosadíme za $\tilde{\varrho}(t'')$ na pravej strane integrálnej rovnice integrálnu rovnicu písanú pre $\tilde{\varrho}(t'')$ a túto procedúru opakujeme, dostaneme rozvoj matice hustoty $\tilde{\varrho}(t)$ podľa mocnín poruchy H'. Ak sa obmedzíme na korekcie prvého rádu, dostaneme

$$\widetilde{\varrho}(t) = \varrho_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left[\widetilde{H'}(t'), \varrho_0 \right],$$

alebo po návrate z interakčnej reprezentácie späť do Schrödingerovej reprezentácie:

$$\varrho(t) = \varrho_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' e^{-iHt/\hbar} \left[\widetilde{H'}(t'), \varrho_0 \right] e^{iHt/\hbar}.$$

Stredná hodnota veličiny M v čase t je preto rovná

$$\langle M(t)\rangle = \operatorname{Tr}\{M\varrho(t)\} = \operatorname{Tr}\{M\varrho_0\} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^t dt' \operatorname{Tr}\left\{Me^{-iHt/\hbar}\left[\widetilde{H'}(t'), \varrho_0\right]e^{iHt/\hbar}\right\}$$

Rovnovážnu strednú hodnotu veličiny A označme $\langle A \rangle_0 = \text{Tr} \rho_0 A$. Ak ďalej uvážime, že Tr(ABC) = Tr(BCA) atď., dostaneme odtiaľto

$$\langle M(t)\rangle - \langle M\rangle_0 = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \operatorname{Tr}\left\{\widetilde{M}(t)\left[\widetilde{H'}(t'), \varrho_0\right]\right\} = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left\langle \left[\widetilde{M}(t), \widetilde{H'}(t')\right]\right\rangle_0 dt'$$

kde sme v druhej rovnici ešte raz použili pravidlo o nemennosti stopy pri cyklickej zámene operátorov. Preto odchýlku $\langle \delta M(t) \rangle = \langle M(t) \rangle - \langle M \rangle_0$ od rovnovážnej hodnoty veličiny M možno vyjadriť v tvare

$$\langle \delta M(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \left\langle \left[\widetilde{M}(t), \widetilde{H'}(t') \right] \right\rangle_0$$
 Kubo (2)

Rovnica (2) predstavuje hlavný výsledok tejto kapitoly: odozva systému $\delta M(t)$ na vonkajšie pôsobenie H'(t') je daná rovnovážnou korelačnou funkciou a nazývame ju Kubovou formulou.

Rovnica (2) nám v princípe umožňuje študovať aj prechodové javy po zapnutí poruchy. Obvykle nás však zaujíma odozva po doznení prechodových javov, preto volíme $t_0 \to -\infty$. Naviac, obvykle možno poruchový člen písať v tvare H'(t) = a(t)B, kde a(t) je klasické časovo závislé pole a B je od času nezávislý operátor interakcie medzi klasickým poľom a študovaným systémom. Pre takéto systémy platí $\widetilde{H'}(t) = a(t)\widetilde{B}$ a Kubovu formulu môžeme písať v tvare³

$$\langle \delta M(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathcal{G}_{MB}(t-t') a(t'),$$

kde sme zaviedli tzv. Greenovu funkciu $\mathcal{G}_{MB}(t)$ popisujúcu odozvu veličiny M na veličinu B:

$$\mathcal{G}_{MB}(t) = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\widetilde{M}(t), B(0) \right] \right\rangle_0 \theta(t),$$

pričom $\theta(t)$ je Heavisideova funkcia. Greenova funkcia $\mathcal{G}_{MB}(t)$ sa často nazýva aj funkciou odozvy (veličiny M na veličinu B).

Teda odchýlka $\langle \delta M(t) \rangle$ od rovnovážnej hodnoty je daná konvolúciou klasického poľa a(t) a tzv. Greenovej funkcie $\mathcal{G}_{MB}(t-t')$. Všimnime si, že funkcia $\mathcal{G}_{MB}(t-t')$ je nenulová iba pre t' < t, t.j. odozva v čase t závisí iba od príčin v predošlých časoch t'. Tento predpoklad je v zhode s princípom príčinnosti (kauzality) a Greenovu funkciu $\mathcal{G}_{MB}(t-t')$ nazývame retardovanou. Pripomíname ešte raz, že $\mathcal{G}_{MB}(t)$ je daná rovnovážnymi koreláciami v študovanom systéme. Inými slovami, na určenie zmien v systéme pod vplyvom malých porúch stačí študovať korelácie v systéme bez porúch.

Predpokladajme napokon, že klasické pole má harmonický časový priebeh:⁴

$$a(t) = a_{\omega} e^{-i(\omega + i\gamma)t} = a_{\omega} e^{-i\omega t} e^{\gamma t},$$

kde $\gamma = 0^+$ je infinitezimálna kladná konštanta, ktorá popisuje pomalé zapínanie poruchy z nulovej hodnoty v čase $t \to -\infty$ s časovou konštantou $1/\gamma \to \infty$. Potom podľa Kubovej formuly platí

$$\langle \delta M(t) \rangle = a_{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathcal{G}_{MB}(t-t') e^{-i(\omega+i\gamma)t'} = G_{MB}(\omega) a_{\omega} e^{-i(\omega+i\gamma)t},$$

³Vďaka predpokladu o nezávislosti H od času sú časové vývoje operátorov dané exponenciálami $e^{\pm iHt/\hbar}$. Využitím cyklickej zámeny premenných ľahko ukážeme, že v takom prípade funkcia $\mathcal{G}_{MB}(t,t')$ závisí iba od rozdielu časov t-t'.

⁴Pre iné ako harmonické priebehy možno naše výsledky použiť nasledovne. V prvom kroku študovaný priebeh rozložíme na harmonické komponenty, nájdeme odozvy na ne, a v druhom kroku nájdené odozvy sčítame. Ešte jedna poznámka: naša voľba funkcie a(t) implikuje, že poruchový hamiltonián H'(t) nie je hermitovský. V III.10 sme tento problém odstránili tak, že sme študovali odozvu na poruchu popísanú ako súčet H'(t) a k nemu hermitovsky združeného operátora, kmitajúceho na frekvencii $e^{i\omega t}e^{\gamma t}$.

teda odozva na harmonický časový priebeh je harmonická, $\langle \delta M(t) \rangle = \langle \delta M \rangle_{\omega} e^{-i(\omega + i\gamma)t}$, pričom

$$\langle \delta M \rangle_{\omega} = G_{MB}(\omega) a_{\omega}, \qquad G_{MB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \mathcal{G}_{MB}(\tau) e^{i(\omega + i\gamma)\tau}.$$
 (3)

Formula (3) sa tiež nazýva Kubovou formulou. Všimnime si, že (pre harmonický časový priebeh) existuje medzi amplitúdou poruchy a_{ω} a amplitúdou odozvy $\langle \delta M \rangle_{\omega}$ jednoduchý algebraický vzťah. To je dôsledkom nezávislosti hamiltoniánu H od času.

Spektrálna reprezentácia

Teraz ukážeme, že ak poznáme všetky vlastné stavy $|n\rangle$ a im príslušné energie E_n systému bez interakcie s vonkajším poľom, t.j. hamiltoniánu H, potom aspoň v princípe vieme určiť funkciu odozvy. Počítajme:

$$\begin{split} G_{MB}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt G(t) e^{i(\omega+i\gamma)t} = \frac{1}{i\hbar} \int_{0}^{\infty} dt e^{i(\omega+i\gamma)t} \left\langle \left[\widetilde{M}(t), B\right] \right\rangle_{0} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{m} e^{-E_{m}/T} \frac{1}{i\hbar} \int_{0}^{\infty} dt e^{i(\omega+i\gamma)t} \left\langle m \left| \widetilde{M}(t) B - B\widetilde{M}(t) \right| m \right\rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-E_{m}/T} \frac{1}{i\hbar} \int_{0}^{\infty} dt e^{i(\omega+i\gamma)t} \left(\langle m | \widetilde{M}(t) | n \rangle \langle n | B | m \rangle - \langle m | B | n \rangle \langle n | \widetilde{M}(t) | m \rangle \right) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-E_{m}/T} \frac{1}{i\hbar} \int_{0}^{\infty} dt e^{i(\omega+i\gamma)t} \left(e^{i\omega_{mn}t} \langle m | M | n \rangle \langle n | B | m \rangle - e^{i\omega_{nm}t} \langle m | B | n \rangle \langle n | M | m \rangle \right), \end{split}$$

kde $\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n$ je rozdiel energií vlastných stavov. Explicitnou integráciou podľa času a zámenou sumačných indexov m, n v druhom člene napokon dostávame hľadanú spektrálnu reprezentáciu funkcie odozvy:

$$G_{MB}(\omega) = \frac{1}{\hbar Z} \sum_{m,n} \frac{\langle m|M|n\rangle \langle n|B|m\rangle}{\omega + i\gamma - \omega_{nm}} \left(e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T} \right).$$

Príklad: odozva neutrálneho plynu na potenciálové pole

Kubov formalizmus budeme teraz aplikovať na problém odozvy neutrálneho plynu na potenciálové pole. Odvodené výsledky budeme môcť priamo aplikovať pri štúdiu excitačných spektier hélia II. Štúdium odozvy nabitých častíc na elektromagnetické pole je zložitejšie, pretože celkové pole, v ktorom sa nabité častice hýbu, je súčtom externého poľa a poľa od indukovaných nábojov a prúdov. Tejto otázke sa budeme venovať pri štúdiu coulombovských systémov.

Veličinou, ktorej zmeny nás budú zaujímať, bude hustota častíc v bode **r**, t.j. $M = \rho(\mathbf{r})$.⁵ Budeme predpokladať, že časopriestorový priebeh potenciálového poľa vo vzorke s objemom \mathcal{V} je charakterizovaný frekvenciou ω a vlnovým vektorom **q**, t.j. $\varphi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\mathcal{V}}\varphi_{\mathbf{q}\omega}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-i(\omega+i\gamma)t}$. Interakciu plynu častíc s potenciálovým poľom v Schrödingerovom obraze $H'(t) = \int d^3\mathbf{r}'\varphi(\mathbf{r}',t)\rho(\mathbf{r}')$ preto možno písať ako súčin klasického potenciálu a(t) a operátora B, H' = a(t)B, kde

$$a(t) = \frac{1}{\mathcal{V}} \varphi_{\mathbf{q}\omega} e^{-i(\omega+i\gamma)t}, \qquad B = \int d^3 \mathbf{r}' e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \rho(\mathbf{r}').$$

Keďže predpokladáme, že hamiltonián H systému častíc nezávisí od času, môžeme predpokladať, že odozva systému bude mať časový vývoj $\langle \delta \rho(\mathbf{r},t) \rangle = \langle \delta \rho(\mathbf{r}) \rangle_{\omega} e^{i(\omega+i\gamma)t}$. Podľa Kubovej formuly (3) pritom musí platiť:⁶

$$\langle \delta \rho(\mathbf{r}) \rangle_{\omega} = \frac{1}{i\hbar \mathcal{V}} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\gamma)t} \int d^3 \mathbf{r}' e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \left\langle \left[\rho(\mathbf{r},t), \rho(\mathbf{r}') \right] \right\rangle_0 \varphi_{\mathbf{q}\omega}.$$

⁵Pripomíname, že maticu hustoty (t.j. stav systému) sme označovali symbolom ρ , kým operátor hustoty označujeme symbolom ρ .

⁶Odteraz budeme akýkoľvek časovo závislý operátor X(t) interpretovať ako $X(t) = e^{iHt/\hbar} X e^{-iHt/\hbar}$. Všimnime si, že operátor X(t) je teda zapísaný v interakčnom obraze vzhľadom na hamiltonián H + H', čo je vlastne Heisenbergov obraz vzhľadom na H.

Integrovaním $\int d^3 \mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ rovnice pre $\langle \delta \rho(\mathbf{r}) \rangle_{\omega}$ pri využití definície priestorovej Fourierovej transformácie (pozri Dodatok) dostaneme:

$$\langle \delta \rho \rangle_{\mathbf{k}\omega} = \frac{1}{i\hbar\mathcal{V}} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\gamma)t} \langle [\rho_{\mathbf{k}}(t), \rho_{-\mathbf{q}}] \rangle_0 \varphi_{\mathbf{q}\omega}.$$

V ďalšom výklade budeme naviac predpokladať, že študovaný systém častíc je translačne invariantný. V takom prípade však stredná hodnota $\langle [\rho_{\mathbf{k}}(t), \rho_{-\mathbf{q}}] \rangle_0$ nadobúda nenulovú hodnotu, iba ak $\mathbf{k} = \mathbf{q}$.⁷ Preto v študovanom systéme častíc bude odchýlka hustoty oscilovať iba na budiacej frekvencii a vlnovej dĺžke, $\langle \delta \rho(\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{1}{V} \langle \delta \rho \rangle_{\mathbf{q}\omega} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-i(\omega+i\gamma)t}$, pričom bude platiť

$$\langle \delta \rho \rangle_{\mathbf{q}\omega} = \chi(\mathbf{q}, \omega) \varphi_{\mathbf{q}\omega}$$

kde

$$\chi(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{i\hbar\mathcal{V}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega+i\gamma)t} \langle [\rho_{\mathbf{q}}(t), \rho_{-\mathbf{q}}] \rangle_0 \theta(t).$$

Ukázali sme teda, že odozva na potenciálové pole je popísaná funkciou odozvy typu hustota-hustota. Za povšimnutie stojí, že $\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} = \rho_{-\mathbf{q}}$, čiže operátory M a B sú hermitovsky združené. Vďaka tomu možno spektrálnu reprezentáciu zjednodušiť na tvar s explicitne reálnym čitateľom:

$$\chi(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{\hbar Z \mathcal{V}} \sum_{m,n} \frac{|\langle m|\rho_{\mathbf{q}}|n\rangle|^2}{\omega + i\gamma - \omega_{nm}} \left(e^{-E_m/T} - e^{-E_n/T} \right).$$

Kramersove-Kronigove vzťahy

Keď študujeme funkciu odozvy $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ ako funkciu komplexnej frekvencie ω , pomocou spektrálnej reprezentácie ľahko nahliadneme, že $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ má singularity pre $\omega = \omega_{nm} - i\gamma$. V makroskopických systémoch so spojitým spektrom je teda funkcia $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ singulárna na čiare (tzv. reze) infinitezimálne pod reálnou osou. V hornej polrovine komplexnej roviny ω je funkcia $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ analytická. Keď že naviac pre veľké frekvencie $\chi \propto 1/\omega$, sú splnené predpoklady,⁸ na základe ktorých platia Kramersove-Kronigove (alebo disperzné) vzťahy:

$$\chi'(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds \chi''(\mathbf{q},s)}{s-\omega}, \qquad \chi''(\mathbf{q},\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds \chi'(\mathbf{q},s)}{s-\omega}.$$

Kramersove-Kronigove vzťahy nám umožňujú zo známej funkcie $\chi''(\mathbf{q},\omega)$ vypočítať $\chi'(\mathbf{q},\omega)$ a naopak. Na záver pripojme dve poznámky:

1. Kramersove-Kronigove vzťahy platia pre všetky Greenove funkcie, pre ktoré platí $B = M^{\dagger}$, t.j. pre Greenove funkcie $G_{MM^{\dagger}}(\omega)$.

2. V matematickej literatúre sa funkcia $G''_{MM^{\dagger}}(\omega)$ nazýva Hilbertovou transformáciou funkcie $G'_{MM^{\dagger}}(\omega)$.

Struktúrny faktor

Skúmajme rozptyl testovacích častíc na časticiach neutrálneho plynu. Pre konkrétnosť si môžeme predstaviť rozptyl neutrónov na atómoch ⁴He. Nech súradnica neutrónu je **R** a nech súradnice atómov ⁴He sú \mathbf{r}_i . Nech neutróny interagujú s atómami ⁴He prostredníctvom potenciálu $V(\mathbf{r})$. Potom hamiltonián popisujúci interakciu neutrónu a sústavy atómov je

$$H_{\rm int} = \sum_i V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}$$

⁷Ak využijeme translačnú invariantnosť, môžeme totiž písať

$$\begin{split} \int d^{3}\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \int d^{3}\mathbf{r}' e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \left\langle \left[\rho(\mathbf{r},t),\rho(\mathbf{r}')\right] \right\rangle_{0} &= \int d^{3}\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \int d^{3}\mathbf{r}' e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \left\langle \left[\rho(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t),\rho(\mathbf{0})\right] \right\rangle_{0} \\ &= \int d^{3}\mathbf{R} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left\langle \left[\rho(\mathbf{R},t),\rho(\mathbf{0})\right] \right\rangle_{0} \int d^{3}\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'}, \end{split}$$

kde sme v druhej rovnosti prešli od premennej r k $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r'}$. Ale posledný výraz je úmerný $\delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}$; dôkaz je hotový. ⁸Pozri napríklad I.21. kde sme predpokladali, že Fourierov rozvoj potenciálu $V(\mathbf{r})$ je $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ a definovali sme Fourierovu komponentu operátora hustoty častíc $\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} = \sum_{i} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{i}}$, pozri Dodatok.

Predpokladajme teraz, že neutrón sa rozptýli zo stavu s hybnosťou \mathbf{P} a energiou E do stavu s hybnosťou $\mathbf{P} - \hbar \mathbf{q}$ a energiou $E - \hbar \omega$. S pravdepodobnosťou $\frac{1}{Z}e^{-E_m/T}$ sa systém atómov pred rozptylom nachádzal vo vlastnom stave $|m\rangle$ s energiou E_m . Nech po rozptyle systém atómov prejde do vlastného stavu $|n\rangle$ s energiou E_n . Podľa Fermiho zlatého pravidla je pravdepodobnosť takéhoto rozptylu za jednotku času daná vzťahom

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \left| (f|H_{\text{int}}|i) \right|^2 \delta \left(E_f - E_i \right),$$

kde počiatočný stav sústavy atómy + neutrón je stav $|i\rangle = |\mathbf{P}\rangle \otimes |m\rangle$ s energiou $E_i = E + E_m$. Konečným stavom je stav $|f\rangle = |\mathbf{P} - \hbar \mathbf{q}\rangle \otimes |n\rangle$ s energiou $E_f = E - \hbar \omega + E_n$. Keďže platí $\langle \mathbf{P} - \hbar \mathbf{q} | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} | \mathbf{P} \rangle = \delta_{\mathbf{kq}}$, dostaneme odtiaľto

$$W = \frac{2\pi}{\hbar \mathcal{V}^2} |V_{\mathbf{q}}|^2 \left| \langle n | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | m \rangle \right|^2 \delta \left(\hbar \omega - \hbar \omega_{nm} \right),$$

kde $\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$. Sčítaním cez všetky možné počiatočné a konečné stavy systému atómov⁹ zistíme, že pravdepodobnosť rozptylu neutrónu so zmenou hybnosti $\hbar \mathbf{q}$ a zmenou energie $\hbar\omega$ je úmerná tzv. dynamickému štruktúrnemu faktoru systému atómov,

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{Z\mathcal{V}} \sum_{m} e^{-E_m/T} \sum_{n} |\langle n|\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}|m\rangle|^2 \delta\left(\omega - \omega_{nm}\right), \qquad (4)$$

kde $\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$. Všimnime si, že $S(\mathbf{q}, \omega) \ge 0$ pre všetky frekvencie ω , keďže ide o súčet nezáporných sčítancov. Naviac, pri teplote T = 0 pre všetky záporné frekvencie ω platí $S(\mathbf{q}, \omega) = 0$.

Poznámka. Pojem štruktúrneho faktora možno zaviesť pre akúkoľvek Greenovu funkciu typu $G_{MM^{\dagger}}(\omega)$. Štruktúrny faktor príslušný ku $G_{MM^{\dagger}}(\omega)$ dostaneme z (4) nahradením operátora $\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ operátorom M^{\dagger} .

Dynamický štruktúrny faktor je (časovou) Fourierovou transformáciou nasledovnej funkcie:

$$\mathcal{S}(\mathbf{q},t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} S(\mathbf{q},\omega) e^{-i\omega t} = \frac{1}{2\pi Z \mathcal{V}} \sum_{m} e^{-E_m/T} \sum_{n} e^{i\omega_{mn}t} \langle m | \rho_{\mathbf{q}} | n \rangle \langle n | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | m \rangle.$$

Ak využijeme, že $e^{i\omega_{mn}t} \langle m|\rho_{\mathbf{q}}|n\rangle = \langle m|\rho_{\mathbf{q}}(t)|n\rangle$ a ak ďalej využijeme úplnosť systému vlastných stavov $1 = \sum_{n} |n\rangle \langle n|$, pre funkciu $\mathcal{S}(\mathbf{q}, t)$ dostaneme výsledok

$$\mathcal{S}(\mathbf{q},t) = \frac{1}{2\pi\mathcal{V}} \langle \rho_{\mathbf{q}}(t) \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}(0) \rangle, \qquad (5)$$

kde sme lomenými zátvorkami označili tepelnú strednú hodnotu: $\langle X \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n} \langle n | X | n \rangle e^{-E_n/T}$. Teda $\mathcal{S}(\mathbf{q},t)$ je dynamickou korelačnou funkciou medzi (priestorovými) Fourierovými komponentami hustoty. Táto korelačná funkcia môže byť nenulová aj v systémoch, v ktorých $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle = 0$. V takýchto prípadoch (ktoré nás obvykle zaujímajú) $\mathcal{S}(\mathbf{q},t)$ meria fluktuácie vĺn hustoty.

Pokiaľ meriame iba zmenu hybnosti testovacej častice, potom pravdepodobnosť rozptylu so zmenou hybnosti $\hbar \mathbf{q}$ popisuje tzv. statický štruktúrny faktor $S_{\mathbf{q}}$, ktorý je súčtom pravdepodobností rozptylu so všetkými možnými prenosmi energie, $S_{\mathbf{q}} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(\mathbf{q}, \omega) = 2\pi \mathcal{S}(\mathbf{q}, 0)$. Ak využijeme explicitné vyjadrenie funkcie $\mathcal{S}(\mathbf{q}, t)$, pre statický štruktúrny faktor napokon dostame vyjadrenie

$$S_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} \rangle.$$

Všimnime si, že statický štruktúrny faktor závisí iba od statickej korelačnej funkcie medzi vlnami hustoty v študovanom systéme (t.j. obidva operátory hustoty sú počítané v tom istom čase).

Na záver pripomeňme, že experimentálne určený štruktúrny faktor by mal závisieť od okamžitých konfigurácií rozptyľujúcich častíc v čase rozptylu. Avšak, pretože typický difrakčný experiment sa realizuje akumuláciou dát za čas dlhý v porovnaní s typickými fluktuačnými časmi vo vzorke,¹⁰

 $^{^9\}mathrm{Tieto}$ stavy nesledujeme, sledujeme len stavy neutrónu.

¹⁰Poznamenajme, že pri výpočte štruktúrneho faktora pre dokonalé kryštály možno časové ustrednenie vynechať, kým v prípade kvapalín je ustrednenie kľúčové, pretože častice kvapaliny v čase putujú po vzorke.

experiment v skutočnosti meria štruktúrny faktor stredovaný v čase. V ergodických systémoch však možno stredovanie cez čas nahradiť stredovaním cez štatistický súbor, teda naše formuly sú zmysluplné.

Fluktuačne-disipačná veta

Porovnaním spektrálnych reprezentácií imaginárnej časti funkcie odozvy $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$ a dynamického štruktúrneho faktora $S(\mathbf{q}, \omega)$ dostávame tzv. fluktuačne-disipačnú vetu

$$S(\mathbf{q},\omega) = -\frac{\hbar}{\pi} \left[n(\omega) + 1 \right] \chi''(\mathbf{q},\omega),$$
(6)

kde $n(\omega) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1}$ je Boseho-Einsteinova distribučná funkcia.

Názov pochádza z nasledovných úvah. Videli sme, že $S(\mathbf{q}, \omega)$ meria fluktuácie v systéme. Na druhej strane, imaginárna časť funkcie odozvy $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$ meria schopnosť študovaného systému odoberať energiu z budiaceho systému kmitajúceho s vlnovým vektorom \mathbf{q} a frekvenciou ω , teda stratu (disipáciu) energie z budiaceho systému.¹¹ Fluktuačne-disipačná veta teda hovorí, že schopnosť absorbovať energiu je priamo úmerná rovnovážnym fluktuáciám.

Ak využijeme vzťah
y $\chi''(\mathbf{q},\omega) = -\chi''(\mathbf{q},-\omega)$ a $n(-\omega) + 1 = -n(\omega)$, ľahko odvodíme alternatívnu formu fluktu
ačnej vety, $S(\mathbf{q},-\omega) = -\frac{\hbar}{\pi}n(\omega)\chi''(\mathbf{q},\omega)$. Preto môžeme tiež písať

$$S(\mathbf{q},\omega) - S(\mathbf{q},-\omega) = -\frac{\hbar}{\pi}\chi''(\mathbf{q},\omega).$$

Treba zdôrazniť, že fluktuačne-disipačná veta (6) platí v nezmenenej forme medzi akoukoľvek funkciou $G''_{MM^{\dagger}}(\omega)$ a k nej príslušnou spektrálnou funkciou. Špeciálnym prípadom je Nyquistov vzťah $\langle V^2 \rangle = 4RT \times \Delta f$ medzi tepelnými fluktuáciami napätia $\langle V^2 \rangle$ medzi koncami drôtu (meranými pri teplote T vo frekvenčnom intervale Δf) a odporom R drôtu (ktorý je meradlom disipácie energie v drôte). Iným príkladom je vzťah medzi koeficientom trenia a náhodnou fluktuujúcou silou pri Brownovom pohybe, pozri cvičenia.

Sumačné pravidlá

Nakoniec odvodíme exaktné výsledky pre momenty dynamického štruktúrneho faktora $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^{\alpha} S(\mathbf{q}, \omega)$ s $\alpha = \pm 1$. Tieto výsledky možno použiť ako kontrolu konzistentnosti približných výpočtov. Netriviálnym príkladom ich použitia je Feynmanova teória excitačného spektra hélia II.

Pravidlo f-súm

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega S(\mathbf{q},\omega) = \frac{\hbar n \mathbf{q}^2}{2m}.$$

Dôkaz. Predpokladajme, že skúmaný systém je symetrický voči inverzii. Potom platí $S(\mathbf{q}, \omega) = S(-\mathbf{q}, \omega)$. Ak použijeme spektrálnu reprezentáciu štruktúrneho faktora $S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2} [S(\mathbf{q}, \omega) + S(-\mathbf{q}, \omega)]$, ľahko ukážeme, že

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2\mathcal{V}\hbar} \left\langle \left[\left[\rho_{\mathbf{q}}, H \right], \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} \right] \right\rangle.$$

Na druhej strane platí vzťah $[\rho_{\mathbf{q}}, H] = i\hbar\dot{\rho}_{\mathbf{q}}$, pretože ide o pohybovú rovnicu pre operátor $\rho_{\mathbf{q}}$. Použijúc rovnicu kontinuity $\dot{\rho}_{\mathbf{q}} + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = 0$ potom dostávame $[\rho_{\mathbf{q}}, H] = \hbar\mathbf{q}\cdot\mathbf{j}_{\mathbf{q}}$. Ak využijeme explicitné výrazy pre nábojové a prúdové hustoty (pozri III.10)

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{i} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{i}}, \qquad \mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2m} \sum_{i} \left[\mathbf{p}_{i} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{i}} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{i}} \mathbf{p}_{i} \right],$$

kde suma beží cez jednotlivé častice, dostaneme napokon

$$\left\langle \left[\left[\rho_{\mathbf{q}}, H \right], \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} \right] \right\rangle = \frac{N\hbar^2 \mathbf{q}^2}{m}.$$

¹¹Explicitný príklad uvidíme pri štúdiu tlmenia ultrazvuku v supravodičoch v kapitole ??.

Tým je pravidlo f-súm dokázané.

Sumačné pravidlo pre stlačiteľnosť

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{\omega} S(\mathbf{q},\omega) \stackrel{q\to 0}{\longrightarrow} \frac{\hbar}{2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_T.$$

Dôkaz urobíme tak, že porovnáme veličinu $\chi'(q,0)$ počítanú dvojakým spôsobom: pomocou makroskopických úvah a pomocou štruktúrneho faktora.

Makroskopické úvahy: V dlhovlnnej limite možno zmenu koncentrácie častíc pri zvýšení potenciálnej energie o φ interpretovať ako zníženie chemického potenciálu μ , a preto

$$\chi'(q \to 0, 0) = \left(\frac{\partial n}{\partial \varphi}\right)_T = -\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T.$$

Výpočet pomocou štruktúrneho faktora: Počítajme $\chi'(\mathbf{q}, 0)$ z Kramersových-Kronigových vzťahov a použime pritom fluktuačne-disipačnú vetu. Dostaneme

$$\chi'(\mathbf{q},0) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds \chi''(\mathbf{q},s)}{s} = -\frac{2}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} S(\mathbf{q},\omega).$$

Porovnaním oboch výrazov pre $\chi'(\mathbf{q}, 0)$ dostaneme sumačné pravidlo pre stlačiteľnosť.

Vzťah medzi $(\partial n/\partial \mu)_T$ a izotermálnou rýchlosťou zvuku v_s .

Voľná energia systému je extenzívna veličina. Preto pri konštantnej teplote môžeme písať

$$F(N,\mathcal{V},T) = \mathcal{V}f\left(\frac{N}{\mathcal{V}},T\right),$$

kde f(n,T) je hustota voľnej energie v systéme s hustotou n pri teplote T. Chemický potenciál je daný vzťahom $\mu = (\partial F/\partial N)_{\mathcal{V},T} = f'_n(n,T)$. Preto $(\partial \mu/\partial n)_T = f''_{nn}(n,T)$. Na druhej strane, tlak je daný vzťahom $p = -(\partial F/\partial \mathcal{V})_{T,N} = -f(n,T) + nf'_n(n,T)$. Pre prevrátenú hodnotu izotermálnej stlačiteľ nosti preto platí $(\partial p/\partial n)_T = nf''_{nn}(n,T)$. Následne dostávame

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T = \frac{1}{f_{nn}''(n,T)} = n \left(\frac{\partial n}{\partial p}\right)_T = \frac{n}{mv_s^2}$$

kde v_s je izotermálna rýchlosť zvuku, ktorá je daná vzťahom $mv_s^2 = (\partial p/\partial n)_T$.

Distribučná funkcia pre páry častíc

Ak využijeme definičné vzťahy pre $\rho_{\mathbf{q}},$ statický štruktúrny faktor môžeme zapísať v tvare

$$S_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{l,l'} \langle e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_{l'})} \rangle = n + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{l \neq l'} \langle e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_{l'})} \rangle = n + n^2 \int d^3 \mathbf{r} g(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}},\tag{7}$$

kde v poslednom kroku sme využili definíciu Diracovej delta funkcie a zaviedli sme tzv. distribučnú funkciu pre páry častíc

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{nN} \sum_{l \neq l'} \langle \delta \left[\mathbf{r} - (\mathbf{r}_{l'} - \mathbf{r}_l) \right] \rangle,$$

ktorej fyzikálny význam je nasledovný. Fixujme vzdialenosť \mathbf{r} a vypočítajme pre všetky dvojice atómov ich relatívnu vzdialenosť $\mathbf{r}_{l'} - \mathbf{r}_l$. Ak pre dané \mathbf{r} existuje nejaká dvojica so vzdialenosťou $\mathbf{r}_{l'} - \mathbf{r}_l = \mathbf{r}$, potom integrál funkcie $g(\mathbf{r})$ cez malé okolie bodu \mathbf{r} dá konečný príspevok. Teda funkcia $g(\mathbf{r})$ je úmerná hustote počtu párov s relatívnou vzdialenosťou \mathbf{r} . Normu funkcie $g(\mathbf{r})$ nájdeme výpočtom statického štruktúrneho faktora pre $\mathbf{q} = 0$. Z definičnej formuly dostaneme $S_0 = \frac{N^2}{\mathcal{V}}$, kým z rovnice (7) vyplýva $S_0 = n^2 \int d^3 \mathbf{r} g(\mathbf{r})$. Preto musí platiť $\int d^3 \mathbf{r} g(\mathbf{r}) = \mathcal{V}$. Z rovnice (7) vyplýva nasledovný vzťah medzi Fourierovou transformáciou distribučnej funkcie párov $g_{\bf q}$ a statickým štruktúrnym faktorom:

$$g_{\mathbf{q}} = \frac{1}{n^2} S_{\mathbf{q}} - \frac{1}{n}.$$
(8)

V kapitole 6 použijeme vzťah (8) na výpočet distribučnej funkcie párov elektrónov.

Špeciálne prípady distribučnej funkcie pre páry častíc

1. Ak častice vytvárajú Bravaisovu mriežku, potom platí

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{nN} \sum_{l \neq j} \langle \delta \left[\mathbf{r} - (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l) \right] \rangle = \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{r}_j \neq 0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j),$$

pretože v Bravaisovej mriežke možno sumu ce
z \mathbf{r}_l nahradiť násobením počtom bodov.

2. Ak častice vytvárajú ideálny plyn, potom funkcia $g(\mathbf{r})$ musí byť konštantná, lebo polohy atómov v ideálnom plyne sú nekorelované. Ľahko nahliadneme, že platí $g(\mathbf{r}) = 1$, pretože veľkosť konštanty je daná normalizáciou funkcie $g(\mathbf{r})$.

3. Ak častice vytvárajú kvapalinu, potom distribučná funkcia pre páry častíc je iba funkciou vzdialenosti častíc r (tzv. radiálna distribučná funkcia $g(\mathbf{r}) = g(r)$). Na veľkých vzdialenostiach očakávame, že g(r) = 1 ako v plyne. Na malých vzdialenostiach musí platiť $g(r) \to 0$, pretože častice sa správajú ako tuhé (nepreniknuteľné) gule. Očakávame tiež, že funkcia g(r) má maximum s hodnotou väčšou než 1 pri $r \approx r_0$, kde dĺžka r_0 parametrizuje hustotu častíc v kvapaline vzťahom $\rho \sim r_0^{-3}$.

Cvičenia

1. Pre systém neinteragujúcich bozónov so spinom S = 0 pri teplote T = 0 vypočítajte dynamický štruktúrny faktor $S(\mathbf{q}, \omega)$, statický štruktúrny faktor $S_{\mathbf{q}}$ a distribučnú funkciu $g(\mathbf{r})$ pre páry častíc.

2. To isté pre systém neinteragujúcich fermiónov so spinom $S = \frac{1}{2}$ v D = 1.

3. To isté pre systém neinteragujúcich fermiónov so spinom $S = \frac{1}{2}$ v D = 3.

4.* Vypočítajte dynamický štruktúrny faktor $S(\mathbf{q},\omega)$ pre harmonický kryštál s jednoatomárnou bázou.

Návod: vychádzajte zo vzťahu (5) a použite $\rho_{\mathbf{q}}(t) = \sum_{j} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{j}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_{j}(t))$, kde \mathbf{R}_{j} je ideálna poloha bodu jBravaisovej mriežky a $\mathbf{u}_{j}(t)$ je operátor výchylky tohto bodu (v Heisenbergovom obraze) v čase t. Použite výsledok

$$\left\langle \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{u}_{j}(t))\right\rangle \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{u}_{k}(0))\right\rangle = \exp\left[-\left\langle \left(\mathbf{q}\cdot\mathbf{u}_{k}\right)^{2}\right\rangle + \left\langle \mathbf{q}\cdot\mathbf{u}_{j}(t)\mathbf{q}\cdot\mathbf{u}_{k}(0)\right\rangle\right] \approx e^{-\left\langle \left(\mathbf{q}\cdot\mathbf{u}_{k}\right)^{2}\right\rangle}\left[1 + \left\langle \mathbf{q}\cdot\mathbf{u}_{j}(t)\mathbf{q}\cdot\mathbf{u}_{k}(0)\right\rangle\right]$$

platný pre harmonické kmity. Pri časovej Fourierovej transformácii využite aproximatívnu formulu platnú pre malé **q**. 5. Fluktuačne-disipačná veta pre (klasický) Brownov pohyb.

Pohyb Brownovej častice s hmotnosťou $m \vee D = 1$ opíšme tzv. Langevinovou rovnicou $m\dot{v} = -\eta v + f(t)$, kde η je koeficient trenia a f(t) je náhodne fluktuujúca sila, pričom $\langle f(t) \rangle = 0$ a $\langle f(t)f(t') \rangle = 2B\delta(t-t')$. Ukážte, že koeficienty B a η nie sú nezávislé, ale naopak zviazané fluktuačne-disipačnou vetou $B = \eta T$. Návod: najprv ukážte, že riešením diferenciálnej rovnice pre v(t) s počiatočnou podmienkou $v(0) = v_0$ je $v(t) = e^{-t/\tau} v_0 + \frac{1}{m} \int_0^t dt' e^{(t'-t)/\tau} f(t')$, kde $\frac{1}{\tau} = \frac{\eta}{m}$. Potom vypočítajte strednú hodnotu $v_{\infty}^2 = \lim_{t \to \infty} \langle v(t)^2 \rangle$ v limite dlhých časov a žiadajte, aby platila (rovnovážna) podmienka $mv_{\infty}^2 = T$.

2 Supratekuté hélium: excitačné spektrum

V tejto prednáške vyložíme dva prístupy k popisu excitačných spektier supratekutín s nenulovými interakciami medzi časticami. Najprv budeme v rámci teórie Bogoľubova¹² predpokladať, že interakcie sú slabé a skonštruujeme poruchovú teóriu supratekutín. Takýto prístup samozrejme nemožno použiť na kvantitatívne štúdium excitačných spektier He II. Túto druhú úlohu budeme riešiť v rámci Feynmanovho fenomenologického prístupu. Literatúra: NP2, Rickayzen.

Teoretický model

Skúmajme systém N častíc so spinom S = 0, s energiami $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ a so slabými párovými interakciami

 $^{^{12}\}mathrm{V}$ anglickej literatúre sa používa transkripcia Bogoliubov aj Bogolyubov. My budeme používať slovenskú verziu Bogoľubov.

s potenciálom $U(\mathbf{r})$. Predpokladajme, že teplota T = 0. Nech častice sa hýbu v škatuli s objemom \mathcal{V} a nech pre ne platia periodické okrajové podmienky. Ak zavedieme kreačné a anihilačné operátory $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ a $a_{\mathbf{k}}$ pre jednočasticové stavy (rovinné vlny indexované vlnovým vektorom \mathbf{k}), potom hamiltonián (??) možno písať v nasledovnom tvare (pozri napr. III.6):

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}, \qquad (9)$$

kde $V_{\mathbf{q}} = \int d^3 \mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ je Fourierova transformácia interakčnej energie. Budeme predpokladať, že $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$, preto $V_{\mathbf{q}} = V_{-\mathbf{q}}$ a $V_{\mathbf{q}}$ je reálne číslo. Pre konkrétnosť budeme mať na mysli nasledovný modelový potenciál s amplitúdou U a dosahom a:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{U}{(2\pi)^{3/2}} e^{-\frac{\mathbf{r}^2}{2a^2}}$$

s Fourierovými komponentami $V_{\mathbf{q}} = Ua^3 e^{-\frac{a^2 \mathbf{q}^2}{2}}$. Naviac budeme predpokladať, že U > 0, t.j. že interakcie sú odpudivé. Je preto zrejmé, že táto teória nemôže vysvetliť existenciu kvapalného stavu. 50 rokov po sformulovaní teórie sa však objavili systémy, ktoré možno kvantitatívne popísať (modifikovanou) Bogoľubovovou teóriou: ide o supratekutosť plynov, v literatúre skôr známu ako Boseho-Einsteinovu kondenzáciu v plynoch. Na plyny v limite $T \rightarrow 0$ totiž možno aplikovať tie isté úvahy ako na kvapaliny: entropia plynu musí vymiznúť. Príroda tento problém rieši vznikom kondenzátu. Keďže podľa BE teórie $T_{BE} \propto n^{2/3}$ kde $n = N/\mathcal{V}$ je hustota častíc, kritické teploty pre vznik kondenzátu v plynov bolo dosiahnutie dostatočne nízkych teplôt. Táto úloha bola experimentálne vyriešená len pomerne nedávno.

Nekonzistentnosť teórie Hartreeho-Focka

Hamiltonián (9) popisuje translačne invariantný systém. Preto neporušený základný stav systému N bozónov $|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(a_0^{\dagger}\right)^N |0\rangle$ je zároveň riešením interagujúceho problému v priblížení Hartreeho-Focka. Energia základného stavu je $E_{GS} = \langle N|H|N\rangle = \frac{1}{2\mathcal{V}}N(N-1)V_0$. V teórii Hartreeho-Focka sú jednočasticové excitované stavy popísané vlnovými funkciami $|\mathbf{q}\rangle = a_{\mathbf{q}}^{\dagger}|N-1\rangle$ a ich energie sú $E_{\mathbf{q}} = \langle \mathbf{q}|H|\mathbf{q}\rangle = E_{GS} + \bar{\varepsilon}_{\mathbf{q}}$, kde $\bar{\varepsilon}_{\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{q}} + nV_{\mathbf{q}}$. Ak ďalej uvážime, že $\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} = \sum_{i} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{i}} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{k}}$, dynamický štruktúrny faktor v teórii Hartreeho-Focka pri teplote T = 0 bude

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{\hbar}{\mathcal{V}} |\langle \mathbf{q} | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | N \rangle|^2 \delta \left[\hbar \omega - (E_{\mathbf{q}} - E_{GS}) \right] = \hbar n \delta \left[\hbar \omega - \bar{\varepsilon}_{\mathbf{q}} \right].$$
(10)

Pre fyzikálne zaujímavé momenty štruktúrneho faktora (10) teda platia vzťahy

$$\int_0^\infty d\omega S(\mathbf{q},\omega) = n, \qquad \int_0^\infty d\omega \omega S(\mathbf{q},\omega) = \frac{n\bar{\varepsilon}_{\mathbf{q}}}{\hbar}, \qquad \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} S(\mathbf{q}\to 0,\omega) = \frac{\hbar}{V_0}.$$

V poslednom z integrálov sme využili, že v dlhovlnnej limite $q \to 0$ platí $\bar{\varepsilon}_{\mathbf{q}} \to nV_0$.

Na druhej strane, exaktné sumačné pravidlá pre štruktúrny faktor pri teplote T = 0 nadobúdajú nasledovný tvar (pozri kapitolu 3):

$$\int_0^\infty d\omega S(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \rangle, \qquad \int_0^\infty d\omega \omega S(\mathbf{q},\omega) = \frac{n\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\hbar}, \qquad \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} S(\mathbf{q}\to 0,\omega) = \frac{\hbar n}{2mv_s^2}.$$

Keďže v teórii Hartreeho-Focka platí $\langle N | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} | N \rangle = N$, štruktúrny faktor (10) spĺňa prvé sumačné pravidlo. Na druhej strane, keďže $\bar{\varepsilon}_{\mathbf{q}} \neq \varepsilon_{\mathbf{q}}$, štruktúrny faktor (10) narúša druhé sumačné pravidlo (pravidlo f-súm). Toto narušenie je obzvlášť dramatické v dlhovlnnej limite $q \to 0$. Čo sa týka tretieho sumačného pravidla (pre stlačiteľnosť), pre chemický potenciál $\mu = \frac{\partial E_{GS}}{\partial N}$ v teórii Hartreeho-Focka platí $\mu = nV_0$, odkiaľ pre rýchlosť zvuku vyplýva

$$v_s^2 = \frac{n}{m} \frac{\partial \mu}{\partial n} = \frac{nV_0}{m}.$$
(11)

Preto exaktné sumačné pravidlo pre stlačiteľnosť dáva na pravej strane $\frac{\hbar n}{2mv_s^2} = \frac{\hbar}{2V_0}$, čo opäť nesúhlasí s explicitným výpočtom pre štruktúrny faktor (10).

Teória Bogoľubova

Pozri III.12. Dynamický štruktúrny faktor v teóri
i Bogoľubova Dynamický štruktúrny faktor pri teplot
eT=0je definovaný vzťahom

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{\hbar}{\mathcal{V}} \sum_{j} |\langle j | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | \Psi_0 \rangle|^2 \delta \left[\hbar \omega - (E_j - E_{GS}) \right].$$

Ak zanedbáme malý počet častíc s hybnosťami $\mathbf{k} \neq 0$, ktoré sú prítomné v základnom stave $|\Psi_0\rangle$, potom môžeme písať $\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}|\Psi_0\rangle \approx (a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_0 + a_0^{\dagger}a_{-\mathbf{q}})|\Psi_0\rangle \approx \sqrt{N}(e^{i\theta}a_{\mathbf{q}}^{\dagger} + e^{-i\theta}a_{-\mathbf{q}})|\Psi_0\rangle$ a pre $S(\mathbf{q},\omega)$ dostaneme

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{\hbar N}{\mathcal{V}} \sum_{j} |\langle j| (e^{i\theta} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} + e^{-i\theta} a_{-\mathbf{q}}) |\Psi_0\rangle|^2 \delta \left[\hbar \omega - (E_j - E_{GS})\right].$$

Pretože $(e^{i\theta}a^{\dagger}_{\mathbf{q}} + e^{-i\theta}a_{-\mathbf{q}})|\Psi_{0}\rangle = (e^{i\theta}u^{*}_{\mathbf{q}} - e^{-i\theta}v^{*}_{\mathbf{q}})\alpha^{\dagger}_{\mathbf{q}}|\Psi_{0}\rangle = e^{i\theta}(|u_{\mathbf{q}}| - |v_{\mathbf{q}}|)\alpha^{\dagger}_{\mathbf{q}}|\Psi_{0}\rangle$, k sume cez excitované stavy *j* prispieva iba stav $\alpha^{\dagger}_{\mathbf{q}}|\Psi_{0}\rangle$ s energiou $E_{GS} + E_{\mathbf{q}}$ a pre dynamický štruktúrny faktor dostaneme $S(\mathbf{q}, \omega) = \hbar n(|u_{\mathbf{q}}| - |v_{\mathbf{q}}|)^{2}\delta(\hbar\omega - E_{\mathbf{q}})$ a po využití výsledkov pre $u_{\mathbf{q}}$ a $v_{\mathbf{q}}$ v konečnej forme:

$$S(\mathbf{q},\omega) = \frac{n\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}\delta\left(\omega - \omega_{\mathbf{q}}\right),$$

kde sme zaviedli frekvenciu $\omega_{\mathbf{q}} = E_{\mathbf{q}}/\hbar$. V teórii Bogoľubova preto sumačné pravidlá pre jednotlivé momenty dynamického štruktúrneho faktora nadobúdajú tvar

$$\int_0^\infty d\omega S(\mathbf{q},\omega) = \frac{n\varepsilon_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}}, \qquad \int_0^\infty d\omega \omega S(\mathbf{q},\omega) = \frac{\hbar q^2}{2m}, \qquad \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} S(\mathbf{q}\to 0,\omega) = \frac{\hbar n}{2mv^2}$$

kde v poslednom pravidle (pre stlačiteľnosť) sme využili, že v dlhovlnnej limite $S(\mathbf{q}, \omega) \rightarrow \frac{\hbar nq}{2mv} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}})$. Porovnaním s exaktnými sumačnými pravidlami ľahko nahliadneme, že pravidlo f-súm a sumačné pravidlo pre stlačiteľnosť sú splnené.

Napokon nám ostáva overiť platnosť sumačného pravidla pre statický štruktúrny faktor S_q . Za tým účelom počítajme S_q v rámci teórie Bogoľubova:

$$S_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} \rangle,$$

kde sme použili označeni
e $\langle X \rangle \equiv \langle \Psi_0 | X | \Psi_0 \rangle$. Sumy v poslednom člene potrebujeme vykonať do rádu
 N_0^1 . Preto aspoň dva zo sumačných indexov musia byť rovné 0:

$$S_{\mathbf{q}} = n + \frac{1}{\mathcal{V}} \left[\langle a_{-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{0} a_{0} \rangle + \langle a_{0}^{\dagger} a_{0}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} \rangle + \langle a_{0}^{\dagger} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} a_{0} \rangle + \langle a_{-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{0}^{\dagger} a_{0} a_{-\mathbf{q}} \rangle \right].$$

Ak teraz zanedbáme rozdiel medzi N a N₀ a operátory nahradíme c-číslami podľa $a_0^{\dagger} \rightarrow \sqrt{N}e^{-i\theta}$ a $a_0 \rightarrow \sqrt{N}e^{i\theta}$ a ak naviac využijeme vzťahy $\langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger}a_{\mathbf{q}}\rangle = |v_{\mathbf{q}}|^2$, $\langle a_{\mathbf{q}}a_{-\mathbf{q}}\rangle = -u_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}}^*$ a výsledky pre $u_{\mathbf{q}}$, $v_{\mathbf{q}}$, dostaneme napokon $S_{\mathbf{q}} \approx n \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}}$. Ukázali sme teda, že v teórii Bogoľubova sú všetky tri sumačné pravidlá splnené.

Vráťme sa ešte na chvíľu k diskusii o charaktere dlhovlnných Bogoľubovových excitácií. Podľa mikroskopickej teórie pre rýchlosť zvuku platí $v = \sqrt{\frac{n_0 V_0}{m}}$. Tento výsledok je v zhode s makroskopickým odhadom (11), ak zanedbáme rozdiel medzi N a N_0 . Teda jednočasticové excitácie sú v dlhovlnnej limite totožné so zvukovými vlnami.

Zovšeobecnenie teórie Bogoľubova na konečné teploty

Najprv skonštruujme funkciu odozvy hustota-hustota v rámci teórie Bogoľubova. Pri teplote T = 0

dostaneme pomocou fluktuačne-disipačnej vety pre imaginárnu časť funkcie odozvy pre frekvencie $\omega > 0$ výraz $\chi''(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{\pi}{\hbar}S(\mathbf{q}, \omega)$. Ak naviac pre záporné frekvencie použijeme vzťah $\chi''(\mathbf{q}, -\omega) = -\chi''(\mathbf{q}, \omega)$, dostávame napokon

$$\chi''(\mathbf{q},\omega) = -\frac{n\mathbf{q}^2}{2m\omega_{\mathbf{q}}} \left[\delta(\omega-\omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega+\omega_{\mathbf{q}})\right].$$

Pomocou Kramersových-Kronigových vzťahov pre reálnu časť funkcie odozvy odtiaľto dostaneme $\chi'(\mathbf{q},\omega) = \frac{n\mathbf{q}^2/m}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}$. Výsledky pre reálnu aj imaginárnu časť funkcie odozvy možno sumarizovať vzťahom

$$\chi(\mathbf{q},\omega) = \frac{n\mathbf{q}^2/m}{(\omega+i\gamma)^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2},\tag{12}$$

kde opäť predpokladáme, že $\gamma = 0^+$.

V ďalšom výklade budeme predpokladať, že výsledok pre funkciu odozvy (12) platí aj pri konečných teplotách. Inými slovami, budeme predpokladať, že pre daný vlnový vektor existuje v spektre jediný mód s frekvenciou $\omega_{\mathbf{q}}$. Pre dynamický štruktúrny faktor potom dostávame

$$S(\mathbf{q},\omega) = Z_{\mathbf{q}} \left[n(\omega) + 1 \right] \left[\delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}) - \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}}) \right], \tag{13}$$

kde $Z_{\mathbf{q}} = \frac{n\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}$.¹³ Keďže stále predpokladáme, že v dlhovlnnej limite má spektrum charakter zvukových vĺn, t.j. $\omega_q \propto q$, potom napríklad ľahko vysvetlíme, že merné teplo hélia II pri nízkych teplotách škáluje s treťou mocninou teploty, $c_V \propto T^3$ (pozri napr. I.11).

Feynmanova fenomenologická teória

Podľa teórie Bogoľubova sú v supratekutine jednočasticové excitácie totožné s kolektívnymi excitáciami. Feynman argumentuje, že tento výsledok Bogoľubovovej teórie je všeobecnou vlastnosťou supratekutín a preto v supratekutinách pre daný vlnový vektor **q** existuje jediný mód. Táto hypotéza sa nazýva aproximáciou jediného módu. Feynman ďalej argumentuje, že ak $|\Psi_0\rangle$ je základný stav hélia s energiou E_{GS} , potom stav $\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}|\Psi_0\rangle$ je excitovaný stav s hybnosťou $\hbar \mathbf{q}$ a energiou $E_{GS} + E_{\mathbf{q}}$. Normalizovaná vlnová funkcia excitovaného stavu s hybnosťou $\hbar \mathbf{q}$ potom je

$$|\mathbf{q}
angle = rac{1}{\sqrt{\mathcal{V}S_{\mathbf{q}}}}
ho_{\mathbf{q}}^{\dagger}|\Psi_{0}
angle,$$

kde $S_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \langle \Psi_0 | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | \Psi_0 \rangle$ je statický štruktúrny faktor pri teplote T = 0, na ktorú sa v ďalšom výklade obmedzíme. Spektrálna reprezentácia dynamického štruktúrneho faktora v priblížení jediného módu má preto tvar $S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} |\langle \mathbf{q} | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | \Psi_0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}})$, čo možno zapísať pomocou statického štruktúrneho faktora ako

$$S(\mathbf{q},\omega) = S_{\mathbf{q}}\delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}).$$

Preto v priblížení jediného módu $\int_0^\infty d\omega \omega S(\mathbf{q},\omega) = S_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}$. Na druhej strane, podľa pravidla f-súm musí platiť $\int_0^\infty d\omega \omega S(\mathbf{q},\omega) = \frac{\hbar n q^2}{2m}$. Porovnaním týchto výsledkov dostávame Feynmanovu predpoveď pre disperzný zákon

$$E_{\mathbf{q}} = \frac{n\varepsilon_{\mathbf{q}}}{S_{\mathbf{q}}}.$$

$$S_{\mathbf{q}} = Z_{\mathbf{q}} \left[2n(\omega_{\mathbf{q}}) + 1 \right] = \frac{n\varepsilon_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}} \coth \frac{E_{\mathbf{q}}}{2T}.$$

Za zmienku stojí kvalitatívna zmena $S_{\mathbf{q}}$ v dlhovlnnej limite $\mathbf{q} \to 0$. Pri nulovej teplote totiž $S_{\mathbf{q}} \to 0$, kým pri konečnej teplote $S_{\mathbf{q}} \to \frac{nT}{mv_{e}^{2}}$.

¹³Pripomíname, že aj pre záporné frekvencie je štruktúrny faktor kladný, ako aj má byť: $S(\mathbf{q}, \omega < 0) = Z_{\mathbf{q}}n(\omega_{\mathbf{q}})\delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}})$. Ľahko možno overiť, že pravidlo f-súm aj sumačné pravidlo pre stlačiteľnosť sú opäť splnené. Pri konečnej teplote treba integrovať v hraniciach $-\infty, \infty$. Statický štruktúrny faktor pri konečnej teplote je daný vzťahom



Obr. 1: Vľavo: statický štruktúrny faktor pre supratekuté hélium. Pík pri $q \approx 2 \text{ Å}^{-1}$ je zdôvodnený v texte. Dlhovlnná limita je predmetom cvičenia 1. V extrémne krátkovlnnej limite $q \to \infty$ pre štruktúrny faktor platí $S_{\mathbf{q}} \to n$, v súlade so vzťahom (7). Vpravo: porovnanie experimentálneho disperzného zákona s teóriou Bogoľubova (rýchlosť zvuku berieme ako fitovací parameter). Rotónové minimum je vysvetlené v texte podľa Feynmana. V extrémne krátkovlnnej limite Feynman predpovedá $E_{\mathbf{q}} \approx \varepsilon_{\mathbf{q}}$, podobne ako Bogoľubov.

Disperzný zákon pre $\omega_{\mathbf{q}}$ možno určiť z nameraných dát pre $S(\mathbf{q}, \omega)$ pomocou formuly (13). Experiment ukazuje, že v dlhovlnnej oblasti q < 1 Å⁻¹ rastie frekvencia ω_q lineárne s vlnovým vektorom q (v súlade s teóriou Bogoľubova). Avšak pre $q \approx 2$ Å⁻¹ má disperzný zákon lokálne minimum (na rozdiel od teórie Bogoľubova, v ktorej energia E_q monotónne rastie s q). Excitácie v tejto oblasti spektra sa nazývajú rotóny. Ich existenciu predpovedal Landau na základe termodynamických úvah.

Feynman vysvetlil existenciu rotónového minima ako jednoduchý dôsledok predpokladu o jedinom móde. V kvapaline, ktorej usporiadanie na malých vzdialenostiach je podobné kryštálom, má totiž funkcia $S_{\mathbf{q}}$ pík pre vlnový vektor $q_0 \approx \frac{2\pi}{d}$, kde d je typická vzdialenosť medzi časticami (pozri prednášku 1 a obr. 1). V blízkosti hybnosti $q = q_0$ preto vznikne lokálne minimum disperzného vzťahu $\omega_{\mathbf{q}}$.

Landauovo kritérium

Experimentálnym faktom je, že supratekutina môže tiecť bez disipácie energie, iba ak rýchlosť tečenia u nepresiahne kritickú hodnotu v_c . Landau sformuloval nasledovné kritérium pre možnosť bezdisipatívneho transportu hmoty. Skúmajme hélium tečúce s rýchlosťou $-\mathbf{u}$ cez rúru stojacu v laboratórnej vzťažnej sústave. Prejdime do súradnicovej sústavy, v ktorej hélium stojí a steny rúry sa hýbu s rýchlosťou \mathbf{u} . Predstavme si steny rúry ako masívny objekt s hmotnosťou M. Pýtajme sa, či môže masívny objekt odovzdávať tekutine hybnosť. Ak áno, potom podľa Landaua nie je možný bezdisipatívny transport hmoty. Masívny objekt by mohol v supratekutine vybudiť excitáciu s hybnosťou $\hbar \mathbf{k}$ a energiou $E_{\mathbf{k}}$, pričom by sa jeho rýchlosť zmenila na \mathbf{u}' . V rozptylovom procese by sa musela zachovávať celková hybnosť a energia:

$$M\mathbf{u} = M\mathbf{u}' + \hbar\mathbf{k}, \qquad \frac{1}{2M} (M\mathbf{u})^2 = \frac{1}{2M} (M\mathbf{u}')^2 + E_{\mathbf{k}}.$$

Ak zo zákona zachovania hybnosti vyjadríme $M\mathbf{u}' = M\mathbf{u} - \hbar\mathbf{k}$ a výsledok dosadíme do zákona zachovania energie, po úprave dostaneme podmienku

$$\mathbf{u} \cdot \hbar \mathbf{k} = E_{\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M} \approx E_{\mathbf{k}},$$

kde približná rovnosť vyplýva z podmienky $M \to \infty$. Keďže $\mathbf{u} \cdot \hbar \mathbf{k} \leq \hbar u k$, rozptyl s prenesenou hybnosťou k nie je možný pre rýchlosti tečenia $u < \frac{E_k}{\hbar k}$. Landau preto stotožnil rýchlosť $v_{\text{Landau}} = \min_k \frac{E_k}{\hbar k}$, t.j. najmenšiu z rýchlostí $\frac{E_k}{\hbar k}$, s kritickou rýchlosťou tečenia supratekutiny. V teórii Bogoľubova $v_{\text{Landau}} = v_s$, kým pre neinteragujúce bozóny $v_{\text{Landau}} = 0$. Dnes vieme, že Landauovo kritérium nepredstavuje ani nutnú, ani postačujúcu podmienku na vznik supratekutého prúdenia.¹⁴ Existencia kritickej rýchlosti súvisí s excitovaním tzv. supratekutých vírov. Tejto téme sa však nebudeme venovať. Pripomenieme iba, že ide o čiarové topologické defekty podobné dislokáciám a vírom v supravodiči.

¹⁴Naozaj: keďže v héliu II je $v_s \approx 65 \text{ m/s}$, ak by šlo o postačujúcu podmienku, potom by kritická rýchlosť musela byť aspoň 65 m/s. Pozorované kritické rýchlosti však závisia od rozmeru kapiláry a sú obvykle o dva rády nižšie. Naopak, ak by išlo o nutnú podmienku, čo sa zdá pravdepodobnejšie, potom by v systémoch s $v_{\text{Landau}} = 0$ nemohla existovať supratekutosť. Supravodivosť sa však experimentálne pozoruje napríklad v d-vlnových supravodičoch alebo v supratekutej fáze A fermiónovej kvapaliny ³He, pričom pre oba systémy platí $v_{\text{Landau}} = 0$. Moderná interpretácia Landauovej kritickej rýchlosti je (pozri napríklad knihu G. Volovika, kapitola 26.), že v_{Landau} je medzná rýchlosť, pri prekročení ktorej sa excitačné spektrum supratekutého stavu kvalitatívne zmení oproti stavu supratekutiny v pokoji.

Cvičenia

1. Feynmanovo priblíženie jedného módu umožňuje predpovedať disperzný zákon $E_{\mathbf{q}}$, ak je známy statický štruktúrny faktor $S_{\mathbf{q}}$. Pomocou sumačného pravidla pre stlačiteľnosť ukážte, že v dlhovlnnej limite sa dá statický štruktúrny faktor $S_{\mathbf{q}}$ v priblížení jedného módu predpovedať teoreticky, t.j. netreba ho merať. Pracujte pri teplote T = 0.

2. Vlnovú funkciu s jedným excitovaným módom $\alpha_{\mathbf{q}}^{\dagger}|\Psi_{0}\rangle$ reprezentujte pomocou operátorov $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$. Explicitným výpočtom sa presvedčte, že ide o normovanú vlnovú funkciu.

3. Nech $|\Psi_0\rangle$ je základný stav pre kondenzát s fázou $\theta = 0$. Presvedčte sa, že v okolí priestorového bodu \mathbf{x}_0 možno vlnovú funkciu $\alpha_{\mathbf{q}}^{\dagger}|\Psi_0\rangle$ (pre $\mathbf{q} \to 0$) aproximovať vlnovou funkciu $|\Psi'_0\rangle = e^{i\theta_0}|\Psi_0\rangle$, kde $\theta_0 = \mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_0$. Ukážte, že $|\Psi'_0\rangle$ možno interpretovať ako základný stav pre kondenzát s fázou $\theta = \frac{\theta_0}{N}$, kde N je stredná hodnota počtu častíc v systéme. Z tejto úvahy vyplýva, že stavy $|\Psi_0\rangle$ a $|\Psi'_0\rangle$ majú rovnaké energie, teda energia $E_{\mathbf{q}} \to 0$ pre $\mathbf{q} \to 0$.

3 Supravodivosť

Pozri III.14-19.

Magnetické interakcie medzi elektrónmi

Úlohu i
ónového pozadia pri vzniku príťažlivej interakcie medzi elektrónmi môžu hrať aj iné stupne voľnosti, s ktorými elektróny interagujú. Ako často diskutovaný príklad uvedieme interakciu elektrónu s magnetizovateľným prostredím tvoreným ostatnými elektrón
mi. Interakcie medzi elektrónmi popíšme Hubbardovým modelom s interakčným členom
 $H_U = U \sum_{\mathbf{R}} n_{\mathbf{R}\uparrow} n_{\mathbf{R}\downarrow}$. Ak zavedieme operátor celkovej hustoty elektrónov v mriežkovom bode
 $\mathbf{R}, n_{\mathbf{R}} = n_{\mathbf{R}\uparrow} + n_{\mathbf{R}\downarrow}$, a vektor operátorov spinu v bode mriežky
 $\mathbf{S}_{\mathbf{R}} = (S_{\mathbf{R}}^x, S_{\mathbf{R}}^y, S_{\mathbf{R}}^z)$, interakčný člen možno prepísať do tvaru

$$H_U = U \sum_{\mathbf{R}} \left(\frac{1}{4} n_{\mathbf{R}}^2 - \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \right) = \frac{U}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{4} n_{\mathbf{q}} n_{-\mathbf{q}} - \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \right),$$

kde v druhej rovnici sme prešli k Fourierovým komponentám. Hamiltonián H_U popisuje netienené interakcie medzi nábojovými a spinovými hustotami a je analógom hamiltoniánu H_{Coulomb} v modeli želé. Magnetickú časť hamiltoniánu H_U môžeme interpretovať ako $H_{\text{mag}} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{B}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q}}$, t.j. ako interakciu spinovej hustoty s "magnetickým poľom" $\mathbf{B}_{\mathbf{q}} = U\mathbf{S}_{\mathbf{q}}$. Všimnime si, že Fourierova komponenta "magnetického poľa" $\mathbf{B}_{\mathbf{q}}$ je pritom generovaná Fourierovou komponentou spinovej hustoty $\mathbf{S}_{\mathbf{q}}$.

V magneticky polarizovateľnom médiu očakávame, že magnetické pole $\mathbf{B}_{\mathbf{q}}$ generované spinovou hustotou $\mathbf{S}_{\mathbf{q}}$ bude zosilnené koeficientom $\chi(\mathbf{q})$, ktorý závisí od vlnového vektora a hrá rolu tieniaceho faktora $\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q},\omega)}$ pre coulombovské interakcie. Preto "tienené" magnetické pole $\mathbf{B}_{\mathbf{q}}^{\text{tot}}$ generované spinovou hustotou $\mathbf{S}_{\mathbf{q}}$ bude $\mathbf{B}_{\mathbf{q}}^{\text{tot}} = U\chi(\mathbf{q})\mathbf{S}_{\mathbf{q}}$ a magnetický hamiltonián nadobudne tvar

$$H_{\text{mag}} = -\frac{U}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q}) \mathbf{S}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} = -\frac{U}{4\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k},\mathbf{p}} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{\sigma}_{\gamma\delta} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\alpha} c_{\mathbf{k}\beta} c^{\dagger}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\gamma} c_{\mathbf{p}\delta}.$$

V druhej rovnici sme interpretovali vlny spinovej hustoty vo formalizme druhého kvantovania ako $\mathbf{S}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\alpha} c_{\mathbf{k}\beta}$, kde $\vec{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ sú Pauliho matice. Ak sa teraz (podobne ako pri odvodení hamiltoniánu (??)) obmedzíme na rozptyl v tzv. Cooperovom kanáli $\mathbf{p} = -\mathbf{k}$ (t.j. rozptyl párov s nulovou hybnosťou) a ak využijeme identitu $\vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{\sigma}_{\gamma\delta} = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}$, dostaneme magnetickú verziu modelového BCS hamiltoniánu:

$$H_{\rm BCS}^{\rm mag} = \frac{U}{4\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \chi(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \left(3S_{\mathbf{k}'}^{\dagger}S_{\mathbf{k}} - \mathbf{T}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \cdot \mathbf{T}_{\mathbf{k}}\right),$$

kde sme použili kreačné a anihilačné operátory pre singletné a tripletné Cooperove páry

$$S_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{-\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}), \quad T_{\mathbf{k}}^{1} = c_{-\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad T_{\mathbf{k}}^{0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}), \quad T_{\mathbf{k}}^{-1} = c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\downarrow},$$

a využili sme identitu $\sum_{\alpha\beta} c^{\dagger}_{\mathbf{k}'\alpha} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}'\beta} (2c_{-\mathbf{k}\alpha}c_{\mathbf{k}\beta} - c_{-\mathbf{k}\beta}c_{\mathbf{k}\alpha}) = \mathbf{T}^{\dagger}_{\mathbf{k}'} \cdot \mathbf{T}_{\mathbf{k}} - 3S^{\dagger}_{\mathbf{k}'}S_{\mathbf{k}}.$

Stojí za zmienku, že magnetické interakcie sú príťažlivé pre tripletné Cooperove páry. Verí sa, že feromagnetické fluktuácie spôsobujú (tripletnú) supratekutosť izotopu ³He a (pravdepodbne tripletnú) supravodivosť Sr_2RuO_4 .

Na druhej strane, magnetické interakcie sú zadanlivo odpudivé pre singletné Cooperove páry. Avšak, ak funkcia $\chi(\mathbf{q})$ vykazuje ostré maximá pri konečných vlnových vektoroch, potom interakcia $H_{\text{BCS}}^{\text{mag}}$ môže spôsobovať aj supravodivosť so singletnými Cooperovými pármi. Verí sa napríklad, že tento mechanizmus je zodpovedný za supravodivosť vysokoteplotných supravodičov.

Variačná metóda pre maticu hustoty

Metódou renormalizačnej grupy teda obvykle vieme identifikovať dominantné procesy v študovanom systéme, napríklad cooperovské rozptyly v prípade systémov s príťažlivými interakciami. Na popis supravodivého stavu pod kritickou teplotou potrebujeme na jednej strane uhádnuť tvar efektívneho hamiltoniánu a na strane druhej optimalizovať voľné parametre, ktoré doňho vstupujú. Úlohe o tvare hamiltoniánu sa budeme venovať v nasledovnej prednáške. Teraz (v princípe) vyriešime jednoduchšiu úlohu o optimalizácii jeho parametrov.

Najprv zovšeobecníme variačný princíp z kvantovej mechaniky na štatistickú fyziku. Majme systém s hamiltoniánom H. Z kvantovej mechaniky vieme, že pre energiu základného stavu E platí $E \leq \langle \psi | H | \psi \rangle$, kde $| \psi \rangle$ je ľubovoľný normalizovaný stav systému. Teda energiu E možno zhora ohraničiť voľbou variačného stavu $| \psi \rangle$. Stav $| \psi \rangle$ môžeme ďalej optimalizovať minimalizovaním jeho energie.

Ukážeme, že pri konečnej teplote možno tento výsledok zovše
obecniť nasledovne. Nech ρ je ľubovoľná matica hustoty pre skúmaný systém. Potom voľnú energi
uF systému možno zhora odhadnúť nasledovne:

$$F \le \mathrm{Tr}\rho H + T\mathrm{Tr}\rho\ln\rho.$$
(14)

Teda výsledok (14) možno použiť na optimalizáciu matíc hustoty $\rho.$

Dôkaz.¹⁵ Nech veličina x nadobúda hodnotu x s pravdepodobnosťou P(x). Definujme strednú hodnotu veličiny f(x) vzťahom $\langle f(x) \rangle = \text{Tr}P(x)f(x)$, kde symbol stopy znamená sumáciu alebo integrovanie cez všetky dovolené hodnoty x. Z nerovnosti $e^x \ge 1 + x$, platnej pre všetky reálne x, dostávame nerovnosť $\langle e^{-\lambda x} \rangle \ge e^{-\lambda \langle x \rangle}$ pre strednú hodnotu exponenciály. Naozaj:

$$\langle e^{-\lambda x} \rangle = \operatorname{Tr}\left\{P(x)e^{-\lambda x}\right\} = e^{-\lambda\langle x\rangle}\operatorname{Tr}\left\{P(x)e^{-\lambda(x-\langle x\rangle)}\right\} \ge e^{-\lambda\langle x\rangle}\operatorname{Tr}\left\{P(x)\left[1-\lambda(x-\langle x\rangle)\right]\right\} = e^{-\lambda\langle x\rangle}.$$

Nech matica hustoty ρ , ktorú študujeme, je diagonálna v báze $|n\rangle$. Potom presná štatistická suma spĺňa nerovnosť

$$Z = \sum_{n} \langle n | e^{-H/T} | n \rangle \geq \sum_{n} e^{-\langle n | H | n \rangle / T} = \sum_{n} \rho_n e^{-\langle n | H | n \rangle / T - \ln \rho_n},$$

kde sme pri výpočte strednej hodnoty v stave $|n\rangle$ použili nerovnosť pre strednú hodnotu exponenciály. V druhom kroku sme použili triviálnu identitu $1 = \rho_n e^{-\ln \rho_n}$. Ak teraz pre stredovanie podľa matice hustoty ρ_n ešte raz použijeme nerovnosť pre strednú hodnotu exponenciály, dostaneme

$$Z \ge \sum_{n} \rho_n e^{-\langle n|H|n\rangle/T - \ln \rho_n} \ge e^{-\sum_{n} \rho_n(\langle n|H|n\rangle/T + \ln \rho_n)} = e^{-\operatorname{Tr}\rho(H/T + \ln \rho)}$$

Keďže $F = -T \ln Z$, dostávame odtiaľ to variačnú nerovnosť (14).

Optimalizácia efektívneho hamiltoniánu

Ako možno výsledok (14) použiť na optimalizáciu parametrov efektívneho hamiltoniánu H_0 ? Ak systém popíšeme namiesto presného hamiltoniánu H jednoduchším efektívnym hamiltoniánom H_0 , potom za variačnú maticu hustoty je rozumné zobrať

$$\rho_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-H_0/T}, \qquad Z_0 = \text{Tr}e^{-H_0/T}$$

Ak použijeme túto maticu hustoty v nerovnosti (14), stredovanie podľa ρ_0 označíme symbolom $\langle \ldots \rangle_0$ a použijeme $\ln \rho_0 = -\ln Z_0 - H_0/T$, dostaneme nasledovný horný odhad voľnej energie:

$$F \le F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0, \tag{15}$$

 $^{^{15}\}mathrm{Tu}$ sledujeme výklad v knihe Chaikina a Lubenského, kapitola 4.8.

kde $F_0 = -T \ln Z_0$ je naivná hodnota voľnej energie. Výsledok (15) nám umožňuje optimalizovať parametre efektívneho hamiltoniánu H_0 minimalizovaním pravej strany.

Ak v uvedenom dôkaze nahradíme hamiltonián H "grandkánonickým hamiltoniánom" $\mathcal{H} = H - \mu N$, efektívny hamiltonián H_0 "grandkánonickým efektívnym hamiltoniánom" $\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu N$, štatistickú sumu Z veľkou štatistickou sumou $\mathcal{Z} = \text{Tr}e^{-\mathcal{H}/T}$, voľnú energiu F veľkým termodynamickým potenciálom \mathcal{F} a za maticu hustoty vezmeme $\rho_0 = \frac{1}{\mathcal{Z}_0}e^{-\mathcal{H}_0/T}$ kde $\mathcal{Z}_0 = \text{Tr}e^{-\mathcal{H}_0/T}$, potom dostaneme analogickú nerovnosť

$$\mathcal{F} \leq \mathcal{F}_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0
angle_0.$$

Tlmenie ultrazvuku

Vo zvyšku tejto prednášky popíšeme také experimenty, pri ktorých sa počet elektrónov vo vzorke nemení. Vo všetkých skúmaných prípadoch budeme predpokladať, že pôsobenie vonkajších polí možno chápať ako malú poruchu oproti modelovému hamiltoniánu (??) a odozvu na túto poruchu popíšeme Kubovou formulou.

Začnime skúmamím tlmenia zvukových vĺn v supravodiči. Obmedzíme sa pritom na prípad dlhovlnných pozdĺžnych vĺn s vlnovým vektorom q, pričom budeme predpokladať, že dĺžka vlny je väčšia než rozmer Cooperovho páru, t.j. že platí $q\xi \ll 1.^{16}$ Tlmenie ultrazvukových vĺn sa realizuje prostredníctvom rozptylu fonónov na nečistotách, elektrónoch, atď. My preskúmame, ako sa v supravodivom stave zmení príspevok od rozptylu fonónov na elektrónoch. Interakciu medzi elektrónmi a pozdĺžnymi fonónmi popíšeme hamiltoniánom (pozri napr. III.8):

$$H_{\rm ep} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} g_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^{\dagger}),$$

kde $\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} (c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} + c^{\dagger}_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow})$ je fourierovská komponenta elektrónovej hustoty, operátor $a_{\mathbf{q}}$ anihiluje fonón s hybnosťou \mathbf{q} a $g_{\mathbf{q}}$ je väzbová konštanta medzi elektrónmi a fonónmi. Keďže hamiltonián musí byť hermitovský, musíme žiadať $g^*_{\mathbf{q}} = g_{-\mathbf{q}}$.

Všeobecná formula

Predpokladajme, že zvuková vlna obsahuje $N_{\mathbf{q}}$ fonónov. V dôsledku interakčného člena H_{ep} však $N_{\mathbf{q}}$ nie je zachovávajúcou sa veličinou. Pravdepodobnosti absorpcie a emisie fonónu za jednotku času W_a a W_e možno počítať pomocou Fermiho zlatého pravidla. Ak za počiatočný a konečný stav systému zvuková vlna + elektróny pritom zoberieme direktné súčiny fonónových a elektrónových stavov $|i\rangle = |N_{\mathbf{q}}\rangle \otimes |n\rangle$ a $|f\rangle = |N_{\mathbf{q}} \pm 1\rangle \otimes |m\rangle$, kde $|n\rangle$ a $|m\rangle$ sú vlastné stavy elektrónového systému s energiami E_m a E_n , pre W_a a W_e dostaneme

$$W_{a} = \frac{2\pi |g_{\mathbf{q}}|^{2} N_{\mathbf{q}}}{\hbar \mathcal{V}} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-E_{n}/T} |\langle m|\rho_{-\mathbf{q}}|n\rangle|^{2} \delta(E_{m} - E_{n} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}),$$

$$W_{e} = \frac{2\pi |g_{\mathbf{q}}|^{2} (N_{\mathbf{q}} + 1)}{\hbar \mathcal{V}} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-E_{n}/T} |\langle m|\rho_{\mathbf{q}}|n\rangle|^{2} \delta(E_{m} - E_{n} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}).$$

Časový vývoj počtu fonónov v zvukovej vlne je popísaný rovnicou $\dot{N}_{\mathbf{q}} = W_e - W_a$. Ak teraz budeme predpokladať, že počet fonónov v zvukovej vlne je makroskopický, $N_{\mathbf{q}} \gg 1$, potom vo výraze pre W_e môžeme nahradiť faktor $N_{\mathbf{q}} + 1$ faktorom $N_{\mathbf{q}}$. Ak v ňom naviac zameníme sumačné indexy n a m a ak využijeme vzťah $\rho_{\mathbf{q}} = \rho_{-\mathbf{q}}^{\dagger}$, potom rovnica pre časový vývoj počtu fonónov sa zjednoduší na tvar $\dot{N}_{\mathbf{q}} = -\alpha N_{\mathbf{q}}$ s útlmovým faktorom

$$\alpha = \frac{2\pi |g_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar} \left(1 - e^{-\hbar\omega_{\mathbf{q}}/T} \right) \frac{1}{Z\mathcal{V}} \sum_{n,m} e^{-E_n/T} \left| \langle m | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | n \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega_{\mathbf{q}})$$

¹⁶Dá sa ukázať, že v tomto prípade je väzbová konštanta $g_{\mathbf{q}}$ medzi elektrónmi a zvukovou vlnou (pozri ďalší výklad) rovnaká v normálnom aj v supravodivom stave. *Pozdĺžna* dielektrická funkcia supravodiča je totiž v dlhovlnnej limite takmer rovnaká, ako v normálnom stave. Tienenie dlhovlnných *priečnych* polí je však v supravodiči kvalitatívne iné ako v normálnom kove, keďže statické polia sú odtienené Meissnerovým javom.

Porovnaním s definíciou dynamického štruktúrneho faktora $S(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$ v kapitole 1 môžeme výsledok pre koeficient útlmu ultrazvukových vĺn zjednodušiť nasledovne:

$$\alpha = \frac{2\pi |g_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar^2} \left(1 - e^{-\hbar\omega_{\mathbf{q}}/T}\right) S(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}}).$$

Ak teraz štruktúrny faktor prepíšeme pomocou fluktuačne-disipačnej vety, dostaneme napokon

$$\alpha = -\frac{2|g_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar}\chi''(\mathbf{q},\omega_{\mathbf{q}}).$$

Teda imaginárna časť funkcie odozvy hustota-hustota meria absorpciu (fonónového) žiarenia s vlnovým vektorom **q** a frekvenciou $\omega_{\mathbf{q}}$. Inými slovami, funkcia $\chi''(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$ je meradlom disipácie energie v elektrónovom systéme, ako sme tvrdili bez dôkazu v kapitole 1.

Priblíženie stredného poľa

V priblížení stredného poľa za vlastné stavy supravodiča berieme vlastné stavy hamiltoniánu (??). Pri výpočte útlmovej funkcie preto potrebujeme elektrónové operátory nahradiť bogoľubónmi. Pri tomto prepise je užitočná nasledovná identita:

$$c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}c_{\mathbf{p}\uparrow} + c^{\dagger}_{-\mathbf{p}\downarrow}c_{-\mathbf{k}\downarrow} = (u^{*}_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{p}} - v^{*}_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{p}})\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}\gamma_{\mathbf{p}\uparrow} + (u_{\mathbf{k}}u^{*}_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{k}}v^{*}_{\mathbf{p}})\gamma^{\dagger}_{-\mathbf{p}\downarrow}\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} + (u^{*}_{\mathbf{k}}v^{*}_{\mathbf{p}} + v^{*}_{\mathbf{k}}u^{*}_{\mathbf{p}})\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}\gamma^{\dagger}_{-\mathbf{p}\downarrow} + (u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{p}})\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}\gamma_{\mathbf{p}\uparrow} + 2\delta_{\mathbf{k}\mathbf{p}}|v_{\mathbf{k}}|^{2}, \quad (16)$$

Kombinácie funkcií u a v, ktoré vystupujú na pravej strane, sa nazývajú koherenčnými faktormi typu I. Všimnime si, že prvé dva členy nemenia počet bogoľubónov, kým druhé dva členy menia počet bogoľubónov o 2.

Keďže v typických experimentoch je energia ultrazvukových vĺn malá oproti supravodivej energetickej medzere, $\hbar \omega_{\mathbf{q}} \ll \Delta$,¹⁷ zákon zachovania energie v rovnici pre α možno splniť iba procesmi, ktoré zachovávajú počet bogoľubónov. Preto môžeme písať

$$\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{k}} \left[(u_{\mathbf{k}}^{*} u_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - v_{\mathbf{k}}^{*} v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow} + (u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{*} - v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{*}) \gamma_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} + \dots \right] = \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\mathbf{k}),$$

kde vybodkované členy, ktoré zodpovedajú kreácii a anihilácii párov bogoľubónov, možno zanedbať. Ak $|n\rangle$ a $|m\rangle$ sú vlastnými stavmi hamiltoniánu (??), potom ľahko nahliadneme, že $|\langle m | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | n \rangle|^2 = \sum_{\mathbf{k}} |\langle m | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} (\mathbf{k}) | n \rangle|^2$. Príspevky od $\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} (\mathbf{k})$ k útlmovému faktoru sú teda dvoch typov. Prvý príspevok pochádza od procesov, v ktorých $|n\rangle$ obsahuje bogoľubón v stave $\mathbf{k} - \mathbf{q}, \uparrow$ a stav \mathbf{k}, \uparrow je prázdny, čo sa stane s pravdepodobnosťou $f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(1-f_{\mathbf{k}})$, pozri aj III.11. Druhý príspevok pochádza od procesov, v ktorých $|n\rangle$ obsahuje bogoľubón v stave $-\mathbf{k}, \downarrow$ a stav $-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \downarrow$ je prázdny, čo sa stane s pravdepodobnosťou $f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(1-f_{\mathbf{k}})$, pozri aj III.11. Druhý príspevok pochádza od procesov, v ktorých $|n\rangle$ obsahuje bogoľubón v stave $-\mathbf{k}, \downarrow$ a stav $-\mathbf{k} + \mathbf{q}, \downarrow$ je prázdny, čo sa stane s pravdepodobnosťou $f_{\mathbf{k}}(1-f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})$. Zámenou sumačnej premennej \mathbf{k} v druhom príspevku za $-\mathbf{k} + \mathbf{q}$ a uvážiac, že funkcie $f_{\mathbf{k}}, u_{\mathbf{k}}$ a $v_{\mathbf{k}}$ sú párne, dostaneme, že obidva príspevky sú rovnaké. Naviac, ak použijeme identitu

$$\left(1 - e^{-\hbar\omega_{\mathbf{q}}/T}\right) f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(1 - f_{\mathbf{k}})\delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}) = (f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}})\delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}), \quad (17)$$

pre útlmový faktor v priblížení stredného poľa dostaneme

$$\alpha = \frac{4\pi |g_{\mathbf{q}}|^2 \omega_{\mathbf{q}}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} |u_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - v_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2 \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}).$$
(18)

Pri vyhodnocovaní tohto výrazu v koherenčnom faktore položíme $\mathbf{q} = 0$, pretože $q\xi \ll 1$. Naviac, keďže $\hbar\omega_{\mathbf{q}} \ll T$, zlomok môžeme aproximovať deriváciou a dostaneme

$$\alpha = \frac{4\pi |g_{\mathbf{q}}|^2 \omega_{\mathbf{q}}}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right)^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial E_{\mathbf{k}}}\right) \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \hbar \omega_{\mathbf{q}}).$$

¹⁷Okrem teplôt extrémne blízko k T_c , kedy $\Delta \to 0$.

Ak teraz sumu ce
z ${\bf k}$ nahradíme integráciou cez energie, zaviedieme faktor
 tako kosínus uhla medzi ${\bf k}$ a
 ${\bf q}$ a využijeme, že pre frekvenciu zvuku platí vzťa
h $\omega_{{\bf q}} = vq$, kde v je rýchlosť zvuku, dostaneme

$$\alpha = 2\pi |g_{\mathbf{q}}|^2 vq N(0) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(\frac{\varepsilon}{E}\right)^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) \int_{-1}^1 dt \delta \left(\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2} - \sqrt{(\varepsilon - \hbar v_F qt)^2 + \Delta^2} - \hbar vq\right).$$

Stojí za povšimnutie, že keďže $\hbar vq \ll \Delta$, k integrálu cez t prispieva iba $t \approx 0$. Fyzikálne to znamená, že ultrazvukom sú rozptyľované iba bogoľubóny s vlnovým vektorom k kolmým na smer šírenia zvukovej vlny. Integrujúc cez t dostaneme

$$\alpha = \frac{2\pi |g_{\mathbf{q}}|^2 v N(0)}{\hbar v_F} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon\varepsilon}{E} \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) = \frac{4\pi |g_{\mathbf{q}}|^2 v N(0)}{\hbar v_F} \int_{\Delta}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) = 2\alpha_N f(\Delta),$$

kde $\alpha_N = \frac{2\pi N(0)|g_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar} \frac{v}{v_F}$. Všimnime si, že keďže $f(0) = \frac{1}{2}$, v normálnom stave (t.j. pri $\Delta = 0$) nadobúda útlmový faktor hodnotu $\alpha = \alpha_N$. Teda α_N je útlmový faktor pre rozptyl fonónov na elektrónoch v normálnom kove. Všimnime si, že α_N nie je funkciou teploty.

Pri znižovaní teploty pod T_c útlmový faktor α klesá a pri T = 0 úplne vymizne. Je tomu tak preto, lebo k rozptylu fonónov môže dôjsť iba na tepelne excitovaných bogoľubónoch, ktorých pri znižovaní teploty ubúda. Z merania teplotnej závislosti podielu $\frac{\alpha}{\alpha_N}$ možno (v princípe) určiť teplotnú závislosť energetickej medzery Δ .

Relaxácia jadrových spinov

Jadrá atómov môžu niesť spin. Pre jednoduchosť budeme skúmať prípad, kedy jadrový spin má hodnotu $S = \frac{1}{2}$. V prítomnosti magnetického poľa sú energie dvoch možných stavov jadra $\varepsilon_{\uparrow} = \varepsilon_{\downarrow} - \hbar \omega_N$, kde $\hbar \omega_N$ je extrémne malá energia omnoho menšia než všetky elektrónové energie ako napr. Δ alebo T. Pri fixovanej teplote preto v magnetickom poli vzniká rovnovážna magnetizácia $M^0 = \frac{1}{2}(N^0_{\uparrow} - N^0_{\downarrow})$ jadrových spinov.

Predstavme si, že v systéme jadrových spinov umelo vyvoláme odchýlku od rovnovážnej magnetizácie. Rýchlosť zániku takýchto odchýlok W možno merať technikou jadrovej magnetickej rezonancie. Takéto merania nám potom poskytujú informáciu o vlastnostiach média, do ktorého sú jadrové spiny ponorené, podobne ako pri štúdiu tlmenia ultrazvuku.

V našich úvahách vezmeme do úvahy iba interakcie jadrových spinov s elektrónmi. Naviac budeme predpokladať, že jadrové spiny sú navzájom nezávislé, a preto stačí skúmať vývoj magnetizácie jediného reprezentanta. Interakciu zvoleného jadrového spinu \mathbf{S} v mriežkovom bode \mathbf{R} so systémom elektrónov popíšeme hamiltoniánom

$$H_{\rm int} = J \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{R}} = J \left[S^z s_{\mathbf{R}}^z + \frac{1}{2} (S^+ s_{\mathbf{R}}^- + S^- s_{\mathbf{R}}^+) \right],$$

kde $\mathbf{s}_{\mathbf{R}}$ je operátor spinu elektrónov v mriežkovom bode \mathbf{R} :

$$s^{z}_{\mathbf{R}} = \frac{1}{2}(c^{\dagger}_{\mathbf{R}\uparrow}c_{\mathbf{R}\uparrow} - c^{\dagger}_{\mathbf{R}\downarrow}c_{\mathbf{R}\downarrow}), \qquad s^{+}_{\mathbf{R}} = c^{\dagger}_{\mathbf{R}\uparrow}c_{\mathbf{R}\downarrow}, \qquad s^{-}_{\mathbf{R}} = c^{\dagger}_{\mathbf{R}\downarrow}c_{\mathbf{R}\uparrow}.$$

Všeobecná formula

V prítomnosti interakcií medzi jadrami a elektrónmi sa pravdepodobnosti priemetov zvoleného jadrového spinu (alebo, ekvivalentne, počty jadrových spinov s danými priemetmi) v čase vyvíjajú podľa nasledovných vzťahov

$$\begin{aligned} \frac{dN_{\uparrow}}{dt} &= W_{\uparrow\downarrow}N_{\downarrow} - W_{\downarrow\uparrow}N_{\uparrow}, \\ \frac{dN_{\downarrow}}{dt} &= W_{\downarrow\uparrow}N_{\uparrow} - W_{\uparrow\downarrow}N_{\downarrow}, \end{aligned}$$

kde $W_{\sigma\tau}$ je pravdepodobnosť, že za jednotku času sa jadrový spin preklopí (v dôsledku jeho interakcií s elektrónmi) zo stavu τ do stavu σ . V rovnováhe pritom musí platiť podmienka

$$W_{\downarrow\uparrow}N^0_{\uparrow} = W_{\uparrow\downarrow}N^0_{\downarrow}.$$

Teraz predpokladajme, že skúmaný systém jadrových spinov (s fixovaným celkovým počtom $N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$) nie je v rovnováhe, ale platí $N_{\uparrow}(t) = N_{\uparrow}^0 + m(t)$ a $N_{\downarrow}(t) = N_{\downarrow}^0 - m(t)$. Ľahko nahliadneme, že z pohybových rovníc pre N_{\uparrow} a N_{\downarrow} vyplýva

$$\frac{dm}{dt} = -Wm,$$

kde $W = W_{\downarrow\uparrow} + W_{\uparrow\downarrow}$ je rýchlosť relaxácie k rovnováhe.

Ak vlastné stavy elektrónového systému označíme $|m\rangle$, $|n\rangle$ a ak k nim príslušné energie sú E_m a E_n , potom podľa Fermiho zlatého pravidla platí

$$W_{\uparrow\downarrow} = \frac{2\pi}{\hbar Z} \sum_{m,n} e^{-E_n/T} |\langle m \otimes \uparrow | J \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{R}} | n \otimes \downarrow \rangle|^2 \,\delta(E_m - E_n - \hbar \omega_N),$$

$$W_{\downarrow\uparrow} = \frac{2\pi}{\hbar Z} \sum_{m,n} e^{-E_n/T} |\langle m \otimes \downarrow | J \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{R}} | n \otimes \uparrow \rangle|^2 \,\delta(E_m - E_n + \hbar \omega_N).$$

Keďže pre maticové elementy jadrového spinu platí $\langle \downarrow |S^-| \uparrow \rangle = 1$ a $\langle \uparrow |S^+| \downarrow \rangle = 1$, pravdepodobnosti $W_{\sigma\tau}$ závisia iba od vlastností elektrónového systému:

$$W_{\uparrow\downarrow} = \frac{\pi J^2}{2\hbar Z} \sum_{m,n} e^{-E_n/T} \left| \langle m | s_{\mathbf{R}}^- | n \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar \omega_N) = \left(\frac{J}{2\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_N t} \left\langle s_{\mathbf{R}}^+ (t) s_{\mathbf{R}}^- (0) \right\rangle,$$
$$W_{\downarrow\uparrow} = \frac{\pi J^2}{2\hbar Z} \sum_{m,n} e^{-E_n/T} \left| \langle m | s_{\mathbf{R}}^+ | n \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n + \hbar \omega_N) = \left(\frac{J}{2\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_N t} \left\langle s_{\mathbf{R}}^- (0) s_{\mathbf{R}}^+ (t) \right\rangle,$$

kde integrálne výrazy sme odvodili technikami z kapitoly 1. Tieto výrazy ukazujú, že pravdepodobnosti $W_{\uparrow\downarrow}$ a $W_{\downarrow\uparrow}$ sú (až na nepodstatnú multiplikatívnu konštantu) dané Fourierovými transformáciami spinového štruktúrneho faktora elektrónového systému definovaného vzťahmi $\mathcal{S}_{+-}(\mathbf{R},t) = \langle s_{\mathbf{R}}^+(t)s_{\mathbf{R}}^-(0) \rangle$ a $\mathcal{S}_{-+}(\mathbf{R},t) = \langle s_{\mathbf{R}}^-(t)s_{\mathbf{R}}^+(0) \rangle$. Preto platí $W = \left(\frac{J}{2\hbar}\right)^2 [S_{+-}(\mathbf{R},\omega_N) + S_{-+}(\mathbf{R},-\omega_N)]$.

Keďže zvyšovacie a znižovacie operátory pre lektróny sú definované vzťahmi $s_{\mathbf{R}}^{\pm} = s_{\mathbf{R}}^{x} \pm i s_{\mathbf{R}}^{y}$, v spinovo izotrópnom systéme zrejme platí $\mathcal{S}_{+-}(\mathbf{R},t) = \mathcal{S}_{-+}(\mathbf{R},t) = \langle s_{\mathbf{R}}^{x}(t)s_{\mathbf{R}}^{x}(0) \rangle + \langle s_{\mathbf{R}}^{y}(t)s_{\mathbf{R}}^{y}(0) \rangle$. Ak ďalej uvážime, že v takomto systéme platí $\langle s_{\mathbf{R}}^{x}(t)s_{\mathbf{R}}^{x}(0) \rangle = \langle s_{\mathbf{R}}^{y}(t)s_{\mathbf{R}}^{y}(0) \rangle = \langle s_{\mathbf{R}}^{z}(t)s_{\mathbf{R}}^{z}(0) \rangle = \mathcal{S}_{zz}(\mathbf{R},t)$ a ak zavedieme funkciu odozvy spin-spin $\chi_{zz}(\mathbf{R},\omega)$ elektrónového systému príslušnú k štruktúrnemu faktoru $\mathcal{S}_{zz}(\mathbf{R},t)$ (pozri kapitolu 1), výsledok pre W možno pomocou fluktuačne-disipačnej vety (v limite $\hbar\omega_N \ll T$) zapísať v tvare

$$\frac{W}{T} = -\frac{J^2}{\pi\hbar^2\omega_N}\chi_{zz}''(\mathbf{R},\omega_N).$$

Všimnime si, že vzťah medzi W a $\chi''_{zz}(\mathbf{R}, \omega_N)$ je analogický so vzťahom medzi útlmovým faktorom α pre ultrazvuk a funkciou odozvy hustota-hustota $\chi''(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$. Rozdiely sú pochopiteľné: jadrové spiny interagujú so *spinmi* a nie *nábojmi* elektrónov. Naviac, jadrové spiny sú *lokálne objekty* a nie *rovinné vlny* ako ultrazvuk.

Priblíženie stredného poľa

V tomto priblížení pri vyhodnocovaní spektrálnych rozkladov pravdepodobností $W_{\sigma\tau}$ za vlastné stavy supravodiča opäť berieme vlastné stavy hamiltoniánu (??). Pri výpočte $W_{\uparrow\downarrow}$ ďalej využijeme, že pre operátor spinu elektrónov platí $s_{\mathbf{R}}^{-} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{kp}} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{p}\uparrow} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{p})\cdot\mathbf{R}}$. Po prechode k operátorom pre bogoľubóny preto $s_{\mathbf{R}}^{-}$ možno zapísať v tvare

$$s_{\mathbf{R}}^{-} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} (u_{\mathbf{k}}^{*} u_{\mathbf{p}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{p}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{p}}^{*} \gamma_{-\mathbf{p}\downarrow}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{p}} \gamma_{\mathbf{p}\uparrow} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}}^{*} v_{\mathbf{p}}^{*} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \gamma_{-\mathbf{p}\downarrow}^{\dagger}) e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{p})\cdot\mathbf{R}} \cdot \mathbf{e}^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{p})\cdot\mathbf{R}} \cdot \mathbf{e}^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{p})\cdot$$

Prvé dva členy popisujú rozp
tyly bogoľubónov, kým druhé dva členy popisujú anihiláciu a kreáciu párov
 bogoľubónov, a preto menia energiu systému aspoň o 2 Δ . Avšak, keď
že okrem teplôt v extrémnej blízkosti kritickej teploty plat
í $\hbar\omega_N \ll \Delta$, procesy kreácie a anihilácie párov bogoľubónov nemôžu splniť zákon zachovania energie $E_m = E_n + \hbar\omega_N$. Preto pri výpočte $W_{\uparrow\downarrow}$ môžeme efektívne písať
 $s_{\mathbf{R}} =$

 $\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{kp}} \left(u_{-\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}} v_{-\mathbf{k}}^*\right) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\cdot\mathbf{R}} \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{p}\uparrow}$ a analogickou úvahou ako pri výpočte tlmenia ultrazvuku pre spektrálny rozklad dostaneme vyjadrenie

$$W_{\uparrow\downarrow} = \frac{\pi J^2}{2\hbar \mathcal{N}^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \left| u_{-\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}} v_{-\mathbf{k}}^* \right|^2 f_{\mathbf{p}} (1 - f_{\mathbf{k}}) \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{p}} - \hbar \omega_N).$$

Hlavným rozdielom oproti výrazu (18) pre tlmenie ultrazvuku je, že do výrazu pre $W_{\uparrow\downarrow}$ vstupuje iný koherenčný faktor

$$|u_{-\mathbf{k}}^*u_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}}v_{-\mathbf{k}}^*|^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{p}}\varepsilon_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{p}}\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{p}}E_{\mathbf{k}}}\right),$$

kde sme pri úprave predpokladali, že funkcia $\Delta_{\mathbf{k}}$ je reálna a párna. V ďalšom výklade sa obmedzíme na jednoduchý prípad konštantnej funkcie $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$. Prechodom od súm cez \mathbf{p} a \mathbf{k} k integrálom podľa ε a ε' dostaneme

$$W_{\uparrow\downarrow} = \frac{\pi J^2 N(0)^2}{4\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \left(1 + \frac{\varepsilon \varepsilon' + \Delta^2}{EE'}\right) f(1 - f') \delta(E' - E - \hbar \omega_N).$$

Teraz si všimnime, že člen úmerný $\varepsilon \varepsilon'$ po integrácii vypadne, pretože je nepárnou funkciou. Zvyšné členy sú párne, a preto sa v nich možno obmedziť na integrovanie cez kladné energie. Tak dostaneme

$$W_{\uparrow\downarrow} = \frac{\pi J^2 N(0)^2 T}{\hbar} \int_{\Delta}^{\infty} \frac{dEE}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \int_{\Delta}^{\infty} \frac{dE'E'}{\sqrt{(E')^2 - \Delta^2}} \left(1 + \frac{\Delta^2}{EE'}\right) \frac{f - f'}{E' - E} \delta(E' - E - \hbar\omega_N),$$

kde sme naviac integračné premenné ε a ε' nahradili energiami $E = \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}$ a $E' = \sqrt{(\varepsilon')^2 + \Delta^2}$. Využili sme tiež identitu (17) v limite $\hbar \omega_N \ll T$. Všimnime si, že zlomok na pravej strane možno interpretovať ako deriváciu Fermiho funkcie. Zo vzťahu $\mathcal{S}_{+-}(\mathbf{R},t) = \mathcal{S}_{-+}(\mathbf{R},t)$ vyplýva, že pravdepodobnosť $W_{\downarrow\uparrow}$ dostaneme z výrazu pre $W_{\uparrow\downarrow}$ zámenou ω_N za $-\omega_N$. Odtiaľ to potom ľahko nahliadneme, že $W_{\downarrow\uparrow} = W_{\uparrow\downarrow}$. Integráciu cez E' možno vďaka delta-funkcii vykonať a tak dostaneme výsledný vzťah¹⁸

$$\frac{W}{T} = \frac{2\pi J^2 N(0)^2}{\hbar} \int_{\Delta}^{\infty} dE \frac{E(E + \hbar\omega_N) + \Delta^2}{\sqrt{E^2 - \Delta^2} \sqrt{(E + \hbar\omega_N)^2 - \Delta^2}} \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right).$$

Všimnime si, že v normálnom stave je pravdepodobnosť relaxácie jadrových spinov daná tzv. Korringovým vzťahom $\frac{W_N}{T} = \frac{\pi J^2 N(0)^2}{\hbar}$, t.j. W_N lineárne klesá s klesajúcou teplotou.



Obr. 2: Porovnanie teplotných závislostí $\frac{\alpha}{\alpha_N}$ a $\frac{W}{W_N}$.

Na obrázku 2 porovnávame teplotné závislosti normalizovaného koeficientu tlmenia ultrazvuku $\frac{\alpha}{\alpha_N}$ s normalizovanou rýchlosťou relaxácie jadrových spinov $\frac{W}{W_N}$. Obidva procesy súvisia s rozptylom teplene excitovaných bogoľubónov, a preto v limite nízkych teplôt obidva relaxačné procesy vymiznú. Avšak koeficient tlmenia ultrazvuku $\frac{\alpha}{\alpha_N}$ s klesajúcou teplotou monotónne klesá, kým rýchlosť relaxácie jadrových spinov $\frac{W}{W_N}$ tesne pod T_c najprv prudko narastie, a až potom klesá do nuly. Teória BCS teda predpovedá kvalitatívne rozdielne správanie týchto zdanlivo podobných procesov, v súlade s experimentálnymi pozorovaniami.

¹⁸Tento výsledok možno dostať aj priamym výpočtom $S_{zz}(\mathbf{R},t)$, ak použijeme tzv. koherenčné faktory typu II:

$$c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}c_{\mathbf{p}\uparrow} - c^{\dagger}_{-\mathbf{p}\downarrow}c_{-\mathbf{k}\downarrow} = (u^{*}_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{p}} + v^{*}_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{p}})\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}\gamma_{\mathbf{p}\uparrow} - (u_{\mathbf{k}}u^{*}_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{k}}v^{*}_{\mathbf{p}})\gamma^{\dagger}_{-\mathbf{p}\downarrow}\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} + (u^{*}_{\mathbf{k}}v^{*}_{\mathbf{p}} - v^{*}_{\mathbf{k}}u^{*}_{\mathbf{p}})\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}\gamma^{\dagger}_{-\mathbf{p}\downarrow} - (u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{p}})\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}\gamma_{\mathbf{p}\uparrow}.$$
(19)

Cvičenia

1. Ukážte, že elektrónová polarizovateľnosť $\alpha^{e}(\mathbf{q},\omega)$ súvisí so susceptibilitou (t.j. korelačnou funkciou hustota-hustota) elektrónového plynu $\chi^{e}(\mathbf{q},\omega)$ nasledovne: $\alpha^{e}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{e^{2}}{\epsilon_{0}\mathbf{q}^{2}}\chi^{e}(\mathbf{q},\omega)$. Pomocou fenomenologického výrazu pre $\alpha^{e}(\mathbf{q},\omega)$ vypočítajte $\chi^{e}(\mathbf{q},\omega)$ a výsledok porovnajte so vzťahom (12) pre supratekutinu.

2. Odhadnite strednú hodnotu výchylky anharmonického oscilátora s hamiltoniánom $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{m\omega^2}{l}x^3$ pri teplote T. Návod: použite variačnú metódu s efektívnym hamiltoniánom $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2$ a variačným parametrom a.

3. a) Vysvetlite, prečo prechod od Hubbardovho modelu v limite silnej väzby pri polovičnom zaplnení pásu k antiferomagnetickému Heisenbergovmu modelu (kapitola ??) je príkladom renormalizačnej procedúry. Ktoré stavy boli eliminované?
b) To isté pre metódu pseudopotenciálov (kapitola 9). Všimnite si, že renormalizačná procedúra môže generovať nové členy v hamiltoniáne [v prípade a) boli interakcie medzi nábojmi nahradené interakciami medzi spinmi] alebo "iba" meniť číselné hodnoty parametrov modelu [v prípade b) alebo pre Cooperov rozptyl].

4. Ukážte, že v termodynamickej limite je priblíženie stredného poľa pre hamiltonián (??) presné. Návod: ukážte, že v termodynamickej limite platí $\langle e^{-\mathcal{H}_{BCS}/T} \rangle_{red} = \langle e^{-\mathcal{H}_{red}/T} \rangle_{red}$. K tomu stačí, aby $\langle \mathcal{H}_{BCS}^n \rangle_{red} = \langle \mathcal{H}_{red}^n \rangle_{red}$. Túto rovnosť overte pre niekoľko malých hodnôt *n*.

4 Greenove funkcie

V tejto prednáške najprv zovšeobecníme pojem Greenovej funkcie z kapitoly 1. Potom budeme metódou pohybových rovníc hľadať jednočasticovú Greenovu funkciu pre neusporiadané systémy. Opierame sa pritom o výklad v knihe Rickayzena. Pozri aj AGD.

Retardované, advansované, kauzálne a Matsubarove Greenove funkcie

Skúmajme systém s hamiltoniánom H nezávislým od času. Pre ľubovoľné operátory A, B definujeme 4 typy Greenových funkcií:

Retardovaná Greenova funkcia: definujeme ju vzťahom

$$G_R(t,t') = -\frac{i}{\hbar} \langle \left[A(t), B(t') \right]_{\epsilon} \rangle \theta(t-t') \rangle$$

kde $[X,Y]_{\epsilon} = XY + \epsilon YX$. Časový vývoj $A(t) = e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar}$ sa rozumie v Heisenbergovom obraze a lomené zátvorky predstavujú rovnovážnu strednú hodnotu, $\langle X \rangle = \text{Tr}\rho X$, kde $\rho = \frac{1}{Z}e^{-H/T}$. Ak obidva operátory X, Y sú fermiónové, t.j. ak sú nepárnymi mocninami fermiónových kreačných a anihilačných operátorov, potom berieme $\epsilon = +1$. Ak obidva operátory X, Y sú bozónové, t.j. ak sú párnymi mocninami fermiónových kreačných a anihilačných operátorov, potom berieme $\epsilon = -1$.¹⁹

Cyklickými zámenami operátorov pod stopou ľahko ukážeme, že retardovaná Greenova funkcia závisí iba od rozdielu časov, $G_R(t, t') = G_R(t - t')$. Skúmajme nasledovnú funkciu komplexnej premennej z:

$$G(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{izt} G_R(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{izt} \langle [A(t), B(0)]_{\epsilon} \rangle.$$

Funkcia G(z) je analytická pre Imz > 0, pretože vtedy integrál konverguje.²⁰ Fourierovu transformáciu funkcie $G_R(t)$ budeme definovať pomocou funkcie G(z), kde vezmeme $z = \omega + i\gamma$ s reálnou frekvenciou ω a kladnou infinitezimálnou frekvenciou γ , t.j. definujeme ju vzťahom $G_R(\omega) = G(\omega + i\gamma)$. Ak predpokladáme, že hamiltonián H má vlastné stavy $|n\rangle$ s vlastnými energiami E_n a ak maticové elementy označíme ako $\langle m|A|n\rangle = A_{mn}$, potom funkciu $G_R(\omega)$ možno napísať v tzv. spektrálnej reprezentácii

$$G_R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{\omega + i\gamma - x}$$

so spektrálnou funkciou A(x) (pozri aj kapitolu 3):

$$A(x) = \left(1 + \epsilon e^{-\hbar x/T}\right) \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-E_m/T} A_{mn} B_{nm} \delta(\hbar x - E_n + E_m).$$

 $^{^{19}}$ V kapitole 1 sme sa obmedzili iba na bozónové Greenove funkcie. Náš výklad v tejto kapitole je teda všeobecnejší. 20 Vylučujeme patologický prípad, kedy korelácie rastú exponenciálne v čase.

Všimnime si, že v dôležitom špeciálnom prípade, kedy $B = A^{\dagger}$, je spektrálna funkcia reálna. Integrovaním explicitnej formuly pre A(x) dostaneme nasledovné sumačné pravidlá

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{1 + \epsilon e^{-\hbar x/T}} = \frac{1}{\hbar} \langle AB \rangle; \qquad \int_{-\infty}^{\infty} dx A(x) = \frac{1}{\hbar} \langle [A, B]_{\epsilon} \rangle.$$

Pomocou druhého pravidla ľahko odvodíme výraz pre asymptotiku Greenovej funkcie pre veľké ω : $G(\omega) \approx \frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dx A(x) = \frac{\langle [A,B]_{\epsilon} \rangle}{\hbar \omega}$. Všimnime si, že $G(\omega) \to 0$ pre $|\omega| \to \infty$.

Advansovaná Greenova funkcia:na rozdiel od retardovanej Greenovej funkcie, ktorá je nenulová iba pret>t'ju definujeme vzťahom

$$G_A(t,t') = +\frac{i}{\hbar} \langle \left[A(t), B(t') \right]_{\epsilon} \rangle \theta(t'-t),$$

teda advansovaná Greenova funkcia je nenulová iba pre t' > t. Opäť platí $G_A(t, t') = G_A(t - t')$, preto môžeme definovať funkciu $G'(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{izt} G_A(t)$. Analogicky ako pre retardovanú funkciu vidno, že tentokrát je funkcia G'(z) analytická v dolnej polrovine. Fourierovu transformáciu funkcie $G_A(t)$ preto budeme definovať vzťahom $G_A(\omega) = G'(\omega - i\gamma)$. Explicitný výpočet ukazuje, že

$$G_A(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{\omega - i\gamma - x}$$

s tou istou spektrálnou funkciou, akú má $G_R(\omega)$. Teda retardovaná aj advansovaná Greenova funkcia sú dané tou istou funkciou komplexnej premennej z:

$$G(z) = G'(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{z - x}$$

ako špeciálne prípady $G_R(\omega) = G(\omega + i\gamma)$ a $G_A(\omega) = G(\omega - i\gamma)$ pre reálne ω . Podľa Weierstrassovej vety²¹ pritom platí

$$G_R(\omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{\omega - x} - i\pi A(\omega), \qquad G_A(\omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{\omega - x} + i\pi A(\omega).$$

Teda, ak je spektrálna funkcia reálna (čo platí vždy, ak $B^{\dagger} = A$), potom ju možno vypočítať zo známej Greenovej funkcie podľa

$$A(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} G_R(\omega).$$

Ak je funkcia A(x) nenulová v bode x_0 , potom bod $z = x_0$ na reálnej osi je bodom singularity funkcie G(z). Pre makroskopické systémy so spojitým spektrom je však funkcia A(x) nenulová na spojitej množine energií x. V takom prípade hovoríme, že funkcia G(z) má *rez* na reálnej osi.

Kauzálna Greenova funkcia: definujeme ju vzťahom

$$G_c(t,t') = -\frac{i}{\hbar} \langle TA(t)B(t') \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle A(t)B(t') \rangle \theta(t-t') + \epsilon \frac{i}{\hbar} \langle B(t')A(t) \rangle \theta(t'-t)$$

V definícii kauzálnej Greenovej funkcie sme použili operátor časového usporiadania T, ktorý usporiadava súčiny operátorov v rôznych časoch tak, aby operátory v skoršom čase stáli napravo od operátorov v neskoršom čase. Pre fermiónové operátory sa pri zámene poradia zmení znamienko. Operátor T možno zovšeobecniť na súčin ľubovoľného počtu operátorov. Všimnime si, že opäť platí $G_c(t, t') = G_c(t - t')$.

Ukážeme, že Fourierova transformácia $G_c(\omega)$ je opäť určená už zavedenou funkciou komplexnej premennej G(z). Naozaj, skúmajme najprv funkciu $G''(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G_c(t)$. Štandardným spôsobom ukážeme, že

$$G''(\omega) = \frac{i}{\hbar Z} \sum_{m,n} A_{mn} B_{nm} \left[-e^{-E_m/T} \int_0^\infty dt e^{it(E_m - E_n)/\hbar + i\omega t} + \epsilon e^{-E_n/T} \int_{-\infty}^0 dt e^{it(E_m - E_n)/\hbar + i\omega t} \right].$$

V prvom integráli v hranatej zátvorke musíme zobrať $\omega \to \omega + i\gamma$, aby bol konvergentný. Podobne, v druhom integráli musíme vziať $\omega \to \omega - i\gamma$. Po explicitnom integrovaní cez čas a ponechaní malých imaginárnych častí dostaneme, opäť s použitím Weierstrassovej vety a jednoduchých manipulácií,

$$G_c(\omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{\omega - x} - i\pi F(\omega) A(\omega), \qquad F(\omega) = \frac{1 - \epsilon e^{-\hbar\omega/T}}{1 + \epsilon e^{-\hbar\omega/T}}.$$

²¹Pozri napr. III.11.

Funkcia $F(\omega)$ sa pre fermióny redukuje na $F(\omega) = 1 - 2f(\hbar\omega)$, kde $f(\hbar\omega)$ je Fermiho-Diracova distribučná funkcia. Pre bozóny $F(\omega) = -1 - 2n(\hbar\omega)$, kde $n(\hbar\omega)$ je Boseho-Einsteinova distribučná funkcia. V limite T = 0, kedy sa kauzálna Greenova funkcia obvykle používa, dostávame v prípade oboch štatistík $F(\omega) = \operatorname{sign}(\omega)$. Ak použijeme Weierstrassovu vetu ešte raz (tentoraz však opačným smerom), kauzálnu Greenovu funkciu pri teplote T = 0 môžeme opäť vyjadriť pomocou už zavedenej funkcie komplexnej frekvencie G(z), tentokrát pri frekvencii $z = \omega + i\gamma \operatorname{sign}(\omega)$:

$$G_c(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{\omega - x + i \gamma \text{sign}(\omega)}.$$

Matsubarova (teplotná) Greenova funkcia: definujeme ju vzťahom

$$G(\tau,\tau') = -\frac{1}{\hbar} \langle TA(-i\tau)B(-i\tau') \rangle = -\frac{1}{\hbar} \langle A(-i\tau)B(-i\tau') \rangle \theta(\tau-\tau') + \frac{\epsilon}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) = -\frac{1}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) + \frac{\epsilon}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) = -\frac{1}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) + \frac{\epsilon}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) = -\frac{1}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) + \frac{\epsilon}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) = -\frac{1}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) + \frac{\epsilon}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) = -\frac{1}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) = -\frac{1}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau')A(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) = -\frac{1}{\hbar} \langle B(-i\tau')A(-i\tau'$$

Matsubarovu Greenovu funkciu možno chápať ako kauzálnu Greenovu funkciu v imaginárnom čase $t = -i\tau$. Platí pritom, že $A(-i\tau) = e^{\tau H/\hbar} A e^{-\tau H/\hbar}$. Stojí tiež za zmienku, že $[A(-i\tau)]^{\dagger} = A^{\dagger}(i\tau)$. Ľahko overíme, že opäť platí $G(\tau, \tau') = G(\tau - \tau')$.

Matsubarovu Greenovu funkciu budeme študovať na konečnom intervale $-\hbar\beta < \tau \leq \hbar\beta$, kde $\beta = \frac{1}{T}$. Túto funkciu následne periodicky predžujeme na celú reálnu os. Výslednú periodickú funkciu s periódou $2\hbar\beta$ možno rozvinúť do Fourierovho radu podľa $e^{-i\omega_n\tau}$ s diskrétnymi frekvenciami $\omega_n = \frac{2\pi n}{2\hbar\beta}$, kde n sú celé čísla:

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n = -\infty}^{\infty} \overline{G}(\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}$$

Všimnime si nasledovnú symetriu funkcie $G(\tau)$. Nech čas τ leží v intervale $0 < \tau \leq \hbar\beta$. Vtedy $-\hbar\beta < \tau - \hbar\beta \leq 0$ a pre Greenove funkcie v časoch τ a $\tau - \hbar\beta$ dostávame

$$G(\tau) = -\frac{1}{\hbar Z} \operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H} e^{\tau H/\hbar} A e^{-\tau H/\hbar} B \right], \quad G(\tau - \hbar \beta) = \frac{\epsilon}{\hbar Z} \operatorname{Tr} \left[e^{-\beta H} B e^{(\tau/\hbar - \beta)H} A e^{-(\tau/\hbar - \beta)H} \right].$$

Ak teraz využijeme cyklickú zámenu operátorov pod stopou, ľahko sa presvedčíme, že pre $0<\tau\leq\hbar\beta$ platí

$$G(\tau - \hbar\beta) = -\epsilon G(\tau).$$

Keďže pre fermióny má byť $G(\tau - \hbar\beta) = -G(\tau)$, vo Fourierovom rade podľa $e^{-i\omega_n\tau}$ môžu figurovať iba také frekvencie ω_n , pre ktoré $e^{i\omega_n\hbar\beta} = -1$. Teda môžeme písať n = 2l + 1, kde l je celé číslo a vo Fourierovom rade fermiónovej Greenovej funkcie vystupujú iba tzv. fermiónové Matsubarove frekvencie

$$\omega_l = \frac{(2l+1)\pi}{\beta\hbar} = \frac{(2l+1)\pi T}{\hbar}$$

Podobne, keďže pre bozóny má byť $G(\tau - \hbar\beta) = G(\tau)$, vo Fourierovom rade podľa $e^{-i\omega_n\tau}$ môžu figurovať iba také frekvencie ω_n , pre ktoré $e^{i\omega_n\hbar\beta} = 1$. Teda môžeme písať n = 2l, kde l je celé číslo a vo Fourierovom rade bozónovej Greenovej funkcie vystupujú iba tzv. *bozónové Matsubarove frekvencie*

$$\omega_l = \frac{2l\pi}{\beta\hbar} = \frac{2l\pi T}{\hbar}$$

Ľahko overíme, že tak vo fermiónovom, ako aj v bozónovom prípade má inverzná Fourierova transformácia tvar

$$\overline{G}(\omega_l) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} G(\tau).$$

Explicitný výpočet stopy (v prípade oboch štatistík) dáva nasledovný výsledok pre Matsubarovu Greenovu funkciu:

$$\overline{G}(\omega_l) = -\frac{1}{\hbar Z} \sum_{m,n} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} e^{-\beta E_m} A_{mn} B_{nm} e^{\tau (E_m - E_n)/\hbar} = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} A_{mn} B_{nm} \frac{e^{-\beta E_m} + \epsilon e^{-\beta E_n}}{i\hbar\omega_l - (E_n - E_m)},$$

kde sme využili identitu $e^{i\omega_l\hbar\beta} = -\epsilon$. Teda spektrálnu reprezentáciu možno opäť písať v tvare

$$\overline{G}(\omega_l) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A(x)}{i\omega_l - x}$$

4 GREENOVE FUNKCIE



Obr. 3: Vľavo: sumarizácia vzťahov medzi komplexnou funkciou G(z) a retardovanou, advansovanou a Matsubarovou Greenovou funkciou. Vpravo: to isté pre kauzálnu Greenovu funkciu pri T = 0.

s už zavedenou spektrálnou funkciou A(x). Inými slovami, Matsubarovu Greenovu funkciu $\overline{G}(\omega_l)$ dostaneme z už zavedenej funkcie komplexnej frekvencie G(z) dosadením $z = i\omega_l$.

Zaviedli sme teda 4 typy Greenových funkcií, ktoré možno dostať z jedinej funkcie komplexnej frekvencie G(z).²² Priamy fyzikálny význam majú obvykle iba retardované Greenove funkcie. Načo sme teda zavádzali ostatné 3 typy funkcií? Pretože pri výpočtoch pomocou poruchovej teórie je výhodné používať kauzálne Greenove funkcie pri T = 0 a Matsubarove Greenove funkcie pri konečných teplotách. V týchto prednáškach budeme pracovať iba s Matsubarovými Greenovými funkciami. Kauzálne a advansované Greenove funkcie sme spomenuli len pre úplnosť.

Nakoniec sa ešte zmienime o tom, ako možno zo známej Matsubarovej Greenovej funkcie vypočítať retardovanú Greenovu funkciu. Samozrejme, pokiaľ nájdeme spektrálnu funkciu A(x), nie je čo riešiť. Čo ak však dostaneme (povedzme z numerického výpočtu) iba sadu hodnôt $\overline{G}(\omega_l)$? V takom prípade máme riešiť nasledovnú úlohu: treba nájsť funkciu komplexnej frekvencie G(z), ktorá bude mať nasledovné tri vlastnosti:

(i) pre všetky Matsubarove frekvencie v hornej polrovine platí $G(i\omega_l) = \overline{G}(\omega_l)$

(ii) funkcia G(z) je analytická v hornej polrovine

(iii) funkcia G(z) má asymptotiku 1/z pre veľké z.

Ak túto úlohu vyriešime, potom retardovanú Greenovu funkciu dostaneme zo vzťahu $G_R(\omega) = G(\omega + i\gamma)$ pre reálne ω . Našťastie existuje matematický výsledok, podľa ktorého má táto úloha jedno-značné riešenie.²³

Jednočasticová Greenova funkcia

Skúmajme pre jednoduchosť systém, kde sa častice hýbu na mriežke s bodmi *i*. Najjednoduchšiu Greenovu funkciu dostaneme, ak za operátory A, B vezmeme anihilačný a kreačný operátor častice:²⁴

$$\mathcal{G}(i,\tau;j,\tau') = -\langle Tc_i(-i\tau)c_j^{\dagger}(-i\tau')\rangle,$$

kde $c_i(-i\tau) = e^{\mathcal{H}\tau}c_i e^{-\mathcal{H}\tau}$ a $c_j^{\dagger}(-i\tau') = e^{\mathcal{H}\tau'}c_j^{\dagger}e^{-\mathcal{H}\tau'}$. Odteraz až do konca kapitoly kladieme $\hbar = 1$. Spektrálna funkcia jednočasticovej Greenovej funkcie má tvar

$$\mathcal{A}(i,j,\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \left(e^{-\beta E_m} + \epsilon e^{-\beta E_n} \right) \langle m | c_i | n \rangle \langle n | c_j^{\dagger} | m \rangle \delta \left[\omega - (E_n - E_m) \right].$$

Sumačné pravidlá pre spektrálnu funkciu sú

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega \mathcal{A}(i,j,\omega)}{1+\epsilon e^{-\beta\omega}} = \langle c_i c_j^{\dagger} \rangle, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \mathcal{A}(i,j,\omega) = \left\langle \left[c_i, c_j^{\dagger} \right]_{\epsilon} \right\rangle = \delta_{ij},$$

kde sme v druhom sumačnom pravidle použili kánonické komutačné vzťahy. V limite T = 0 sa prvé sumačné pravidlo redukuje na $\int_0^\infty d\omega \mathcal{A}(i, j, \omega) = \langle c_i c_j^{\dagger} \rangle$.

 $^{^{22}}$ Jednoduchý vzťah všetkých štyroch typov Greenových funkcií je výsledkom vhodnej voľby definícií. Používame definície podľa Rickayzenovej knihy. V literatúre sa používajú aj iné definície. Vtedy vzťah medzi rôznymi typmi Greenových funkciú a funkciou G(z)môže obsahovať dodatočné multiplikatívne konštanty.

²³G. Baym and D.N. Mermin, J. Math. Phys. **2**, 232 (1961).

 $^{^{24}}$ Pre jednoduchosť nepíšeme spinový index. Ak by sme na ňom nástojili, index *i* si môžeme predstaviť ako dvojicu indexov: priestorového a spinového. Pracujeme pritom v grandkánonickom formalizme.

Spektrálna funkcia diagonálnej Greenovej funkcie si=jteda pozostáva z dvoch príspevkov $\mathcal{A}(i,i,\omega)=\mathcal{A}^>(i,i,\omega)+\mathcal{A}^<(i,i,\omega)$:

$$\mathcal{A}^{>}(i,i,\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} \left| \langle n | c_i^{\dagger} | m \rangle \right|^2 \delta \left[\omega - (E_n - E_m) \right],$$

$$\mathcal{A}^{<}(i,i,\omega) = \frac{\epsilon}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} \left| \langle m | c_i | n \rangle \right|^2 \delta \left[\omega - (E_n - E_m) \right].$$

Ide o zovšeobecnenie na prípad konečných teplôt spektrálnej funkcie $\mathcal{A}^>$ pre vkladanie častíc a funkcie $\mathcal{A}^<$ pre vyberanie častíc, ktoré boli zavedené v kapitole ??. Tentokrát však ide o vkladanie a vyberanie častíc do mriežkového bodu *i* a nie do stavu rovinnej vlny. Keďže obidve funkcie $\mathcal{A}^>(i, i, \omega)$, $\mathcal{A}^<(i, i, \omega)$ sú nezáporné, možno ich opäť chápať ako pravdepodobnosti, že elektrón v mriežkovom bode *i* možno vložiť, resp. vybrať, s energiou ω .

Vo zvyšku tejto prednášky preskúmame jednočasticovú Greenovu funkciu v niekoľkých jednoduchých systémoch neinteragujúcich častíc.

Translačne invariantný systém

Skúmajme častice na jednoduchej kubickej mriežke popísanej tesnoväzobným hamiltoniánom

$$\mathcal{H}_0 = -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^{\dagger} c_j + c_j^{\dagger} c_i) - \mu \sum_i c_i^{\dagger} c_i.$$

Nech mriežka obsahuje $\mathcal{N} = N^3$ bodov a nech na jej okrajoch platia periodické okrajové podmienky. Našou úlohou je vypočítať Greenovu funkciu $\mathcal{G}_0(i, j; \tau) = -\langle Tc_i(-i\tau)c_j^{\dagger} \rangle$. Vďaka translačnej invariantnosti systému bude funkcia $\mathcal{G}_0(i, j; \tau)$ iba funkciou relatívnej vzdialenosti $\mathbf{R} = i - j$. Preto môžeme definovať jej priestorovú Fourierovu transformáciu $G_0(\mathbf{k}, \tau)$ pomocou vťahu

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{R},\tau) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} G_0(\mathbf{k},\tau) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}.$$

Na rozlíšenie Greenových funkcií v r-priestore a ich Fourierových transformácií v tejto kapitole používame nasledovnú konvenciu: objekty týkajúce sa r-priestoru označujeme krútenými symbolmi, napr. \mathcal{G} alebo \mathcal{A} . Objekty v k-priestore označujeme obyčajnými symbolmi, napr. G alebo A.

Inverzná Fourierova transformácia má tvar

$$G_0(\mathbf{k},\tau) = \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \mathcal{G}_0(\mathbf{R},\tau) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \mathcal{G}_0(i,j;\tau),$$

kde v druhej rovnosti sme využili translačnú invariantnosť systému.

Namiesto jednočasticovej bázy orbitálov *i* bude odteraz výhodné pracovať v báze rovinných vĺn:

$$c_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{j} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{j}} c_{j}^{\dagger}, \qquad c_{j}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{j}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$$

V tejto báze možno fourierovsky transformovanú Greenovu funkciu zapísať v tvare

$$G_0(\mathbf{k},\tau) = -\langle Tc_{\mathbf{k}}(-i\tau)c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle = -\langle e^{\mathcal{H}_0\tau}c_{\mathbf{k}}e^{-\mathcal{H}_0\tau}c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle \theta(\tau) + \epsilon \langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger}e^{\mathcal{H}_0\tau}c_{\mathbf{k}}e^{-\mathcal{H}_0\tau} \rangle \theta(-\tau).$$

Pretože v báze rovinných vĺn má hamiltonián diagonálny tvar $\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}$, kde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ sú grandkánonické energie, pre časový vývoj operátora $c_{\mathbf{k}}$ platí

$$\frac{\partial}{\partial \tau} c_{\mathbf{k}}(-i\tau) = [\mathcal{H}_0, c_{\mathbf{k}}(-i\tau)] = e^{\mathcal{H}_0 \tau} [\mathcal{H}_0, c_{\mathbf{k}}] e^{-\mathcal{H}_0 \tau} = -\varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}(-i\tau).$$

Po integrovaní pohybovej rovnice odtiaľto dostaneme časový vývoj $c_{\mathbf{k}}(-i\tau) = e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}\tau}c_{\mathbf{k}}$ a po dosadení do vzťahu pre Greenovu funkciu dostávame²⁵

$$G_0(\mathbf{k},\tau) = -(1 - f_{\mathbf{k}})e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}\tau}\theta(\tau) + f_{\mathbf{k}}e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}\tau}\theta(-\tau),$$

 $^{^{25}\}mathrm{Pre}$ konkrétnosť sa odteraz obmedzíme na prípad fermiónov.

kde sme zaviedli skrátené označeni
e $f_{\mathbf{k}} = f(\varepsilon_{\mathbf{k}})$. Fourierova transformácia podľa času
 $\overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}G_0(\mathbf{k},\tau) = -(1-f_{\mathbf{k}})\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}\tau}$ napokon po integrácii dáva výsledok pre Greenovu funkciu

$$\overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}}.$$

Pripomíname, že jednoduchý výsledný vzťah pre $\overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_n)$ platí iba pre grandkánonické energie $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.²⁶

Výsledok pre jednočasticovú Greenovu funkciu znamená, že spektrálna funkcia pre translačne invariantný systém nezávislých častíc je $A_0(\mathbf{k}, x) = \delta(x - \varepsilon_{\mathbf{k}})$. Táto funkcia triviálne spĺňa sumačné pravidlá $\int_{-\infty}^{\infty} dx A_0(\mathbf{k}, x) = 1$ aj $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx A_0(\mathbf{k}, x)}{1 + e^{-\beta x}} = 1 - f_{\mathbf{k}}$. Delta-funkčná spektrálna funkcia znamená, že v študovanom systéme má častica s hybnosťou **k** presne definovanú energiu $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

V systémoch s nečistotami a/alebo v interagujúcich systémoch sa jednočasticová spektrálna funkcia zmení dvojakým spôsobom:

(i) namiesto delta funkcie bude vystupovať lorentzián s konečnou šírkou; stred lorentziánu môže byť rôzny od $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ - vtedy hovoríme o zmene spektra, pozri napr. II.8.

(ii) integrál $\int dx$ cez lorentzián nebude vyčerpávať sumačné pravidlo. Zvyšok spektrálnej váhy bude pripadať na tzv. nekoherentné excitácie (kedy je vybudených množstvo ďalších excitácií tak, že celková hybnosť systému je **k**), a preto tento zvyšok bude spojite rozložený cez široký interval energií, pozri cvičenie 1 k I.11.

Andersonov model. Metóda pohybových rovníc

Predpokladajme, že v našom mriežkovom modeli existuje na každom bode mriežky *i* dodatočný náhodný potenciál V_i . Dostávame potom tzv. Andersonov model $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + U$, kde za neporušenú časť hamiltoniánu sme zobrali kinetickú energiu v dokonalej mriežke \mathcal{H}_0 . Rozptyl na náhodnom potenciáli popisuje poruchový člen $U = \sum_i V_i c_i^{\dagger} c_i$. Naším cieľom bude vypočítať Greenovu funkciu $\mathcal{G}(i, j, \tau)$ pre Andersonov model:

$$\mathcal{G}(i,j,\tau) = -\langle c_i(-i\tau)c_j^{\dagger}\rangle\theta(\tau) + \langle c_j^{\dagger}c_i(-i\tau)\rangle\theta(-\tau).$$

Opäť sme sa obmedzili na fermiónový prípad.

Nech $\mathcal{G}_0(i, j, \tau)$ je Greenova funkcia pre model \mathcal{H}_0 s dokonalou periodicitou. Časovou a priestorovou transformáciou môžeme Greenovu funkciu $\mathcal{G}_0(i, j, \tau)$ vyjadriť pomocou už známej funkcie $\overline{\mathcal{G}_0}(\mathbf{k}, \omega_n)$:

$$\mathcal{G}_0(i,j,\tau) = \frac{1}{\beta \mathcal{N}} \sum_{n\mathbf{k}} \overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_n) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) - i\omega_n\tau} = \frac{1}{\beta \mathcal{N}} \sum_{n\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) - i\omega_n\tau}}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}}.$$

Teda Greenova funkcia $\mathcal{G}_0(i, j, \tau)$ je známa. Greenovu funkciu $\mathcal{G}(i, j, \tau)$ budeme hľadať tzv. metódou pohybových rovníc. Za tým účelom počítajme deriváciu $\mathcal{G}(i, j, \tau)$ podľa τ . Tá pozostáva z dvoch typov členov: z derivácií theta funkcií, $\frac{\partial}{\partial \tau} \theta(\tau) = \delta(\tau)$, a z derivácií časového vývoja $c(-i\tau)$:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}(i, j, \tau) = -\left\langle \left\{ c_i, c_j^{\dagger} \right\} \right\rangle \delta(\tau) - \left\langle T e^{\mathcal{H}\tau} \left[\mathcal{H}, c_i \right] e^{-\mathcal{H}\tau} c_j^{\dagger} \right\rangle$$

Teraz využijeme, že v prvom člene na pravej strane môžeme vďaka Diracovej delta-funkcii položiť $\tau = 0$, a preto $\left\{c_i, c_j^{\dagger}\right\} = \delta_{ij}$. Ďalej platí $[\mathcal{H}, c_i] = [U, c_i] + [\mathcal{H}_0, c_i]$, pričom $[U, c_i] = -V_i c_i$ a $[\mathcal{H}_0, c_i] = \sum_m' t_{im} c_m$, kde $t_{im} = \mu$ pre i = m, $t_{im} = t$ pre susedné body i a m a ináč $t_{im} = 0$. Tak dostaneme pohybovú rovnicu pre Greenovu funkciu $\mathcal{G}(m, j, \tau)$:

$$\sum_{m} \left[\delta_{im} \frac{\partial}{\partial \tau} - t_{im} + V_i \delta_{im} \right] \mathcal{G}(m, j, \tau) = -\delta_{ij} \delta(\tau).$$
⁽²⁰⁾

Pohybovú rovnicu pre $\mathcal{G}_0(i, j, \tau)$, t.j. pre mriežku bez náhodného potenciálu, dostaneme vypustením člena úmerného V_i :

$$\sum_{m} \left[\delta_{im} \frac{\partial}{\partial \tau} - t_{im} \right] \mathcal{G}_0(m, j, \tau) = -\delta_{ij} \delta(\tau).$$

²⁶Pretože do Fermiho distribučných funkcií vstupujú grandkánonické energie.

Diferenciálnu rovnicu pre $\mathcal{G}(m, j, \tau)$ preto možno prepísať ako nasledovnú integrálnu rovnicu:

$$\mathcal{G}(m,j,\tau) = \mathcal{G}_0(m,j,\tau) + \sum_k \int_0^\beta d\tau' \mathcal{G}_0(m,k,\tau-\tau') V_k \mathcal{G}(k,j,\tau').$$

Naozaj: (i) Ak na túto rovnicu pôsobíme zľava operátorom $\sum_{m} \left[\delta_{im} \frac{\partial}{\partial \tau} - t_{im} \right]$ a využijeme rovnicu pre $\mathcal{G}_{0}(m, j, \tau)$, ľahko overíme, že funkcia $\mathcal{G}(m, j, \tau)$, ktorá rieši integrálnu rovnicu, rieši aj diferenciálnu pohybovú rovnicu (20). (ii) Naviac, keďže platí $\mathcal{G}_{0}(m, j, \tau - \beta) = -\mathcal{G}_{0}(m, j, \tau)^{27}$ potom aj Greenova funkcia Andersonovho modelu spĺňa okrajovú podmienku $\mathcal{G}(m, j, \tau - \beta) = -\mathcal{G}(m, j, \tau)$.

Integrovaním $\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}$ oboch strán rovnice dostávame

$$\overline{\mathcal{G}}(m,j,\omega_n) = \overline{\mathcal{G}}_0(m,j,\omega_n) + \sum_k \overline{\mathcal{G}}_0(m,k,\omega_n) V_k \overline{\mathcal{G}}(k,j,\omega_n).$$
(21)

Z integrálnej rovnice (21) vychádzame pri riešení úlohy o pohybe elektrónov v náhodnom prostredí. Fyzikálny zmysel tejto rovnice je nasledovný: $\overline{\mathcal{G}}(m, j, \omega_n)$ popisuje amplitúdu prechodu elektrónu z bodu j do bodu m v neusporiadanom systéme, kým $\overline{\mathcal{G}}_0(m, j, \omega_n)$ popisuje ten istý proces v dokonalom systéme. Rovnica (21) hovorí, že v nedokonalom systéme sa elektrón z j do m dostane alebo bez zrážok (prvý člen), alebo sa elektrón najprv cez neusporiadaný systém dostane do bodu k, tam sa s amplitúdou V_k rozptýli a pokračuje, už bez zrážok, do bodu m.

Stojí za zmienku, že systém rovníc (21) pre Andersonov model je uzavretý, t.j. na určenie jednočasticových Greenových funkcií $\overline{\mathcal{G}}(m, j, \omega_n)$ nepotrebujeme počítať žiadne zložitejšie objekty, napr. viacčasticové Greenove funkcie. Ľahko nahliadneme, že je tomu tak preto, lebo Andersonov model je kvadratický v kreačných a anihilačných operátoroch, t.j. ide o jednočasticovú úlohu.

Prímesné stavy

Teraz sa obmedzíme na prípad, kedy v mriežke existuje jediný bod s konečným prímesným potenciálom, povedzme bod 0. V takomto prípade rovnica (21) nadobudne tvar

$$\overline{\mathcal{G}}(m,j) = \overline{\mathcal{G}_0}(m,j) + \overline{\mathcal{G}_0}(m,0)V_0\overline{\mathcal{G}}(0,j),$$

kde pre jednoduchosť neuvádzame závislosť Greenových funkcií od frekvencie. Položme teraz m = 0. Dostaneme rovnicu $\overline{\mathcal{G}}(0,j) = \overline{\mathcal{G}_0}(0,j) + \overline{\mathcal{G}_0}(0,0)V_0\overline{\mathcal{G}}(0,j)$, ktorej riešením je $\overline{\mathcal{G}}(0,j) = \frac{\overline{\mathcal{G}_0}(0,j)}{1-V_0\overline{\mathcal{G}_0}(0,0)}$. Ak tento výraz dosadíme do všeobecnej rovnice pre $\overline{\mathcal{G}}(m,j)$, dostaneme napokon riešenie problému:

$$\mathcal{G}(m,j) = \mathcal{G}_0(m,j) + \frac{\mathcal{G}_0(m,0)V_0\mathcal{G}_0(0,j)}{1 - V_0\mathcal{G}_0(0,0)}$$

Spektrum v prítomnosti poruchy počítajme pomocou retardovanej Greenovej funkcie v bode 0:

$$\mathcal{G}_R(0,0,\omega) = \mathcal{G}(0,0,\omega+i\gamma) = \frac{\mathcal{G}_0(0,0,\omega+i\gamma)}{1 - V_0 \mathcal{G}_0(0,0,\omega+i\gamma)}$$

Pre lokálnu Greenovu funkciu neporušeného problému $\mathcal{G}_0(0, 0, \omega + i\gamma)$ dostaneme:

$$\mathcal{G}_0(0,0,\omega+i\gamma) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega+i\gamma-\varepsilon_{\mathbf{k}}} = M(\omega) - i\pi N(\omega),$$

kde sme prešli od súm k integrálom, zaviedli sme hustotu stavov $N(\omega)$ pre neporušený problém a tiež jej Hilbertovu transformáciu $M(\omega) = P \int \frac{d\varepsilon N(\varepsilon)}{\omega - \varepsilon}$. Hustota stavov v mieste prímesi je preto daná vzťahom

$$\mathcal{A}(0,0,\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\mathcal{G}_R(0,0,\omega) = \frac{N(\omega)}{[1 - V_0 M(\omega)]^2 + \pi^2 V_0^2 N^2(\omega)}.$$

²⁷Túto podmienku sme zatiaľ ukázali iba pre $0 < \tau \leq \beta$. Pre $-\beta < \tau \leq 0$ však platí $\mathcal{G}_0(m, j, \tau) = -\mathcal{G}_0(m, j, \tau + \beta) = -\mathcal{G}_0(m, j, \tau - \beta)$, kde druhá rovnosť vyplýva z periodicity funkcie $\mathcal{G}_0(m, j, \tau)$ s periódou 2 β . Teda podmienka $\mathcal{G}_0(m, j, \tau - \beta) = -\mathcal{G}_0(m, j, \tau)$ platí pre všetky τ .

Ak energia ω leží mimo neporušeného pásu energií, potom $N(\omega) \to 0$ a výraz pre hustotu stavov v mieste prímesi možno zjednodušiť nasledovne: $\mathcal{A}(0,0,\omega) = \frac{1}{V_0} \delta [1 - V_0 M(\omega)]$. Teda ak je pri energii ω^* mimo neporušeného pásu energií splnená rovnica $1 = V_0 M(\omega^*)$, potom pri tejto energii existuje (lokalizovaný) vlastný stav systému s prímesou, pozri obrázok 4.



Obr. 4: Schematický náčrt lokálnej hustoty stavov $\mathcal{A}(0, 0, \omega)$ v mieste prímesi pre jednoduchú modelovú hustotu stavov $N(\omega)$. Zľava doprava rastie veľkosť odpudivej interakcie $V_0 > 0$ v mieste prímesi. Pre menšie než kritické hodnoty V_0 (ľavé 2 obrázky) sa mení iba tvar kontinua oproti neporušenej hustote stavov $N(\omega)$ ďaleko od poruchy (zobrazenej tou istou krivkou vo všetkých grafoch). Pre väčšie než kritické hodnoty V_0 (pravé 2 obrázky) existuje ostrý antiviazaný stav. S rastom V_0 spektrálna váha antiviazaného stavu rastie, až postupne vyčerpá celé sumačné pravidlo.

Slabo neusporiadané systémy. Vlastná energia a Dysonova rovnica

Vráťme sa k skúmaniu systémov s mnohými prímesami. Budeme predpokladať, že potenciál V_k v bode k je náhodnou funkciou. Ďalej budeme predpokladať, že potenciál v rôznych bodoch mriežky je nekorelovaný. Pravdepodobnostné rozloženie pre potenciál nech je rovnaké pre všetky body mriežky a označme ho P(V). O strednej hodnote $\langle V^n \rangle = \int dV P(V) V^n$ budeme predpokladať, že $\langle V^n \rangle = 0$ pre všetky nepárne n.

Rovnicu (21) možno riešiť iteratívne: za Greenovu funkciu $\overline{\mathcal{G}}(k, j, \omega_n)$ na pravej strane dosadíme rovnicu (21) a tento postup iterujeme:

$$\begin{split} \overline{\mathcal{G}}(i,j,\omega_n) &= \overline{\mathcal{G}_0}(i,j,\omega_n) + \sum_k \overline{\mathcal{G}_0}(i,k,\omega_n) V_k \overline{\mathcal{G}}(k,j,\omega_n) \\ &= \overline{\mathcal{G}_0}(i,j,\omega_n) + \sum_k \overline{\mathcal{G}_0}(i,k,\omega_n) V_k \left[\overline{\mathcal{G}_0}(k,j,\omega_n) + \sum_l \overline{\mathcal{G}_0}(k,l,\omega_n) V_l \overline{\mathcal{G}}(l,j,\omega_n) \right] \\ &= \overline{\mathcal{G}_0}(i,j) + \sum_k \overline{\mathcal{G}_0}(i,k) V_k \overline{\mathcal{G}_0}(k,j) + \sum_{kl} \overline{\mathcal{G}_0}(i,k) V_k \overline{\mathcal{G}_0}(l,j) + \dots, \end{split}$$

kde v poslednom riadku sme prestali uvádzať závislosť od Matsubarovej frekvencie. Teda pohyb elektrónu z bodu j do bodu i v neusporiadanom médiu sa môže uskutočniť alebo bez rozptylov (prvý člen), alebo s jedným rozptylom (druhý člen), atď.



Obr. 5: Poruchový rozvoj pre jednočasticovú Greenovu funkciu v neusporiadanom systéme.

Greenova funkcia $\overline{\mathcal{G}}(i, j)$ popisuje pohyb cez danú vzorku s konkrétnou realizáciou náhodného potenciálu. Takúto Greenovu funkciu zrejme nebudeme schopní určiť inak, ako numericky. Ak sa však budeme zaujímať o Greenovu funkciu $\langle \overline{\mathcal{G}}(i, j) \rangle$ stredovanú cez množstvo rovnako pripravených vzoriek, t.j. cez vzorky s rovnakou rozdeľovacou funkciou P(V), ale s inými realizáciami náhodnosti, potom stredovaním iteračnej rovnice pre $\overline{\mathcal{G}}(i, j)$ dostaneme:

$$\begin{split} \langle \overline{\mathcal{G}}(i,j) \rangle &= \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,j) + \sum_{k} \langle V_{k} \rangle \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,k) \overline{\mathcal{G}_{0}}(k,j) + \sum_{kl} \langle V_{k} V_{l} \rangle \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,k) \overline{\mathcal{G}_{0}}(l,j) \\ &+ \sum_{klm} \langle V_{k} V_{l} V_{m} \rangle \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,k) \overline{\mathcal{G}_{0}}(k,l) \overline{\mathcal{G}_{0}}(l,m) \overline{\mathcal{G}_{0}}(m,j) \\ &+ \sum_{klmn} \langle V_{k} V_{l} V_{m} V_{n} \rangle \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,k) \overline{\mathcal{G}_{0}}(k,l) \overline{\mathcal{G}_{0}}(l,m) \overline{\mathcal{G}_{0}}(m,n) \overline{\mathcal{G}_{0}}(n,j) + \dots \end{split}$$

Keďže podľa predpokladu stredné hodnoty súčinov nepárneho počtu potenciálov V_k sú nulové a zároveň platí $\langle V_k V_l \rangle = \langle V^2 \rangle \delta_{kl}$ a $\langle V_k V_l V_m V_n \rangle = \langle V^4 \rangle \delta_{kl} \delta_{lm} \delta_{mn} + \langle V^2 \rangle^2 (\delta_{kl} \delta_{mn} + \delta_{km} \delta_{ln} + \delta_{kn} \delta_{lm})$, ustrednené príspevky od týchto procesov sú

$$\begin{split} \langle \overline{\mathcal{G}}(i,j) \rangle &= \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,j) + \langle V^{2} \rangle \sum_{kl} \delta_{kl} \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,k) \overline{\mathcal{G}_{0}}(k,l) \overline{\mathcal{G}_{0}}(l,j) \\ &+ \langle V^{4} \rangle \sum_{klmn} \delta_{kl} \delta_{lm} \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,k) \overline{\mathcal{G}_{0}}(k,l) \overline{\mathcal{G}_{0}}(l,m) \overline{\mathcal{G}_{0}}(m,n) \overline{\mathcal{G}_{0}}(n,j) \\ &+ \langle V^{2} \rangle^{2} \sum_{klmn} \delta_{kn} \delta_{lm} \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,k) \overline{\mathcal{G}_{0}}(k,l) \overline{\mathcal{G}_{0}}(l,m) \overline{\mathcal{G}_{0}}(m,n) \overline{\mathcal{G}_{0}}(n,j) \\ &+ \langle V^{2} \rangle^{2} \sum_{klmn} \delta_{km} \delta_{ln} \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,k) \overline{\mathcal{G}_{0}}(k,l) \overline{\mathcal{G}_{0}}(l,m) \overline{\mathcal{G}_{0}}(m,n) \overline{\mathcal{G}_{0}}(n,j) \\ &+ \langle V^{2} \rangle^{2} \sum_{klmn} \delta_{kl} \delta_{mn} \overline{\mathcal{G}_{0}}(i,k) \overline{\mathcal{G}_{0}}(k,l) \overline{\mathcal{G}_{0}}(l,m) \overline{\mathcal{G}_{0}}(m,n) \overline{\mathcal{G}_{0}}(n,j) + \dots \end{split}$$

Ak ustrednenú Greenovu funkciu $\langle \overline{\mathcal{G}}(i,j) \rangle$ označíme ako dvojitú čiaru z j do i, neporušenú Greenovu funkciu $\overline{\mathcal{G}}_0(i,j)$ označíme ako obyčajnú čiaru z j do i a ak po stredovaní totožné body rozptylu (t.j. body stotožnené Kroneckerovou deltou) spojíme čiarkovanou čiarou, predošlú rovnicu môžeme zapísať graficky tzv. Feynmanovým diagramom obr. 5.

Všetky Feynmanove diagramy možno klasifikovať na základe pojmu tzv. vlastnej energie²⁸ S(i, j) nasledovným preskupením jednotlivých členov rozvoja $\langle \overline{\mathcal{G}}(i, j) \rangle$:

$$\langle \overline{\mathcal{G}}(i,j) \rangle = \overline{\mathcal{G}}_{0}(i,j) + \sum_{kl} \overline{\mathcal{G}}_{0}(i,k) \mathcal{S}(k,l) \overline{\mathcal{G}}_{0}(l,j) + \sum_{klmn} \overline{\mathcal{G}}_{0}(i,k) \mathcal{S}(k,l) \overline{\mathcal{G}}_{0}(l,m) \mathcal{S}(m,n) \overline{\mathcal{G}}_{0}(n,j) + \dots,$$
(22)

pričom vlastná energia $\mathcal{S}(i, j)$ je definovaná tak, že jej Feynmanov diagram sa nerozpadne odstránením jednej elektrónovej čiary $\overline{\mathcal{G}_0}(i, j)$ na dva nespojené diagramy. Pomocou Feynmanových diagramov možno rozvoj pomocou vlastných energií zapísať ako na obr. 6.



Obr. 6: Reorganizácia poruchového rozvoja pomocou vlastnej energie.

Porovnaním rozvoja Greenovej funkcie $\langle \overline{\mathcal{G}}(i,j) \rangle$ pomocou vlastných energií (22) s pôvodným rozvojom dostaneme rozvoj pre vlastnú energiu do rádu V^4 :

$$\mathcal{S}(k,l) = \langle V^2 \rangle \delta_{kl} \overline{\mathcal{G}_0}(0) + \langle V^4 \rangle \delta_{kl} \overline{\mathcal{G}_0}(0)^3 + \langle V^2 \rangle^2 \delta_{kl} \overline{\mathcal{G}_0}(0) \sum_m \overline{\mathcal{G}_0}(k-m) \overline{\mathcal{G}_0}(m-l) + \langle V^2 \rangle^2 \overline{\mathcal{G}_0}(k-l)^2 \overline{\mathcal{G}_0}(l-k),$$

kde sme využili, že neporušené Greenove funkcie $\langle \overline{\mathcal{G}}_0(i,j) \rangle$ závisia iba od i-j, t.j. $\langle \overline{\mathcal{G}}_0(i,j) \rangle = \langle \overline{\mathcal{G}}_0(i-j) \rangle$. Všimnime si, že ustrednená vlastná energia $\mathcal{S}(k,l)$ závisí iba od rozdielu k-l. Očakávame, že $\mathcal{S}(k,l)$ bude translačne invariantná do všetkých rádov podľa V, a preto $\mathcal{S}(k,l) = \mathcal{S}(k-l)$.

²⁸Preklad z anglického termínu self-energy.

4 GREENOVE FUNKCIE

Keďže na pravej strane rozvoja (22) teda figurujú iba translačne invariantné objekty, aj ľavá strana bude translačne invariantná, čiže musí platiť $\langle \overline{\mathcal{G}}(i,j) \rangle = \langle \overline{\mathcal{G}}(i-j) \rangle$. Postupom inverzným k tomu, aký sme použili pri prepísaní rovnice (21) do tvaru mocninného rozvoja, môžeme rozvoj (22) prepísať do tvaru integrálnej *Dysonovej rovnice* pre $\langle \overline{\mathcal{G}}(i-j) \rangle$:

$$\langle \overline{\mathcal{G}}(i-j) \rangle = \overline{\mathcal{G}_0}(i-j) + \sum_{kl} \overline{\mathcal{G}_0}(i-k)\mathcal{S}(k-l)\langle \overline{\mathcal{G}}(l-j) \rangle.$$

Fourierovou transformáciou Greenovej funkcie a vlastnej energie z reálneho priestoru do priestoru hybností $\langle \overline{G}(\mathbf{k}) \rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \overline{\mathcal{G}}(\mathbf{R}) \rangle$ a $\Sigma(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \mathcal{S}(\mathbf{R})$ dostávame napokon namiesto integrálnej rovnice algebraickú Dysonovu rovnicu

$$\langle \overline{G}(\mathbf{k}) \rangle = \overline{G_0}(\mathbf{k}) + \overline{G_0}(\mathbf{k}) \Sigma(\mathbf{k}) \langle \overline{G}(\mathbf{k}) \rangle$$

Riešením tejto rovnice je Greenova funkcia $\langle \overline{G}(\mathbf{k}) \rangle = \frac{\overline{G_0}(\mathbf{k})}{1 - \overline{G_0}(\mathbf{k})\Sigma(\mathbf{k})}$. Ak využijeme explicitný tvar neporušenej Greenovej funkcie a zahrnieme závislosť od ω_n , dostaneme nasledovný výsledok pre ustrednenú Greenovu funkciu:

$$\left\langle \overline{G}(\mathbf{k},\omega_n) \right\rangle = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k},\omega_n)}.$$
(23)

Vlastná energia je pritom definovaná svojím poruchovým rozvojom.

Doteraz prezentovaný výklad bol presný. Aby sme však dospeli ku hmatateľným výsledkom, v ďalšom výklade musíme pristúpiť k aproximáciám. V prípade, kedy poruchový potenciál je slabý, sa môžeme obmedziť na príspevok najnižšieho rádu podľa V. V tejto tzv. Bornovej aproximácii tak dostaneme²⁹

$$\Sigma(\mathbf{k},\omega_n) = \langle V^2 \rangle \overline{\mathcal{G}_0}(0,\omega_n) = \frac{\langle V^2 \rangle}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = \langle V^2 \rangle \int \frac{d\varepsilon N(\varepsilon)}{i\omega_n - \varepsilon},$$

kde v druhej rovnosti sme použili Fourierovu transformáciu z reálneho priestoru do priestoru hybností a v tretej rovnosti sme sumu nahradili integrálom.

Ak budeme predpokladať, že energia ω_n je malá energia oproti vzdialenosti Fermiho energie od okrajov neporušeného pásu, potom pre reálnu časť vlastnej energie dostaneme

$$\Sigma'(\mathbf{k},\omega_n) = -\langle V^2 \rangle \int \frac{d\varepsilon N(\varepsilon)\varepsilon}{\omega_n^2 + \varepsilon^2} \approx -\langle V^2 \rangle \int \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} N(\varepsilon) = \text{const},$$

kde v poslednej rovnosti sme predpokladali, že hustota stavov $N(\varepsilon)$ je hladkou funkciou okolo Fermiho energie a preto integrál existuje a je konečný (v zmysle hlavnej hodnoty). V tomto priblížení je teda reálna časť vlastnej energie zhruba nezávislá od ω_n a možno ju kompenzovať zmenou chemického potenciálu. Odteraz preto budeme predpokladať, že $\Sigma'(\mathbf{k}, \omega_n) = 0$.

Na druhej strane, ak zavedieme označenie $\frac{1}{\tau} = 2\pi N(0) \langle V^2 \rangle$, ktorého fyzikálny zmysel ozrejmíme o chvíľu, pre imaginárnu časť vlastnej energie dostávame

$$\Sigma''(\mathbf{k},\omega_n) = -i\omega_n \langle V^2 \rangle \int \frac{d\varepsilon N(\varepsilon)}{\omega_n^2 + \varepsilon^2} \approx -i\frac{\omega_n}{|\omega_n|}\frac{1}{2\tau},$$

kde v približnej rovnosti sme využili, že integrál je pre malé ω_n dominovaný malými hodnotami ε , a preto funkciu $N(\varepsilon)$ možno nahradiť jej hodnotou na Fermiho ploche N(0).

Matsubarova Greenova funkcia elektrónu s hybnosťou
 ${\bf k}$ v slabo neusporiadanom systéme preto je

$$\langle \overline{G}(\mathbf{k},\omega_n) \rangle = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\frac{\omega_n}{|\omega_n|\frac{1}{2\tau}}}$$

Výraz pre retardovanú Greenovu funkciu odtiaľto dostaneme zámenou $i\omega_n \to \omega$ a uvážením vzťahu $\omega_n = |\omega_n|$ v hornej polrovine:

$$\langle G_R(\mathbf{k},\omega)\rangle = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau}}.$$

²⁹Je užitočné si uvedomiť, že hoci vlastnú energiu počítame iba do konečného (druhého) rádu poruchovej teórie, v skutočnosti sme (vďaka Dysonovej rovnici) uvážili nekonečne veľa diagramov prispievajúcich ku Greenovej funkcii.

Všimnime si, že v prítomnosti nečistôt sa retardovaná Greenova funkcia zmenila nahradením infinitezimálneho člena $i\gamma$ konečným členom $\frac{i}{2\tau}$. Teda analytické vlastnosti zostávajú nezmenené.

V reálnom čase opisuje retardovaná Greenova funkcia $\langle G_R(\mathbf{k},t) \rangle$ amplitúdu pre zotrvanie elektrónu v stave s hybnosťou \mathbf{k} , do ktorého bol vložený v čase t = 0. Integráciou v komplexnej rovine pre ňu dostávame výsledok

$$\langle G_R(\mathbf{k},t)\rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \langle G_R(\mathbf{k},\omega)\rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau}} = -ie^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}}t} e^{-\frac{t}{2\tau}}\theta(t),$$

ktorý ukazuje, že amplitúda pre zotrvanie elektrónu v stave s počiatočnou hybnosťou \mathbf{k} exponenciálne klesá s časovou konštantou 2τ . Konečná hodnota τ fyzikálne zodpovedá možnosti rozptylu elektrónu pripraveného v stave rovinnej vlny s hybnosťou \mathbf{k} do iných stavov. Táto možnosť je dôsledkom skutočnosti, že stav \mathbf{k} nie je vlastným stavom hamiltoniánu \mathcal{H} . Analogicky možno interpretovať aj výsledok pre spektrálnu funkciu elektrónu:

$$\langle A(\mathbf{k},\omega)\rangle = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\langle G_R(\mathbf{k},\omega)\rangle = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 + \Gamma^2}$$

podľa ktorého spektrálna funkcia nie je delta-funčná, ale má konečnú šírku $\Gamma = \frac{1}{2\tau}$. Rovinná vlna **k** má totiž nenulový prekryv s presnými vlastnými stavmi s energiami ležiacimi v okolí $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

Poznamenajme tiež, že napriek zmenenej spektrálnej funkcii elektrónu sa celková hustota stavov v prítomnosti slabého prímesného potenciálu nezmení:

$$\langle N(\omega) \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \langle A(\mathbf{k}, \omega) \rangle \approx N(0) \int d\varepsilon \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - \varepsilon)^2 + \Gamma^2} = N(0),$$

kde v druhej rovnosti sme sumu cez **k** nahradili štandardným spôsobom integrálom cez energie. Tento výsledok je zmysluplný: v limite slabej neusporiadanosti dochádza k veľkým relatívnym zmenám $N(\omega)$ iba pri krajoch pásu, pozri II.4.

Na záver poznamenajme, že tu prezentovaná poruchová teória musí v limite silnej neusporiadanosti zlyhať, pretože v tejto limite sú všetky stavy lokalizované (pozri II.4 a III.4), čiže kvalitatívne odlišné od Blochových vĺn. Andersonov prechod kov-izolant ďalej analyzujeme v kapitole 10.

Cvičenia

1. Ukážte, že pre spektrálnu funkciu A(x) Greenovej funkcie $G(t) = -i\langle [A(t), B]_{\epsilon} \rangle \theta(t)$ pre systém s (od času nezávislým) hamiltoniánom H platia sumačné pravidlá

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^n A(x) = \left\langle \left[\left[A, H \right]_n, B \right]_\epsilon \right\rangle, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx x^n A(x)}{1 + \epsilon e^{-x/T}} = \left\langle \left[A, H \right]_n, B \right\rangle,$$

kde sme zaviedli označenie pre vnorené komutátory $[A, H]_n = [[A, H]_{n-1}, H]$, pričom $[A, H]_0 = A$. Teda explicitne máme $[A, H]_1 = [A, H]$, $[A, H]_2 = [[A, H], H]$, atď.

2. Skonštruujte retardovanú, advansovanú a Matsubarovu Greenovu funkciu $G_R(\omega)$, $G_A(\omega)$ a $\overline{G}(\omega_n)$, ak spektrálna funkcia má tvar $A(\omega) = \frac{2}{\pi\Lambda^2}\sqrt{\Lambda^2 - \omega^2}$, kde $-\Lambda \leq \omega \leq \Lambda$. Pomôcka: využite, že pre Im $z \neq 0$ alebo $|z| > \Lambda$ platí

$$G(z) = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{d\omega A(\omega)}{z - \omega} = \frac{2z}{\Lambda^2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\Lambda^2}{z^2}} \right)$$

Nájdite asymptotiku funkcie G(z) pre $|z| \to \infty$. Ukážte, že funkcia $\overline{G}(\omega_n)$ je rýdzo imaginárna a nakreslite jej graf. Nakreslite grafy reálnej a imaginárnej zložky funkcie $G_R(\omega)$ a kvalitatívne overte platnosť Kramersových-Kronigových vzťahov.

3. Za lokálnu jednočasticovú Greenovu funkciu $\mathcal{G}_0(0, 0, \omega + i\gamma)$ vezmite funkciu $G_R(\omega)$ z predošlého cvičenia. (Akej neporušenej hustote stavov to zodpovedá?) Pre takýto model vypočítajte lokálnu hustotu stavov $\mathcal{A}(0, 0, \omega)$ v mieste jedinej prímesi s odpudivým potenciálom V_0 a overte výsledky prezentované na obrázku 4. Nájdite kritickú hodnotu V_0 potrebnú na vznik antiviazaného stavu.

4. Namiesto úlohy o prímesnom atóme skúmajte metódou pohybových rovníc úlohu o intersticiálnom atóme, t.j. o dokonalom kryštáli (povedzme jednoduchom kubickom) s jedným pridaným bodom (povedzme v strede jednej z elementárnych kociek). Za neporušený problém zoberte nezviazaný systém dokonalá mriežka + intersticiálny bod. Za poruchu vezmite tunelovanie medzi intersticiálnym bodom a bodmi mriežky (povedzme najbližšími ôsmimi).

5. Ukážte, že tunelová hustota stavov definovaná ako $\langle N(\omega) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle A(\mathbf{k}, \omega) \rangle$ je totožná s priemerovanou lokálnou hustotou stavov $\langle \mathcal{A}(i, i, \omega) \rangle$ (ktorá nezávisí od voľby mriežkového bodu *i*).

5 Poruchová teória a Feynmanove diagramy

V minulej kapitole sme Greenove funkcie hľadali metódou pohybových rovníc. Keďže sme riešili problém, ktorého hamiltonián bol kvadratický v kreačných a anihilačných operátoroch, dostali sme uzavretý systém rovníc pre jednočasticovú Greenovu funkciu.³⁰ Pri aplikácii metódy pohybových rovníc na mnohočasticové problémy s interakciami (t.j. s kvartickými členmi v kreačných a anihilačných operátoroch) však do pohybovej rovnice pre jednočasticovú Greenovu funkciu vstupujú tzv. dvojčasticové Greenove funkcie, t.j. Greenove funkcie s dvomi kreačnými a dvomi anihilačnými operátormi. Pohybové rovnice pre dvojčasticové Greenove funkcie zas obsahujú viacčasticové Greenove funkcie. Dostávame tak nekonečný systém rovníc, ktorý sa obvykle rieši tak, že sa aproximuje konečným systémom.³¹ V tejto prednáške budeme prezentovať alternatívnu, tzv. poruchovú metódu na hľadanie Greenových funkcií. V celej prednáške kladieme $\hbar = 1$. Literatúra: Rickayzen, AGD.

Operátory poľa

Skúmajme systém bezspinových častíc v škatuli s objemom $\mathcal{V} = L^3$ s periodickými okrajovými podmienkami. Rovinné vlny $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ s $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(k, l, m)$ potom vytvárajú úplný systém jednočasticových stavov. Im príslušné kreačné operátory označme $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$. Namiesto kreačných a anihilačných operátorov $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}}$ budeme pracovať s operátormi poľa:

$$\psi^{\dagger}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \varphi^{*}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) c^{\dagger}_{\mathbf{k}}, \qquad \psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) c_{\mathbf{k}}.$$

Fyzikálny zmysel kreačného operátora poľa $\psi^{\dagger}(\mathbf{x})$ je nasledovný. Keďže operátor $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ do systému vkladá časticu s vlnovou funkciou $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, potom operátor $\psi^{\dagger}(\mathbf{x})$ vkladá časticu v lineárnej superpozícii stavov $\sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x})$, kde sme využili úplnosť systému rovinných vĺn. Teda $\psi^{\dagger}(\mathbf{x})$ vkladá časticu do bodu \mathbf{x} . Podobne $\psi(\mathbf{x})$ vyberá časticu z bodu \mathbf{x} . Využijúc úplnosť systému rovinných vĺn ľahko nahliadneme, že pre fermióny ($\epsilon = +1$) aj pre bozóny ($\epsilon = -1$) platia nasledovné kánonické komutačné vzťahy pre operátory poľa:

$$[\psi(\mathbf{x}),\psi(\mathbf{y})]_{\epsilon} = 0, \qquad \left[\psi^{\dagger}(\mathbf{x}),\psi^{\dagger}(\mathbf{y})\right]_{\epsilon} = 0, \qquad \left[\psi(\mathbf{x}),\psi^{\dagger}(\mathbf{y})\right]_{\epsilon} = \delta(\mathbf{y}-\mathbf{x}).$$

Nech grandkánonický hamiltonián

$$\mathcal{H} = \sum_{i} h_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}$$

skúmaného systému častíc i = 1, ..., N pozostáva z jednočasticovej energie s operátorom $h(\mathbf{x})$ a z dvojčasticových interakcií s potenciálom $V(\mathbf{x})$. Napríklad v modeli želé $h(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2m}\nabla^2 - \mu$ a $V(\mathbf{x})$ je coulombovská potenciálna energia. Potom v druhom kvantovaní môžeme písať (pozri napríklad III.6):

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left[\int d^3 \mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \right] c_{\mathbf{k}'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{p},\mathbf{p}'} \left[\int d^3 \mathbf{x} \int d^3 \mathbf{y} \varphi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{y}) V(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{y}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \right] c_{\mathbf{k}'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{k}}. \end{aligned}$$

Pomocou operátorov poľa možno hamiltonián \mathcal{H} zapísať v elegantnom tvare:

$$\mathcal{H} = \int d^3 \mathbf{x} \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{x} \int d^3 \mathbf{y} \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi^{\dagger}(\mathbf{y}) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{x}).$$
(24)

³⁰Keďže redukovaný BCS hamiltonián (??) je tiež kvadratický, metódu pohybových rovníc opäť možno použiť. Je však potrebné zaviesť aj tzv. anomálnu Greenovu funkciu, pozri napr. kapitolu 7.

³¹Výnimkou je napríklad tzv. Tomonagov-Luttingerov model jednorozmerného kovu, ktorý možno metódou pohybových rovníc riešiť presne. Pozri H.U.Everts and H.Schulz, Solid State Communications **15**, 1413 (1974).
Hamiltonián (24) pripomína výraz pre strednú hodnotu energie v stave s vlnovou funkciou $\psi(\mathbf{x})$. Podotýkame však, že $\psi(\mathbf{x})$ nie je vlnová funkcia, ale operátor poľa.³²

Neinteragujúci systém: n-časticová Greenova funkcia a Wickova veta

Skúmajme najprv neinteragujúci systém bezspinových fermiónov s hamiltoniánom

$$\mathcal{H}_0 = \int d^3 \mathbf{x} \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}).$$

Jednočasticovú Greenovu funkciu pre neinteragujúci systém definujeme vzťahom

$$\mathcal{G}_0(1,1') = -\langle T\psi(1)\psi^{\dagger}(1')\rangle,$$

kde sme priestoročasové súradnice označili skrátene symbolom $l = (\mathbf{x}_l, \tau_l)$, t.j. $\psi(l) = e^{\mathcal{H}_0 \tau_l} \psi(\mathbf{r}_l) e^{-\mathcal{H}_0 \tau_l}$. Pre časový vývoj operátora poľa dostávame, podobne ako v predošlej kapitole

$$\frac{\partial \psi(1)}{\partial \tau_1} = \frac{\partial}{\partial \tau_1} \left[e^{\mathcal{H}_0 \tau_1} \psi(\mathbf{r}_1) e^{-\mathcal{H}_0 \tau_1} \right] = e^{\mathcal{H}_0 \tau_1} \left[\mathcal{H}_0, \psi(\mathbf{r}_1) \right] e^{-\mathcal{H}_0 \tau_1} = -e^{\mathcal{H}_0 \tau_1} h(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_1) e^{-\mathcal{H}_0 \tau_1} = -h(\mathbf{r}_1) \psi(1).$$

Preto jednočasticová Greenova funkcia $\mathcal{G}_0(1, 1')$ spĺňa nasledovnú pohybovú rovnicu,

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h(\mathbf{r}_1)\right] \mathcal{G}_0(1, 1') = -\delta(1, 1'),$$

kde sme zaviedli označenie $\delta(1,2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta(\tau_1 - \tau_2).$

Definujme ďalej *n*-časticovú Greenovu funkciu vzťahom

$$\mathcal{G}_n(1,\ldots,n;1',\ldots,n') = (-1)^n \langle T\psi(1)\ldots\psi(n)\psi^{\dagger}(n')\ldots\psi^{\dagger}(1')\rangle.$$

Operátor časového usporiadania ${\cal T}$ pritom pôsobí nasledovne:

(i) permutuje operátory $\psi(1), \ldots, \psi(n), \psi^{\dagger}(1'), \ldots, \psi^{\dagger}(n'),$

(ii) každej permutácii priradí znamienko ± 1 podľa toho, koľko párových výmien bolo potrebných na jej dosiahnutie,

(iii) každej permutácii priradí súčin theta-funkcií, ktoré zabezpečujú, aby operátory vo väčšom čase stáli naľavo od operátorov v menšom čase,

(iv) príspevky všetkých permutácií sa sčítajú.

S využitím cyklickej zámeny premenných pod stopou opäť môžeme ukázať, že pre $0 \leq \tau_l \leq \beta$ platia okrajové podmienky $\mathcal{G}_n(\tau_1, \ldots, \tau_i = \beta, \ldots, \tau_{2n}) = -\mathcal{G}_n(\tau_1, \ldots, \tau_i = 0, \ldots, \tau_{2n}).$ Počítajme pôsobenie operátora $\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h(\mathbf{r}_1)$ na *n*-časticovú Greenovu funkciu neinteragujúceho sys-

Počítajme pôsobenie operátora $\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h(\mathbf{r}_1)$ na *n*-časticovú Greenovu funkciu neinteragujúceho systému $\mathcal{G}_{0n}(1,\ldots,n;1',\ldots,n')$. Keďže platí $[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h(\mathbf{r}_1)]\psi(1) = 0$, k $[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h(\mathbf{r}_1)]\mathcal{G}_{0n}(1,\ldots,n;1',\ldots,n')$ prispievajú iba derivácie theta funkcií. Permutácie prispievajúce ku Greenovej funkcii \mathcal{G}_{0n} možno zoskupiť do nasledovných dvojíc:

$$+\langle \dots \psi(1)\psi^{\dagger}(j')\dots\rangle \dots \theta(\tau_{1}-\tau_{j'})\dots-\langle \dots \psi^{\dagger}(j')\psi(1)\dots\rangle \dots \theta(\tau_{j'}-\tau_{1})\dots$$

kde bodky označujú rovnaké faktory v oboch členoch.³³ Derivovaním theta-funkcií v takejto dvojici podľa τ_1 a využitím kánonických komutačných vzťahov ľahko vidno, že táto dvojica sa redukuje na jeden člen, v ktorom dvojicu operátorov $\psi(1)$, $\psi^{\dagger}(j')$ a theta funkciu premennej $\tau_{j'} - \tau_1$ treba nahradiť 4-rozmernou delta funkciou $\delta(1, j')$. Takto dostávame vzťah³⁴

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h(\mathbf{r}_1)\right] \mathcal{G}_{0n}(1,\dots,n;1',\dots,n') = \sum_{j'=1'}^{n'} (-1)^{j'} \delta(1,j') \mathcal{G}_{0n-1}(2,\dots,n;1',\dots,(j-1)',(j+1)',\dots,n')$$

³²Názov druhé kvantovanie bol zrejme inšpirovaný práve výrazom pre Hamiltonov operátor (24), kde ako keby sme nahradili vlnové funkcie operátormi. Treba však jasne povedať, že o žiadne dodatočné kvantovanie tu samozrejme nejde. ³³Ak $\psi(1)$ vytvára dvojicu namiesto $\psi^{\dagger}(j')$ s nejakým anihilačným operátorom, potom príspevok takejto dvojice k $[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h(\mathbf{r}_1)]\mathcal{G}_{0n}(1, \ldots, n; 1', \ldots, n')$ je nulový, a preto takéto dvojice nemusíme uvažovať.

 $[\]left[\frac{\sigma}{\partial \tau_1} + h(\mathbf{r}_1)\right]\mathcal{G}_{0n}(1,\ldots,n;\Gamma,\ldots,n')$ je nulovy, a preto taketo uvojice nemaonie drazovati ³⁴Pre j' = 1' je znamienko –1 dôsledkom definícií $\mathcal{G}_{0n} \propto (-1)^n$ a $\mathcal{G}_{0n-1} \propto (-1)^{n-1}$. Pre j' > 1' treba naviac zohľadniť, že počet komutácií potrebných na presun operátora $\psi(1)$ tesne pred $\psi^{\dagger}(j')$ môže byť nepárny.

Diferenciálnu rovnicu pre \mathcal{G}_{0n} možno písať ako nasledovnú integrálnu rovnicu, ako sa ľahko presvedčíme aplikovaním operátora $\left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h(\mathbf{r}_1)\right]$:

$$\mathcal{G}_{0n}(1,\ldots,n;1',\ldots,n') = \sum_{j'=1'}^{n'} (-1)^{j'+1} \mathcal{G}_0(1,j') \mathcal{G}_{0n-1}(2,\ldots,n;1',\ldots,(j-1)',(j+1)',\ldots,n').$$

Teda *n*-časticovú Greenovu funkciu vieme vyjadriť pomocou jednočasticovej Greenovej funkcie a n-1-časticovej Greenovej funkcie. V špeciálnom prípade n = 2 dostávame

$$\mathcal{G}_{02}(1,2;1',2') = \mathcal{G}_{0}(1,1')\mathcal{G}_{0}(2,2') - \mathcal{G}_{0}(1,2')\mathcal{G}_{0}(2,1') = \begin{vmatrix} \mathcal{G}_{0}(1,1') & \mathcal{G}_{0}(1,2') \\ \mathcal{G}_{0}(2,1') & \mathcal{G}_{0}(2,2') \end{vmatrix}$$

Pren=3ďalej máme

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{03}(1,2,3;1',2',3') &= \mathcal{G}_{0}(1,1')\mathcal{G}_{02}(2,3;2',3') - \mathcal{G}_{0}(1,2')\mathcal{G}_{02}(2,3;1',3') + \mathcal{G}_{0}(1,3')\mathcal{G}_{02}(2,3;1',2') \\ &= \begin{vmatrix} \mathcal{G}_{0}(1,1') & \mathcal{G}_{0}(1,2') & \mathcal{G}_{0}(1,3') \\ \mathcal{G}_{0}(2,1') & \mathcal{G}_{0}(2,2') & \mathcal{G}_{0}(2,3') \\ \mathcal{G}_{0}(3,1') & \mathcal{G}_{0}(3,2') & \mathcal{G}_{0}(3,3') \end{vmatrix}, \end{aligned}$$

kde v poslednej rovnici sme si všimli, že ide o rozvoj determinantu podľa prvého riadku. Pre všeobecné n teda dostávame tzv. *Wickovu vetu* (zdôrazňujeme, že táto veta platí iba pre Greenove funkcie neinteragujúceho systému):

$$\mathcal{G}_{0n}(1,\ldots,n;1',\ldots,n') = \begin{vmatrix} \mathcal{G}_0(1,1') & \ldots & \mathcal{G}_0(1,n') \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{G}_0(n,1') & \ldots & \mathcal{G}_0(n,n') \end{vmatrix} = \sum_{\mathcal{P}} (-1)^P \mathcal{G}_0(1,P_1') \ldots \mathcal{G}_0(n,P_n'),$$

kde v druhej rovnici sme determinant zapísali ako sumu cez všetky permutácie $\mathcal{P} = (P'_1, \ldots, P'_n)$ indexov 1', ..., n' a P je parita permutácie \mathcal{P} .

Interagujúci systém: interakčná reprezentácia a evolučný operátor

Odteraz budeme študovať interagujúci problém s hamiltoniánom (24), ktorý budeme interpretovať ako súčet kinetickej energie \mathcal{H}_0 a interakčnej energie $V, \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$.

V Schrödingerovom obraze je časový vývoj stavov v imaginárnom čase popísaný operátorom $e^{-\mathcal{H}\tau}$, t.j. $|\psi_S(\tau)\rangle = e^{-\mathcal{H}\tau}|\psi_S(0)\rangle$ a operátory A_S majú iba explicitnú závislosť od času.

V Heisenbergovom obraze sa naopak stavy v čase nemenia, $|\psi_H(\tau)\rangle = |\psi_S(0)\rangle = e^{\mathcal{H}\tau}|\psi_S(\tau)\rangle$, kým operátory závisia od času podľa vzťahu $A_H(\tau) = e^{\mathcal{H}\tau}A_S e^{-\mathcal{H}\tau}$.

V interakčnom obraze (označujeme ho vlnovkou) nie je časová závislosť stavov kompenzovaná úplne: $\widetilde{|\psi(\tau)\rangle} = e^{\mathcal{H}_0 \tau} |\psi_S(\tau)\rangle$. Preto časový vývoj operátorov je daný vzťahom $\widetilde{A(\tau)} = e^{\mathcal{H}_0 \tau} A_S e^{-\mathcal{H}_0 \tau}$. Explicitná závislosť stavov od času v interakčnom obraze $\widetilde{|\psi(\tau)\rangle} = U(\tau) |\psi_S(0)\rangle$ je popísaná tzv. evolučným operátorom

$$U(\tau) = e^{\mathcal{H}_0 \tau} e^{-\mathcal{H}\tau}.$$
(25)

Podobne, ak porovnáme časový vývoj operátorov v interakčnom a Heisenbergovom obraze, dostaneme prevodový vzťah medzi obrazmi $\widetilde{A(\tau)} = U(\tau)A_HU(\tau)^{-1}$, v ktorom opäť figuruje evolučný operátor.

Derivovaním definičného výrazu (25) dostávame pohybovú rovnicu pre $U(\tau)$:

$$\frac{\partial U(\tau)}{\partial \tau} = \mathcal{H}_0 U(\tau) - e^{\mathcal{H}_0 \tau} \mathcal{H} e^{-\mathcal{H}_0 \tau} U(\tau) = -\widetilde{V(\tau)} U(\tau), \tag{26}$$

kde sme využili, že $\mathcal{H}_0(\tau) = \mathcal{H}_0$. Ak ďalej uvážime, že U(0) = 1, diferenciálnu rovnicu pre $U(\tau)$ môžeme prepísať ako integrálnu rovnicu, ktorú môžeme riešiť iteratívne:

$$U(\tau) = 1 - \int_0^{\tau} d\tau_1 \widetilde{V(\tau_1)} U(\tau_1) = 1 - \int_0^{\tau} d\tau_1 \widetilde{V(\tau_1)} + \int_0^{\tau} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \widetilde{V(\tau_1)} \widetilde{V(\tau_2)} + \dots$$

Všimnime si, že l-tý príspevok obsahuje integrál cez oblasť $\tau \ge \tau_1 \ge \tau_2 \ge \ldots \ge \tau_l \ge 0$. Integrál cez túto zložitú oblasť nahradíme integrálom cez hyperkocku $0 \le \tau_i \le \tau$. Pretože l časov možno permutovať l! spôsobmi, integračnú oblasť sme zväčšili l! krát. Aby sme zaručili, že operátory vo väčších časoch figurujú naľavo od operátorov v menších časoch, použijeme operátor časového usporiadania T:

$$U(\tau) = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \int_0^{\tau} d\tau_1 \dots \int_0^{\tau} d\tau_l T\left[\widetilde{V(\tau_1)} \dots \widetilde{V(\tau_l)}\right].$$

Tento výsledok pre evolučný operátor možno formálne zapísať nasledovne:

$$U(\tau) = T \exp\left[-\int_0^{\tau} d\tau_1 \widetilde{V(\tau_1)}\right].$$
(27)

Ak napíšeme integrál v exponente ako Riemannovu sumu s krokom
 δ a uvážime pôsobenie operátora T,dostaneme alternatívne vyjad
renie

$$U(\tau) = \lim_{\delta \to 0} e^{-\delta \widetilde{V(\tau)}} e^{-\delta \widetilde{V(\tau-\delta)}} \dots e^{-\delta \widetilde{V(2\delta)}} e^{-\delta \widetilde{V(\delta)}},$$
(28)

ktoré možno interpretovať aj ako výsledok "numerického" riešenia diferenciálnej rovnice (26) Newtono-vou metódou. Operátor inverzný k evolučnému má tvar

$$U(\tau)^{-1} = \lim_{\delta \to 0} e^{\delta \widetilde{V(\delta)}} e^{\delta \widetilde{V(2\delta)}} \dots e^{\delta \widetilde{V(\tau-\delta)}} e^{\delta \widetilde{V(\tau)}}$$

Všimnime si, že v inverznom evolučnom operátore sú operátory v najmenšom čase celkom vľavo! Pre $\tau_1 \ge \tau_2$ preto platí

$$U(\tau_1)U(\tau_2)^{-1} = \lim_{\delta \to 0} e^{-\delta \widetilde{V(\tau_1)}} \dots e^{-\delta \widetilde{V(\tau_2)}} = T \exp\left[-\int_{\tau_2}^{\tau_1} d\tau \widetilde{V(\tau)}\right].$$

Interagujúci systém: jednočasticová Greenova funkcia

Teraz sme pripravení počítať Greenovu funkciu interagujúceho systému. Máme počítať nasledovný objekt (do ktorého vstupujú operátory v Heisenbergovom obraze a stredovanie podľa komplikovaného hamiltoniánu \mathcal{H}):

$$\mathcal{G}(1,2) = -\frac{\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\psi_{H}(1)\psi_{H}^{\dagger}(2)\right]}{\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\right]}\theta(\tau_{1}-\tau_{2}) + \frac{\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\psi_{H}^{\dagger}(2)\psi_{H}(1)\right]}{\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\right]}\theta(\tau_{2}-\tau_{1}).$$

Ak označíme stredovanie podľa matice hustoty neinteragujúceho systému ako $\langle X \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}_0} X \right]$, potom menovateľ môžeme zjednodušiť nasledovne:

$$\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\right] = \operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}_0}U(\beta)\right] = Z_0\langle U(\beta)\rangle_0,$$

kde $U(\beta) = T \exp\left[-\int_0^\beta d\tau \widetilde{V(\tau)}\right]$. Ak v čitateli prvého člena v $\mathcal{G}(1,2)$ využijeme vzťah medzi Heisenbergovým a interakčným obrazom $A_H(\tau) = U^{-1}(\tau)\widetilde{A(\tau)}U(\tau)$, potom dostaneme

$$\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\psi_{H}(1)\psi_{H}^{\dagger}(2)\right] = \operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}_{0}}U(\beta)U(\tau_{1})^{-1}\widetilde{\psi(1)}U(\tau_{1})U(\tau_{2})^{-1}\widetilde{\psi^{\dagger}(2)}U(\tau_{2})\right].$$

Ak ďalej uvážime, že $\tau_1 \geq \tau_2$, a použijeme vzťah pre $U(\tau_1)U(\tau_2)^{-1}$, tento výraz môžeme upraviť na tvar

$$Z_0 \left\langle T \exp\left[-\int_{\tau_1}^{\beta} d\tau \widetilde{V(\tau)}\right] \widetilde{\psi(1)} T \exp\left[-\int_{\tau_2}^{\tau_1} d\tau \widetilde{V(\tau)}\right] \widetilde{\psi^{\dagger}(2)} T \exp\left[-\int_{0}^{\tau_2} d\tau \widetilde{V(\tau)}\right] \right\rangle_0$$

Ak teraz necháme operátor časového usporiadani
aTpôsobiť na celý stredovaný operátor, môžeme písať

$$\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\psi_{H}(1)\psi_{H}^{\dagger}(2)\right] = Z_{0}\left\langle T\exp\left[-\int_{0}^{\beta}d\tau\widetilde{V(\tau)}\right]\widetilde{\psi(1)}\widetilde{\psi^{\dagger}(2)}\right\rangle_{0}.$$

Podobne pre čitateľ druhého člena s $\tau_2 \geq \tau_1$ dostaneme

$$\operatorname{Tr}\left[e^{-\beta\mathcal{H}}\psi_{H}^{\dagger}(2)\psi_{H}(1)\right] = Z_{0}\left\langle T\exp\left[-\int_{0}^{\beta}d\tau\widetilde{V(\tau)}\right]\widetilde{\psi^{\dagger}(2)}\widetilde{\psi(1)}\right\rangle_{0}$$

Sumarizáciou týchto výsledkov dostávame pre jednočasticovú Greenovu funkciu vzťah

$$\mathcal{G}(1,2) = -\frac{\left\langle TU(\beta)\widetilde{\psi(1)}\widetilde{\psi^{\dagger}(2)} \right\rangle_{0}}{\left\langle U(\beta) \right\rangle_{0}}.$$
(29)

Všimnime si, že výraz (29) vyjadruje Greenovu funkciu interagujúceho systému pomocou stredovania podľa neporušeného hamiltoniánu \mathcal{H}_0 a pomocou operátorov poľa v interakčnom obraze, t.j. s časovým vývojom podľa \mathcal{H}_0 . Keďže hamiltonián \mathcal{H}_0 je jednoduchší ako \mathcal{H} , ide o výrazné zjednodušenie problému.

Poruchová teória

Rovnica (29) je východiskovým bodom poruchovej teórie. Greenovu funkciu môžeme počítať pomocou rozvoja do mocnín nasledovnej veličiny:³⁵

$$\int_0^\beta d\tau \widetilde{V(\tau)} = \frac{1}{2} \int d1' \int d1'' \widetilde{\psi^{\dagger}(1')} \widetilde{\psi^{\dagger}(1'')} V(1', 1'') \widetilde{\psi(1'')} \widetilde{\psi(1'')},$$

kde sme zaviedli označenie $V(i, j) = V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\delta_\beta(\tau_i - \tau_j)$ a integrovanie sme schematicky označili nasledovne: $\int dl = \int_0^\beta d\tau_l \int d^3 \mathbf{r}_l$. Pomocou pojmu mnohočasticovej Greenovej funkcie možno čitateľa aj menovateľa Greenovej funkcie (29) vyjadriť nasledovne:³⁶

$$\begin{split} \left\langle TU(\beta)\widetilde{\psi(1)}\widetilde{\psi^{\dagger}(2)}\right\rangle_{0} &= -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n}}{2^{n}n!} \int dn' \int dn'' \dots \int d1' \int d1'' V(n',n'') \dots V(1',1'') \\ &\times \quad \mathcal{G}_{0,2n+1}(1,1',1'',\dots n',n'';2,1'_{+},1''_{+},\dots n'_{+},n''_{+}), \\ \left\langle U(\beta) \right\rangle_{0} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n}}{2^{n}n!} \int dn' \int dn'' \dots \int d1' \int d1'' V(n',n'') \dots V(1',1'') \\ &\times \quad \mathcal{G}_{0,2n}(1',1'',\dots n',n'';1'_{+},1''_{+},\dots n'_{+},n''_{+}). \end{split}$$

Výrazy typu n_+ znamenajú, že priestoročasový bod n_+ má infinitezimálne väčší čas než bod n. Časové usporiadanie potom zaručí, že kreačné operátory v interakčnej energii stoja naľavo od anihilačných, ako aj má byť.

Ak teraz vyjadríme mnohočasticovú Greenovu funkciu pomocou Wickovej vety, môžeme kresliť diagramy zodpovedajúce jednotlivým členom poruchového rozvoja, podobne ako v prípade rozptylu na nečistotách.

Diagramy pre čitateľ obsahujú fermiónovú čiaru z 2 do 1, tzv. chrbticu, s ktorou sú interakciami (čiarkované čiary) spojené iné fermiónové čiary. Okrem tejto tzv. spojenej časti môžu diagramy obsahovať aj celkom oddelené časti. Explicitný príklad nespojeného diagramu pre n = 3 je na obr. 7.

Veta o spojených diagramoch

Odteraz nebudeme písať vlnovky nad operátormi v interakčnej reprezentácii, ani index 0 pri termálnych stredných hodnotách. Všetky časové vývoje aj stredovania budú chápané vzhľadom na \mathcal{H}_0 .

³⁵Tu ide o matematickú subtílnosť. Žiadame, aby funkcia $\delta_{\beta}(\tau)$ spĺňala pre všetky bozónové funkcie $f(\tau)$ vzťah $f(\tau) = \int_{0}^{\beta} d\tau' \delta_{\beta}(\tau - \tau') f(\tau')$, a preto $\delta_{\beta}(\tau)$ musí byť sumou Diracových delta-funkcií: $\delta_{\beta}(\tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau - n\beta)$. Naozaj, aby napríklad platilo $f(\beta) = \int_{0}^{\beta} d\tau' \delta_{\beta}(\beta - \tau') f(\tau')$, nestačí za $\delta_{\beta}(\tau)$ zobrať obyčajnú Diracovu delta-funkciu. Ak si totiž obyčajnú delta funkciu $\delta(\tau)$ predstavíme ako limitný člen postupnosti lorentziánov, potom zrejme platí $\int_{0}^{\beta} d\tau' \delta_{\beta}(\beta - \tau') f(\tau') = \frac{1}{2} f(\beta)$, lebo sme integrovali len cez polovicu delta funkcie. Ľahko sa však presvedčíme, že $\int_{0}^{\beta} d\tau' \delta_{\beta}(\beta - \tau') f(\tau') = f(\beta)$, ako aj má byť.

 $^{^{36}}$ Operátor interakčnej energie V má byť vyjadrený pomocou tzv. normálne usporiadaných výrazov, t.j. výrazov, v ktorých kreačné operátory stoja naľavo od anihilačných operátorov. Fyzikálnym dôvodom je vylúčenie interakcie elektrónu so sebou samým, pozri napr. III.7. Tu prezentované vyjadrenia pomocou mnohočasticových Greenových funkcií nereprodukujú normálne usporiadané výrazy, t.j. obsahujú aj self-interakcie elektrónov. Tieto self-interakcie však iba posúvajú energiu systému o konštantu a neovplyvňujú pohyb elektrónov, teda neovplyvnia výpočet Greenovej funkcie.



Obr. 7: Nespojený diagram pre jednočasticovú Greenovu funkciu rádu n = 3.

Najprv si uvedomme, že každý topologicky neekvivalentný diagram n-tého rádu prispeje ku Greenovej funkcii n! krát, pretože daný súbor n interakčných čiar možno očíslovať n! spôsobmi.

V čitateli Greenovej funkcie (29) teraz explicitne odlíšime príspevky od spojených diagramov, ktoré označíme indexom c, od nespojených diagramov. V príspevku n-tého rádu nech r faktorov prispieva k spojenému diagramu a zvyšných n - r faktorov nech prispieva k nespojeným diagramom. Ak teraz pripustíme iba permutácie r indexov vnútri spojených diagramov a n - r indexov vnútri nespojených diagramov, musíme písať

$$\left\langle TU(\beta)\psi(1)\psi^{\dagger}(2)\right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \sum_{r=0}^n \frac{n!}{r!(n-r)!} \int d\tau_{1'} \dots d\tau_{r'} \left\langle T\psi(1)\psi^{\dagger}(2)V(\tau_{1'})\dots V(\tau_{r'})\right\rangle_c \\ \times \int d\tau_{(r+1)'} \dots d\tau_{n'} \left\langle TV(\tau_{(r+1)'})\dots V(\tau_{n'})\right\rangle,$$

kde sme zohľadnili počet výberov r prvkov zn-člennej množiny. Ak príspevky spojených a nespojených diagramov označíme ako

$$C_r = \int d\tau_{1'} \dots d\tau_{r'} \left\langle T\psi(1)\psi^{\dagger}(2)V(\tau_{1'})\dots V(\tau_{r'})\right\rangle_c,$$

$$D_{n-r} = \int d\tau_{(r+1)'} \dots d\tau_{n'} \left\langle TV(\tau_{(r+1)'})\dots V(\tau_{n'})\right\rangle,$$

potom zmenou poradia sumácií dostaneme

$$\left\langle TU(\beta)\psi(1)\psi^{\dagger}(2)\right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{r=0}^{n}\frac{(-1)^{n}}{n!}\frac{n!}{r!(n-r)!}C_{r}D_{n-r} = \sum_{r=0}^{\infty}\sum_{n=r}^{\infty}\frac{(-1)^{n}}{r!(n-r)!}C_{r}D_{n-r}.$$

Ak v poslednom kroku zavedieme sumačnú premennú k=n-r,dostaneme napokon

$$\left\langle TU(\beta)\psi(1)\psi^{\dagger}(2)\right\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r}{r!} C_r \times \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} D_k.$$

Pre menovateľ Greenovej funkcie (29) podobným spôsobom dostaneme $\langle U(\beta) \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} D_k$. Preto Greenova funkcia (29) je daná iba spojenými diagramami:

$$\mathcal{G}(1,2) = -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left\langle T\psi(1)\psi^{\dagger}(2)V(\tau_{1'})\dots V(\tau_{n'}) \right\rangle_c.$$

Tento formálny výsledok možno zapísať v nasledovnej explicitnej forme

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(1,2) &= \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int dn' \int dn'' \dots \int d1' \int d1'' V(n',n'') \dots V(1',1'') \\ &\times \mathcal{G}_{0,2n+1}(1,1',1'',\dots n',n'';2,1'_+,1''_+,\dots n'_+,n''_+)_c, \end{aligned}$$

kde index c pri mnohočasticovej Greenovej funkcii $\mathcal{G}_{0,2n+1}$ označuje, že pri aplikovaní Wickovej vety sa máme obmedziť iba na topologicky neekvivalentné a neočíslované spojené diagramy. Zrušenie očíslovania vnútorných vrcholov sme kompenzovali zavedením multiplikatívneho faktora $2^n n!$. Dodatočný faktor 2^n možno zdôvodniť tým, že na koncoch interakčnej čiary s indexom l by mali byť body l', l'' alebo l'', l', teda pre n interakčných čiar existuje 2^n možností indexovania ich koncov.

Podľa Wickovej vety ku mnohočasticovej Greenovej funkcii $\mathcal{G}_{0,2n+1}$ prispievajú súčiny jednočasticových Greenových funkcií so znamienkami ±1. Teraz sa venujme otázke o znamienku toho-ktorého príspevku (diagramu). Skúmajme graf zodpovedajúci *n*-tému rádu poruchovej teórie. Takýto graf obsahuje 2*n* vnútorných bodov, ktoré ležia alebo na chrbtici z 2 do 1, alebo na uzavretej slučke. Nech na chrbtici sa nachádza *r* vnútorných bodov a nech na každej z *l* slučiek je s_i bodov, má teda byť $2n = r + \sum_{i=1}^{l} s_i$. Dá sa ukázať,³⁷ že chrbtica prispieva znamienkom $(-1)^r$, kým každá zo slučiek dáva znamienko $(-1)^{s_i+1}$. Preto celkové znamienko diagramu je $(-1)^{r+l+\sum_i s_i} = (-1)^{2n+l} = (-1)^l$. Teda znamienko diagramu zreprodukujeme, ak každej uzavretej slučke priradíme faktor (-1).

Odvodili sme tak nasledovné Feynmanove pravidlá pre príspevok *n*-tého rádu ku $\mathcal{G}(1,2)$:

- A. Nakresli všetky topologicky rôzne spojené diagramy také, že:
- 1. diagram obsahuje externé body 1 a 2
- 2. diagram obsahuje 2n vnútorných vrcholov
- 3. páry vnútorných vrcholov nech sú spojené čiarkovanými (interakčnými) čiarami
- 4. nakresli orientované plné čiary tak, že
- a) jedna čiara vychádza z bodu 2
- b) jedna čiara vchádza do 1
- c) pre každý vnútorný vrchol platí, že doňho jedna čiara vchádza a jedna z neho vychádza

B. Ku každému diagramu priraď nasledovný príspevok (číslo):

- 1. interakčnej čiare medzi i a j priraď -V(i,j)
- 2. orientovanej plnej čiare z bodu j do bodu i priraď $\mathcal{G}_0(i, j_+)$
- 3. uzavretej slučke priraď faktor (-1)
- 4. integruj cez súradnice všetkých vnútorných vrcholov i: $\int_0^\beta di = \int_0^\beta d\tau_i \int d^3 \mathbf{r}_i$

C. Príspevok *n*-tého rádu ku $\mathcal{G}(1,2)$ je súčtom príspevkov všetkých topologicky rozdielnych diagramov *n*-tého rádu.

Feynmanove pravidlá vo Fourierovom obraze

Pre translačne invariantné systémy s hamiltoniánom nezávislým od času je výhodné Greenove funkcie zapísať vo Fourierovom obraze:

$$\mathcal{G}(1,2) = \frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{l\mathbf{k}} \overline{G}(\mathbf{k},\omega_l) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - i\omega_l(\tau_1 - \tau_2)}$$

a podobne pre Greenove funkcie $\mathcal{G}_0(1,2)$ neinteragujúceho systému. Do sumy vstupujú fermiónové

Takýto zápis zodpovedá jednému členu Wickovho rozvoja, pričom každý stĺpec symbolizuje jednočasticovú Greenovu funkciu \mathcal{G}_0 z dolného bodu do horného bodu. Znamienko príspevku k Wickovmu rozvoju je pritom dané paritou permutácie, ktorá vytvorí dolný riadok z horného. (Všimnime si, že poradie bodov v hornom riadku je teda irelevantné, dôležité je iba relatívne poradie bodov v oboch riadkoch.)

Zoraď me teraz body v prvom riadku nasledovne: prvých r + 1 bodov nech sú body z chrbtice, ďalších s_1 bodov nech sú body prvej slučky, atď. Body v druhom riadku nech zodpovedajú obiehaniu chrbtice a jednotlivých slučiek. Tak dostaneme

Vnútorné body chr
btice sme pritom označili a_i a body prvej slučky sme označili
 b_i . Aby sme v chr
btici vyrobili v dolnom riadku rovnaké poradie ako v hornom, musíme bod 2 presunúť doľava, t.j. musíme permutovať
 r krát. Podobne v dolnom riadku prvej slučky musíme presunúť bod b_1 celkom doľava, t.j. musíme permutovať
 $s_1 - 1$ krát. Znamienko permutácie je pritom také isté, ako keby sme permutoval
i $s_1 + 1$ krát.

 $^{^{37}}$ Greenova funkcia $\mathcal{G}_{0,2n+1}$ obsahuje anihilačné operátory z prvého riadku a kreačné operátory z druhého riadku:

Matsubarove frekvencie ω_l . Namiesto o propagácii elektrónu z 2 do 1 vo Fourierovom obraze hovoríme o propagácii elektrónu s hybnosťou **k** a energiou ω_l . Elektrón vstupujúci do 1 (alebo vystupujúci z 2) teda nesie hybnosť **k** a energiu ω_l .

Pri diskusii o Fourierovej transformácii interakcie V(i, j) musíme najprv priradiť interakčným čiaram v diagrame orientáciu. Povedzme, že interakčná čiara vedie z j do i. Potom budeme analogicky písať, tentokrát s bozónovými Matsubarovými frekvenciami:³⁸

$$V(i,j) = V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\delta_\beta(\tau_i - \tau_j) = \frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{n\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) - i\omega_n(\tau_i - \tau_j)},$$

kde $V_{\mathbf{k}}$ je Fourierova transformácia dvojčasticového interakčného potenciálu. Fourierove komponenty $G(\mathbf{k}, \omega_l)$ dostaneme z $\mathcal{G}(1, 2)$ spätnou transformáciou:

$$\overline{G}(\mathbf{k},\omega_l) = \int_0^\beta d\tau_1 \int d^3 \mathbf{r}_1 e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)+i\omega_l(\tau_1-\tau_2)} \mathcal{G}(1,2).$$

Naším cieľom je sformulovať Feynmanove pravidlá na výpočet príspevku k $G(\mathbf{k}, \omega_l)$ od diagramu zodpovedajúceho *n*-tému rádu poruchovej teórie. Do každého z 2*n* vnútorných vrcholov diagramu jedna elektrónová čiara vstupuje, jedna elektrónová čiara z neho vystupuje a čiarkovaná čiara buď vstupuje alebo vystupuje. Nech vstupujúca elektrónová čiara nesie hybnosť a energiu \mathbf{k}_1 a ω_1 , vystupujúca elektrónová čiara nesie hybnosť a energiu \mathbf{k}_2 a ω_2 a interakčná čiara nesie hybnosť a energiu \mathbf{k} a ω . Potom integrácia cez priestoročasové súradnice vnútorného bodu dáva

$$\int_0^\beta d\tau \int d^3 \mathbf{r} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - i\omega_1 \tau} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} + i\omega_2 \tau} e^{\pm(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega\tau)} = \beta \mathcal{V} \delta_{\mathbf{k}_1 \pm \mathbf{k}, \mathbf{k}_2} \delta_{\omega_1 \pm \omega, \omega_2}$$

Teda v každom vnútornom vrchole musí platiť $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1 \pm \mathbf{k}$ a $\omega_2 = \omega_1 \pm \omega$, kde horné znamienka zodpovedajú vstupujúcim a dolné znamienka vystupujúcim interakčným čiaram. Inými slovami, v každom vrchole musia platiť "Kirchhoffove zákony" pre hybnosť a energiu.³⁹

Integrácie ce
z2nvnútorných bodov a cez súradnice bodu 1 teda dajú multiplikatívny faktor
 $(\beta \mathcal{V})^{2n+1}$. Tento faktor je presne kompenzovaný faktorom
 $1/(\beta \mathcal{V})^{2n+1}$ z Fourierovho rozvoja 2n + 1elektrónových čiar, preto dostávame nasledovné modifikované pravidlá pre výpočet príspevku diagramu n-tého rádu ku Greenovej funkci
i $\overline{G}(\mathbf{k},\omega_l)$:

1. externé čiary
40 nesú hybnosť ${\bf k}$ a energiu ω_l

- 2. rešpektujúc zákony zachovania vo vrcholoch, priraď vnútorným čiaram hybnosti a energie
- 3. elektrónovej čiare s hybrosťou \mathbf{p} a energiou ω_m priraď faktor $\overline{G_0}(\mathbf{p},\omega_m)$
- 4. interakčnej čiare s hybnosťou **q** a energiou ω_n priraď faktor $-\frac{1}{\beta \nu}V_{\mathbf{q}}$
- 5. uzavretej slučke priraď faktor (-1)
- 6. sumuj cez n voľných hybností a energií⁴¹

Fermióny so spinom S = 1/2 a spinovo nezávislými interakciami

V tomto prípade máme dva druhy fermiónových čiar, jednu pre projekciu spinu \uparrow a jednu pre projekciu \downarrow . Keďže o interakciách predpokladáme, že nezávisia od spinov, z vnútorných vrcholov vystupujú fermiónové Greenove funkcie s rovnakým spinom, aký do nich vstupuje.⁴² Dôsledkom je, že celá chrbtica má ten istý spin, daný zvonka. Podobne všetky fermiónové čiary v slučke majú ten istý spin. Ten však môže byť \uparrow alebo \downarrow , preto uzavretej slučke treba priradiť faktor (-2) namiesto (-1). To je zároveň jediná zmena Feynmanových pravidiel pre prípad fermiónov so spinom S = 1/2 a spinovo nezávislými interakciami oproti bezspinovému prípadu.

³⁸Funkciu $\delta_{\beta}(\tau)$ sme reprezentovali sumou cez bozónové Matsubarove frekvencie $\delta_{\beta}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n} e^{-i\omega_{n}\tau}$. Ľahko totiž overíme, že takto definovaná funkcia $\delta_{\beta}(\tau)$ diverguje pre $\tau = n\beta$ a že normalizačná podmienka $\int_{0}^{\beta} d\tau \delta_{\beta}(\tau) = 1$ je splnená. Dá sa tiež uveriť, že $\delta_{\beta}(\tau) = 0$ pre $\tau \neq n\beta$.

³⁹V kryštáloch by sme namiesto zákona zachovania hybnosti vo vrchole dostali zákon zachovania kvázihybnosti.

 $^{^{40}}$ T.j. čiary vystupujúce z pôvodného bodu 2 a vstupujúce do pôvodného bodu 1. $^{41}2n + 1$ elektrónových čiar a n interakčných čiar zodpovedá 3n + 1 štvorhybnostiam; z nich jedna je fixovaná zvonka

a vo vnútorných bodoch máme 2n zákonov zachovania; výsledkom je 3n + 1 - (2n + 1) = n voľných štvorhybností. ⁴²Ako je obvyklé, odteraz nehovoríme o projekciách spinu, ale kratšie o spine.



Obr. 8: Diagramy rádu n = 1 prispievajúce k vlastnej energii.

Vlastná energia elektrónov

Skúmajme diagramatický rozvoj pre Greenovu funkciu elektrónu $\overline{G}(\mathbf{k}, \omega_l)$. Podobne ako v prípade interakcie elektrónov s nečistotami, zaveď me pojem vlastnej energie $\overline{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega_l)$ ako takej časti diagramu, ktorá sa nerozpadne na dve nespojené časti odstránením jednej vnútornej elektrónovej čiary $\overline{G_0}$. Dostávame tak poruchový rozvoj pre Greenovu funkciu:

$$\overline{G}(\mathbf{k},\omega_l) = \overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_l) + \overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_l)\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega_l)\overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_l) + \overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_l)\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega_l)\overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_l)\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega_l)\overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_l) + \dots$$

Nekonečný rozvoj možno prepísať ako algebraickú rovnicu pre $\overline{G}(\mathbf{k},\omega_l)$. Dostaneme tak Dysonovu rovnicu $\overline{G}(\mathbf{k},\omega_l) = \overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_l) + \overline{G_0}(\mathbf{k},\omega_l)\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega_l)\overline{G}(\mathbf{k},\omega_l)$ s riešením

$$\overline{G}(\mathbf{k},\omega_l) = \frac{1}{i\omega_l - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega_l)}.$$

V prvom ráde poruchovej teórie k vlastnej energii prispievajú dva diagramy, pozri obrázok 8. Pre vlastnú energiu teda dostávame

$$\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega_l) = -\frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{m\mathbf{p}} \left[-2V_0 + V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}\right] \overline{G_0}(\mathbf{p},\omega_m).$$

Z definície časovej Fourierovej transformácie vyplýva, že $\frac{1}{\beta} \sum_{m} \overline{G_0}(\mathbf{p}, \omega_m) = G_0(\mathbf{p}, \tau = 0)$. Podľa Feynmanovho pravidla B2 máme Greenovu funkciu v čase $\tau = 0$ interpretovať ako $G_0(\mathbf{p}, \tau = 0^-) = \langle c^{\dagger}_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}} \rangle_0 = f_{\mathbf{p}}$, kde $f_{\mathbf{p}}$ je Fermiho-Diracova distribučná funkcia. Výraz pre vlastnú energiu sa preto zjednoduší nasledovne:

$$\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega_l) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \left[2V_0 - V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} \right] f_{\mathbf{p}} = nV_0 - \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} f_{\mathbf{p}},$$

kde *n* je hustota elektrónového plynu. Prvý člen meria posuv energie elektrónu v poli ostatných elektrónov. Druhý člen je tzv. výmenný člen. V prvom ráde poruchovej teórie teda vlastná energia nezávisí od frekvencie. Póly retardovanej Greenovej funkcie sa v komplexnej rovine presunú z $\varepsilon_{\mathbf{k}} - i\eta$ do $\varepsilon_{\mathbf{k}} + \Sigma(\mathbf{k}) - i\eta$, čo zodpovedá zmene spektra z $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ na $\varepsilon_{\mathbf{k}}^* = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \Sigma(\mathbf{k})$. Teraz vidíme, prečo sa $\overline{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega_l)$ nazýva vlastnou energiou.

Vo vyšších rádoch poruchovej teórie je vlastná energia $\overline{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega_l)$ komplikovanou funkciou hybnosti a energie. V Landauovej teórii Fermiho kvapaliny sa však predpokladá, že jednočasticové spektrum interagujúceho systému fermiónov je (pri nízkych excitačných energiách) jednoduché, pretože je kvalitatívne podobné jednočasticovému spektru neinteragujúceho systému. Podľa Landaua hlavnou zmenou jednočasticových vlastností oproti neinteragujúcemu systému je zmena disperzného zákona elektrónov z $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ na renormalizovaný tvar $\varepsilon_{\mathbf{k}}^*$, ako aj konečná pravdepodobnosť rozptylu $\Gamma_{\mathbf{k}}$. Landau naviac argumentuje, že v limite $\varepsilon_{\mathbf{k}}^* \to 0$ platí $\varepsilon_{\mathbf{k}}^* \gg \Gamma_{\mathbf{k}}$.

Teraz preložíme Landauove predstavy do jazyka Greenových funkcií. Pre konkrétnosť budeme skúmať retardovanú Greenovu funkciu elektrónu s hybnosťou **k**, pre ktorú platí exaktný Dysonov výsledok $G_R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}$. Vlastná energia je komplexná funkcia, $\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma'(\mathbf{k}, \omega) + i\Sigma''(\mathbf{k}, \omega)$. Ústredným predpokladom Landauovej teórie je, že pri energii $\omega = \varepsilon_{\mathbf{k}}^*$ platí $\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma'(\mathbf{k}, \omega) = 0$, čiže pri tejto energii reálna časť menovateľa Greenovej funkcie $G_R(\mathbf{k}, \omega)$ vymizne. Ak teraz rozvinieme funkciu $\Sigma'(\mathbf{k}, \omega)$ do Taylorovho radu okolo bodu $\omega = \varepsilon_{\mathbf{k}}^*$, dostaneme nasledovný výsledok pre tzv. koherentnú časť Greenovej funkcie:

$$G_{R,\mathrm{coh}}(\mathbf{k},\omega) \approx \frac{a_{\mathbf{k}}}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^* + i\Gamma_{\mathbf{k}}},$$

kde sme zaviedli tzv. renormalizáciu vlnovej funkcie $a_{\mathbf{k}}$ a pravdepodobnosť rozptylu $\Gamma_{\mathbf{k}}$,

$$\frac{1}{a_{\mathbf{k}}} = 1 - \frac{\partial \Sigma'(\mathbf{k},\omega)}{\partial \omega}|_{\omega = \varepsilon_{\mathbf{k}}^*}, \qquad \Gamma_{\mathbf{k}} = -a_{\mathbf{k}} \Sigma''(\mathbf{k},\varepsilon_{\mathbf{k}}^*).$$

Podľa kapitoly 4 Greenova funkcia s jednoduchým pólom pri komplexnej energii $z = \varepsilon_{\mathbf{k}}^* - i\Gamma_{\mathbf{k}}$ popisuje elektrón s excitačnou energiou $\varepsilon_{\mathbf{k}}^*$ a inverznou dobou života $\Gamma_{\mathbf{k}}$, v súlade s Landauovou fenomenologickou teóriou.

Spektrálna funkcia $A(\mathbf{k}, \omega)$ jednočasticovej Greenovej funkcie teda obsahuje lorentzián s váhou $a_{\mathbf{k}}$ so stredom pri $\omega = \varepsilon_{\mathbf{k}}^*$ a šírkou $\Gamma_{\mathbf{k}}$. Zo sumačného pravidla $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\mathbf{k}, \omega) = 1$ potom vyplýva, že časť $1 - a_{\mathbf{k}}$ spektrálnej váhy chýba. Preto musia existovať iné, tzv. nekoherentné príspevky k $A(\mathbf{k}, \omega)$. Explicitný príklad spektrálnej funkcie $A(\mathbf{k}, \omega)$ obsahujúcej kvázičasticový pík a nekoherentné pozadie uvidíme v kapitole 7.



Obr. 9: Diagramy rádu n = 2 prispievajúce k vlastnej energii.

Cvičenia

1. Dokážte platnosť kánonických komutačných vzťahov pre operátory poľa. Ukážte, že spätná transformácia od operátorov poľa k operátorom $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}}$ má tvar $c_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \int d^3 \mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \psi^{\dagger}(\mathbf{x})$ a $c_{\mathbf{k}} = \int d^3 \mathbf{x} \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x})$. Ukážte tiež, že operátor celkového počtu častíc možno písať v tvare $N = \int d^3 \mathbf{x} \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x})$.

2. Skúmajte anharmonický oscilátor s hamiltoniánom $H = H_0 + V$, kde $H_0 = \hbar \omega a^{\dagger} a$ je neporušený harmonický oscilátor a $V = g(a + a^{\dagger})^3$ je operátor poruchy. (Čomu zodpovedá porucha V v x-p reprezentácii?) Explicitne vypočítajte časovú závislosť operátora poruchy $\widetilde{V(\tau)}$ v interakčnom obraze. Viete určiť $V_H(\tau)$ v Heisenbergovom obraze?

3. V druhom ráde poruchovej teórie k vlastnej energii prispieva 6 diagramov, pozri obrázok 9. Napíšte výrazy pre príspevky jednotlivých diagramov k vlastnej energii elektrónu.

4. Skonštruujte Feynmanove pravidlá pre výpočet dvojčasticovej Greenovej funkcie. Koľko typov kostier (z dvoch chrbtíc) prichádza do úvahy? Nakreslite všetky neekvivalentné diagramy 1. rádu, ktoré prichádzajú do úvahy.

6 Coulombovský plyn elektrónov

V tejto prednáške sa budeme venovať hustému coulombovskému plynu, v ktorom možno interakčné efekty započítať pomocou poruchovej teórie. Najprv ukážeme, že popis jednočasticových excitácií coulombovského plynu je v priblížení Hartreeho-Focka neuspokojivý. Potom ukážeme, že podobné problémy vznikajú aj pri výpočte energie základného stavu hustého coulombovského plynu. V druhej časti prednášky preskúmame diagramatické rozvoje pre funkcie odozvy popísané dvojčasticovými Greenovými funkciami a zavedieme dôležité priblíženie náhodných fáz. Ukážeme, že zahrnutie tienenia coulombovských interakcií odstráni obidva problémy naivnej poruchovej teórie. Literatúra: II.6, III.7, NP1, Mahan, Rickayzen, Giuliani+Vignale.

Coulombovský plyn

V tejto kapitole budeme skúmať coulombovský plyn, t.j. systém elektrónov s hustotou n, ktoré sa pohybujú v médiu s homogénne rozloženým kladným nábojom s nábojovou hustotou +en. Takýto elektricky neutrálny systém sa niekedy nazýva model želé. Grandkánonický hamiltonián pre coulombovský plyn elektrónov má tvar

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V, \qquad \mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}, \qquad V = \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \sum_{\mathbf{k}\sigma'} c^{\dagger}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma'} c_{-\mathbf{k}\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma},$$

kde $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$ je grandkánonická kinetická energia a $V_{\mathbf{q}} = \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2}$ je Fourierova komponenta coulombovskej interakcie. Všimnime si, že v interakčnom člene absentuje príspevok s $\mathbf{q} = 0.43$

Hustotu elektrónového plynu *n* možno parametrizovať typickou vzdialenosťou r_0 medzi elektrónmi definovanou vzťahom $\frac{4}{3}\pi r_0^3 = n^{-1}$. Teraz zavedieme atómové jednotky, t.j. dĺžky budeme merať v jednotkách Bohrovho polomeru $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ a energie v jednotkách $\varepsilon_B = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = 13.6$ eV. Hustota coulombovského plynu je potom charakterizovaná bezrozmerným parametrom $r_s = \frac{r_0}{a_B}$.

V prednáškach II.6 a III.7 sme ukázali, že ak $r_s \ll 1$, potom coulombovské interakcie medzi elektrónmi možno chápať ako malú poruchu ku kinetickej energii elektrónov. Energiu základného stavu E coulombovského plynu N elektrónov teda zrejme možno rozvinúť do radu podľa mocnín r_s . Do prvého rádu poruchovej teórie sme dostali výsledok

$$\frac{E}{N\varepsilon_B} = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s},$$

kde prvý člen je kinetická energia elektrónov a druhý člen je tzv. výmenná energia. Ak označíme vlnovú funkciu základného stavu neinteragujúceho systému ako $|FS\rangle$, potom výmennú energiu formálne dostaneme ako $E_1 = \langle FS | V | FS \rangle$, kde V je interakčný člen v hamiltoniáne.

Stojí za zmienku, že výpočet do prvého rádu poruchovej teórie je pre coulombovský plyn ekvivalentný s priblížením Hartreeho-Focka. Naozaj, ak nedôjde k spontánnemu narušeniu symetrie, čo v limite malých r_s nepredpokladáme, vďaka translačnej invariantnosti hamiltoniánu \mathcal{H} musia byť Hartreeho-Fockove jednočasticové stavy rovinnými vlnami. Ale stav $|FS\rangle$ je Slaterovým determinantom rovinných vĺn, teda je prípustným riešením rovníc Hartreeho-Focka.⁴⁴

Výmenná diera

Nenulová hodnota $E_1 < 0$ indikuje, že dokonca aj v neinteragujúcom systéme s vlnovou funkciou $|FS\rangle$ musia existovať korelácie medzi elektrónmi. Preskúmajme preto distribučnú funkciu párov elektrónov $g(\mathbf{r})$, definovanú v prednáške 1, v stave $|FS\rangle$. Ak použijeme výsledok (8), ktorý vyjadruje Fourierovu transformáciu distribučnej funkcie párov $g_{\mathbf{q}}$ pomocou statického štruktúrneho faktora $S_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\nu} \langle FS | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} | FS \rangle$, dostaneme

$$g(\mathbf{R}) = \frac{1}{n^2 \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \left[\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \langle FS | c^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} c^{\dagger}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} c_{\mathbf{k}'\sigma'} | FS \rangle - n \right]$$

kde sme použili vzťah $\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}$. Avšak

$$\langle FS | c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'} | FS \rangle = \delta_{\mathbf{q}0} f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (1-f_{\mathbf{k}}),$$

preto pre distribučnú funkciu párov elektrónov dostávame

$$g(\mathbf{R}) = 1 - \frac{2}{n^2} \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} F(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}$$

kde sme zaviedli funkciu $F(\mathbf{q}) = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$, ktorú sme explicitne vypočítali v III.7. Ak využijeme tam odvodený výsledok pre $F(\mathbf{q})$, integráciou cez \mathbf{q} vo sférických súradniciach dostaneme napokon distribučnú funkciu párov elektrónov v stave Fermiho mora

$$g(R) = 1 - \frac{9}{2} \left[\frac{\cos k_F R - (k_F R)^{-1} \sin k_F R}{(k_F R)^2} \right]^2.$$

 $^{^{43}}$ Ide o dôsledok toho, že celkový náboj elektrónov je presne kompenzovaný nábojom i
ónov, pozri napr. III.7.

 $^{^{44}}$ Je však treba poznamenať, že nikde sme neukázali, že stav $|FS\rangle$ je (globálne) optimálnym riešením. Napríklad Overhauser [Phys. Rev. **128**, 1437 (1962)] ukázal, že v priblížení Hartreeho-Focka má stav so spontánne modulovanou spinovou hustotou nižšiu energiu ako translačne invariantný stav. Overhauserova nestabilita je dôsledkom ďalekého dosahu coulombovských interakcií. Dnes sa však verí, že po zahrnutí tienenia zostane coulombovský plyn stabilný, pozri napríklad Jones-March, kapitola 4.12.

Funkcia g(R) je zobrazená na obr. 10. Všimnime si, že pravdepodobnosť nájsť dva elektróny v tom istom bode je polovičná oproti pravdepodobnosti nájsť ich ďaleko od seba. Toto je dôsledok Pauliho vylučovacieho princípu: polovica všetkých elektrónov je odpudzovaná zvoleným elektrónom (ide o elektróny s rovnakým spinom ako spin zvoleného elektrónu), kým druhá polovica elektrónov (s opačným spinom ako spin zvoleného elektrónu) nevníma prítomnosť testovacieho elektrónu. Potlačenie funkcie g(R) siaha do vzdialenosti ~ k_F^{-1} , čo je vzdialenosť porovnateľná s r_0 . Toto potlačenie sa v literatúre nazýva výmennou dierou. Vďaka existencii výmennej diery je na malých vzdialenostiach každý elektrón obklopený (po zarátaní ióného pozadia) kladným nábojom, a preto je energia E_1 znížená oproti klasickej predpovedi $E_1 = 0.^{45}$



Obr. 10: Distribučná funkcia pre páry elektrónov v neinteragujúcom plyne elektrónov.

Energia jednočasticových excitácií coulombovského plynu v priblížení Hartreeho-Focka Teraz preskúmame elementárne excitácie modelu želé, ktoré vzniknú pridaním elektrónu s hybnosťou $K > k_F$ k Fermiho moru:

$$|\psi\rangle = c^{\dagger}_{\mathbf{K}\alpha}|FS\rangle.$$

Hybnosť tohto stavu je $\hbar \mathbf{K}$, spin S = 1/2 a projekcia spinu $S^z = \alpha$.⁴⁶ Tieto kvantové čísla sú totožné s výsledkami pre elektrón vo vákuu. Na druhej strane, excitačná energia, t.j. rozdiel energií $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{K}} = \langle \psi | H | \psi \rangle - \langle FS | H | FS \rangle$, sa líši od energie elektrónu vo vákuu $\varepsilon_{\mathbf{K}}$. Naozaj,

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \varepsilon_{\mathbf{K}} - \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \sum_{\sigma} V_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'} \langle \psi | c^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} | \psi \rangle, \\ &= \varepsilon_{\mathbf{K}} - \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \sum_{\sigma} V_{\mathbf{k} - \mathbf{k}'} (f_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{K}} \delta_{\sigma\alpha}) (f_{\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{K}} \delta_{\sigma\alpha}) \end{aligned}$$

Tak dostávame výraz pre energiu kvázičastice

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{K}} = \varepsilon_{\mathbf{K}} - \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{K}-\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{K}} - \frac{e^2}{\epsilon_0} \int_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{K^2 + k^2 - 2\mathbf{K} \cdot \mathbf{k}}$$

Integráciou vo sférických súradniciach napokon možno ukázať, že

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{K}} = \varepsilon_{\mathbf{K}} - \frac{e^2 k_F}{4\pi^2 \epsilon_0} F\left(\frac{K}{k_F}\right),$$

 $^{^{45}}$ Okrem výmennej diery sa v literatúre spomína aj korelačná diera. Ide o to, že v systéme s coulombovskými interakciami sa musia navzájom vyhýbať aj elektróny s opačnými spinmi, čo povedie k ďalšiemu zníženiu energie. Na popis korelačnej diery je potrebné použiť lepšie priblíženia než priblíženie Hartreeho-Focka.

⁴⁶Hamiltonián \mathcal{H} komutuje s operátormi celkovej hybnosti, celkového spinu a projekcie celkového spinu. Preto vlastné stavy \mathcal{H} možno zvoliť ako stavy s ostrými hodnotami týchto veličín. Uvažovaný variačný stav má tiež túto vlastnosť.

kde sme zaviedli funkciu $F(x) = \frac{1-x^2}{2x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| + 1$. Pre grupovú rýchlosť kvázičastíc $\mathbf{v}_{\mathbf{K}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{K}}}{\partial \mathbf{K}}$ v blízkosti Fermiho plochy preto dostaneme výsledok

$$\frac{v_K}{v_F} = 1 + Cr_s \ln \frac{2k_F}{|K - k_F|},$$

kde $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$ je Fermiho rýchlosť neinteragujúceho Fermiho plynu a $C = \frac{1}{\pi} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}$. Všimnime si, že v limite veľkých hustôt $r_s \ll 1$ je korekcia malá, s výnimkou tesnej blízkosti Fermiho plochy, kde Fermiho rýchlosť diverguje.

Zistili sme teda, že v mnohočasticovom systéme sú energie elektrónov rôzne od energií vo vákuu. To sa však dalo očakávať: keď do systému pridáme elektrón, musí okolo neho vzniknúť výmenná diera, t.j. rozdelenie náboja v jeho blízkosti sa zmení. Následne sa musí zmeniť aj energia elektrónu. Očakávame, že aj v priblíženiach lepších než je priblíženie Hartreeho-Focka môžeme hovoriť o častici a o deformácii média, cez ktoré sa pohybuje. Vzniknutý zložený objekt (holá častica + deformácia média) sa v literatúre nazýva kvázičasticou. Stojí za zmienku, že holou časticou nemusí byť iba pridaná častica. Naozaj, ak z Fermiho mora odstránime elektrón s hybnosťou $K < k_F$ a spinom α , dostaneme stav

$$|\psi'\rangle = c_{\mathbf{K}\alpha}|FS\rangle,$$

ktorý môžeme nazvať Fermiho morom s dierou. Hybnosť takéhoto stavu je $-\hbar \mathbf{K}$, jeho spin je S = 1/2a priemet spinu $S^z = -\alpha$.

Predpoveď poruchovej teórie prvého rádu, že rýchlosť kvázičastíc v blízkosti Fermi plochy diverguje, je v rozpore s experimentálnymi výsledkami pre kovy. To naznačuje, že prvý rád poruchovej teórie nemožno použiť na popis excitovaných stavov. Ide o prekvapenie, pretože popis základného stavu do prvého rádu v limite $r_s \ll 1$ nevykazoval žiadne problémy. Ľahko nahliadneme, že zdrojom problémov bola divergencia $V_{\mathbf{q}}$ v limite $\mathbf{q} \rightarrow 0$, t.j. dlhý dosah coulombovských interakcií.

Energia coulombovského plynu do 2. rádu poruchovej teórie

Korekcia 2. rádu k energii (nedegenerovaného) základného stavu je

$$E_2 = -\sum_n \frac{\langle FS|V|n\rangle\langle n|V|FS\rangle}{E_n^0 - E_0^0},$$

kde $|n\rangle$ sú excitované stavy neinteragujúceho systému s (neporušenými) energiami E_n^0 . Maticový element $\langle n|V|FS\rangle$ môže byť nenulový iba pre stavy typu

$$|n\rangle = |\mathbf{p}, \sigma, \mathbf{k}, \sigma'; \mathbf{q}\rangle = c^{\dagger}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma'} c_{-\mathbf{k}\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma} |FS\rangle,$$

ktoré obsahujú dve diery v stavoch $\mathbf{p}\sigma$ a $-\mathbf{k}\sigma'$ pod Fermiho plochou a dva elektróny v stavoch $\mathbf{p} + \mathbf{q}\sigma$ a $-\mathbf{k} - \mathbf{q}\sigma'$ nad Fermiho plochou. Hovoríme o vzniku dvoch časticovo-dierových párov, jedného so spinom σ a druhého so spinom σ' , pozri obrázok 11. Excitačná energia časticovo-dierových párov je

$$E_n^0 - E_0^0 = \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}.$$

Prípady $\sigma' = \sigma$ a $\sigma' = -\sigma$ budeme skúmať zvlášť. Začnime s prípadom $\sigma' = -\sigma$. V tomto prípade pre maticový element operátora poruchy $V = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{Q}\neq 0} \frac{e^2}{\mathcal{V}\epsilon_0 \mathbf{Q}^2} \sum_{\mathbf{P}\tau} \sum_{\mathbf{K}\tau'} c^{\dagger}_{\mathbf{P}+\mathbf{Q}\tau} c^{\dagger}_{-\mathbf{K}-\mathbf{Q}\tau'} c_{-\mathbf{K}\tau'} c_{\mathbf{P}\tau}$ platí

$$\langle \mathbf{p}, \sigma, \mathbf{k}, -\sigma; \mathbf{q} | V | FS \rangle = \frac{e^2}{\mathcal{V}\epsilon_0 \mathbf{q}^2} f_{\mathbf{p}} f_{-\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) (1 - f_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}).$$

Faktor 2 sa v menovateli nenachádza, pretože interakčný člen dáva nenulový príspevok v dvoch prípadoch: buď $\mathbf{P}, \tau = \mathbf{p}, \sigma$ a $\mathbf{K}, \tau' = \mathbf{k}, -\sigma$, alebo $\mathbf{P}, \tau = -\mathbf{k}, -\sigma$ a $\mathbf{K}, \tau' = -\mathbf{p}, \sigma$. Súčin Fermiho funkcií vyjadruje podmienku, aby stavy \mathbf{p} a \mathbf{k} ležali vnútri Fermiho mora a stavy $\mathbf{p} + \mathbf{q}$ a $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ vonku Fermiho mora. Nakoniec pripomeňme, že pretože platí $|\mathbf{p}, \sigma, \mathbf{k}, -\sigma; \mathbf{q}\rangle = |-\mathbf{k}, -\sigma, -\mathbf{p}, \sigma; -\mathbf{q}\rangle$, každý excitovaný stav $|n\rangle$ je v sume cez $\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma$ započítaný dvakrát. Preto $\sum_{n} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}}$, kde v poslednej rovnosti sme explicitne vykonali sumáciu cez spinový index.



Obr. 11: Vľavo: excitovaný stav s dvomi časticovo-dierovými pármi. V strede: excitácia časticovo-dierových párov, priamy rozptyl. Vpravo: excitácia časticovo-dierových párov, výmenný rozptyl. Tento proces je možný, iba ak $\sigma' = \sigma$.

Na druhej strane, v prípade $\sigma' = \sigma$ pre maticový element platí

Faktor 2 sa v menovateli nenachádza z toho istého dôvodu, ako v prípade $\sigma' = -\sigma$. Dodatočný člen v hranatej zátvorke zohľadňuje tú skutočnosť, že v prípade $\sigma' = \sigma$ sa do excitovaného stavu $|n\rangle$ možno dostať buď (tzv. priamym) rozptylom elektrónov o q, alebo (tzv. výmenným) rozptylom o $\mathbf{Q} = -(\mathbf{p} + \mathbf{k} + \mathbf{q})$, pozri obrázok 11. Pretože v sume cez $\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma$ je každý excitovaný stav $|\mathbf{p}, \sigma, \mathbf{k}, \sigma; \mathbf{q} \rangle$ započítaný štyrikrát,⁴⁷ v prípade $\sigma' = \sigma$ treba sumu cez excitované stavy počítať podľa vzťahu $\sum_n = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{k},\mathbf{q}}$, kde v poslednej rovnosti sme vykonali sumáciu cez spinový index. Sčítaním príspevkov od $\sigma' = -\sigma$ a $\sigma' = \sigma$ pre korekciu druhého rádu poruchovej teórie k energii

základného stavu dostávame

$$E_2 = -\left(\frac{e^2}{\mathcal{V}\epsilon_0}\right)^2 \sum_{\mathbf{p},\mathbf{k},\mathbf{q}} \left\{ \frac{1}{\mathbf{q}^4} + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\mathbf{q}^2} - \frac{1}{(\mathbf{p} + \mathbf{k} + \mathbf{q})^2} \right]^2 \right\} \frac{f_{\mathbf{p}}f_{-\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})(1 - f_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}})}{\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}$$

Roznásobením hranatej zátvorky dostaneme $\frac{1}{\mathbf{q}^4} + \frac{1}{(\mathbf{p}+\mathbf{k}+\mathbf{q})^4} - \frac{2}{\mathbf{q}^2(\mathbf{p}+\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}$. Ak v druhom člene sumačnú premennú **q** nahradíme premennou $\mathbf{Q} = -(\mathbf{p}+\mathbf{k}+\mathbf{q})$, ľahko nahliadneme, že hranatú zátvorku možno efektívne nahradiť výrazom $\frac{2}{\mathbf{q}^4} - \frac{2}{\mathbf{q}^2(\mathbf{p}+\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}$. Preto korekciu druhého rádu poruchovej teórie k energii základného stavu možno zapísať v tvare

$$E_2 = -\left(\frac{e^2}{\mathcal{V}\epsilon_0}\right)^2 \sum_{\mathbf{p},\mathbf{k},\mathbf{q}} \left[\frac{2}{\mathbf{q}^4} - \frac{1}{\mathbf{q}^2(\mathbf{p}+\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}\right] \frac{f_{\mathbf{p}}f_{-\mathbf{k}}(1-f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})(1-f_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}})}{\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}.$$

Ak ďalej zaviedieme bezrozmerné premenné $\mathbf{x} = k_F \mathbf{p}, \mathbf{y} = k_F \mathbf{k}$ a $\mathbf{z} = k_F \mathbf{q}$, potom výraz pre E_2 môžeme prepísať do analogického tvaru ako nultý a prvý člen poruchového rozvoja:

$$\frac{E_2}{N\varepsilon_B} = -\frac{3}{16\pi^5} \int d^3 \mathbf{z} \int_{|\mathbf{x}|<1,|\mathbf{x}+\mathbf{z}|>1} d^3 \mathbf{x} \int_{|\mathbf{y}|<1,|\mathbf{y}+\mathbf{z}|>1} d^3 \mathbf{y} \left[\frac{2}{\mathbf{z}^4} - \frac{1}{\mathbf{z}^2(\mathbf{x}+\mathbf{y}+\mathbf{z})^2}\right] \frac{1}{\mathbf{z}\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{y}+\mathbf{z})}$$

Ako sa dalo z nultého a prvého rádu poruchovej teórie čakať, na pravej strane figuruje bezrozmerné číslo, ktoré formálne nezávisí od r_s . Dá sa však ukázať, že prvý člen v hranatej zátvorke dáva divergentný príspevok, pozri napr. NP1. Energiu základného stavu coulombovského plynu teda nemožno počítať naivným poruchovým rozvojom podľa mocnín $r_s.$ Zdrojom problému je opäť divergencia $V_{\bf q}$ pre ${\bf q} \rightarrow 0.$

Funkcie odozvy

Problémy divergujúcej Fermiho rýchlosti a divergujúceho príspevku 2. rádu poruchovej teórie k energii coulombovského plynu majú spoločný zdroj: divergenciu coulombovskej interakcie V_q v dlhovlnnej limite $q \to 0.$ Očakávame, že zahrnutie tienenia opraví naše nefyzikálne výsledky. Vo zvyšku prednášky

 $^{^{47}}$ Faktor 2 pochádza z počítania konfigurácií dier: $|\mathbf{p}, \sigma, \mathbf{k}, \sigma; \mathbf{q} \rangle = |-\mathbf{k}, \sigma, -\mathbf{p}, \sigma; -\mathbf{q} \rangle$. Ďalší faktor 2 pochádza z nerozlíšiteľnosti výsledkov priamych a výmenných rozp
tylov: $|\mathbf{p}, \sigma, \mathbf{k}, \sigma; \mathbf{q}\rangle = -|\mathbf{p}, \sigma, \mathbf{k}, \sigma; -\mathbf{q} - \mathbf{p} - \mathbf{k}\rangle.$

najprv nahradíme klasickú teóriu tienenia coulombovským plynom, popísanú v kapitole 3, kvantovomechanickou teóriou tienenia. Potom explicitne ukážeme, ako zahrnutie tienenia vedie ku konečnej energii základného stavu modelu želé.

Pri popise tienenia budeme aplikovať všeobecnú teóriu lineárnej odozvy, t.j. obmedzíme sa na tienenie slabých polí.⁴⁸ V teórii lineárnej odozvy nás obvykle zaujíma zmena jednočasticovej veličiny $M(1) = \sum_{\alpha\beta} \psi^{\dagger}_{\alpha}(1)m_{\alpha\beta}(1)\psi_{\beta}(1)$ v priestoročasovom bode 1 v dôsledku jednočasticovej zmeny hamiltoniánu $B(2) = \sum_{\gamma\delta} \psi^{\dagger}_{\gamma}(2)b_{\gamma\delta}(2)\psi_{\delta}(2)$ v priestoročasovom bode 2. V tomto odstavci explicitne uvádzame aj spinové indexy α , β , γ a δ . Podľa Kubovej formuly je táto zmena daná retardovanou verziou nasledovnej Matsubarovej Greenovej funkcie:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{MB}(1,2) &= -\langle TM(1)B(2)\rangle = -\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} m_{\alpha\beta}(1)b_{\gamma\delta}(2)\langle T\psi^{\dagger}_{\alpha}(3)\psi_{\beta}(1)\psi^{\dagger}_{\gamma}(4)\psi_{\delta}(2)\rangle_{3=1+,4=2+} \\ &= -\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} m_{\alpha\beta}(1)b_{\gamma\delta}(2)\mathcal{G}_{2}(1\beta,2\delta;3\alpha,4\gamma)_{3=1+,4=2+}. \end{aligned}$$

Poznamenávame, že keďže operátory m a b môžu obsahovať derivácie, museli sme odlíšiť priestoročasové indexy pri kreačných a anihilačných operátoroch. Teda zo známej dvojčasticovej Greenovej funkcie \mathcal{G}_2 môžeme určiť obvyklé funkcie odozvy. Napríklad pre funkciu odozvy hustota-hustota (tzv. susceptibilitu) máme $m_{\alpha\beta} = b_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ a preto dostávame

$$\mathcal{X}(1,2) = -\sum_{\alpha\beta} \mathcal{G}_2(1\alpha, 2\beta; 1_+\alpha, 2_+\beta).$$

Dá sa ukázať, že pre dvojčasticové Greenove funkcie platia podobné pravidlá ako pre jednočasticové Greenove funkcie: máme skonštruovať všetky topologicky rozdielne spojené diagramy a priradiť im čísla.

Funkcia odozvy neinteragujúceho systému

Ak použijeme Wickovu vetu a uvážime, že spin voľnej častice je zachovávajúcou sa veličinou, t.j. $\mathcal{G}_0(1\alpha, 1_+\beta) = \delta_{\alpha\beta}\mathcal{G}_{0\alpha}(1, 1_+)$, pre funkciu odozvy (alebo stručnejšie susceptibilitu) neinteragujúceho fermiónového systému $\mathcal{X}_0(1, 2) = -\sum_{\alpha\beta}\mathcal{G}_{02}(1\alpha, 2\beta; 1_+\alpha, 2_+\beta)$ dostaneme

$$\mathcal{X}_{0}(1,2) = -\sum_{\alpha\beta} \mathcal{G}_{0\alpha}(1,1_{+}) \mathcal{G}_{0\beta}(2,2_{+}) + \sum_{\alpha} \mathcal{G}_{0\alpha}(1,2) \mathcal{G}_{0\alpha}(2,1).$$

Prvý člen sa dá ďalej zjednodušiť, ak uvážime, že $\sum_{\alpha} \mathcal{G}_{0\alpha}(1, 1_+) = \langle \rho(1) \rangle = n$ a $\sum_{\beta} \mathcal{G}_{0\beta}(2, 2_+) = \langle \rho(2) \rangle = n$, kde *n* je priemerná hustota elektrónového plynu. Všimnime si, že vďaka translačnej invariantnosti v časopriestore platí $\mathcal{X}_0(1, 2) = \mathcal{X}_0(1-2)$.



Obr. 12: K susceptibilite $\mathcal{X}(1,2)$ prispievajú všetky diagramy (schematicky označené bodkami), ktoré sú spojené aspoň s jedným externých bodov 1 a 2. Prvé dva členy poruchového rozvoja susceptibility $\mathcal{X}(1,2)$ zodpovedajú susceptibilite $\mathcal{X}_0(1,2)$ neinteragujúceho systému. Prvý z nich sa nazýva bublinou.

Skúmajme opäť systém v krabici s objemom \mathcal{V} a periodickými okrajovými podmienkami. Odteraz budeme namiesto retardovaných skúmať Matsubarove Greenove funkcie. Definujme priame a spätné časopriestorové Fourierove transformácie vzťahmi

$$\overline{\chi}_0(\mathbf{q},\omega_n) = \int d^3 \mathbf{r} \int_0^\beta d\tau \mathcal{X}_0(\mathbf{r},\tau) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}+i\omega_n\tau}, \qquad \mathcal{X}_0(\mathbf{r},\tau) = \frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q},\omega_n} \overline{\chi}_0(\mathbf{q},\omega_n) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-i\omega_n\tau}$$

 $^{^{48}}$ Treba poznamenať, že keďže náboj elektrónu *e* je konečný a nie limitne malý, a priori nie je jasné, či teória lineárnej odozvy dáva kvantitatívne správny popis tienenia.

a analogickými výrazmi pre všetky ostatné časopriestorové funkcie. Matsubarove frekvencie sú bozónové, pretože počítame Fourierovu transformáciu Greenovej funkcie pre párny počet fermiónov. Všimnime si, že pokiaľ $\mathbf{q} \neq 0$ alebo $\omega_n \neq 0$, potom konštantný člen $-n^2$ neprispieva k Fourierovej komponente susceptibility. Preto v takomto prípade môžeme písať

$$\overline{\chi}_0(\mathbf{q},\omega_n) = \frac{2}{\beta \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k},\omega_l} \overline{G}_0(\mathbf{k},\omega_l) \overline{G}_0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_l+\omega_n) = \frac{2}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_l} \frac{1}{(i\omega_l+i\omega_n-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})(i\omega_l-\varepsilon_{\mathbf{k}})}$$

kde faktor 2 zohľadňuje dve možné projekcie spinu elektrónu.

Sumu cez fermiónové Matsubarove frekvencie možno vypočítať nasledovne. Najprv si všimneme, že póly funkcie $\frac{1}{e^{\beta z}+1}$ ležia v bodoch $z = i\omega_l$, kde ω_l sú fermiónové Matsubarove frekvencie, a že reziduum v každom póle je $-\frac{1}{\beta}$. Ak použijeme reziduovú vetu na výpočet integrálu po uzavretej krivke C obopínajúcej imaginárnu os (pozri obrázok 13), potom sumu cez fermiónové Matsubarove frekvencie možno počítať ako nasledovný krivkový integrál v komplexnej rovine:

$$F(x,y) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_l} \frac{1}{(i\omega_l + i\omega_n - y)(i\omega_l - x)} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{dz}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{(z + i\omega_n - y)(\omega - x)}$$

Ak teraz integračnú dráhu C doplníme o dva poloblúky v nekonečne (čím hodnotu integrálu nezmeníme, lebo integrand klesá aspoň ako z^{-2}), potom integrál po takto skonštruovanej čiare C' (pozri obrázok 13) možno opäť počítať pomocou reziduovej vety:

$$F(x,y) = \sum_{\text{res}} \frac{1}{(e^{\beta z} + 1)(z + i\omega_n - y)(z - x)} = \frac{f(x) - f(y)}{x - y + i\omega_n},$$

kde v poslednej rovnici sme uvážili, že póly integrandu sa nachádzali v bodoch z = x a $z = y - i\omega_n$; f(x) je Fermiho-Diracova distribučná funkcia. Pre susceptibilitu takto dostaneme

$$\overline{\chi}_0(\mathbf{q},\omega_n) = \frac{2}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\omega_n}$$



Obr. 13: Vľavo: uzavretá integračná dráha C obopínajúca imaginárnu os komplexnej roviny. Vpravo: integračná dráha C' s pólmi pri z = x a $z = y - i\omega_n$.

Funkcia odozvy interagujúceho systému

Susceptibilitu neinteragujúceho plynu $\overline{\chi}_0(\mathbf{q},\omega_n)$ pre $\mathbf{q} \neq 0$ alebo $\omega_n \neq 0$ popisuje diagram, ktorý sa obvykle nazýva bublinou, pozri obrázok 12. Do každého z dvoch koncových bodov bubliny vchádza jedna fermiónová čiara a jedna fermiónová čiara z neho vychádza, pričom rozdiely vstupujúcich a vystupujúcich hybností a energií sú \mathbf{q} a ω_n . Všeobecný diagram pre susceptibilitu $\overline{\chi}(\mathbf{q},\omega_n)$ si túto črtu ponechá, ale jeho vnútro bude obsahovať aj interakčné čiary, pozri obrázok 14.

Definujme teraz tzv. *ireducibilnú susceptibilitu* $\overline{\Pi}(\mathbf{q}, \omega_n)$, ktorá bude analógom vlastnej energie. Ireducibilnou susceptibilitou nazveme takú časť diagramu pre $\overline{\chi}(\mathbf{q}, \omega_n)$, ktorá sa nerozpadne na dve nespojené časti prerezaním jedinej interakčnej čiary. Aplikovaním Feynmanových pravidiel vo Fourie-



Obr. 14: Horný riadok: reorganizácia poruchového rozvoja pre susceptibilitu (dvojito šráfovaná bublina) pomocou ireducibilných susceptibilít (šráfované bubliny). Ireducibilná susceptibilita tu hrá podobnú úlohu ako vlastná energia v poruchovom rozvoji pre jednočasticovú Greenovu funkciu. Dolný riadok: poruchový rozvoj ireducibilnej susceptibility.

rovom obraze ľahko nahliadneme, že potom bude platiť (pozri obrázok 14):⁴⁹

$$\overline{\chi}(\mathbf{q},\omega_n) = \overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n) + \overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n) V_{\mathbf{q}}\overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n) + \overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n) V_{\mathbf{q}}\overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n) V_{\mathbf{q}}\overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n) + \dots$$

Podobne ako v prípade Dysonovej rovnice, nekonečný rozvoj pre susceptibilitu možno nahradiť jednoduchou algebraickou rovnicou $\overline{\chi}(\mathbf{q},\omega_n) = \overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n) + \overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n)V_{\mathbf{q}}\overline{\chi}(\mathbf{q},\omega_n)$ pre $\overline{\chi}(\mathbf{q},\omega_n)$, ktorú vieme triviálne riešiť:

$\overline{\chi}(\mathbf{q},\omega_n) =$	$\overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n)$
	$\overline{1-V_{\mathbf{q}}\overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n)}.$

Pripomíname, že tento výraz pre susceptibilitu je presný. Podobne ako v prípade jednofermiónovej Greenovej funkcie, aproximovaním ireducibilnej susceptibility možno konštruovať rôzne priblíženia pre susceptibilitu.

Teraz objasníme fyzikálny rozdiel medzi $\overline{\chi}(\mathbf{q},\omega)$ a $\overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega)$. Naše úvahy budú podobné zdôvodneniu príťažlivej interakcie v kapitole 3, ale iónové pozadie budeme považovať za inertné. Vo zvyšku odstavca budeme namiesto Matsubarových uvažovať o fyzikálnych, t.j. retardovaných, Greenových funkciách. Predpokladajme, že na náš systém zvonka naložíme malý potenciál $\delta\phi_{\mathbf{q}\omega}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-i\omega t}$. Indukovaná nábojová hustota je potom $\rho_{\mathbf{q}\omega}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-i\omega t}$, kde $\rho_{\mathbf{q}\omega} = e^2\chi(\mathbf{q},\omega)\delta\phi_{\mathbf{q}\omega}$. Indukovaná nábojová hustota generuje indukovaný potenciál $\phi_{\mathbf{q}\omega} = \frac{1}{\epsilon_0q^2}\rho_{\mathbf{q}\omega} = \frac{e^2}{\epsilon_0q^2}\chi(\mathbf{q},\omega)\delta\phi_{\mathbf{q}\omega}$, preto celkový potenciál vo vzorke je súčtom externého a indukovaného potenciálu,

$$\phi_{\mathbf{q}\omega}^{\text{tot}} = \delta\phi_{\mathbf{q}\omega} + \phi_{\mathbf{q}\omega} = \left[1 + V_{\mathbf{q}}\chi(\mathbf{q},\omega)\right]\delta\phi_{\mathbf{q}\omega}.$$

Všimnime si, že pritom platí $\Pi(\mathbf{q}, \omega)\phi_{\mathbf{q}\omega}^{\text{tot}} = \chi(\mathbf{q}, \omega)\delta\phi_{\mathbf{q}\omega}$. Preto indukovaný potenciál možno zapísať dvomi alternatívnymi spôsobmi:

$$\phi_{\mathbf{q}\omega} = V_{\mathbf{q}}\chi(\mathbf{q},\omega)\delta\phi_{\mathbf{q}\omega} = V_{\mathbf{q}}\Pi(\mathbf{q},\omega)\phi_{\mathbf{q}\omega}^{\text{tot}}$$

Susceptibilita $\chi(\mathbf{q},\omega)$ je teda odozvou na externý potenciál $\delta\phi_{\mathbf{q}\omega}$, kým ireducibilná susceptibilita $\Pi(\mathbf{q},\omega)$ je odozvou na celkový (tzv. tienený) potenciál $\phi_{\mathbf{q}\omega}^{\text{tot}}$. Obvykle sa okrem susceptibility definuje aj relatívna permitivita,⁵⁰ ktorá hovorí, koľkokrát je celkový potenciál menší než budiaci potenciál, t.j. je definovaná vzťahom $\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q},\omega)} = \frac{\phi_{\mathbf{q}\omega}^{\text{tot}}}{\delta\phi_{\mathbf{q}\omega}}$. Pre relatívnu permitivitu preto dostávame nasledovné ekvivalentné vyjadrenia:

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q},\omega)} = 1 + V_{\mathbf{q}}\chi(\mathbf{q},\omega), \qquad \epsilon(\mathbf{q},\omega) = 1 - V_{\mathbf{q}}\Pi(\mathbf{q},\omega).$$

Uvedené formálne výrazy pre relatívnu permitivitu sú presné. Obvykle však presný tvar susceptibilít $\chi(\mathbf{q},\omega)$ alebo $\Pi(\mathbf{q},\omega)$ nepoznáme a pri ich výpočte musíme použiť priblíženia.

Priblíženie náhodných fáz (RPA, random phase approximation)

V tomto priblížení aproximujeme ireducibilnú susceptibilitu susceptibilitou neinteragujúceho plynu, t.j.

⁴⁹Ireducibilná susceptibilita je tvorená uzavretou elektrónovou slučkou (s prípadnými ďalšími vnútornými vrcholmi). Faktor (-1) však do jej definície nezahŕňame. Preto rozvoj dvojčasticovej Greenovej funkcie by bol $\overline{G}_2 = (-\overline{\Pi}) + (-\overline{\Pi})(-V)(-\overline{\Pi}) + \ldots$ Keďže susceptibilita je $\overline{\chi} = -\overline{G}_2$, dostávame rozvoj z hlavného textu. Pripomíname ešte, že do definície $\overline{\Pi}$ zahŕňame faktor $\frac{1}{\beta V}$, ktorý Feynmanove pravidlá nepredpisujú. Preto interakčnej čiare priraďujeme faktor $-V_{\alpha}$.

 $^{^{-}V_{\mathbf{q}}.}$ $^{50}\mathrm{V}$ anglickej literatúre sa namiesto o relatívnej permitivite hovorí o dielektrickej funkcii.

berieme $\overline{\Pi}_{\text{RPA}}(\mathbf{q},\omega_n) = \overline{\chi}_0(\mathbf{q},\omega_n)$. Ide teda o najjednoduchšie z tých priblížení, ktoré berú do úvahy tienenie. Pre (retardovanú) dielektrickú funkciu dostávame

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q},\omega) = 1 + \alpha(\mathbf{q},\omega),$$

kde sme zaviedli polarizovateľnosť $\alpha(\mathbf{q}, \omega)$:

$$\alpha(\mathbf{q},\omega) = -V_{\mathbf{q}}\chi_0(\mathbf{q},\omega) = \frac{2e^2}{\epsilon_0 q^2} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega - i\gamma}.$$

Výpočet funkcie $\alpha(\mathbf{q}, \omega)$

Zámenou integračnej premennej $\mathbf{k} \to \mathbf{k} - \mathbf{q}$ v člene úmernom $f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ dostaneme

$$\begin{split} \alpha(\mathbf{q},\omega) &= \frac{2e^2}{\epsilon_0 q^2} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} f_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega - i\gamma} + \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + i\gamma} \right] \\ &= \frac{e^2}{2\pi^2 \epsilon_0 q^2} \int_0^{k_F} dk k^2 \int_{-1}^1 dt \left[\frac{1}{\frac{kq}{m}t + \frac{q^2}{2m} - \omega - i\gamma} + \frac{1}{-\frac{kq}{m}t + \frac{q^2}{2m} + \omega + i\gamma} \right], \end{split}$$

kde v druhom riadku sme integrovali vo sférických súradniciach a zaviedli sme $t = \cos \vartheta$, kde ϑ je uhol medzi k a q. Po zavedení bezrozmerných integračných premenných $x = k/k_F$ a z = tx dostaneme

$$\begin{aligned} \alpha(\mathbf{q},\omega) &= \frac{e^2 k_F^2 m}{2\pi^2 \epsilon_0 q^3} \int_0^1 dx x \int_{-x}^x dz \left[\frac{1}{z - \left(\frac{\omega + i\gamma}{v_F q} - \frac{q}{2k_F}\right)} - \frac{1}{z - \left(\frac{\omega + i\gamma}{v_F q} + \frac{q}{2k_F}\right)} \right] \\ &= \frac{e^2 k_F^2 m}{4\pi^2 \epsilon_0 q^3} \int_{-1}^1 dz \left[\frac{1 - z^2}{z - \left(\frac{\omega + i\gamma}{v_F q} - \frac{q}{2k_F}\right)} - \frac{1 - z^2}{z - \left(\frac{\omega + i\gamma}{v_F q} + \frac{q}{2k_F}\right)} \right], \end{aligned}$$

kde v poslednom riadku sme zmenili poradie integrovania:

$$\int_0^1 dxx \int_{-x}^x dz F(z) = \int_{-1}^1 dz F(z) \int_{|z|}^1 dxx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dz (1-z^2) F(z).$$

Dalej si všimneme, že pre a s malou kladnou imaginárnou časťou platí

$$\int_{-1}^{1} \frac{dz(1-z^2)}{z-a} = -2a + (a^2 - 1) \left[\ln \left| \frac{1+a}{1-a} \right| - i\pi G(a) \right],$$

kde G(a) = 1ak -1 < a < 1, ináčG(a) = 0. Ak ďalej využijeme vzťah
y $n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$ a $\omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}$, pre reálnu a imaginárnu časť polarizovateľnosti napokon dostávame tzv. Lindhardovu formulu pre reálnu časť polarizovateľnosti

$$\alpha'(\mathbf{q},\omega) = \frac{\omega_p^2}{v_s^2} \frac{k_F}{q^3} \left[\frac{q}{2k_F} + \frac{1}{4}(a_1^2 - 1)\ln\left|\frac{1 + a_1}{1 - a_1}\right| - \frac{1}{4}(a_2^2 - 1)\ln\left|\frac{1 + a_2}{1 - a_2}\right| \right]$$

a pre imaginárnu časť polarizovateľnosti

$$\alpha''(\mathbf{q},\omega) = -\frac{\pi}{4} \frac{\omega_p^2}{v_s^2} \frac{k_F}{q^3} \left[G(a_1)(a_1^2 - 1) - G(a_2)(a_2^2 - 1) \right].$$

Uvážili sme pritom, že $v_s^2 = v_F^2/3$, a zaviedli sme označeni
a $a_1 = \frac{\omega}{v_F q} - \frac{q}{2k_F}$ a $a_2 = \frac{\omega}{v_F q} + \frac{q}{2k_F}$. Teraz preskúmame niekoľko špeciálnych limitných prípadov Lindhardovej formuly:

(i) V statickej limite $\omega = 0$ máme $a_1 = -a_2$. Imaginárna časť je vtedy triviálne nulová a pre reálnu časť platí

$$\alpha'(\mathbf{q},0) = \frac{\omega_p^2}{v_s^2} \frac{k_F}{q^3} \left[\frac{q}{2k_F} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| \right]$$

V dlhovlnnej limite odtiaľto dostávame výsledok $\alpha'(\mathbf{q},0) \approx \frac{\omega_p^2}{v_s^2 q^2}$ v zhode s klasickou formulou pre polarizovateľnosť v kapitole 3. Jeho dôsledkom je odstránenie divergencie statickej coulombovskej interakcie V(q) pri $q \to 0$, tienená interakcia v dlhovlnnej limite je totiž $\frac{V(q)}{\epsilon(q,0)} = \frac{e^2}{\epsilon_0 k_s^2}$, kde $k_s^{-1} = \frac{v_s}{\omega_p}$ je tieniaca dĺžka. Všimnime si, že statická polarizovateľnosť $\alpha'(q,0)$ ako funkcia q má nekonecný sklon pri $q = 2k_F$. Dôsledkom tejto singularity sú napríklad Friedelove oscilácie tieniaceho náboja okolo bodovej prímesi.⁵¹

(ii) V dlhovlnnej limite $q \ll k_F$ a pre relatívne veľké frekvencie $\omega \gg v_F q$ je $a_1, a_2 \gg 1$, imaginárna časť polarizovateľnosti je opäť nulová a pre reálnu časť dostávame $\alpha'(0,\omega) = -\frac{\omega_p^2}{\omega^2}$, opäť v zhode s makroskopickým výpočtom z kapitoly 3.

 $^{^{51}}$ Vo Fourierovom rozvoji bodového náboja totiž vystupujú aj zložky s vlnovým vektorom $\approx 2k_F$, ktoré sú vďaka singularite funkcie $\alpha'(\mathbf{q}, 0)$ pri $q = 2k_F$ slabo tienené. Pozri napríklad NP1.

Energia coulombovského plynu sa zahrnutím tienenia

V jazyku diagramov možno tienenie popísať tak, že každú interakčnú čiaru nahradíme geometrickým radom s 0,1,2, atď. bublinami:

$$\frac{-1}{\beta \mathcal{V}} V_{\mathbf{q}} \to \frac{-1}{\beta \mathcal{V}} V_{\mathbf{q}} + \frac{-1}{\beta \mathcal{V}} V_{\mathbf{q}} \left[-\overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n) \right] \left[-V_{\mathbf{q}} \right] + \ldots = \frac{-1}{\beta \mathcal{V}} \frac{V_{\mathbf{q}}}{1 - V_{\mathbf{q}} \overline{\Pi}(\mathbf{q},\omega_n)} = \frac{-1}{\beta \mathcal{V}} \frac{V_{\mathbf{q}}}{\overline{\epsilon}(\mathbf{q},\omega_n)}$$

Týmto postupom nahradíme netienenú interakciu $V_{\mathbf{q}}$ tienenou interakciou $\frac{V_{\mathbf{q}}}{\epsilon(\mathbf{q},\omega_n)}$. Ľahko sa presvedčíme, že ak takúto zámenu urobíme v našom poruchovom výpočte vlastnej energie elektrónu, pre Fermiho rýchlosť dostaneme konečný výsledok v súlade s experimentom.

Pri výpočte energie základného stavu použijeme tzv. techniku integrácie cez väzobnú konštantu. Namiesto hamiltoniánu $H = H_0 + V$ budeme skúmať celú triedu hamiltoniánov $H_{\lambda} = H_0 + \lambda V.^{52}$ Pre $\lambda = 0$ máme $H_{\lambda} = H_0$, t.j. neinteragujúci systém, kým pre $\lambda = 1$ dostávame hamiltonián, ktorý chceme študovať. Teda zapínanie interakčného člena možno popísať zmenou prarametra λ z hodnoty 0 na 1. Nech základným stavom hamiltoniánu H_{λ} je $|\psi_{\lambda}\rangle$ a nech energia tohto stavu je E_{λ} , t.j. nech platí $H_{\lambda}|\psi_{\lambda}\rangle = E_{\lambda}|\psi_{\lambda}\rangle$. Podľa Feynmanovej-Hellmannovej vety⁵³ platí

$$\frac{\partial E_{\lambda}}{\partial \lambda} = \langle \psi_{\lambda} | V | \psi_{\lambda} \rangle \equiv \langle V \rangle_{\lambda}$$

Ak energiu plne interagujúceho systému s $\lambda = 1$ označíme E, potom integráciou tejto rovnice dostávame $E = E_0 + E_{\text{int}}$, kde $E_{\text{int}} = \int_0^1 d\lambda \langle V \rangle_{\lambda}$. Teda energia E je súčtom (kinetickej) energie neinteragujúceho systému E_0 a energie E_{int} , do ktorej vstupuje iba stredná hodnota interakčnej energie $\langle V \rangle_{\lambda}$. Integráciou cez väzobnú konštantu sme sa teda vyhli výpočtu kinetickej energie v stave $|\psi_{\lambda}\rangle$. Pre $\langle V \rangle_{\lambda}$ platí

$$\langle V \rangle_{\lambda} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^{3}\mathbf{r} \int d^{3}\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}')\psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \rangle_{\lambda}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^{3}\mathbf{r} \int d^{3}\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})\psi_{\sigma}(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle_{\lambda} - \frac{n}{2} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}$$

$$= \frac{1}{2\beta} \int d1 \int d2V(1-2)\mathcal{G}_{\lambda}(1,2;1_{+},2_{+}) - \frac{n}{2} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}},$$

$$(30)$$

kde *n* je koncentrácia elektrónov.⁵⁴ Teda na výpočet $\langle V \rangle_{\lambda}$ potrebujeme poznať dvojčasticovú Greenovu funkciu $\mathcal{G}_{\lambda}(1,2;1_+,2_+)$ systému s hamiltoniánom H_{λ} . Ak v prvom člene na pravej strane výrazu (30) prejdeme k Fourierovým komponentám, dostaneme

$$\langle V \rangle_{\lambda} = -\frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q},\omega_n} V_{-\mathbf{q}} \overline{\chi}_{\lambda}(\mathbf{q},\omega_n) - \frac{n}{2} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}},$$

kde sme zároveň využili vzťah medzi $\mathcal{G}_{\lambda}(1,2;1_+,2_+)$ a susceptibilitou. V priblížení RPA preto platí

$$\langle V \rangle_{\lambda} = -\frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q},\omega_n} \frac{V_{\mathbf{q}} \overline{\chi}_0(\mathbf{q},\omega_n)}{1 - \lambda V_{\mathbf{q}} \overline{\chi}_0(\mathbf{q},\omega_n)} - \frac{n}{2} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}.$$

$$\frac{\partial F_{\lambda}}{\partial \lambda} = \frac{1}{Z_{\lambda}} \text{Tr} V e^{-\beta H_{\lambda}} = \langle V \rangle_{\lambda}; \qquad F = F_0 + \int_0^1 d\lambda \langle V \rangle_{\lambda}$$

⁵³Pozri napr. I.29.

 54 Stojí za zmienku, že v kapitole 5 sme pri reprezentovaní interakčnej energie pomocou dvojčasticovej Greenovej funkcie konštantný člen $-\frac{n}{2}\sum_{\mathbf{q}}V_{\mathbf{q}}$ ignorovali. Pracovali sme teda s (nefyzikálnym) hamiltoniánom obsahujúcim vlastnú interakciu elektrónov. Avšak Greenove funkcie (t.j. korelácie v systéme) zahrnutím vlastných interakcií samozrejme neboli ovplyvnené.

 $^{^{52}}$ V tomto odstavci pracujeme pri nulovej teplote a pri fixnej hustote elektrónov, ktorá zodpovedá Fermiho vlnovému vektoru k_F . Tým je jednoznačne zadaná distribučná funkcia $f_{\mathbf{k}}$ pre neinteragujúce elektróny. Polarizovateľnosť $\alpha(\mathbf{q},\omega)$ pritom nezávisí od hodnoty chemického potenciálu, pretože do nej vstupujú iba rozdiely jednočasticových energií $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}$. Preto pre $\alpha(\mathbf{q},\omega)$ môžeme použiť výsledky grandkánonickej teórie. Metódu integrácie cez väzobnú konštantu však možno aplikovať aj v kánonických a grandkánonických súboroch: hamiltoniánu H_{λ} prislúcha štatistická suma $Z_{\lambda} = \text{Tr}e^{-\beta H_{\lambda}}$, matica hustoty $\rho_{\lambda} = \frac{1}{Z_{\lambda}}e^{-\beta H_{\lambda}}$ a voľná energia $F_{\lambda} = -T \ln Z_{\lambda}$. Keďže $\partial H_{\lambda}/\partial \lambda = V$, pre voľnú energiu F_{λ} platia nasledovné vzťahy:

Všimnime si, že v tomto priblížení závisí $\overline{\chi}_{\lambda}(\mathbf{q}, \omega_n)$ od λ iba vďaka menovateľu v RPA formule, keďže za ireducibilnú susceptibilitu berieme susceptibilitu neinteragujúceho plynu. Integráciu cez λ teda možno explicitne vykonať a dostávame

$$E_{\rm int} = \int_0^1 d\lambda \langle V \rangle_\lambda = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \ln\left[1 - V_{\mathbf{q}} \overline{\chi}_0(\mathbf{q}, \omega_n)\right] - n V_{\mathbf{q}} \right\}.$$

V limite T = 0 sú Matsubarove frekvencie spojito rozložené pozdĺž imaginárnej osi a sumu cez ne môžeme nahradiť integrálom, $\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} = \int \frac{d\omega}{2\pi}$. Keďže integrand závisí iba od veľkosti vektora **q**, možno ďalej písať $\sum_{\mathbf{q}} = \frac{\mathcal{V}}{2\pi^2} \int_0^\infty dq q^2$. Tak dostávame pre interakčnú energiu na jeden elektrón v priblížení RPA výraz

$$\frac{E_{\rm int}}{N} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dq q^2 \left\{ \frac{1}{n} \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \ln\left[\overline{\epsilon}_{\rm RPA}(q,\omega)\right] - V_q \right\},\,$$

kde $\overline{\epsilon}_{\text{RPA}}(q,\omega)$ je Matsubarova relatívna permitivita.

Pri analýze interakčného príspevku v priblížení RPA si najprv všimnime, že $\bar{\epsilon}_{\text{RPA}}(\mathbf{q},\omega)$ možno zapísať pomocou bezrozmerných premenných $x = \frac{q}{k_F}$ a $\nu = \frac{\omega}{\varepsilon_F}$ v tvare $\bar{\epsilon}_{\text{RPA}}(q,\omega) = 1 + AF\left(x,\frac{\nu}{x}\right)$, kde sme zaviedli bezrozmerný parameter $A = \frac{\omega_p^2}{\varepsilon_F^2} \propto r_s$. Ak vo výraze pre interakčnú energiu E_{int} prejdeme k bezrozmerným premenným x, ν , dostaneme

$$\frac{E_{\text{int}}}{N} = \frac{3\varepsilon_F}{8} \int_0^\infty dx x^2 \left\{ \int_{-\infty}^\infty \frac{d\nu}{\pi} \ln\left[1 + AF\left(x, \frac{\nu}{x}\right)\right] - \frac{A}{x^2} \right\}.$$

Ak teraz uvážime, že $\varepsilon_F \propto r_s^{-2}$ a $A \propto r_s$, môžeme počítať rozvoj interakčnej energie podľa mocnín r_s .

Dá sa ukázať, že pre energiu základného stavu coulombovského plynu platí rozvoj⁵⁵

$$\frac{E}{N\varepsilon_B} = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + 0.0622\ln r_s - 0.093 + 0.018r_s\ln r_s + O(r_s).$$

Prvý člen rozvoja zodpovedá kinetickej energii E_0 . Druhý a tretí člen pochádzajú z výrazu pre interakčnú energiu v RPA priblížení. Štvrtý a piaty člen obsahujú príspevky aj od tu nediskutovaných diagramov. Stojí za zmienku, že druhý (tzv. výmenný) člen je prítomný aj v priblížení Hartreeho-Focka, t.j. prvé dva členy popisujú energiu nekorelovaných elektrónov. Tretí a vyššie členy teda popisujú korelácie v coulombovskom plyne a nahrádzajú formálne nekonečný príspevok 2. rádu poruchovej energie. V oblasti platnosti teórie, t.j. pre $r_s \rightarrow 0$, je príspevok týchto (tzv. korelačných) členov malý.

Záverečné poznámky

(i) Pre reálne kovy podľa Rickayzena leží parameter r_s v intervale 1.8 < r_s < 5.6. Keďže v tejto kapitole popísaná poruchová teória je oprávnená iba v limite $r_s \ll 1$, nemožno ju v reálnych kovoch považovať za kvantitatívne správnu. Najspoľahlivejšie informácie o modeli želé vo fyzikálne relevantnej oblasti r_s máme z numerických simulácií.

(ii) Tu prezentovaná teória nemôže byť ani kvalitatívne správna v limite veľkých r_s (t.j. riedkych plynov). V tejto limite totiž očakávame, že elektrónový plyn vytvorí tzv. Wignerov kryštál (pozri II.7).

$$\frac{E}{E_0} = 1 - 0.41r_s + 0.028r_s^2 \ln r_s - 0.042r_s^2 + 0.0081r_s^3 \ln r_s + O(r_s^3),$$

kde E_0 je energia neinteragujúceho plynu. V teórii coulombovského plynu hrá parameter r_s podobnú úlohu ako konštanta jemnej štruktúry $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$, pretože ho možno vyjadriť v tvare $r_s = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar v_F}$. Teda rolu rýchlosti svetla c v coulombovskom plyne hrá Fermiho rýchlosť v_F .

Všimnime si, že funkcia $E(r_s)$ nie je analytická v okolí bodu $r_s = 0$. Ponúkame nasledovné kvalitívne vysvetlenie tejto skutočnosti. Ak by funkcia $E(r_s)$ mala byť analytickou v okolí $r_s = 0$, potom by správanie elektrónového plynu v hypotetickom prípade $r_s < 0$ muselo byť kvalitatívne rovnaké ako vo fyzikálnom prípade $r_s > 0$, čo však neočakávame, lebo pre $r_s < 0$ by sa elektróny navzájom priťahovali. Pozri aj Negele-Orland, kapitola 2.1.

⁵⁵Pozri napr. Sólyom, 3.diel. Energiu coulombovského plynu možno ekvivalentne zapísať v tvare

Podľa numerických simulácií je Wignerov kryštál stabilný iba pre $r_s > 106$, teda pre extrémne riedke plyny. Elektróny vytvárajú mriežku typu bcc s energiou

$$\frac{E}{N\varepsilon_B} = -\frac{1.79186}{r_s} + \frac{2.6758}{r_s^{3/2}} - \frac{1.1054}{r_s^2}.$$

Prvé dva členy sú v prekvapivo dobrej zhode s analytickými odhadmi potenciálnej energie $-\frac{1.8}{r_s}$ a energie nulových kmitov $\frac{3}{r_s^{3/2}}$ (pozri II.7). Posledný člen možno interpretovať ako príspevok anharmonických korekcií k nulovým kmitom. Stojí za zmienku, že v každom bode Wignerovho kryštálu je prítomný voľný spin, ktorý môže obsadzovať dva stavy. Táto mohutná degenerácia je odstránená podobne ako v Hubbardovom modeli (pozri II.7 a kapitolu ??) kvantovými fluktuáciami, ktoré stabilizujú antiferomagnetický stav.

(iii) V oblasti 50 < r_s < 106 má podľa numerických simulácií feromagnetická kovová fáza nižšiu energiu ako paramagnetický kov (ktorý je stabilný pre $r_s < 50$), aj ako Wignerov kryštál. Prechod paramagnet-feromagnet je pravdepodobne druhého druhu, kým prechod feromagnet-kryštál je prvého druhu.

Cvičenia

- 1. Výsledok pre energiu jednočasticových excitácií porovnajte s predpoveďou diagramatickej poruchovej teórie 1. rádu.
- 2. Preskúmajte oblasť v rovine (q, ω) , v ktorej je $\alpha''(\mathbf{q}, \omega) \neq 0$.
- 3. Vypočítajte polarizovateľnosť $\alpha({\bf q},\omega)$ pre jednorozmerný plyn.
- 4. Ukážte, že pre distribučnú funkciu párov elektrónov pri teploteT=0 platí presný výsledok

$$g(\mathbf{R}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \left(\frac{1}{\pi n} \int_0^\infty d\omega \chi''(\mathbf{q},\omega) + 1\right).$$

Preskúmajte funkciu $g(\mathbf{R})$ v priblížení RPA. Návod: použite (8), vzťah medzi statickým a dynamickým štruktúrnym faktorom a fluktuačne-disipačnú vetu.

5. Nájdite prvé dva členy poruchového rozvoja energie podľa mocnín r_s pre plne polarizovaný feromagnetický stav modelu želé. Ktorý člen stabilizuje magnetické usporiadanie?

7 Zviazaný systém elektrónov a fonónov

V tejto prednáške preskúmame pomocou diagramatickej poruchovej teórie interakciu medzi elektrónmi a fonónmi. Pracujeme v jednopásovom priblížení, t.j. obmedzujeme sa na jeden blochovský pás. Naviac zanedbávame anharmonické javy vo fonónovom systéme. Literatúra: II.8, III.8, Rickayzen, Schrieffer, Scalapino v knihe Parksa, AGD, Marsiglio & Carbotte v knihe Bennemann & Ketterson.

Zviazaný systém elektrónov a fonónov

Prístup z "prvých princípov" k tejto téme by bol nasledovný. Skúmajme najprv ideálne periodické rozmiestnenie jadier a vyriešme príslušný čisto elektrónový problém. Výsledkom bude okrem iného znalosť rozloženia hustoty elektrónov $\rho(\mathbf{r})$ v základnom stave. Teraz pripusťme kmity jadier okolo ideálnych polôh, avšak bez interakcie jadier s elektrónmi, t.j. pri fixovanej hustote $\rho(\mathbf{r})$. Napríklad pre pozdĺžne akustické kmity jadier takto ľahko zistíme, že ich frekvencia v dlhovlnnej limite neklesá k nule, ale blíži sa k iónovej plazmovej frekvencii zavedenej v prednáške 3. Týmto spôsobom skonštruujeme systém nezávislých elektrónov a fonónov s hamiltoniánom

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}s} \hbar \omega_{\mathbf{q}s} a^{\dagger}_{\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}s},$$

kde s je index fonónovej vetvy. Teraz zoberme do úvahy, že malé kmity jadier okolo rovnovážnych polôh modifikujú potenciál, v ktorom sa hýbu elektróny. Postupom opísaným v II.8 a III.8 dostaneme hamiltonián pre interakciu medzi elektrónmi a fonónmi

$$H_{\rm int} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{q}s} g^s_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \left(a_{\mathbf{q}s} + a^{\dagger}_{-\mathbf{q}s} \right) + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \sum_{\mathbf{k}\sigma'} c^{\dagger}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma'} c_{-\mathbf{k}\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma}.$$
(31)

Prvý člen popisuje rozptyly elektrónu zo stavu **k** do stavu **k'** pri emisii fonónu s kvantovými číslami $-\mathbf{q}s$ alebo absorbcii fonónu $\mathbf{q}s$. V dôsledku (diskrétnej) translačnej invariantnosti sa pritom zachováva tzv. kvázihybnosť, t.j. platí $\mathbf{k'} = \mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{K}$, kde **K** je ľubovoľný vektor recipročnej mriežky. Druhý člen popisuje coulombovské interakcie medzi elektrónmi.

Ak budeme predpokladať, že $U(\mathbf{r})$ je energia interakcie medzi elektrónom a jadrom vo vzájomnej vzdialenosti \mathbf{r} , pre maticový element elektrón-fonónovej interakcie $g^s_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ platí (pozri II.8)

$$g^{s}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = N \sqrt{\frac{\hbar \mathcal{V}_{0}}{2M\omega_{\mathbf{q}s}}} \int d^{3}\mathbf{r} \; \psi^{*}_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \left(-\mathbf{e}_{\mathbf{q}s} \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}\right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

kde sme pre jednoduchosť predpokladali existenciu iba jedného typu jadier a oproti II.8 sme zahrnuli aj faktor $\sqrt{\mathcal{V}_0}$, kde \mathcal{V}_0 je objem elementárnej bunky Bravaisovej mriežky. S tým súvisí aj zámena normalizačného faktora elektrón-fonónovej interakcie $\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}$ (kde \mathcal{N} je počet buniek v kryštále) za faktor $\frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}$ (kde \mathcal{V} je objem kryštálu).

Ako sme už povedali, v teórii "z prvých princípov" by sme mali za fonónové frekvencie brať spomínané nefyzikálne frekvencie $\omega_{\mathbf{qs}}$. Podobne, za $U(\mathbf{r})$ by sme mali brať coulombovské interakcie medzi elektrónmi a jadrami a za $V_{\mathbf{q}}$ by sme mali brať netienené elektrón-elektrónové interakcie. Dá sa však ukázať,⁵⁶ že ak zahrnieme tienenie, potom môžeme pracovať s fyzikálnymi frekvenciami fonónov a tienenými (t.j. konečnými v dlhovlnnej limite) interakciami $U(\mathbf{r})$ a $V_{\mathbf{q}}$. V tejto prednáške, podobne ako v II.8 a III.8, budeme študovať model, v ktorom je už tienenie započítané. V zjednodušených úvahách budeme používať rádové odhady pre akustické fonóny v dlhovlnnej limite

$$\omega_{\mathbf{q}} \approx vq, \qquad |g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}| \approx |g(q)| \approx U \sqrt{\frac{\hbar q \mathcal{V}_0}{M v}},$$

kde v je rýchlosť zvuku a U je tienená potenciálna energia elektrónu v poli atómu.

Greenova funkcia pre fonóny

Matsubarovu Greenovu funkciu fonónov definujeme pomocou nasledovného vzťahu (odteraz berieme $\hbar = 1$):

$$D^{s}(\mathbf{q},\tau) = \langle T(a_{\mathbf{q}s}(\tau) + a_{-\mathbf{q}s}^{\dagger}(\tau))(a_{-\mathbf{q}s} + a_{\mathbf{q}s}^{\dagger}) \rangle.$$

Vo zvyšku tohto odstavca vypočítame Greenovu funkciu $D_0^s(\mathbf{q}, \tau)$ pre systém neinteragujúcich fonónov s hamiltoniánom \mathcal{H}_0 , kedy môžeme písať $D_0^s(\mathbf{q}, \tau) = \langle Ta_{\mathbf{q}s}(\tau)a_{\mathbf{q}s}^{\dagger} \rangle + \langle Ta_{-\mathbf{q}s}^{\dagger}(\tau)a_{-\mathbf{q}s} \rangle$. Pre časový vývoj anihilačných operátorov dostaneme diferenciálnu rovnicu

$$\frac{d}{d\tau}a_{\mathbf{q}s}(\tau) = e^{\mathcal{H}_0\tau}[\mathcal{H}_0, a_{\mathbf{q}s}]e^{-\mathcal{H}_0\tau} = -\omega_{\mathbf{q}s}a_{\mathbf{q}s}(\tau)$$

s riešením $a_{\mathbf{q}s}(\tau) = e^{-\omega_{\mathbf{q}s}\tau}a_{\mathbf{q}s}$ Ak využijeme symetriu $\omega_{-\mathbf{q}s} = \omega_{\mathbf{q}s}$,⁵⁷ pre časový vývoj kreačných operátorov analogicky dostaneme $a^{\dagger}_{-\mathbf{q}s}(\tau) = e^{\omega_{\mathbf{q}s}\tau}a^{\dagger}_{-\mathbf{q}s}$. Po dosadení týchto výsledkov do vzťahu pre Greenovu funkciu napokon dostávame

$$D_0^s(\mathbf{q},\tau) = \left[e^{-\omega_{\mathbf{q}s}\tau} \langle a_{\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}s}^{\dagger} \rangle + e^{\omega_{\mathbf{q}s}\tau} \langle a_{-\mathbf{q}s}^{\dagger} a_{-\mathbf{q}s} \rangle\right] \theta(\tau) + \left[e^{-\omega_{\mathbf{q}s}\tau} \langle a_{\mathbf{q}s}^{\dagger} a_{\mathbf{q}s} \rangle + e^{\omega_{\mathbf{q}s}\tau} \langle a_{-\mathbf{q}s} a_{-\mathbf{q}s}^{\dagger} \rangle\right] \theta(-\tau).$$

Ak ďalej využijeme, že v systéme voľných fonónov platí $\langle a_{\mathbf{q}s}^{\dagger}a_{\mathbf{q}s}\rangle = n_{\mathbf{q}s}$ a $\langle a_{\mathbf{q}s}a_{\mathbf{q}s}^{\dagger}\rangle = n_{\mathbf{q}s} + 1$, kde $n_{\mathbf{q}s}$ je Boseho-Einsteinovo rozdelenie, potom pre Matsubarove Fourierove komponenty (s bozónovou frekvenciou ω_n) Greenovej funkcie dostávame

$$\overline{D}_0^s(\mathbf{q},\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} D_0^s(\mathbf{q},\tau) = (n_{\mathbf{q}s}+1) \frac{\left[e^{(i\omega_n-\omega_{\mathbf{q}s})\tau}\right]_0^\beta}{i\omega_n-\omega_{\mathbf{q}s}} + n_{\mathbf{q}s} \frac{\left[e^{(i\omega_n+\omega_{\mathbf{q}s})\tau}\right]_0^\beta}{i\omega_n+\omega_{\mathbf{q}s}}.$$

⁵⁶Pozri napríklad Rickayzenovu knihu.

⁵⁷Odvodenie vo všeobecnom prípade možno nájsť napríklad v mojich textoch "Elektróny a fonóny v tuhých látkach" v prednáške Klasická teória kmitov mriežky.

Po jednoduchej úprave odtiaľto napokon dostávame konečný výsledok pre Greenovu funkciu systému neinteragujúcich fonónov

$$\overline{D}_0^s(\mathbf{q},\omega_n) = \frac{2\omega_{\mathbf{q}s}}{\omega_n^2 + \omega_{\mathbf{q}s}^2}.$$

Fonónové Greenove funkcie $\overline{D}^{s}(\mathbf{q}, \omega_{n})$ možno opäť reprezentovať pomocou spektrálnej funkcie $A^{s}(\mathbf{q}, x)$:

$$\overline{D}^{s}(\mathbf{q},\omega_{n}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A^{s}(\mathbf{q},x)}{i\omega_{n}-x}.$$

Ľahko nahliadneme, že pre voľné fonóny platí $A_0^s(\mathbf{q}, x) = -\delta(x - \omega_{\mathbf{q}s}) + \delta(x + \omega_{\mathbf{q}s}).$

Feynmanove pravidlá pre zviazaný systém elektrónov a fonónov⁵⁸

Postupom podobným ako v kapitole 5 možno ukázať, že pri výpočte Greenových funkcií interagujúceho systému sa môžeme obmedziť na štúdium topologicky neekvivalentných súvislých diagramov. Rozdielom pri kreslení diagramov je, že okrem elektrónových a coulombovských čiar teraz existujú aj fonónové čiary, ktoré budeme značiť vlnovkou. Existuje aj nový typ vrcholov: objavia sa totiž vnútorné vrcholy, do ktorých jedna elektrónová čiara vstupuje a jedna vystupuje, pričom do vrcholu zároveň vstupuje alebo z neho vystupuje aj fonónová čiara. V translačne invariantných systémoch s hamiltoniánom nezávislým od času pritom možno elektrónovým, fonónovým a coulombovským čiaram opäť priradiť štvorhybnosti, pričom vo vnútorných vrcholoch platia zákony zachovania.⁵⁹ Feynmanove pravidlá pre priradenie čísel k diagramom sú nasledovné:

1. čiaram v diagrame priraď štvorhybnosti v súlade so zákonmi zachovania vo vnútorných vrcholoch; sumuj cez voľné štvorhybnosti a fonónové vetvy

- 2. (tienenej) coulombovskej interačnej čiare so štvorhybnosťou $\mathbf{q}\omega_n$ priraď $-\frac{1}{\beta \mathcal{V}}V(\mathbf{q},\omega_n) = -\frac{1}{\beta \mathcal{V}}\frac{V_{\mathbf{q}}}{\epsilon(\mathbf{q},\omega_n)}$
- 3. fonónovej čiare pre vetvu s so štvorhybnosťou $\mathbf{q}\omega_n$ priraď $\frac{1}{\beta \mathcal{V}}\overline{D}_0^s(\mathbf{q},\omega_n)$
- 4. elektrónovej čiare so štvorhybnosťou $\mathbf{k}\omega_l$ priraď Greenovu funkciu $\overline{G}_0(\mathbf{k},\omega_l)$
- 5. coulombovskému vrcholu priraď číslo 1

6. elektrón-fonónovému vrcholu pre fonónovú vetvu s s vchádzajúcou elektrónovou hybnosťou k a vychádzajúcou hybnosťou k' priraď $g^s_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$

7. uzavretej elektrónovej slučke priraď faktor (-2)

Opravy k vrcholu

Skúmajme rozptyl elektrónu na fonóne **q**s. V najnižšom ráde poruchovej teórie je takýto proces popísaný diagramom s jediným vrcholom s amplitúdou $g^s_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$. Takýto proces zodpovedá rozptylu holého elektrónu. V procese rozptylu by však elektrón mohol najprv emitovať virtuálny fonón, potom sa rozptýliť na fonóne **q**s, a nakoniec absorbovať virtuálny fonón. Zodpovedajúci Feynmanov diagram je zobrazený na obrázku 15.



Obr. 15: Poruchový rozvoj vrcholovej funkcie $\Gamma^s_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\omega,\omega+z)$ pre elektrón-fonónový rozptyl.

Po zohľadnení všetkých korekcií k vrcholu dostávame tzv. vrcholovú funkciu $\Gamma_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{s}(\omega,\omega+z)$ pre rozptyl na fonóne $\mathbf{q}s$ s energiou z, ktorá vo všeobecnosti závisí od štvorhybností nalietavajúceho a rozptýleného elektrónu. Túto funkciu zakresľujeme vyplneným trojuholníkom, pozri obrázok 15.

 $^{^{58}\}mathrm{V}$ tom
to odstavci prezentujeme iba výsledky pre Feynmanove diagramy. Odvodenie možno nájsť napr. v
 AGD.

⁵⁹V mriežkových modeloch namiesto zachovania hybnosti dostávame v každom vnútornom vrchole zachovanie kvázihybnosti, t.j. ide o zachovanie hybnosti modulo ľubovoľný vektor recipročnej mriežky.



Obr. 16: Dysonova rovnica pre elektrónový propagátor.

Ľahko sa presvedčíme, že pomocou vrcholovej funkcie možno Dysonovu rovnicu pre elektrón nakresliť ako na obrázku 16, v ktorom dvojitá plná čiara zodpovedá presnej elektrónej Greenovej funkcii $\overline{G}(\mathbf{k},\omega)$ interagujúceho systému a dvojitá vlnovka zodpovedá alebo tienenej coulombovskej interakcii, alebo presnej fonónovej Greenovej funkcii $\overline{D}^{s}(\mathbf{q},z)$ interagujúceho systému. Tomuto diagramu zodpovedá presná rovnica $\overline{G}(\mathbf{k},\omega) = \overline{G}_{0}(\mathbf{k},\omega) + \overline{G}_{0}(\mathbf{k},\omega)\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega)\overline{G}(\mathbf{k},\omega)$ s riešením

$$\overline{G}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{i\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega)}$$

Pre vlastnú energiu pritom platí $\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'\omega'} U(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega,\omega') \overline{G}(\mathbf{k}',\omega')$, kde

$$U(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega,\omega') = -V(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\omega-\omega')\Gamma_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\omega',\omega) + \sum_{s} g^{s}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\Gamma^{s}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\omega',\omega)\overline{D}^{s}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\omega-\omega')$$

a $\Gamma_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\omega',\omega)$ je vrcholová funkcia pre coulombovské interakcie.

Teda ak poznáme vrcholovú funkciu $\Gamma^s_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\omega,\omega')$ a fonónovú Greenovu funkciu $\overline{D}^s(\mathbf{q},z)$, potom vlastnú energiu elektrónov možno určiť riešením nasledovnej integrálnej rovnice:

$$\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'\omega'} \frac{U(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega,\omega')}{i\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \overline{\Sigma}(\mathbf{k}',\omega')}.$$
(32)

Rovnica (32) platí pre akékoľvek systémy, v ktorých jediným rozptylovým procesom je zrážka elektrónu s bozónovou excitáciou.⁶⁰ Okrem rozptylu na fonónoch sa v tomto formalizme často študuje napríklad rozptyl na magnónoch, atď.

Migdalova "veta"

Príspevok prvej korekcie k vrcholu je podľa obr. 15 a Feynmanových pravidiel daný výrazom

$$\Gamma_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(1)}(\omega,\omega+z) = \frac{g(q)}{\beta\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'\omega'} |g(\mathbf{k}-\mathbf{k}')|^2 \frac{2\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}}{\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^2 + (\omega-\omega')^2} \frac{1}{i\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}'}} \frac{1}{i(\omega'+z) - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}}$$

Pre jednoduchosť sme sa obmedzili na príspevok jediného fonónového módu a maticový element $g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ sme aproximovali funkciou prenesenej hybnosti g(q). Predpokladajme naviac, že Fermiho plocha je guľová a že stavy \mathbf{k} a $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ sa nachádzajú v jej tesnej blízkosti.

Teraz si všimnime, že ak sa elektrón s hybnosťou \mathbf{k} v blízkosti Fermiho plochy rozptýli na fonóne, potom vďaka nerovnosti $\hbar\omega_D \ll \varepsilon_F$ medzi typickou energiou fonónov $\hbar\omega_D$ a Fermiho energiou elektrónov ε_F musí aj rozptýlený elektrón s hybnosťou \mathbf{k}' ležať v blízkosti Fermiho plochy.⁶¹ Sumu cez \mathbf{k}' ďalej štandardným spôsobom nahraď me integrálom cez energie a priestorový uhol:

$$\frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{k}'} = N(0) \int d\varepsilon' \int \frac{d\Omega'}{4\pi}.$$
(33)

Uhol medzi \mathbf{k}' a \mathbf{k} pritom označme θ , pozri obrázok 17. Hustotu stavov sme aproximovali jej hodnotou na Fermiho ploche, lebo k integrálu prispievajú len energie ε' v blízkosti Fermi plochy. Z toho istého dôvodu bude veľkosť vektora $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ závisieť iba od uhla θ a nie od ε' : $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \approx 2k_F \sin(\theta/2)$.

 $^{^{60}}$ V princípe možno uvažovať aj o iných rozp
tylových procesoch: ak pri skúmaní interakcie medzi jadrami a elektrón
mi (pozri II.8) uvážime rozvoj potenciálnej energie elektrón
ov do druhého rádu podľa výchylky jadier z rovnovážnych polôh, dostaneme aj elementárne procesy, kedy sa elektróny rozp
tyľujú za súčasnej účasti dvoch fonónov.

⁶¹Fonónový propagátor je totiž veľký iba pre $\omega' \sim \omega_D$ a elektrónový propagátor potom vyžaduje $\varepsilon_{\mathbf{k}'} \sim \omega' \ll \varepsilon_F$.



Obr. 17: Vľavo: pri rozptyle zo stavu \mathbf{k} v blízkosti Fermiho plochy do stavu \mathbf{k}' v blízkosti Fermiho plochy možno dĺžku vektora $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ aproximovať výrazom $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \approx 2k_F \sin(\theta/2)$. Vpravo: príklad vrcholových korekcií, ktoré pri teplotách blízkych ku kritickej teplote supravodivého prechodu nie sú malé.

Výraz pre $\Gamma^{(1)}_{{\bf k},{\bf k}+{\bf q}}(\omega,\omega+z)$ preto môžeme zjednodušiť nasledovne:

$$\Gamma^{(1)}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\omega,\omega+z) = \frac{g(q)}{\beta} \sum_{\omega'} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} N(0) |g(\theta)|^2 \frac{2\omega_{\theta}}{\omega_{\theta}^2 + (\omega-\omega')^2} \int \frac{d\varepsilon'}{(\varepsilon'-i\omega') \left[\varepsilon'+\mathbf{v}'\cdot\mathbf{q}+\frac{q^2}{2m}-i(\omega'+z)\right]} d\varepsilon'$$

kde \mathbf{v}' je grupová rýchlosť elektrónu s hybnosťou \mathbf{k}' . Integrál cez ε' možno doplniť v komplexnej rovine poloblúkom v nekonečne v hornej alebo dolnej polrovine a počítať ho pomocou reziduovej vety. Ľahko nahliadneme, že nenulový príspevok dostaneme, iba ak póly $i\omega'$ a $i\omega' + iz$ ležia v opačných polrovinách. Ak zvolíme kladnú fonónovú Matsubarovu frekvenciu z > 0, znamená to, že nenulové príspevky dostaneme iba od frekvencií ω' ležiacich v intervale $-z < \omega' < 0$. V takom prípade integrál cez ε' dáva $\frac{2\pi}{z+i(\mathbf{v}'\cdot\mathbf{q}+q^2/(2m))}$.

V ďalšom výklade sa obmedzíme na prípad nulovej teploty, kedy $\frac{1}{\beta} \sum_{\omega'} = \int \frac{d\omega'}{2\pi}$. Ak zavedieme väzbovú konštantu $\lambda = 2N(0) \frac{|g(\theta)|^2}{\omega_{\theta}}$ podobne ako v II.8,⁶² pre prvú korekciu k vrcholu dostaneme

$$\frac{\Gamma_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(1)}(\omega,\omega+z)}{g(q)} = \lambda \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \frac{1}{z+i\left(\mathbf{v}'\cdot\mathbf{q}+\frac{q^2}{2m}\right)} \int_{-z}^{0} d\omega' \frac{\omega_{\theta}^2}{\omega_{\theta}^2+(\omega-\omega')^2}.$$

Absolútnu hodnotu opravy k vrcholu $\Gamma^{(1)}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\omega,\omega+z)$ môžeme zhora ohraničiť nasledovne:

$$\left|\frac{\Gamma_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(1)}(\omega,\omega+z)}{g(q)}\right| \leq \lambda \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \frac{z}{\left|z+i\left(\mathbf{v}'\cdot\mathbf{q}+\frac{q^2}{2m}\right)\right|} = \lambda \frac{z}{2v_F q} \int_{-1}^{1} \frac{dt}{\sqrt{\left(t+\frac{q}{2k_F}\right)^2 + \left(\frac{z}{v_F q}\right)^2}}$$

V druhej rovnosti sme cez priestorový uhol Ω' integrovali zavedením sférických súradníc s osou z v smere **q** a kosínus uhla medzi **k**' a **q** sme označili t. Preto

$$\left|\frac{\Gamma_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(1)}(\omega,\omega+z)}{g(q)}\right| \le \frac{\lambda}{2} \frac{z}{v_F q} \ln \frac{1 + \frac{q}{2k_F} + \sqrt{\left(1 + \frac{q}{2k_F}\right)^2 + \left(\frac{z}{v_F q}\right)^2}}{-1 + \frac{q}{2k_F} + \sqrt{\left(-1 + \frac{q}{2k_F}\right)^2 + \left(\frac{z}{v_F q}\right)^2}} \approx \frac{\lambda}{2} \frac{z}{v_F q}$$

kde v poslednom odhade sme zanedbali malé logaritmické korekcie. Pre typické fonónové frekvencie platí $z \sim vq \ll v_F q$, keďže rýchlosť zvuku je omnoho menšia než Fermiho rýchlosť: $v \ll v_F$.⁶³ Ukázali sme teda, že opravy k elektrónovo-fonónovému vrcholu sú rádu $\lambda v/v_F$, čiže malé. Tento výsledok sa nazýva *Migdalovou vetou*.

Migdalovu vetu možno interpretovať nasledovným spôsobom: Pri rozptyle elektrónu zo stavu **k** do stavu **k** + **q** máme do činenia s priestorovou vlnovou funkciou ~ $e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ s charakteristickou dĺžkou $\frac{1}{q}$. Elektrón na Fermiho ploche túto vzdialenosť preletí za čas $\tau \sim \frac{1}{v_Fq}$. Keďže typický rozptylový proces vedie k zmene hybnosti $q \sim k_F$, dostaneme odtiaľto $\tau \sim \frac{\hbar}{\varepsilon_F}$, kde ε_F je Fermiho

 $^{^{62}}$ Zanedbávame tu slabú závislosť λ od rozp
tylového uhla $\theta,$ pozri ďalší výklad.

 $^{^{63}}$ Podľa Bohmovho-Staverovho odhadu platí $\frac{v}{v_F} \propto \sqrt{\frac{m}{M}}$, kd
em/M je podiel hmotnosti elektrónu a jadra.

energia. Ak charakteristickú frekvenciu fonónov označíme ω_D , potom za čas τ sa fonónový systém zmení o $\omega_D \tau \sim \frac{\hbar \omega_D}{\varepsilon_F} \ll 1$. Inými slovami, elektrón v typickom rozptylovom procese nestihne vyžiariť virtuálny fonón a opravy k vrcholu možno zanedbať.

Stojí za zmienku, že Migdalova veta nie je vetou v matematickom zmysle slova: existujú totiž prípady, kedy neplatí. Typickým príkladom je diagram na obrázku 17, ktorý pri teplotách blízkych k teplote supravodivého prechodu nie je malý.

Renormalizácia spektra elektrónov

V tomto odstavci budeme pre jednoduchosť predpokladať, že elektrón-fonónová väzbová konštanta závisí iba od prenesenej hybnosti, $g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^s = g^s(\mathbf{q})$. Ak využijeme Migdalovu vetu a ak zanedbáme príspevky elektrón-elektrónových interakcií k vlastnej energii, Dysonovu rovnicu (32) potom môžeme zjednodušiť na tvar:

$$\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'\omega'} \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega')}{i\omega' - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \overline{\Sigma}(\mathbf{k}', \omega')},\tag{34}$$

kde $U(\mathbf{q}, z) = \sum_{s} |g^{s}(\mathbf{q})|^{2} \overline{D}^{s}(\mathbf{q}, z)$. Pre jednoduchosť budeme opäť skúmať rotačne invariantné systémy, v ktorých vlastná energia nezávisí od smeru **k**. Tento predpoklad je pomerne dobre splnený pre jednoduché kovy. Naviac budeme predpokladať, že vlastná energia je iba funkciou frekvencie ω , t.j. že $\overline{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega)$ nezávisí ani od smeru, ani od veľkosti **k**. Táto vlastnosť vyplýva z pozorovania, že pravá strana rovnice (34) závisí od **k** iba prostredníctvom vektora $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$, t.j. (v rotačne invariantných systémoch) od jeho dĺžky. Dĺžka vektora $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ však dominantne závisí od uhla medzi **k** a **k**' a takmer nezávisí od veľkosti **k**, pozri obrázok 17.

Za spomenutých predpokladov môžeme vlastnú energiu vyjadriť pomocou tzv. renormalizácie vlnovej funkcie \overline{Z}_{ω} , ktorá závisí len od frekvencie, $\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega) = (1-\overline{Z}_{\omega})i\omega$. Pre Greenovu funkciu potom dostaneme vyjadrenie

$$\overline{G}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{i\overline{Z}_{\omega}\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}}.$$

Dosaď me tento ansatz do rovnice (34) a sumu cez \mathbf{k}' nahraď me integráciami (33) ako pri analýze Migdalovej vety. Naviac zoberme namiesto plnej fonónovej Greenovej funkcie Greenovu funkciu systému voľných fonónov.⁶⁴ Tak dostaneme:

$$(1 - \overline{Z}_{\omega})i\omega = N(0) \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \sum_{s} |g^{s}(\theta)|^{2} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega'} \frac{2\omega_{\theta s}}{\omega_{\theta s}^{2} + (\omega - \omega')^{2}} \int \frac{d\varepsilon'}{i\overline{Z}_{\omega'}\omega' - \varepsilon'}.$$

Integrál cez ε' možno vypočítať nasledovne:⁶⁵

$$\int \frac{d\varepsilon'}{i\overline{Z}_{\omega'}\omega'-\varepsilon'} = \int \frac{d\varepsilon'(i\overline{Z}_{\omega'}\omega'+\varepsilon')}{-(\overline{Z}_{\omega'}\omega')^2-(\varepsilon')^2} = -\frac{i\pi\overline{Z}_{\omega'}\omega'}{|\overline{Z}_{\omega'}\omega'|} = -i\pi\mathrm{sgn}(\omega'),$$

kde v poslednej rovnosti sme predpokladali, že funkcia \overline{Z}_{ω} je reálna a že $\overline{Z}_{\omega} > 0$ (tieto predpoklady o chvíľu potvrdíme). Všimnime si, že po integrácii cez ε' pravá strana nezávisí od \overline{Z}_{ω} .

V ďalšom výklade sa obmedzíme na skúmanie teploty T = 0. Ak nahradíme sumu cez Matsubarove frekvencie ω' integrálom, dostaneme pre \overline{Z}_{ω} explicitný výraz

$$\overline{Z}_{\omega} = 1 + \frac{N(0)}{\omega} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \sum_{s} |g^{s}(\theta)|^{2} \int_{0}^{\infty} d\omega' \left[\frac{\omega_{\theta s}}{\omega_{\theta s}^{2} + (\omega' - \omega)^{2}} - \frac{\omega_{\theta s}}{\omega_{\theta s}^{2} + (\omega' + \omega)^{2}} \right].$$

Tento výsledok sa v literatúre obvykle formuluje pomocou spektrálnej funkcie $\alpha^2 F(\nu)$ pre fonónový systém, pričom príspevky jednotlivých módov sú váhované silou ich väzby na elektróny:⁶⁶

$$\alpha^2 F(\nu) = N(0) \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \sum_s |g^s(\theta)|^2 \delta(\nu - \omega_{\theta s}).$$
(35)

⁶⁴Ak by sme trvali na používaní plnej fonónovej Greenovej funkcie, museli by sme použiť jej spektrálnu reprezentáciu a výklad by ostal veľmi pododobný.

⁶⁵Reálna časť integrálu nekonverguje dosť pomaly. Striktne vzaté, takto možno postupovať iba pre systémy s dokonalou časticovo-dierovou symetriou.

⁶⁶Pomocou funkcie $\alpha^2 F(\nu)$ možno popísať väzbu medzi elektrónmi a fonónmi aj v reálnych materiáloch, v ktorých spektrálna funkcia fonónov nepozostáva z delta-funkcií ako v našom modelovom príklade. Funkciu $\alpha^2 F(\nu)$ možno merať

Tak dostaneme nasledovnú formulu:

$$\overline{Z}_{\omega} = 1 + \frac{1}{\omega} \int_0^{\infty} d\nu \alpha^2 F(\nu) \int_0^{\infty} d\omega' \left[\frac{\nu}{\nu^2 + (\omega' - \omega)^2} - \frac{\nu}{\nu^2 + (\omega' + \omega)^2} \right].$$

Integrál ce
z ω' možno vykonať. Dostaneme tak explicitný výraz pre funkci
u $\overline{Z}_{\omega},$ tzv. renormalizáciu vlnovej funkcie:

$$\overline{Z}_{\omega} = 1 + \frac{2}{\omega} \int_0^{\infty} d\nu \alpha^2 F(\nu) \arctan \frac{\omega}{\nu}.$$

Všimnime si, že funkcia \overline{Z}_{ω} je reálna a že platí $\overline{Z}_{\omega} = \overline{Z}_{-\omega} \ge 1$, keď že funkcia $\alpha^2 F(\nu)$ je nezáporná. Tým sme overili naše predpoklady.

Ak teraz zavedieme označeni
e $\overline{Z}_{\omega=0}=1+\lambda,$ ľahko nahliadneme, že pre tzv. väzobnú konštant
u λ pritom platí

$$\lambda = 2 \int_0^\infty d\nu \frac{\alpha^2 F(\nu)}{\nu} = 2N(0) \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \sum_s \frac{|g^s(\theta)|^2}{\omega_{\theta s}},$$

v súlade s definíciou pri výklade Migdalovej vety.

Teraz prejdime od Matsubarových frekvencií $i\omega$ ku komplexným frekvenciám z a hľadajme renormalizáciu vlnovej funkcie Z(z), pričom pre $z = i\omega$ na imaginárnej osi má platiť $Z(i\omega) = \overline{Z}_{\omega}$. Ak použijeme vzťah $\arctan x = \frac{1}{2i} \ln \frac{1+ix}{1-ix}$, kde za reálne číslo x vezmeme $\frac{\omega}{\nu}$, pre Z(z) dostaneme výraz, ktorý možno vyhodnotiť v celej komplexnej rovine z:

$$Z(z) = 1 + \frac{1}{z} \int_0^\infty d\nu \alpha^2 F(\nu) \ln \frac{\nu + z}{\nu - z}$$

Retardovanú renormalizáciu vlnovej funkcie dostaneme pomocou vzťahu $Z_R(\omega) = Z(\omega + i\gamma)$. Všimnime si, že keďže pre logaritmus komplexného čísla $z = |z|e^{i\varphi}$ platí $\ln z = \ln |z| + i\varphi$, funkcia $Z_R(\omega)$ už nie je čisto reálna. Pre retardovanú Greenovu funkciu elektrónu teda dostávame

$$G_R(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{(\omega + i\gamma)Z_R(\omega) - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{\omega + \Lambda(\omega) + i\Gamma(\omega) - \varepsilon_{\mathbf{k}}},$$
(36)

kde sme namiesto komplexnej vlastnej energie $\Sigma(\omega)$ explicitne zaviedli jej reálnu a imaginárnu časť $\Sigma(\omega) = -\Lambda(\omega) - i\Gamma(\omega)$, pričom

$$\Lambda(\omega) = \int_0^\infty d\nu \alpha^2 F(\nu) \ln \left| \frac{\nu + \omega}{\nu - \omega} \right|, \qquad \Gamma(\omega) = \pi \int_0^{|\omega|} d\nu \alpha^2 F(\nu).$$

Všimnime si, že platí $\Gamma(\omega) = \Gamma(-\omega) \ge 0$ a zároveň $\Lambda(\omega) = -\Lambda(-\omega)$. Funkciu podobnú $\Lambda(\omega)$ sme odvodili pri skúmaní zmeny spektra elektrónov pomocou obyčajnej poruchovej teórie v II.8; podobne funkcia $\Gamma(\omega)$ úzko súvisí s dobou života elektrónov odvodenou v III.8. V ďalšom výklade bližšie preskúmame súvis Greenovej funkcie (36) s týmito výsledkami. Za tým účelom skúmajme spektrálnu funkciu elektrónu:

$$A(\mathbf{k},\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_R(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\omega)}{\left[\omega + \Lambda(\omega) - \varepsilon_{\mathbf{k}}\right]^2 + \Gamma^2(\omega)}.$$
(37)

V prednáške III.8 sme ukázali, že v limite $\omega \to 0$ v Debyeovom modeli platí $\Gamma(\omega) \propto |\omega|^3$. Preto pre malé frekvencie $\Gamma(\omega) \to 0$ a spektrálna funkcia obsahuje ostrý pík pri frekvencii ω , ktorá spĺňa rovnicu $\omega + \Lambda(\omega) = \varepsilon_{\mathbf{k}}$. Ale pre malé frekvencie $\omega \ll \omega_D$, kde ω_D je typická fonónová frekvencia, sme v II.8 ukázali, že $\Lambda(\omega) = \lambda \omega$. Preto ostrý pík sa realizuje pri energii $\omega = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{1+\lambda}$. Tento výsledok možno interpretovať ako prítomnosť kvázičastíc s disperzným zákonom $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$. Došlo teda k nárastu efektívnej hmotnosti kvázičastíc v tesnej blízkosti Fermi plochy podľa vzťahu $\frac{m^*}{m} = 1 + \lambda$ spomenutému, ale nedokázanému v II.8.

$$\alpha^2 F(\nu) = N(0) \int \frac{d\Omega}{4\pi} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \sum_s |g^s(\theta)|^2 \delta(\nu - \omega_{\theta s}).$$

napríklad pomocou tunelovej spektroskopie, pozri knihu Schrieffera alebo články Scalapina a McMillana s Rowellom v knihe Parksa. Stojí tiež za zmienku, že v systémoch, ktoré nie sú rotačne invariantné, by naša definícia funkcie $\alpha^2 F(\nu)$ viedla k funkcii závisiacej od smeru k. V takom prípade je rozumné definíciu funkcie $\alpha^2 F(\nu)$ zovšeobecniť nasledovne:



Obr. 18: Mapa spektrálnej funkcie $A(\mathbf{k}, \omega)$ v rovine ($\varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{k}}, \omega$) pre modelovú funkciu $\alpha^2 F(\nu) = \lambda \left(\frac{\nu}{\omega_0}\right)^2$ pre $|\nu| < \omega_0$ a $\alpha^2 F(\nu) = 0$ pre $|\nu| > \omega_0$ (Debyeov model fonónov) s $\lambda = 0.5$. Tmavé oblasti zodpovedajú veľkým hodnotám $A(\mathbf{k}, \omega)$. Obrázok ukazuje: 1. renormalizáciu spektra pre $|\varepsilon| < \omega_0$, 2. závislosť doby života (inverznej šírky kvázičasticového píku) od ε , ako aj 3. existenciu nekoherentnej časti spektrálnej funkcie, t.j. konečných príspevkov k $A(\mathbf{k}, \omega)$ od energií mimo kvázičasticového píku. (F. Horváth)

Na druhej strane, pre $\omega \gg \omega_D$ sme v II.8 ukázali, že $\Lambda(\omega) \ll \omega$. Preto kvázičastice, t.j. riešenia rovnice $\omega + \Lambda(\omega) = \varepsilon_{\mathbf{k}}$, majú v tejto oblasti disperzný zákon $\omega \approx \varepsilon_{\mathbf{k}}$, t.j. ich disperzný zákon sa iba málo líši od disperzie neinteragujúcich elektrónov. Výsledky pre spektrálnu funkciu elektrónov (ak použijeme Debyeov model fonónov) sú zosumarizované na obrázku 37.

Nambuho-Gorkovov formalizmus

V tomto odstavci budeme skúmať zviazaný systém elektrónov a fonónov v takom formalizme, ktorý nám umožní jednotným spôsobom popísať normálny aj supravodivý stav kovu.

Začnime definovaním stĺpcového vektora $\alpha_{\mathbf{k}}$ z anihilačných a kreačných operátorov, jemu hermitovsky združeného riadkového vektora $\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ a ich antikomutačného vzťahu:

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix}, \qquad \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix}, \qquad \left\{ \alpha_{\mathbf{k}}, \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}'} \right\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

V ďalšom výklade bude užitočné matice 2×2 parametrizovať pomocou Pauliho matíc a jednotkovej matice:

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Teraz prepíšeme hamiltonián (31) pomocou operátorov $\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}$. Najprv si všimnime, že môžeme písať $c_{\mathbf{k}'\uparrow}^{\dagger}c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}c_{-\mathbf{k}'\downarrow} = \alpha_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\tau_{3}\alpha_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Preto platí

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \tau_3 \alpha_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{q},0} \right].$$

Podobne, ak budeme predpokladať invarianciu zviazaného systému elektrónov a fonónov voči otočeniu času, potom bude platiť $g^s_{-\mathbf{k}-\mathbf{q},-\mathbf{k}} = g^s_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. Ak sa v takom prípade obmedzíme na procesy $\mathbf{q} \neq 0$, potom elektrónovo-fonónový interakčný člen možno zapísať nasledovne:

$$\begin{split} \sum_{\mathbf{k}\sigma} g^{s}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} &= \sum_{\mathbf{k}} \left[g^{s}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + g^{s}_{-\mathbf{k}-\mathbf{q},-\mathbf{k}} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow} \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} g^{s}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} \left[c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow} \right] = \sum_{\mathbf{k}} g^{s}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} \alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \tau_{3} \alpha_{\mathbf{k}}. \end{split}$$

Po nahradení operátorov $c_{\mathbf{k}}$ a $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ operátormi $\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ teda hamiltonián (31) prejde na tvar

$$\mathcal{H}_{0} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \tau_{3} \alpha_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}s} \omega_{\mathbf{q}s} a_{\mathbf{q}s}^{\dagger} a_{\mathbf{q}s} + \text{const},$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}s} g_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{s} \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \tau_{3} \alpha_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{q}s} + a_{-\mathbf{q}s}^{\dagger} \right) + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{\dagger} \tau_{3} \alpha_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \tau_{3} \alpha_{\mathbf{k}}.$$

Teraz definujme tzv. Nambuho elektrónovú Greenovu funkciu $G(\mathbf{k}, \tau)$, t.j. Greenovu funkciu pre operátory $\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}$. Nambuho Greenova funkcia je teda maticou 2 × 2. Diagonálne prvky matice $G(\mathbf{k}, \tau)$ zodpovedajú Greenovej funkcii normálneho kovu, kým nediagonálne prvky sú nenulové iba v supravodivom stave, pretože súvisia s parametrom usporiadania supravodiča. Tieto prvky ako prvý zaviedol Gorkov a nazval ich anomálnymi Greenovými funkciami:

$$G(\mathbf{k},\tau) = -\langle T\alpha_{\mathbf{k}}(\tau)\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\rangle = \begin{pmatrix} -\langle Tc_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}\rangle & -\langle Tc_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)c_{-\mathbf{k}\downarrow}\rangle \\ -\langle Tc_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}(\tau)c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}\rangle & -\langle Tc_{-\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}(\tau)c_{-\mathbf{k}\downarrow}\rangle \end{pmatrix}.$$

Naším ďalším cieľom bude nájsť rovnicu pre Greenovu funkciu $G(\mathbf{k}, \tau)$. Túto úlohu začneme riešiť štúdiom Greenovej funkcie $G_0(\mathbf{k}, \tau)$ pre neinteragujúci systém s hamiltoniánom \mathcal{H}_0 . Ľahko overíme, že pohybová rovnica pre operátor $\alpha_{\mathbf{k}}(\tau)$ má tvar $\frac{d}{d\tau}\alpha_{\mathbf{k}}(\tau) = [\mathcal{H}_0, \alpha_{\mathbf{k}}(\tau)] = -\varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3\alpha_{\mathbf{k}}(\tau)$. Odtiaľ to vyplýva, že pre $G_0(\mathbf{k}, \tau)$ platí pohybová rovnica

$$\left[\frac{d}{d\tau} + \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3\right]G_0(\mathbf{k},\tau) = -\delta(\tau)\mathbf{1}.$$

Ako obvykle, túto pohybovú rovnicu možno riešiť časovou Fourierovou transformáciou: $G_0(\mathbf{k},\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} \overline{G}_0(\mathbf{k},\omega) e^{-i\omega\tau}$. Tak dostaneme rovnicu $(i\omega \mathbf{1} - \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3)\overline{G}_0(\mathbf{k},\omega) = \mathbf{1}$ pre Greenovu funkciu, ktorej riešením je

$$\overline{G}_0(\mathbf{k},\omega) = \frac{i\omega\mathbf{1} + \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3}{-\omega^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}.$$

Výsledok možno overiť explicitným dosadením do rovnice pre $\overline{G}_0(\mathbf{k},\omega)$, ak zároveň využijeme, že $\tau_3^2 = \mathbf{1}$. Všimnime si, že Greenova funkcia neinteragujúceho systému obsahuje iba diagonálne maticové elementy, ako sme mali čakať.

Dá sa ukázať, že v takto zavedenom maticovom formalizme zostávajú v platnosti Feynmanove pravidlá 1-3 pre zviazaný systém elektrónov a fonónov. Pravidlá 4-7 sú modifikované a pribudne pravidlo 8:

4'. elektrónovej čiare so štvorhybnosťou $\mathbf{k}\omega$ priraď maticovú Greenovu funkciu $\overline{G}_0(\mathbf{k},\omega)$

5′. coulombovskému vrcholu priraď τ_3

6'. elektrón-fonónovému vrcholu pre fonónovú vetvu s s vchádzajúcou elektrónovou hybnosťou k a vychádzajúcou hybnosťou k' priraď $g^s_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\tau_3$

7′. príspevok uzavretej slučky je daný stopou súčinu matíc

8. poradie matíc v súčine je dané poradím im príslušných objektov na elektrónovej čiare v diagrame

Eliašbergove rovnice pre supravodič

Ak uvážime Migdalovu vetu, potom rovnicu pre vlastnú energiu (34) môžeme v Nambuho-Gorkovovom formalizme prepísať ako nasledovnú maticovú rovnicu:

$$\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'\omega'} U(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega') \tau_3 \overline{G}(\mathbf{k}', \omega') \tau_3.$$
(38)

Túto rovnicu teraz prepíšeme ako integrálnu rovnicu pre vlastnú energiu $\overline{\Sigma}$. Začnime s pozorovaním, že pre Greenovu funkciu \overline{G} platí Dysonova rovnica v maticovom tvare $\overline{G} = \overline{G}_0 + \overline{G}_0 \overline{\Sigma} \overline{G}$. Ak túto rovnicu vynásobíme zľava maticou $(\overline{G}_0)^{-1}$ a sprava maticou $(\overline{G})^{-1}$, dostaneme $(\overline{G})^{-1} = (\overline{G}_0)^{-1} - \overline{\Sigma}$, alebo po dosadení explicitného výrazu pre $(\overline{G}_0)^{-1}$:

$$\overline{G}(\mathbf{k},\omega) = \left[i\omega\mathbf{1} - \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3 - \overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega)\right]^{-1}$$

V ďalšom kroku potrebujeme invertovať maticu na pravej strane. Matica vlastných energií je maticou typu 2×2 a ako takú ju možno zapísať ako lineárnu superpozíciu štvorice matíc $\mathbf{1}, \tau_1, \tau_2, \tau_3$. V literatúre sa obvykle predpokladá, že voľbou fázy supravodivého kondenzátu možno zabezpečiť, aby zložka úmerná τ_2 v rozklade nefigurovala a tento predpoklad si osvojíme aj my. Maticu $\overline{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega)$ budeme preto parametrizovať nasledovne:

$$\overline{\Sigma}(\mathbf{k},\omega) = (1 - \overline{Z}_{\mathbf{k}\omega})i\omega\mathbf{1} + \widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega}\tau_1 + \chi_{\mathbf{k}\omega}\tau_3$$

kde $\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega}$ je renormalizácie vlnovej funkcie, $\chi_{\mathbf{k}\omega}$ je diagonálna vlastná energia a $\widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega}$ je nediagonálna vlastná energia. V tejto parametrizácii teda platí $\overline{G}(\mathbf{k},\omega)^{-1} = \overline{Z}_{\mathbf{k}\omega}i\omega\mathbf{1} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\omega}\tau_3 - \widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega}\tau_1$, kde sme zaviedli $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\omega} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \chi_{\mathbf{k}\omega}$. Explicitným vynásobením s $\overline{G}(\mathbf{k},\omega)^{-1}$ teraz ľahko overíme, že pre Greenovu funkciu platí

$$\overline{G}(\mathbf{k},\omega) = \frac{\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega}i\omega\mathbf{1} + \widetilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\omega}\tau_3 + \Delta_{\mathbf{k}\omega}\tau_1}{-\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega}^2\omega^2 - \widetilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\omega}^2 - \widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega}^2},$$

kde sme využili vlastnosti Pauliho matíc $\tau_i \tau_j + \tau_j \tau_i = 2\delta_{ij}\mathbf{1}$. Ak ďalej využijeme, že $\tau_3 \tau_1 \tau_3 = -\tau_1$, dostaneme nasledovný rozklad do Pauliho matíc:

$$\tau_3 \overline{G}(\mathbf{k},\omega) \tau_3 = \frac{\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega} i\omega \mathbf{1} + \widetilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\omega} \tau_3 - \widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega} \tau_1}{-\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega}^2 \omega^2 - \widetilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\omega}^2 - \widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega}^2}$$

Keď napokon toto vyjadrenie dosadíme do rovnice (38) a porovnáme koeficienty v rozkladoch do Pauliho matíc ľavej a pravej strany, dostaneme nasledovný systém rovníc:

$$(1 - \overline{Z}_{\mathbf{k}\omega})\omega = -\frac{1}{\beta\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{k}'\omega'}\frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega')}{\overline{Z}_{\mathbf{k}'\omega'}^{2}(\omega')^{2} + \widetilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}'\omega'}^{2} + \widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}'\omega'}^{2}}\overline{Z}_{\mathbf{k}'\omega'}\omega',$$

$$\chi_{\mathbf{k}\omega} = -\frac{1}{\beta\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{k}'\omega'}\frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega')}{\overline{Z}_{\mathbf{k}'\omega'}^{2}(\omega')^{2} + \widetilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}'\omega'}^{2} + \widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}'\omega'}^{2}}\widetilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}'\omega'},$$

$$\widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega} = \frac{1}{\beta\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{k}'\omega'}\frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega')}{\overline{Z}_{\mathbf{k}'\omega'}^{2}(\omega')^{2} + \widetilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}'\omega'}^{2} + \widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}'\omega'}^{2}}\widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}'\omega'}.$$
(39)

Sústava zviazaných integrálnych rovníc (39) pre funkcie $\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega}$, $\chi_{\mathbf{k}\omega}$ a $\Delta_{\mathbf{k}\omega}$ je v literatúre známa ako Eliašbergove rovnice. Ide o nelineárne rovnice, ktoré je obvykle potrebné riešiť numericky. Vďaka reálnosti jadra $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega')$ pritom možno (podobne ako v normálnom stave) očakávať, že funkcie $\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega}$, $\chi_{\mathbf{k}\omega}$ a $\widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega}$ sú tiež reálne. Po numerickom vyriešení rovníc je napokon potrebné Matsubarove Greenove funkcie nahradiť retardovanými Greenovými funkciami, v podstate pritom ide o analytické predĺženie z imaginárnej osi na reálnu os v komplexnej rovine frekvencií z.

V literatúre sa možno stretnúť aj s Eliašbergovými rovnicami formulovanými priamo ako rovnice pre retardované Greenove funkcie. V tejto formulácii úloha o analytickom predĺžení odpadá. Na druhej strane, riešenie rovníc pre retardované Greenove funkcie je obvykle omnoho náročnejšie ako v matsubarovskom prípade, pretože menovatele na pravej strane môžu byť nulové, a preto je potrebné počítať (zložité) integrály v zmysle vlastnej hodnoty. Naviac, retardované verzie funkcií $\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega}$, $\chi_{\mathbf{k}\omega}$ a $\widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega}$ sú komplexné, t.j. obsahujú reálne aj imaginárne zložky.⁶⁷

Príklad 1: BCS model

Preskúmajme najprv riešenia rovníc (39) pre BCS modelovú interakciu, t.j. žiadajme, aby po renormalizácii v efektívnej šupke platilo $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega') = V$ pre všetky $|\varepsilon_{\mathbf{k}}|, |\varepsilon_{\mathbf{k}'}| < \omega_D$. Naviac predpokladajme, že systém má dokonalú časticovo-dierovú symetriu, t.j. že ku každému stavu \mathbf{k} s energiou $\varepsilon_{\mathbf{k}} > 0$ existuje práve jeden stav \mathbf{k}' s energiou $\varepsilon_{\mathbf{k}'} = -\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Predpokladajme tiež, že pre všetky stavy v šupke platí $\widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega} = \Delta$. Ľahko overíme, že za týchto predpokladov možno zvoliť $\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega} = 1$, $\chi_{\mathbf{k}\omega} = 0$ a prvé dve z rovníc (39) budú touto voľbou triviálne splnené. Posledná Eliašbergova rovnica sa pritom redukuje na tvar

$$1 = \frac{1}{\beta \mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}' \omega'}' \frac{V}{(\omega')^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta^2},$$

⁶⁷Napr. pre $Z_R(\omega)$ sme to explicit demonstrovali v normálnom stave.

kde čiarka nad sumou znamená obmedzenie dovolených hodnôt **k** na šupku $|\varepsilon_{\mathbf{k}}| < \omega_D$. Nahradením sumácie cez fermiónové frekvencie ω integráciou po uzavretej dráhe v komplexnej rovine sa (podobne ako v kapitole 9) ľahko ukáže, že $\frac{1}{\beta} \sum_{\omega} \frac{1}{\omega^2 + E^2} = \frac{1}{2E} \tanh \frac{E}{2T}$. Po uvážení tohto výsledku a po zavedení energie $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$ sa posledná Eliašbergova rovnica redukuje na self-konzistentnú rovnicu BCS modelu:

$$1 = \frac{V}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}}^{\prime} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{k}}}{2T}$$

Teda teória BCS je špeciálnym prípadom Eliašbergovej teórie.

Príklad 2: izotrópny model s dokonalou časticovo-dierovou symetriou

Ide o zovšeobecnenie modelu, ktorý sme skúmali v normálnom stave, na supravodivý stav. Rovnice (39) budeme riešiť pomocou ansatzu $\overline{Z}_{\mathbf{k}\omega} = \overline{Z}_{\omega}, \chi_{\mathbf{k}\omega} = 0$ a $\widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}\omega} = \widetilde{\Delta}_{\omega}$. Podobne ako v predošlom príklade, rovnica pre $\chi_{\mathbf{k}\omega}$ je pre tento ansatz triviálne splnená, pretože vďaka predpokladu dokonalej časticovodierovej symetrie integrál cez ε' vymizne. Dostaneme teda zviazaný systém rovníc pre dve neznáme funkcie \overline{Z}_{ω} a $\widetilde{\Delta}_{\omega}$, ktorý možno zjednodušiť zámenou (33) sumy cez k' za integrál a následným využitím definície (35) funkcie $\alpha^2 F(\nu)$:

$$(1 - \overline{Z}_{\omega})\omega = -\int_{0}^{\infty} d\nu \alpha^{2} F(\nu) \frac{1}{\beta} \sum_{\omega'} \frac{2\nu}{\nu^{2} + (\omega - \omega')^{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon' \overline{Z}_{\omega'} \omega'}{\overline{Z}_{\omega'}^{2} (\omega')^{2} + \widetilde{\Delta}_{\omega'}^{2} + (\varepsilon')^{2}}$$
$$\widetilde{\Delta}_{\omega} = \int_{0}^{\infty} d\nu \alpha^{2} F(\nu) \frac{1}{\beta} \sum_{\omega'} \frac{2\nu}{\nu^{2} + (\omega - \omega')^{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon' \widetilde{\Delta}_{\omega'}}{\overline{Z}_{\omega'}^{2} (\omega')^{2} + \widetilde{\Delta}_{\omega'}^{2} + (\varepsilon')^{2}}.$$

Integráciu cez ε' možno v týchto rovniciach explicitne vykonať. Ak naviac zavedieme namiesto nediagonálnej vlastnej energie $\widetilde{\Delta}_{\omega}$ pomocou vzťahu $\widetilde{\Delta}_{\omega} = \overline{Z}_{\omega} \Delta_{\omega}$ renormalizovanú energiu Δ_{ω} a ak predpokladáme, že opäť (tak, ako v normálnom stave) pĺatí $\overline{Z}_{\omega} > 0$, dostaneme nasledovné zjednodušené Eliašbergove rovnice:

$$\overline{Z}_{\omega} = 1 + \frac{\pi T}{\omega} \sum_{\omega'} \left[g(\omega - \omega') - \mu \right] \frac{\omega'}{\sqrt{(\omega')^2 + \Delta_{\omega'}^2}}, \quad \overline{Z}_{\omega} \Delta_{\omega} = \pi T \sum_{\omega'} \left[g(\omega - \omega') - \mu \right] \frac{\Delta_{\omega'}}{\sqrt{(\omega')^2 + \Delta_{\omega'}^2}},$$

kde sme zaviedli elektrón-fonónovú väzobnú funkciu $g(\omega - \omega')$:

$$g(\omega - \omega') = 2 \int_0^\infty \frac{d\nu \nu \alpha^2 F(\nu)}{\nu^2 + (\omega - \omega')^2}$$

a do teórie sme opäť zahrnuli aj coulombovské interakci
e $\mu=N(0)\int\frac{d\Omega'}{4\pi}V(\theta),$ pozri kapitolu 3.

V ďalšom výklade budeme predpokladať, že funkcie \overline{Z}_{ω} a Δ_{ω} sú párne. Ľahko totiž nahliadneme, že vzťahy $\overline{Z}_{-\omega} = \overline{Z}_{\omega}$ a $\Delta_{-\omega} = \Delta_{\omega}$ sú konzistentné so symetriou $g(\omega - \omega') = g(\omega' - \omega)$. Z párnosti funkcií \overline{Z}_{ω} a Δ_{ω} potom vyplýva, že coulombovské odpudzovanie μ vypadne z rovnice pre \overline{Z}_{ω} . Naviac, ak sa obmedzíme na skúmanie excitačných energií ω, ω' v energetickej šupke ($-\omega_{\max}, \omega_{\max}$), kde ω_{\max} je energia väčšia než maximálna fonónová frekvencia ω_0 , ale rádovo porovnateľná s typickými fonónovými energiami, potom Eliašbergove rovnice môžeme prepísať do konečného tvaru

$$\overline{Z}_{\omega} = 1 + \frac{\pi T}{\omega} \sum_{\omega'}^{\prime} g(\omega - \omega') \frac{\omega'}{\sqrt{(\omega')^2 + \Delta_{\omega'}^2}}, \quad \overline{Z}_{\omega} \Delta_{\omega} = \pi T \sum_{\omega'}^{\prime} \left[g(\omega - \omega') - \mu^* \right] \frac{\Delta_{\omega'}}{\sqrt{(\omega')^2 + \Delta_{\omega'}^2}}, \quad (40)$$

kde $\mu^* = \frac{\mu}{1+\mu\ln(\Lambda/\omega_{\max})}$ je coulombovské odpudzovanie renormalizované z počiatočnej energetickej škály Λ rádovo rovnej šírke pásu po hodnotu ω_{\max} , pozri kapitolu 3.⁶⁸ Čiarky nad sumami obmedzujú Matsubarove frekvencie na interval $(-\omega_{\max}, \omega_{\max})$.

 $^{^{68}}$ Oproti kapitole 3 tu chýba faktor $\frac{1}{2}$ v menovateli. Nejde o preklep: v kapitole 3 sme skúmali Cooperove páry na polovičnom intervvale $(0, \omega_{\max}).$

Systém rovníc (40) možno riešiť numericky a vo zvyšku tohto odstavca okomentujeme kvalitatívne črty získaných riešení. Začnime s pozorovaním, že v konvenčných supravodičoch je energia Δ omnoho menšia než maximálna fonónová frekvencia ω_0 . V takom prípade možno v najnižšom priblížení v prvej z rovníc (40) zanedbať Δ_{ω} na pravej strane a pre renormalizáciu vlnovej funkcie dostaneme výsledok $\overline{Z}_{\omega} = 1 + \frac{\pi T}{\omega} \sum_{\omega'} g(\omega - \omega') \operatorname{sign}(\omega')$, ktorý zovšeobecňuje našu analýzu normálneho stavu na prípad konečných teplôt. Teda \overline{Z}_{ω} sa pri prechode do supravodivého stavu viac-menej nemení a napr. pre $T, \omega \ll \omega_0$ ostane v platnosti náš výsledok pre normálny stav $\overline{Z}_{\omega} \approx 1 + \lambda$.

V blízkosti kritickej teploty T_c možno druhú z rovníc (40) linearizovať podľa Δ . Pre frekvencie $\omega \ll \omega_0$ tak dostaneme rovnicu $(1 + \lambda)\Delta_{\omega} = \pi T_c \sum_{\omega'}' \frac{g(\omega - \omega') - \mu^*}{|\omega'|} \Delta_{\omega'}$. Ak budeme predpokladať, že suma na pravej strane je dominovaná frekvenciami $\omega' < \omega_0$ a že v tomto intervale je funkcia Δ_{ω} zhruba konštantná, táto rovnica sa redukuje na

$$\frac{1+\lambda}{\lambda-\mu^*} \approx \pi T_c \sum_{\omega'=-\omega_0}^{\omega_0} \frac{1}{|\omega'|}.$$
(41)

Ak uvážime, že Matsubarove frekvencie sú $\omega' = (2l+1)\pi T_c$, kde l sú celé čísla, výraz na pravej strane môžeme prepísať na tvar $\pi T_c \sum_{\omega'}' \frac{1}{|\omega'|} = \sum_{l=0}^{l_{\max}} \frac{1}{l+1/2}$, kde $l_{\max} = \frac{\omega_0}{2\pi T_c}$. Ale pre $l_{\max} \gg 1$ ľahko overíme (buď numericky alebo pomocou logaritmickej derivácie funkcie gama), že $\sum_{l=0}^{l_{\max}} \frac{1}{l+1/2} \approx \ln \frac{l_{\max}}{0.14}$. Po dosadení do rovnice (41) tak dostaneme odhad kritickej teploty $T_c \approx 1.14\omega_0 e^{-\frac{1+\lambda}{\lambda-\mu^*}}$. Tento výsledok je veľmi podobný predpovedi teórie BCS, od ktorej sa líši v dvoch bodoch: (i) namiesto elektrónfonónovej väzobnej konštanty λ tu vystupuje väzobná konštanta $\lambda - \mu^*$ zohľadňujúca (renormalizované) coulombovské odpudzovanie elektrónov a (ii) v exponente vystupuje faktor $1 + \lambda$ zohľadňujúci nárast efektívnej hmotnosti elektrónov.⁶⁹ V literatúre možno nájsť niekoľko podobných vzorcov (napr. McMillanov), ktoré boli skonštruované fitovaním numerických riešení Eliašbergových rovníc.

Cvičenia

1. Overte platnosť sumačných pravidiel pre spektrálnu funkciu fonónov $A_0^s(\mathbf{q}, z)$.

2. Presvedčte sa, že vo výraze pre $U(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega, \omega')$ (alebo ekvivalentne v grafickom vyjadrení Dysonovej rovnice) máme nahradiť iba jeden z vrcholov plnou vrcholovou funkciou.

3. Predpokladajte, že $\alpha^2 F(\nu) = \lambda \left(\frac{\nu}{\omega_0}\right)^2$ pre $|\nu| < \omega_0$ a $\alpha^2 F(\nu) = 0$ pre $|\nu| > \omega_0$ (Debyeov model fonónov). Vypočítajte $\Lambda(\omega)$ a $\Gamma(\omega)$ a preskúmajte spektrálnu funkciu elektrónu $A(\varepsilon, \omega)$ pre rôzne hodnoty ε . Overte platnosť sumačného pravidla $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\mathbf{k}, \omega) = 1$. Pomocou druhého zo sumačných pravidiel z kapitoly 4 vypočítajte distribučnú funkciu $f_{\mathbf{k}}$ elektrónov v základnom stave.

4. Pre $\alpha^2 F(\nu) = \frac{\lambda}{2} \omega_0 \delta(\nu - \omega_0)$ (Einsteinov model fonónov) riešte tú istú úlohu ako 3.

5. Rovnice (40) riešte numericky pre $\alpha^2 F(\nu) = \frac{\lambda}{2} \omega_0 \delta(\nu - \omega_0)$ a $\mu^* = 0$. Nájdite T_c a tvar nízkoteplotných riešení. Návod: úlohu riešte iteračne. Prvé priblíženie k \overline{Z}_{ω} dostanete zanedbaním Δ_{ω} v rovnici pre \overline{Z}_{ω} . Za prvé priblíženie k Δ_{ω} zvoľte $\Delta_{\omega} = \Delta$, kde Δ odhadnite pomocou BCS teórie s energiou fonónov ω_0 a väzobnou konštantou λ .

8 Nehomogénna supravodivosť

Priestorovo závislé problémy: rovnice Bogoľubova - de Gennesa

Teóriu BCS teraz zovšeobecníme tak, aby sme pomocou nej mohli popisovať priestorovo závislé úlohy. Nech efektívna interakcia medzi elektrónmi má tvar

$$H_{\rm int} = \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{x} \int d^3 \mathbf{y} U(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \psi^{\dagger}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \psi^{\dagger}_{\downarrow}(\mathbf{y}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{y}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}),$$

kde $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}), \psi_{\sigma}(\mathbf{x})$ sú operátory poľa (pozri III.6). Pre jednoduchosť sa v ďalšom výklade obmedzíme na prípad kontaktnej interakcie $U(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = V(\mathbf{x})\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$, kde $V(\mathbf{x})$ môže byť priestorovo závislá funkcia.

⁶⁹Prítomnosť tohto faktora naznačuje, že kritickú teplotu T_c nemožno donekonečna zvyšovať zväčšovaním elektrónfonónových interakcií. Explicitný príklad toho, že v limite veľmi silných interakcií môže T_c dokonca klesať, možno nájsť v cvičeniach ku kapitole ??.

V priblížení stredného poľa potom dostaneme nasledovný redukovaný BCS hamiltonián

$$\mathcal{H}_{\rm red} = \int d^3 \mathbf{x} \left[\sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \psi_{\sigma}(\mathbf{x}) + \Delta(\mathbf{x}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) + \Delta^*(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \right] + \text{const}, \quad (42)$$

kde $h(\mathbf{x})$ je jednočasticový operátor energie elektrónov, ktorý zahŕňa kinetickú energiu meranú vzhľadom na chemický potenciál, potenciálnu energiu elektrónu v mriežke a prípadnú väzbu na skalárny a vektorový potenciál. Zaviedli sme pritom priestorovo závislý parameter usporiadania

$$\Delta(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x}) \langle \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \rangle.$$
(43)

Ak teraz využijeme, že $\int d^3 \mathbf{x} \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) = - \int d^3 \mathbf{x} \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) h^*(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) + \text{const},^{70}$ redukovaný BCS hamiltonián môžeme zapísať v maticovej forme

$$\mathcal{H}_{\rm red} = \int d^3 \mathbf{x} \left(\begin{array}{cc} \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) & \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} h(\mathbf{x}) & \Delta(\mathbf{x}) \\ \Delta^*(\mathbf{x}) & -h^*(\mathbf{x}) \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \end{array} \right) + \text{const.}$$

V ďalšom výklade bude výhodné definovať spinory $(u_n(\mathbf{x}), v_n(\mathbf{x}))^T$ ako riešenie tzv. rovníc Bogoľubovade Gennesa (BdG):

$$\begin{pmatrix} h(\mathbf{x}) & \Delta(\mathbf{x}) \\ \Delta^*(\mathbf{x}) & -h^*(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{x}) \\ v_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{x}) \\ v_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix}.$$
(44)

Komplexným združením a výmenou riadkov možno tieto rovnice zapísať v tvare

$$\begin{pmatrix} h(\mathbf{x}) & \Delta(\mathbf{x}) \\ \Delta^*(\mathbf{x}) & -h^*(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -v_n^*(\mathbf{x}) \\ u_n^*(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = -E_n \begin{pmatrix} -v_n^*(\mathbf{x}) \\ u_n^*(\mathbf{x}) \end{pmatrix},$$

teda spinory $(u_n, v_n)^T$ a $(-v_n^*, u_n^*)^T$ popisujú združené riešenia BdG rovníc s energiami $\pm E_n$. Budeme pritom predpokladať, že spinory tvoria ortonormálny systém:

$$\int d^3 \mathbf{x} \left[u_n^*(\mathbf{x}) u_m(\mathbf{x}) + v_n^*(\mathbf{x}) v_m(\mathbf{x}) \right] = \delta_{nm}, \quad \int d^3 \mathbf{x} \left[u_n(\mathbf{x}) v_m(\mathbf{x}) - v_n(\mathbf{x}) u_m(\mathbf{x}) \right] = 0,$$

kde druhá rovnosť vyplýva z ortogonality spinorov $(u_n, v_n)^T$ a $(-v_m^*, u_m^*)^T$. Z úplnosti systému spinorov ďalej vyplývajú vzťahy

$$\sum_{n} u_n^*(\mathbf{x})u_n(\mathbf{y}) = \sum_{n>0} [u_n^*(\mathbf{x})u_n(\mathbf{y}) + v_n(\mathbf{x})v_n^*(\mathbf{y})] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$
$$\sum_{n} u_n^*(\mathbf{x})v_n(\mathbf{y}) = \sum_{n>0} [u_n^*(\mathbf{x})v_n(\mathbf{y}) - v_n(\mathbf{x})u_n^*(\mathbf{y})] = 0,$$

kde symbol n > 0 znamená spinory s kladnými energiami.

Diagonalizáciu kvadratického operátora \mathcal{H}_{red} možno vykonať pomocou transformácie k (fermiónovým) kreačným a anihilačným operátorom $\gamma_{n\sigma}^{\dagger}$, $\gamma_{n\sigma}$ pre bogoľubóny v stavoch *n*:

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \sum_{n>0} \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{x}) & -v_n^*(\mathbf{x}) \\ v_n(\mathbf{x}) & u_n^*(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{n\uparrow} \\ \gamma_{n\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}.$$

Ak využijeme úplnosť systému spinorov, ľahko nahliadneme, že transformácia je kánonická, t.j. zachováva fermiónové komutačné vzťahy. Ak ďalej použijeme normovanosť spinorov, pomocou bogoľubónových operátorov môžeme redukovaný BCS hamiltonián zapísať v tvare

$$\mathcal{H}_{\rm red} = \sum_{n>0,\sigma} E_n \gamma_{n\sigma}^{\dagger} \gamma_{n\sigma} + \text{const},$$

⁷⁰Pri odvodení treba najprv použiť kánonické komutačné vzťahy pre operátory poľa. Až na konštantu tak dostaneme $-\int d^3 \mathbf{x} [h(\mathbf{x})\psi_{\downarrow}(\mathbf{x})]\psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x})$. V druhom kroku treba pôsobenie operátora $h(\mathbf{x})$ integráciou per partes preniesť na $\psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x})$.

$$\begin{pmatrix} \gamma_{n\uparrow} \\ \gamma_{n\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} = \int d^3 \mathbf{x} \begin{pmatrix} u_n^*(\mathbf{x}) & v_n^*(\mathbf{x}) \\ -v_n(\mathbf{x}) & u_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}.$$
(45)

Systém BdG rovníc treba doplniť self-konzistentnými podmienkami pre párovací potenciál $\Delta(\mathbf{x})$ a pre chemický potenciál μ . Rovnica (43) pre $\Delta(\mathbf{x})$ nadobudne tvar

$$\Delta(\mathbf{x}) = -V(\mathbf{x}) \sum_{n>0} u_n(\mathbf{x}) v_n^*(\mathbf{x}) \tanh \frac{E_n}{2T},$$

ako ľahko nahliadneme vyjadrením operátorov poľa pomocou bogoľubónových kreačných a anihilačných operátorov. Podobne nájdeme výraz pre hustotu elektrónov v bode \mathbf{x} ,

$$n_{\sigma}(\mathbf{x}) = \langle \psi_{\sigma}^*(\mathbf{x})\psi_{\sigma}(\mathbf{x})\rangle = \sum_{n>0} \left[|u_n(\mathbf{x})|^2 f(E_n) + |v_n(\mathbf{x})|^2 (1 - f(E_n)) \right].$$

Chemický potenciál treba nastaviť tak, aby celkový počet elektrónov $N = \sum_{\sigma} \int d^3 \mathbf{x} n_{\sigma}(\mathbf{x})$ nadobúdal požadovanú hodnotu.

Na záver pripojme poznámku o znamienkovej konvencii v tomto odstavci. Oproti výkladu v homogénnom prípade sme namiesto interakcie -V písali $V(\mathbf{x})$, preto $-\Delta$ a $-v_{\mathbf{k}}$ z homogénneho prípadu sme nahradili výrazmi $\Delta(\mathbf{x})$ a $v_n(\mathbf{x})$.

Príklad 1: translačne invariantný systém

V tomto prípade $h(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu$ a parameter usporiadania nezávisí od polohy, $\Delta(\mathbf{x}) = \Delta$. Skúmajme nasledovné riešenie rovníc (44) v kocke s objemom \mathcal{V} a periodickými okrajovými podmienkami:

$$\begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \\ v_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}} \\ V_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad U_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right)}, \quad V_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta^*}{|\Delta|} \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right)}, \quad (46)$$

kde $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$ a $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}$. Všimnime si, že rôzne riešenia (46) sú číslované vlnovými vektormi **k**. Vlastná energia riešenia (46) rovníc (44) je $+E_{\mathbf{k}}$. Ak uvážime, že $c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\nu}} \int d^3 \mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi_{\sigma}(\mathbf{x})$, potom podľa rovnice (45) sú bogoľubóny príslušné k riešeniu (46) s vektorom **k** kreované operátormi

$$\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} = U_{\mathbf{k}}c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} + V_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k}\downarrow}, \qquad \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\downarrow} = U_{\mathbf{k}}c^{\dagger}_{\mathbf{k}\downarrow} - V_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k}\uparrow}$$

v zhode (až na už spomínané rozdiely v znamienkovej konvencii) s naším predošlým výkladom. Ľahko nahliadneme, že aj self-konzistentná rovnica sa redukuje na známy výsledok, teda BdG teória reprodukuje riešenie BCS.

Príklad 2: Andersonova veta

V tomto odstavci preskúmame, ako sa supravodivý parameter usporiadania v kove s nečistotami líši od jeho hodnoty v takom istom kove bez defektov. Nech jednočasticový hamiltonián elektrónov má tvar $h(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{x}) - \mu$, kde $U(\mathbf{x})$ je náhodný potenciál popisujúci defekty. Platí teda $h(\mathbf{x}) = h^*(\mathbf{x})$, t.j. hamiltonián je symetrický voči otočeniu času. Vlastné stavy hamiltoniánu $h(\mathbf{x})$ a im príslušné vlastné energie označme $\psi_n(\mathbf{x})$ a ε_n , t.j. nech platí $h\psi_n = \varepsilon_n\psi_n$. Naviac nech vlnové funkcie sú normalizované, t.j. nech $\int d^3\mathbf{x} |\psi_n(\mathbf{x})|^2 = 1$.

Naším ústredným predpokladom o neusporiadanosti je, že lokálna hustota stavov neusporiadaného systému $\widetilde{N(\varepsilon, \mathbf{x})} = \sum_{n} |\psi_n(\mathbf{x})|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_n)$ nezávisí od **x**. Neskôr ukážeme, že v takomto prípade parameter usporiadania nebude závisieť od polohy.⁷¹ Ľahko nahliadneme, že pre $\Delta(\mathbf{x}) = \Delta$ možno riešenie BdG rovníc (44) hľadať v tvare

$$\left(\begin{array}{c}u_n(\mathbf{x})\\v_n(\mathbf{x})\end{array}\right) = \psi_n(\mathbf{x}) \left(\begin{array}{c}U_n\\V_n\end{array}\right),$$

 $^{^{71}}$ Opačná situácia sa realizuje v čistých vzorkách vysokoteplotných supravodičov, pretože v tomto prípade nečistoty lokálne potláčajú parameter usporiadania. Ak rozmer Cooperovho páru ξ je malý oproti vzdialenostiam medzi nečistotami, materiál si potom možno predstaviť ako supravodivú matricu s bublinami bez supravodivosti okolo nečistôt. Takýto model sa nazýva modelom ementálu (swiss-cheese model).

kde U_n a V_n sú priestorovo nezávislé konštanty. Fyzikálny zmysel takéhoto riešenia je zrejmý z rovnice (45): bogoľubóny sú lineárnymi kombináciami

$$\gamma_{n\uparrow}^{\dagger} = U_n c_{n\uparrow}^{\dagger} + V_n c_{\bar{n}\downarrow}, \qquad \gamma_{n\downarrow}^{\dagger} = U_n c_{n\downarrow}^{\dagger} - V_n c_{\bar{n}\uparrow},$$

kde operátory $c_{n\sigma}^{\dagger}$ a $c_{\bar{n}\sigma}^{\dagger}$ kreujú elektróny v orbitálnych stavoch $\psi_n(\mathbf{x})$ a $\psi_{\bar{n}}(\mathbf{x}) = \psi_n^*(\mathbf{x})$. Teda supravodivý stav vzniká ako kondenzát párov elektrónov v časovo invertovaných stavoch n, σ a $\bar{n}, -\sigma$.

Spinor $(U_n, V_n)^T$ pritom diagonalizuje maticu z rovníc (44), v ktorých treba nahradiť operátor $h(\mathbf{x})$ energiou ε_n . Príslušná kladná vlastná energia je $E_n = \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}$ a self-konzistentná rovnica nadobudne tvar

$$\Delta = -V \sum_{n>0} |\psi_n(\mathbf{x})|^2 U_n V_n^* \tanh \frac{E_n}{2T}$$

Ľahko overíme, že vďaka podmienke $|U_n|^2 + |V_n|^2 = 1$ platí $U_n V_n^* = \frac{\Delta}{2E_n}$. Ak využijeme tento výsledok a sumáciu cez *n* nahradíme integráciou cez hustotu stavov $\widetilde{N(0)}$ neusporiadaného kovu, dostaneme napokon rovnicu

$$\Delta = -\widetilde{N(0)}V \int d\varepsilon \frac{\Delta}{2\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}} \tanh \frac{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}}{2T}.$$

Ale keďže pre slabú neusporiadanosť platí $N(0) \approx N(0)$ kde N(0) je hustota stavov v čistom kove (pozri II.4), self-konzistentné rovnice v čistom aj špinavom kove sú rovnaké, a teda aj príslušné parametre usporiadania musia byť rovnaké. Tento výsledok sa nazýva Andersonovou vetou.

Príklad 3: supravodič s konečným prúdom

Závislosť od času v BdG teórii

V tomto odstavci odvodíme pohybové rovnice pre operátory poľa. Ako bonus pritom dostaneme nový pohľad na BdG rovnice. Zároveň odvodíme rovnicu kontinuity pre elektrický náboj v supravodiči.

Začnime výpočtom komutátorov medzi operátormi poľa a redukovaným BCS hamiltoniánom (42):

$$\begin{split} & [\psi_{\uparrow}(\mathbf{x}), \mathcal{H}_{\rm red}] = h(\mathbf{x})\psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) + \Delta(\mathbf{x})\psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}), \\ & [\psi_{\downarrow}(\mathbf{x}), \mathcal{H}_{\rm red}] = h(\mathbf{x})\psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) - \Delta(\mathbf{x})\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}), \\ & \left[\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}), \mathcal{H}_{\rm red}\right] = -[\psi_{\uparrow}(\mathbf{x}), \mathcal{H}_{\rm red}]^{\dagger} = -h^{*}(\mathbf{x})\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) - \Delta^{*}(\mathbf{x})\psi_{\downarrow}(\mathbf{x}), \\ & \left[\psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}), \mathcal{H}_{\rm red}\right] = -[\psi_{\downarrow}(\mathbf{x}), \mathcal{H}_{\rm red}]^{\dagger} = -h^{*}(\mathbf{x})\psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) + \Delta^{*}(\mathbf{x})\psi_{\uparrow}(\mathbf{x}). \end{split}$$

Keď tieto vzťahy dosadíme do pohybovej rovnice $i\hbar \frac{\partial X}{\partial t} = [X, \mathcal{H}_{red}]$ pre operátor X v Heisenbergovom obraze, dostaneme nasledovnú pohybovú rovnicu pre operátory poľa:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h(\mathbf{x}) & \Delta(\mathbf{x}) \\ \Delta^{*}(\mathbf{x}) & -h^{*}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

Všimnime si formálnu podobnosť tejto rovnice so Schrödingerovou rovnicou, treba však zdôrazniť, že ide o pohybovú rovnicu pre operátory a nie pre vlnové funkcie. Explicitným dosadením ľahko nahliadneme, že riešenie pohybových rovníc možno zapísať v tvare

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x},t) \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x},t) \end{pmatrix} = \sum_{n>0} \gamma_{n\uparrow} e^{-iE_n t/\hbar} \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{x}) \\ v_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} + \sum_{n>0} \gamma_{n\downarrow}^{\dagger} e^{iE_n t/\hbar} \begin{pmatrix} -v_n^*(\mathbf{x}) \\ u_n^*(\mathbf{x}) \end{pmatrix},$$

kde prvá suma je rozvojom podľa módov s kladnou energiou. Podobne druhá suma je rozvojom podľa módov so zápornou energiou.

Rovnica kontinuity pre náboj v supravodiči.

Operátor hustoty elektrického náboja elektrónov definujeme prirodzenou formulou

$$\rho_Q = -e \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\sigma}(\mathbf{x}).$$

Časovú zmenu $\frac{\partial \rho_Q}{\partial t}$ počítajme explicitným derivovaním výrazu pre ρ_Q . Vo výraze pre $\frac{\partial \rho_Q}{\partial t}$ sa preto objavia derivácie $\frac{\partial \psi_{\sigma}}{\partial t}$ a $\frac{\partial \psi_{\sigma}^{\dagger}}{\partial t}$. Ak tieto objekty vyjadríme pomocou pohybovej rovnice pre operátory poľa, výsledný výraz môžeme po úprave zapísať v tvare

$$\frac{\partial \rho_Q}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_Q = S,\tag{47}$$

kde sme zaviedli označenia

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{j}_{Q} &= -\frac{ie}{\hbar} \sum_{\sigma} \left[\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \psi_{\sigma}(\mathbf{x}) - [h^{*}(\mathbf{x}) \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x})] \psi_{\sigma}(\mathbf{x}) \right] \\ S(\mathbf{x}) &= \frac{2ie}{\hbar} \left[\Delta(\mathbf{x}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) - \Delta^{*}(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) \right]. \end{aligned}$$

Ako uvidíme o chvíľu, rovnicu (47) možno chápať ako vhodne modifikovanú rovnicu kontinuity. Naozaj, predpokladajme pre jednoduchosť, že $h(\mathbf{x}) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2 + U(\mathbf{x}) - \mu$. Potom štandardnými úpravami môžeme ukázať, že možno zvoliť

$$\mathbf{j}_Q = \frac{ie\hbar}{2m} \sum_{\sigma} \left[\psi_{\sigma}^{\dagger} \nabla \psi_{\sigma} - (\nabla \psi_{\sigma}^{\dagger}) \psi_{\sigma} \right] - \frac{e^2}{m} \mathbf{A} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger} \psi_{\sigma},$$

t.j. operátor \mathbf{j}_Q je obvyklý operátor hustoty toku náboja pozostávajúci z tzv. mechanického prúdu $\mathbf{j}_Q^{\text{mech}}$ (prvý člen) a tzv. diamagnetického prúdu $\frac{e}{m}\mathbf{A}\rho_Q$ (druhý člen), pozri napr. III.10. Teda rovnica (47) má tvar rovnice kontinuity a výraz S na pravej strane môžeme interpretovať ako zdroj (resp. lapač) častíc. Všimnime si, že stredná hodnota $\langle S(\mathbf{x}) \rangle$ je nulová, ak je splnená self-konzistentná rovnica pre gap (43).

Fyzikálne vlastnosti bogoľubónov

Pre konkrétnosť skúmajme povedzme mód $n \uparrow$, v ktorom operátory poľa nadobúdajú tvar $\psi_{\uparrow}(\mathbf{x},t) = u_n(\mathbf{x})\gamma_{n\uparrow}e^{-iE_nt/\hbar}$ a $\psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x},t) = v_n(\mathbf{x})\gamma_{n\uparrow}e^{-iE_nt/\hbar}$. Dosadením do všeobecných výrazov pre ρ_Q a $\mathbf{j}_Q^{\text{mech}}$ dostaneme nasledovné vyjadrenia pre príspevok módu $n \uparrow$:

$$\rho_Q = -e|v_n|^2 - e(|u_n|^2 - |v_n|^2)\gamma_{n\uparrow}^{\dagger}\gamma_{n\uparrow}, \qquad \mathbf{j}_Q^{\text{mech}} = -\frac{e\hbar}{m}\text{Im}\left[v_n\nabla v_n^*\right] - \frac{e\hbar}{m}\text{Im}\left[u_n^*\nabla u_n - v_n\nabla v_n^*\right]\gamma_{n\uparrow}^{\dagger}\gamma_{n\uparrow}.$$

c-číselné príspevky k ρ_Q a $\mathbf{j}_Q^{\text{mech}}$ zjavne súvisia s príspevkom módu $n \uparrow$ ku kondenzátu. Stredné hodnoty hustoty náboja a hustoty toku náboja v móde $n \uparrow$ dostaneme ako multiplikatívne faktory pri operátore počtu častíc $\gamma_{n\uparrow}^{\dagger}\gamma_{n\uparrow}$:

$$\rho_Q(\mathbf{x}) = -e\left[|u_n(\mathbf{x})|^2 - |v_n(\mathbf{x})|^2\right], \qquad \mathbf{j}_Q^{\text{mech}}(\mathbf{x}) = -\frac{e\hbar}{m} \text{Im}\left[u_n^*(\mathbf{x})\nabla u_n(\mathbf{x}) - v_n(\mathbf{x})\nabla v_n^*(\mathbf{x})\right].$$

Okrem hustoty náboja je užitočné definovať aj nasledovnú hustotu kvázičastíc:

$$\rho_N(\mathbf{x}) = |u_n(\mathbf{x})|^2 + |v_n(\mathbf{x})|^2.$$

Naším cieľom bude počítať časovú zmenu $\frac{\partial \rho_N}{\partial t}$. Najprv si však uvedomíme, že riešenia BdG rovníc spĺňajú nasledovné pohybové rovnice:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \left(\begin{array}{cc} u_n(\mathbf{x},t) \\ v_n(\mathbf{x},t) \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc} h(\mathbf{x}) & \Delta(\mathbf{x}) \\ \Delta^*(\mathbf{x}) & -h^*(\mathbf{x}) \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} u_n(\mathbf{x},t) \\ v_n(\mathbf{x},t) \end{array} \right).$$

Pri výpočte časovej zmeny $\frac{\partial \rho_N}{\partial t}$ teraz vyjadrime derivácie funkcií u_n, v_n, u_n^*, v_n^* podľa času pomocou týchto pohybových rovníc a po úprave dostaneme rovnicu kontinuity pre hustotu kvázičastíc

$$\frac{\partial \rho_N}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_N = 0, \tag{48}$$

kde $\nabla \cdot \mathbf{j}_N = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \left[u_n^* h u_n + v_n h v_n^* \right]$. Ak teraz opäť vezmeme $h(\mathbf{x}) = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla + e\mathbf{A})^2 + U(\mathbf{x}) - \mu$, pre hustotu toku kvázičastíc dostaneme výsledok

$$\mathbf{j}_N = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[u_n^*(\mathbf{x}) \nabla u_n(\mathbf{x}) - v_n^*(\mathbf{x}) \nabla v_n(\mathbf{x}) \right] + \frac{e}{m} \mathbf{A} \rho_N.$$
(49)

Výhodou rovnice kontinuity pre častice (48) oproti rovnici kontinuity pre náboj (47) je, že rovnica (48) platí bez ohľadu na to, či je splnená self-konzistentná podmienka, kým rovnica (47) platí iba v plne self-konzistentnej teórii. Preto v približných teóriách bez self-konzistentnosti môžeme používať iba rovnicu (48).

Príklad: translačne invariantný systém

Ako príklad preskúmajme fyzikálne vlastnosti bogoľubónu v translačne invariantom systéme s kreačným operátorom $\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} = U_{\mathbf{k}}c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} + V_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k}\downarrow}$. Ide o riešenie BdG rovníc s kladnou energiou popísané spinorom (46). Bogoľubón má nasledovné charakteristiky:

- Hybnosť **P**. Operátor $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ s pravdepodobnosťou $|U_{\mathbf{k}}|^2$ vkladá hybnosť $\hbar \mathbf{k}$ a s pravdepodobnosťou $|V_{\mathbf{k}}|^2$ vyberá hybnosť $-\hbar \mathbf{k}$, čo je to isté. Preto hybnosť bogoľubónu $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ je s určitosťou $\mathbf{P} = \hbar \mathbf{k}$.
- Priemet spinu S^z . Operátor $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ s pravdepodobnosťou $|U_{\mathbf{k}}|^2$ zvyšuje priemet spinu o $\frac{1}{2}$ a s pravdepodobnosťou $|V_{\mathbf{k}}|^2$ znižuje priemet spinu o $-\frac{1}{2}$, čo je to isté. Preto priemet spinu bogoľubónu $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ je s určitosťou $S^z = \frac{1}{2}$.
- Energia bogoľubónu $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ je $E = E_{\mathbf{k}}$.
- Náboj Q. Operátor $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ s pravdepodobnosťou $|U_{\mathbf{k}}|^2$ vkladá náboj -e a s pravdepodobnosťou $|V_{\mathbf{k}}|^2$ ho vyberá. Preto stredná hodnota náboja Q bogoľubónu $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ je $Q = -e(|U_{\mathbf{k}}|^2 - |V_{\mathbf{k}}|^2)$. Rovnaký výsledok dostaneme integrovaním $Q = \int d^3 \mathbf{x} \rho_Q(\mathbf{x})$ cez celý priestor. Preto $Q = -e\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}$.
- Tok náboja \mathbf{J}_Q . Bogoľubón $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ je s pravdepodobnosťou $|U_{\mathbf{k}}|^2$ totožný s časticou s nábojom -ea rýchlosťou $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}$, kým s pravdepodobnosťou $|V_{\mathbf{k}}|^2$ je totožný s časticou s nábojom +ea rýchlosťou $\mathbf{v}_{-\mathbf{k}}^0 = -\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^0$. Teda tok náboja $\mathbf{J}_Q = |U_{\mathbf{k}}|^2(-e)\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^0 + |V_{\mathbf{k}}|^2(+e)(-\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^0)$. K rovnakému výsledku dospejeme integrovaním $\mathbf{J}_Q = \int d^3 \mathbf{x} \mathbf{j}_Q(\mathbf{x})$. Preto $\mathbf{J}_Q = -e\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^0$.
- Rýchlosť $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$. Bogoľubón $\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ je s pravdepodobnosťou $|U_{\mathbf{k}}|^2$ totožný s časticou s rýchlosťou $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}$, kým s pravdepodobnosťou $|V_{\mathbf{k}}|^2$ je totožný s časticou s rýchlosťou $\mathbf{v}_{-\mathbf{k}}^0 = -\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^0$. Teda rýchlosť je $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = (|U_{\mathbf{k}}|^2 |V_{\mathbf{k}}|^2)\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^0$. K rovnakému výsledku dospejeme porovnaním výrazu \mathbf{j}_N s hydrodynamickým výrazom $\rho_N \mathbf{v}_{\mathbf{k}}$. Preto $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\mathbf{v}_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}$, čo je obvyklý výraz pre grupovú rýchlosť.

Rozhranie normálny kov - supravodič: teória BTK.

V tomto odstavci preskúmame, ako tečie elektrický prúd cez rozhranie medzi kovom (N) a supravodičom (S). Obmedzíme sa pritom na skúmanie najjednoduchšieho modelu autorov Blonder, Tinkham a Klapwijk (BTK).⁷² Ide o jednorozmerný model, podľa ktorého sa v oblasti x < 0 nachádza normálny kov, kým v oblasti x > 0 sa nachádza supravodič s reálnym parametrom usporiadania Δ . Pre jednoduchosť sa naviac predpokladá, že jednočasticová energia v celom priestore je popísaná hamiltoniánom

$$h(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \mu + H\delta(x),$$

t.j. disperzné vzťahy v N a S oblastiach sú kvadratické, pričom Fermiho vektory k_F a Fermiho rýchlosti v_F sú v oboch oblastiach rovnaké. Člen úmerný H modeluje potenciálovú bariéru medzi N a S, ktorej veľkosť možno meniť od H = 0 až po $H \to \infty$, kedy sa elektróny premiestňujú z N do S iba pomocou slabého tunelovania.

⁷²G.E. Blonder, M. Tinkham, and T.M. Klapwijk, Phys. Rev. B **25**, 4515 (1982).


Obr. 19: Horný riadok: potenciálna energia v BTK probléme. Dolný riadok: disperzné zákony pre kvázičastice v N oblasti (vľavo) a v S oblasti (vpravo). Elektrón prichádzajúci zľava sa môže odraziť od rozhrania ako diera a alebo elektrón b, prípadne môže prejsť cez rozhranie ako bogoľubón c alebo d.

Riešenie BdG rovníc pre rozhranie

Našou prvou úlohou je vyriešiť BdG rovnice (44) v danej geometrii. Budeme pritom predpokladať, že z N oblasti na rozhranie dopadá rovinná vlna $\begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} e^{iK_+x}$ s energiou $E = \hbar v_F(K_+ - k_F) > \Delta$. Podľa rovnice (49) má dopadajúci tok kvázičastíc veľkosť $\frac{\hbar K_+}{m}$ a je orientovaný smerom k rozhraniu. Časť tohto toku sa od rozhrania odrazí a časť prejde. Prvým krokom bude identifikovať riešenia rovnice (44) s energiou E, ktoré nesú tok smerom od rozhrania. Existujú 4 typy takýchto riešení:

- Odraz (x < 0). Ide o riešenie BdG rovnice (44) v tvare $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iK_+x}$. Veľkosť vlnového vektora K_+ je rovnaká ako v dopadajúcej vlne. Podľa rovnice (49) toto riešenie nesie tok kvázičastíc $-\frac{\hbar K_+}{m}$ orientovaný smerom od rozhrania.
- Andrejevov odraz (x < 0). Ide o riešenie BdG rovnice (44) v tvare $\begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} e^{iK_-x}$. Veľkosť vlnového vektora K_- je fixovaná podmienkou aby vlastné číslo BdG rovnice bolo E, t.j. $\hbar v_F(K_- k_F) = -E$. Podľa rovnice (49) toto riešenie nesie tok kvázičastíc $-\frac{\hbar K_-}{m}$ orientovaný smerom od rozhrania. Fyzikálnym zmyslom tohto riešenia je, že elektrón sa odrazí ako diera s hybnosťou K_- , teda ako absencia elektrónu s hybnosťou $-K_-$ (pozri I.19). Inými slovami, po náraze dopadajúceho elektrónu na rozhranie ubudne z normálneho kovu elektrón, ktorý bol v stave $-K_-$ s energiou -E. Dvojica elektrónov pôvodne v stavoch K_+ , $-K_-$ s celkovou energiou E + (-E) = 0 (alebo 2μ v konvenčných jednotkách) vojde do supravodiča, kde vytvorí Cooperov pár, ktorý zmizne v kondenzáte.⁷³ Absentujúci elektrón v stave $-K_-$ popisujeme ako odrazenú dieru s hybnosťou K_- . Cooperov pár prenesený do oblasti S v našom popise nefiguruje.
- Transmisia (x > 0). Ide o riešenie BdG rovnice (44) v tvare $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} e^{ik_+x}$. Veľkosť vlnového vektora k_+ je fixovaná podmienkou aby vlastné číslo BdG rovnice bolo E, odkiaľ plynie $\hbar v_F(k_+-k_F) \approx \varepsilon$, kde $\varepsilon = \sqrt{E^2 \Delta^2}$. Koeficienty u, v sú dané výrazmi

$$u = \sqrt{\frac{E+\varepsilon}{2E}}, \qquad v = \sqrt{\frac{E-\varepsilon}{2E}}.$$

Podľa rovnice (49) toto riešenie nesie tok kvázičastíc $\approx \frac{\varepsilon}{E} v_F$ orientovaný smerom od rozhrania. V limite $\Delta \to 0$ toto riešenie prejde na tvar $\begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} e^{iK_+x}$, ktorý zodpovedá obyčajnej transmisii elektrónu medzi dvomi normálnymi kovmi.

⁷³V cvičení 4 ukazujeme, že energia Cooperovho páru v kondenzáte je 2 μ , teda elektróny v stavoch $K_+, -K_-$ mali správnu celkovú energiu na prechod do kondenzátu. Keďže úloha nie je translačne invariantná, tento prechod môže nastať aj v prípade, kedy celková hybnosť $K_+ - K_-$ nie je nulová.

• Anomálna transmisia (x > 0). Ide o riešenie BdG rovnice (44) v tvare $\begin{pmatrix} v \\ u \end{pmatrix} e^{-ik_{-}x}$. Veľkosť vlnového vektora k_{-} je fixovaná podmienkou aby vlastné číslo BdG rovnice bolo E, odkiaľ plynie $\hbar v_F(k_{-} - k_F) \approx -\varepsilon$, kde $\varepsilon = \sqrt{E^2 - \Delta^2}$. Koeficienty u, v sú dané tými istými výrazmi ako pri obyčajnej transmisii. Podľa rovnice (49) toto riešenie nesie tok kvázičastíc $\approx \frac{\varepsilon}{E} v_F$ orientovaný smerom od rozhrania. V limite $\Delta \to 0$ toto riešenie prejde na nefyzikálny tvar $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-iK_{-}x}$, preto tento proces medzi normálnymi kovmi absentuje.

Budeme teda predpokladať, že riešenie BdG rovníc má tvar

$$\begin{split} \Psi(x < 0) &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iK_{+}x} + b \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iK_{+}x} + a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{iK_{-}x}, \\ \Psi(x > 0) &= c \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} e^{ik_{+}x} + d \begin{pmatrix} v \\ u \end{pmatrix} e^{-ik_{-}x}. \end{split}$$

Toto riešenie spĺňa BdG rovnice s vlastnou energiou E. Štyri neznáme koeficienty a, b, c, d treba určiť zo zošívania riešení v bode x = 0. Dve podmienky dostaneme z požiadavky spojitosti riešenia, t.j. zo spinorovej rovnice $\Psi(0_-) = \Psi(0_+)$. Druhé dve podmienky dostaneme štandardným postupom: integrovaním ľavej aj pravej strany BdG rovnice cez infinitezimálny interval $(-\delta, \delta)$. Tak dostaneme spinorovú rovnicu $\Psi(0_-) + \frac{2mH}{\hbar^2}\Psi(0_-) = \Psi(0_+)$. Ak zavedieme bezrozmernú veľkosť povrchovej bariéry $Z = \frac{H}{\hbar v_F}$, potom zošívacie podmienky možno zapísať v tvare

$$1+b = uc + vd,$$

$$a = vc + ud,$$

$$i(1-b) + 2Z(1+b) = iuc - ivd,$$

$$(i+2Z)a = ivc - iud,$$

kde sme pre jednoduchosť položili $K_+ \approx K_- \approx k_+ \approx k_- \approx k_F$. Riešenie týchto rovníc má tvar

$$a = \frac{uv}{\gamma}, \quad b = \frac{iZ(iZ-1)(u^2 - v^2)}{\gamma}, \quad c = \frac{(1-iZ)u}{\gamma}, \quad d = \frac{iZv}{\gamma}, \quad \gamma = u^2 + Z^2(u^2 - v^2).$$

Dopadajúci tok kvázičastíc v_F sa teda rozdelil na odrazený tok Bv_F , andrejevovsky odrazený tok Av_F , tok transmisie Cv_F a tok anomálnej transmisie Dv_F , pričom

$$A = |a|^2$$
, $B = |b|^2$, $C = (|u|^2 - |v|^2)|c|^2$, $D = (|u|^2 - |v|^2)|d|^2$.

Dosadením výsledkov pre a, b, c, dľahko overíme, že platí

$$1 = A + B + C + D,$$

t.j. tok kvázičastíc sa zachováva, ako aj má byť.

Riešenie BdG rovníc pre $0 < E < \Delta$.

V tomto intervale energií existujú v oblasti S iba exponenciálne tlmené riešenia, teda očakávame riešenie

$$\Psi(x>0) = c \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} e^{ik_+x-\kappa_+x} + d \begin{pmatrix} v \\ u \end{pmatrix} e^{-ik_-x-\kappa_-x}$$

Vlnové vektory κ_{\pm} sú pritom toho istého rádu veľkosti ako odchýlky k_{\pm} od k_F , ktoré sme zanedbali. Preto môžeme zanedbať aj κ_{\pm} a naše výsledky pre koeficienty a, b, c, d zostanú v platnosti. Jediným rozdielom je, že koeficienty u, v sú v tomto prípade komplexné:

$$u = \sqrt{\frac{E + i\sqrt{\Delta^2 - E^2}}{2E}}, \qquad v = \sqrt{\frac{E - i\sqrt{\Delta^2 - E^2}}{2E}}.$$

Potom však $|u|^2 = |v|^2 = \frac{\Delta}{2E}$, a preto C = D = 0, t.j. tok kvázičastíc do supravodiča je nulový, ako bolo treba čakať. Dá sa však ukázať, že platí 1 = A + B, t.j. počet kvázičastíc sa zachováva aj v tomto intervale energií.

Výpočet prúdu cez rozhranie

V stacionárnom prípade môžeme prúdovú hustotu j v jednorozmernom systéme počítať v ktoromkoľvek bode. Pre jednoduchosť teda budeme výpočty robiť v oblasti N, kde dostaneme

$$j = -\frac{2e}{L} \sum_{k} f_k v_k^0 \approx -2eN(0)v_F \int dE \left[f_{\rightarrow}(E) - f_{\leftarrow}(E) \right],$$

kde $f_{\rightarrow}(E)$ je rozdeľovacia funkcia v oblasti N pre elektróny smerujúce zľava doprava a $f_{\leftarrow}(E)$ je analogický objekt pre elektróny idúce sprava doľava. Predpokladajme ďalej, že chemický potenciál v oblasti N sa zvýši o $\delta\mu$ oproti oblasti S. Vďaka tomu potečie z N do S tok elektrónov. Budeme však pritom predpokladať, že rozdeľovacie funkcie hlboko v oblastiach N a S sú $f_0(E - \delta\mu)$ a $f_0(E)$.⁷⁴

Keďže elektróny smerujúce zľava doprava pochádzajú hlboko z oblasti N, budeme predpokladať, že $f_{\rightarrow}(E) = f_0(E - \delta\mu)$. Na druhej strane, elektróny s energiou E v oblasti N, ktoré idú sprava doľava, môžu pochádzať z troch zdrojov. Prvým zdrojom sú elektróny, ktoré vznikli Andrejevovým odrazom dier s energiou E nalietavajúcich na rozhranie. Takéto diery sú v skutočnosti absentujúcimi elektrónmi s energiou -E. Počet takýchto absencií je $1 - f_{\rightarrow}(-E)$. Po zohľadnení pravdepodobnosti odrazu tak dostaneme príspevok $A(E) [1 - f_{\rightarrow}(-E)]$. Druhým zdrojom sú obyčajne odrazené elektróny, ktorých počet je úmerný $B(E)f_{\rightarrow}(E)$. Tretím zdrojom sú elektrónv prejdených z oblasti S do N taký istý, ako počet elektrónov prejdených z oblasti N do S, tých je však $[C(E) + D(E)] f_0(E)$. Pri konečnej hodnote $\delta\mu$ sa počet elektrónov prejdených z oblasti S do N nezmení oproti ich počtu pri $\delta\mu = 0$, teda je rovný $[C(E) + D(E)] f_0(E)$. Keď sčítame všetky príspevky, pre rozdeľovaciu funkciu pre elektróny v N idúce sprava doľava napokon dostaneme výsledok

$$f_{\leftarrow}(E) = A(E) \left[1 - f_{\rightarrow}(-E) \right] + B(E) f_{\rightarrow}(E) + \left[C(E) + D(E) \right] f_0(E).$$

Ak v tomto výraze využijeme vzťah $f_{\rightarrow}(E) = f_0(E - \delta \mu)$ a použijeme identity C + D = 1 - A - B a $1 - f_0(-E) = f_0(E)$, dostaneme ďalej

$$f_{\leftarrow}(E) = f_0(E) + A(E) \left[f_0(E + \delta\mu) - f_0(E) \right] + B(E) \left[f_0(E - \delta\mu) - f_0(E) \right].$$

Po dosadení výsledkov pre $f_{\rightarrow}(E)$ a $f_{\leftarrow}(E)$ do výrazu pre j napokon dostaneme, ak využijeme symetriu A(-E) = A(E),

$$j = -2eN(0)v_F \int dE \left[f_0(E - \delta\mu) - f_0(E) \right] \left[1 + A(E) - B(E) \right].$$

Túto formulu experimentátori často používajú na fitovanie dát. Aby sme ukázali ako dramaticky sa mechanizmus vodivosti mení pri zmene parametra Z charakterizujúceho bariéru medzi N a S, obmedzíme sa na analýzu diferenciálnej vodivosti pri teplote T = 0. Ak uvážime, že po priložení napätia V na oblasť N oproti S bude $\delta \mu = -eV$, dostaneme

$$\frac{\partial j}{\partial V} = 2e^2 N(0) v_F \left[1 + A(E) - B(E)\right]_{E=eV}$$

 $^{^{74}}$ Máme tu totiž na mysli tzv. bodové kontakty: v mieste rozhrania medzi N a S je prierez vodiča dramaticky zúžený, teda v tejto oblasti tečie veľká prúdová hustota. Ďaleko od spoja je však prúdová hustota malá.

Explicitné formuly pre funkcie A(E) a B(E) majú tvar

$$\begin{split} A(E) &= \frac{\Delta^2}{E^2 + (1 + 2Z^2)^2 (\Delta^2 - E^2)}, \qquad E < \Delta \\ A(E) &= \frac{\Delta^2}{\left[E + (1 + 2Z^2)\sqrt{E^2 - \Delta^2}\right]^2}, \qquad E > \Delta \\ B(E) &= \frac{4Z^2 (1 + Z^2) (\Delta^2 - E^2)}{E^2 + (1 + 2Z^2)^2 (\Delta^2 - E^2)}, \qquad E < \Delta \\ B(E) &= \frac{4Z^2 (1 + Z^2) (E^2 - \Delta^2)}{\left[E + (1 + 2Z^2)\sqrt{E^2 - \Delta^2}\right]^2}, \qquad E > \Delta \end{split}$$

Všimnime si, že keď S prejde do normálneho stavu, $A \to 0$ (t.j. vymiznú Andrejevove odrazy) a zároveň $B \to \frac{Z^2}{1+Z^2}$. Teda odpor rozhrania v normálnom stave nezávisí od napätia a je daný jediným číslom $R_N = \frac{\partial V}{\partial I}$. Ľahko nahliadneme, že v supravodivom stave platí

$$R_N \frac{\partial I}{\partial V} = (1+Z^2) \left[1 + A(E) - B(E)\right]_{E=eV}.$$

Grafy funkcie $R_N \frac{\partial I}{\partial V}$ pre dve limitné hodnoty parametra Z prezentujeme na obrázku 20.



Obr. 20: Diferenciálna vodivosť rozhrania N-S podľa teórie BTK v limitných prípadoch Z = 0 a $Z \gg 1$.

9 Metódy výpočtu pásových štruktúr

V prednáške o coulombovskom plyne sme skúmali pohyb elektrónov v modelovom prípade, kedy kompenzujúci kladný iónový náboj bol homogénne rozložený v priestore. V tejto prednáške budeme skúmať základný stav systému elektrónov v zadanom externom potenciáli $V(\mathbf{r})$ ľubovoľnej formy. Literatúra: Marder, Parr & Yang.

Funkcionál hustoty

Nech hamiltonián systému N elektrónov pozostáva z kinetickej energie $H_{\rm kin}$, coulombovskej interakcie medzi elektrón
mi H_{ee} a z potenciálnej energie elektrónov v externom pol
i $V(\mathbf{r})$. Ak zavedieme označenie $H_0 = H_{\rm kin} + H_{ee}$, potom celkový hamiltonián má tvar

$$H = H_0 + \sum_{\sigma} \int d^3 \mathbf{r} V(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}).$$

V ďalšom výklade sa obmedzíme na skúmanie iba takých mnohočasticových stavov $|\Psi\rangle$, ktoré reprodukujú predpísanú hustotu elektrónov $\rho(\mathbf{r})$, t.j. žiadame, aby pre danú (hladkú) funkciu $\rho(\mathbf{r})$ stav $|\Psi\rangle$ spĺňal podmienku

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \left\langle \Psi \left| \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \right| \Psi \right\rangle.$$
(50)

Funkcia $\rho(\mathbf{r})$ pritom musí spĺňať podmienky $\int d^3 \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) = N$ a $\rho(\mathbf{r}) \ge 0$. Predpokladajme teraz, že pre každé rozloženie hustoty $\rho(\mathbf{r})$ vieme nájsť takú vlnovú funkciu $|\Psi_0[\rho(\mathbf{r})]\rangle$, ktorá spĺňa podmienku (50)

$$\langle \Psi_0[\rho(\mathbf{r})]|H_0|\Psi_0[\rho(\mathbf{r})]\rangle = E_0[\rho(\mathbf{r})].$$

Keby sme poznali funkcionál $E_0[\rho(\mathbf{r})]$, mohli by sme hľadať rozloženie elektrónov a ich celkovú energiu pre akýkoľvek zadaný potenciál $V(\mathbf{r})$. Stačilo by totiž minimalizovať celkovú energiu $E[\rho(\mathbf{r})]$ podľa $\rho(\mathbf{r})$, pričom by platilo

$$E[\rho(\mathbf{r})] = E_0[\rho(\mathbf{r})] + \int d^3 \mathbf{r} V(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}).$$

Teda namiesto hľadania mnohočasticovej vlnovej funkcie $|\Psi\rangle$, ktorá je komplexnou funkciou 3N premenných, by stačilo nájsť reálnu funkciu $\rho(\mathbf{r})$ iba troch priestorových súradníc. Naviac, pri zmenených polohách iónov by v minimalizačnej procedúre stačilo zmeniť iba funkciu $V(\mathbf{r})$. Výstupom minimalizačnej procedúry by bola energia základného stavu mnohočasticového systému a rozloženie hustoty elektrónov $\rho(\mathbf{r})$ v priestore. Bohužiaľ, funkcionál $E_0[\rho(\mathbf{r})]$ nepoznáme.

Thomasovo-Fermiho priblíženie

V literatúre existuje niekoľko pokusov skonštruovať funkcionál $E_0[\rho(\mathbf{r})]$. Historicky prvým je Thomasovo-Fermiho priblíženie. V tomto priblížení sa implicitne predpokladá, že zmeny hustoty $\rho(\mathbf{r})$ sú pomalé a preto hustotu kinetickej energie elektrónov $e_{\rm kin}(\mathbf{r})$ v bode \mathbf{r} možno odhadnúť pomocou hustoty kinetickej energie homogénneho coulombovského plynu s hustotou $\rho(\mathbf{r})$. Ak využijeme výsledok $E_{\rm kin} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} N$ pre kinetickú energiu N elektrónov v objeme \mathcal{V} a ak naviac uvážime vzťah $k_F = (3\pi^2 \rho)^{1/3}$, dostaneme

$$e_{
m kin}({f r})=rac{E_{
m kin}}{{\cal V}}=rac{3}{5}rac{\hbar^2k_F^2}{2m}
ho=rac{3c}{5}rac{\hbar^2}{2m}
ho^{5/3}({f r}),$$

kde $c = (3\pi^2)^{2/3}$. V Thomasovom-Fermiho priblížení do funkcionálu $E_0[\rho(\mathbf{r})]$ ďalej vstupujú klasické coulombovské interakcie medzi medzi nábojovými hustotami, čiže

$$E_0^{\mathrm{TF}}[\rho(\mathbf{r})] = \frac{3c}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 \mathbf{r} \rho^{5/3}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Minimalizáciou funkcionálu $E^{\text{TF}}[\rho(\mathbf{r})]$ podľa $\rho(\mathbf{r})$ s vedľajšou podmienkou $\int d^3 \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) = N$ popísanou Lagrangeovým multiplikátorom μ dostávame Thomasovu-Fermiho rovnicu pre hustotu:

$$c\frac{\hbar^2}{2m}\rho^{2/3}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int d^3\mathbf{r}'\frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V(\mathbf{r}) = \mu.$$
(51)

Keďže pri zmenách hustoty má platiť $\delta E^{\text{TF}} - \mu \delta N = 0$, veličina μ má význam chemického potenciálu. Thomasovu-Fermiho teóriu možno pomerne úspešne aplikovať na veľké atómy, pre ktoré táto jednoduchá teória predpovedá celkovú energiu s presnosťou zhruba 20%. Táto teória však nie je schopná vysvetliť existenciu chemickej väzby: výpočty predpovedajú znižovanie energie molekuly pri vzďaľovaní atómov. Hlavným nedostatkom Thomasovej-Fermiho teórie je, že vyhladzuje rozloženie náboja a nemá v sebe zabudovanú existenciu diskrétnych elektrónových šupiek.⁷⁶

$$E_{\rm int}^{\rm FA}[\rho(\mathbf{r})] = \frac{N-1}{2N} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

V takto modifikovanej teórii napr. pre N = 1 dostávame $E_{int} = 0$, ako aj má byť.

⁷⁵Pri konečnej teplote môžeme definovať voľnú energiu ako funkcionál hustoty. Namiesto optimálnej vlnovej funkcie $|\Psi_0[\rho(\mathbf{r})]\rangle$ pritom hľadáme optimálnu maticu hustoty konzistentnú s $\rho(\mathbf{r})$.

⁷⁶Ďalším problémom teórie je, že Hartreeho člen zahŕňa interakcie elektrónov so sebou. Hartreeho-Fockova teória tento problém nemá, lebo Fockov člen presne kompenzuje nefyzikálnu časť Hartreeho člena. Ak skúmame N elektrónov, počet párov rôznych elektrónov je N(N-1), kým počet všetkých párov je N^2 . Fermi a Amaldi preto navrhli Hartreeho interakčnú energiu vo funcionáli hustoty násobiť faktorom $\frac{N(N-1)}{N^2}$:

Bolo podniknutých niekoľko pokusov vylepšiť Thomasov-Fermiho funkcionál hustoty. Prvým prirodzeným krokom je zahrnúť príspevok výmenného člena. Takáto teória sa nazýva Thomasova-Fermiho-Diracova a paradoxne vedie k ešte horšiemu súladu s experimentom než jednoduchšia Thomasova-Fermiho teória. Okrem tohto pokusu boli pokusy zahrnúť do funkcionálu hustoty aj členy úmerné gradientom. Marder tvrdí, že žiadna z takýchto teórií nie je bežne používaná.

Kohnove-Shamove rovnice

Kohn a Sham sa rozhodli vylepšiť popis kinetickej energie nasledovným spôsobom, ktorý je vlastne krokom späť od pokusu popísať interagujúci systém iba pomocou hustoty elektrónov. Podobne ako v teórii Hartreeho-Focka, základným objektom popisu N-časticového systému je N jednočasticových vlnových funkcií $\psi_l(\mathbf{r})$. Celkovú hustotu elektrónov možno dostať ako súčet jednočasticových príspevkov:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{N} |\psi_l(\mathbf{r})|^2,$$

pričom žiadame, aby $\int d^3 \mathbf{r} |\psi_l(\mathbf{r})|^2 = 1$. Kohn a Sham ďalej postulovali, že pomocou vlnových funkcií $\psi_l(\mathbf{r})$ je potrebné počítať iba kinetickú energiu. Energiu elektrónovo-elektrónových interakcií a samozrejme aj interakciu s vonkajším poľom možno počítať pomocou hustoty $\rho(\mathbf{r})$. Takto dostávame energetický funkcionál

$$E[\{\psi_l\}] = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l=1}^N \int d^3 \mathbf{r} \, |\nabla \psi_l(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{\rm xc}[\rho(\mathbf{r})] + \int d^3 \mathbf{r} V(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}),$$

kde elektrónovo-elektrónové interakcie prispievajú jednak klasickým Hartreeho členom, jednak tzv. výmenno-korelačným funkcionálom $E_{\rm xc}[\rho(\mathbf{r})]$, ktorý zohľadňuje ako Fermi-Diracovu štatistiku elektrónov (výmenné interakcie), tak aj korelačné efekty nad rámec teórie Hartreeho-Focka.⁷⁷

Pohybové rovnice pre vlnové funkcie $\psi_l(\mathbf{r})$ budeme hľadať variovaním $\delta E[\{\psi_l\}]/\delta \psi_l^*(\mathbf{r})$ pri splnení vedľajšej normovacej podmienky $\int d^3\mathbf{r} |\psi_l(\mathbf{r})|^2 = 1$, ktorej priradíme Lagrangeov multiplikátor ε_l . Ak využijeme, že $\delta \rho(\mathbf{r})/\delta \psi_l^*(\mathbf{r}) = \psi_l(\mathbf{r})$, pre $\psi_l(\mathbf{r})$ dostaneme tzv. Kohnove-Shamove rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_l(\mathbf{r}) + \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int d^3\mathbf{r}'\frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{\rm xc}[\rho(\mathbf{r})]}{\delta\rho(\mathbf{r})} + V(\mathbf{r})\right]\psi_l(\mathbf{r}) = \varepsilon_l\psi_l(\mathbf{r}).$$
(52)

Člen v hranatej zátvorke je efektívny potenciál pôsobiaci na elektróny, ktorý je súčtom Hartreeho potenciálu, výmenno-korelačného potenciálu a externého potenciálu.

Kohnova-Shamova rovnica (52) je formálne podobná Hartreeho-Fockovej rovnici: efektívny potenciál je funkciou elektrónovej hustoty $\rho(\mathbf{r})$, ktorá je funkciou vlnových funkcií $\psi_l(\mathbf{r})$. V čom je jej výhoda oproti Hartreeho-Fockovej rovnici? V prvom rade je Kohnov-Shamov potenciál lokálny, t.j. pôsobí iba na vlnovú funkciu v danom bode. To je veľké technické zjednodušenie oproti Hartreeho-Fockovmu nelokálnemu potenciálu. Po druhé je Kohnov-Shamov potenciál rovnaký pre všetky vlnové funkcie $\psi_l(\mathbf{r})$. Po tretie, prítomnosť výmenno-korelačného potenciálu nám umožňuje aspoň čiastočne vziať do úvahy korelačné javy, ktoré nie sú v Hartreeho-Fockovej aproximácii vôbec zohľadnené.

Podobne ako pri diskusii Hartreeho-Fockovej teórie je potrebné si všimnúť, že Kohnovu-Shamovu rovnicu možno písať v tvare

$$H_{\rm KS}\psi_l = \varepsilon_l\psi_l,\tag{53}$$

s hermitovským hamiltoniánom $H_{\rm KS} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{\rm KS}(\mathbf{r})$ s obyčajnou potenciálnou energiou $U_{\rm KS}(\mathbf{r})$.⁷⁸ Preto riešenia prislúchajúce rôznym ε_l sú automaticky ortogonálne a nemusíme zavádzať dodatočné Lagrangeove multiplikátory zaručujúce ortogonálnosť riešení.

⁷⁷Kohnova-Shamova metóda má opäť problém s vlastnými interakciami elektrónov. Jednou z ciest, ako ich odstrániť, je rozložiť výmenno-korelačný funkcionál na výmennú a korelačnú časť: $E_{\rm xc}[\rho(\mathbf{r})] = E_{\rm x}[\rho(\mathbf{r})] + E_{\rm c}[\rho(\mathbf{r})]$ a výmennú časť $E_{\rm x}[\rho(\mathbf{r})]$ počítať ako v Hartreeho-Fockovej metóde. Tak dostaneme tzv. Hartreeho-Fockovu-Kohnovu-Shamovu metódu, t.j. Hartreeho-Fockovu metódu s uvážením korelačných efektov.

⁷⁸Rovnako ako pri metóde Hartreeho-Focka, tento potenciál musí byť určený self-konzistentne.

Výmenno-korelačný funkcionál $E_{\rm xc}[\rho(\mathbf{r})]$ nie je známy. Existuje veľa empirických funkcionálov; výber funkcionálu pre konkrétnu aplikáciu sa často robí metódou pokusov a omylov. V praxi používané funkcionály možno rozdeliť do dvoch veľkých skupín:

*Aproximácia lokálnej hustoty (LDA):*⁷⁹ V tejto aproximácii predpokladáme, že výmenno-korelačný funkcionál je obyčajnou funkciou hustoty v danom bode.

Aproximácia so zovšeobecnenými gradientmi (GGA):⁸⁰ V tejto aproximácii predpokladáme, že výmennokorelačný funkcionál závisí nielen od funkčnej hodnoty hustoty v danom bode, ale aj od jej derivácií.

Metódy riešenia rovnice (53)

Schrödingerovu rovnicu (53) potrebujeme pri self-konzistentnom riešení problému vyriešiť veľa krát, preto je potrebné používať efektívne numerické metódy. Jednou z bežne používaných metód je rozvinúť hľadané funkcie $\psi_l(\mathbf{r})$ do úplného systému funkcií, čím sa problém (53) prevedie na problém z lineárnej algebry. Samozrejme, každý numerický výpočet pracuje iba s konečnou bázou, pozostávajúcou z povedzme M funkcií; v takom prípade potrebujeme diagonalizovať maticu $M \times M$.

Existujú dve protichodné stratégie výberu bázových funkcií. Jedna stratégia berie za bázové funkcie čo najjednoduchšie vlnové funkcie, aby bol výpočet potrebných maticových elementov čo najlacnejší. V prípade atómov a molekúl (t.j. v kvantovej chémii) sa pre radiálne vlnové funkcie obvykle volia gaussiány okolo jadier. V prípade kryštálov sa volia obyčajné rovinné vlny. Povedzme, že hľadáme Blochovu vlnovú funkciu príslušnú k vlnovému vektoru \mathbf{k} z 1. Brillouinovej zóny. Z Blochovej vety vieme, že takúto vlnovú funkciu dostaneme rozvojom

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{K}} c_{\mathbf{k}}(\mathbf{K}) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}},$$

kde **K** sú vektory recipročnej mriežky. Ak chceme popísať vlnové funkcie, ktoré sa menia na dĺžke d, potom potrebujeme uvážiť vlnové vektory **K**, ktorých veľkosť je aspoň $K \sim 2\pi/d$. Ak potrebujeme opísať pásy, ktoré vznikajú z atomárnych orbitálov s vysokými kvantovými číslami (a teda majú veľa nulových bodov), potom dĺžka d môže byť omnoho menšia než mriežková konštanta a preto budeme potrebovať veľký počet rovinných vĺn M; bežne sa používajú rádovo tisíce. To znamená, že potrebujeme študovať (pre každý vlnový vektor **k**) veľké matice $M \times M$. Našťastie nepotrebujeme poznať celé spektrum každej matice, ale stačí nám určiť prvých P najnižších vlastných energií a im príslušných vlnových funkcií.⁸¹ P je počet energetických pásov, ktoré takto dostaneme. Obvykle za P berieme o niečo väčšie číslo, než je počet obsadených pásov.

Druhá stratégia optimalizuje výber bázových funkcií tak, aby bolo možné pracovať s malými M. V prípade kryštálov táto stratégia znamená výber pomerne komplikovaných vlnových funkcií popísaných akronymami ako LAPW a LMTO. Týmto metódam sa však nebudeme venovať.

Pseudopotenciály

Metódy, o ktorých sme zatiaľ hovorili, popisujú pohyb všetkých elektrónov. Takýto prístup je však obvykle zbytočne komplikovaný. Skúmajme napríklad pásovú štruktúru medi. Z experimentov de Haasovho - van Alphenovho typu vieme, že meď má jedinú Fermiho plochu, ktorá je takmer guľová a jej veľkosť zodpovedá 1 elektrónu na atóm. Presne tieto výsledky možno očakávať z naivných úvah, keďže elektrónová konfigurácia atómu medi je $Cu=[Ar] 3d^{10} 4s^1$. Teda z 29 elektrónov medi je za elektrické vlastnosti zodpovedný jediný elektrón a 28 elektrónov vytvára inertné "vnútorné šupky". Naviac, tvar Fermiho plochy indikuje, že valenčný elektrón je takmer voľný. Je teda namieste otázka, či vieme skonštruovať teóriu, ktorá správne popíše valenčné elektróny a ktorá zároveň napr. pre meď vysvetlí, prečo sú tieto elektróny takmer voľné.

Nech $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ je blochovská vlnová funkcia 4s elektrónu medi s vlnovým vektorom **k**. Ďalej nech $|n_{\mathbf{k}}\rangle$ sú normalizované blochovské vlnové funkcie s tým istým vlnovým vektorom príslušné všetkým nižším (plne obsadeným) pásom. Vlnovú funkciu $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ možno samozrejme rozvinúť do radu $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\mathbf{K}} c_{\mathbf{K}} |\mathbf{K}_{\mathbf{k}}\rangle$ podľa rovinných vĺn $|\mathbf{K}_{\mathbf{k}}\rangle$ s vlnovými vektormi $\mathbf{k} + \mathbf{K}$, ale, ako sme videli, tento rad musí obsahovať veľa členov, aby rezultujúca vlnová funkcia $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ bola ortogonálna ku všetkým vlnovým funkciám $|n_{\mathbf{k}}\rangle$.

⁷⁹LDA=local density approximation.

⁸⁰GGA=generalized gradient approximation.

⁸¹O takýchto metódach sa zmienime v prednáške 11.

Uvažujme teraz o rozvoji vlnovej funkci
e $|\psi_{\bf k}\rangle = \sum_{\bf K} c'_{\bf K} |{\bf K}'_{\bf k}\rangle$ podľa tzv. ortogonalizovaných rovinných vĺn

$$|\mathbf{K}'_{\mathbf{k}}
angle = |\mathbf{K}_{\mathbf{k}}
angle - \sum_{n} |n_{\mathbf{k}}
angle \langle n_{\mathbf{k}} | \mathbf{K}_{\mathbf{k}}
angle.$$

Vlnové funkcie $|\mathbf{K}'_{\mathbf{k}}\rangle$ sú pritom z konštrukcie ortogonálne ku všetkým stavom z nižších pásov. Očakávame, že na rozvoj vlnovej funkcie $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ podľa $|\mathbf{K}'_{\mathbf{k}}\rangle$ bude potrebných omnoho menej členov. Schrödingerovu rovnicu $H|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon |\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ potom možno zapísať nasledovne:

$$\sum_{\mathbf{K}} c'_{\mathbf{K}} H | \mathbf{K}_{\mathbf{k}} \rangle - \sum_{\mathbf{K}} c'_{\mathbf{K}} \sum_{n} \varepsilon_{n\mathbf{k}} | n_{\mathbf{k}} \rangle \langle n_{\mathbf{k}} | \mathbf{K}_{\mathbf{k}} \rangle = \varepsilon \sum_{\mathbf{K}} c'_{\mathbf{K}} | \mathbf{K}_{\mathbf{k}} \rangle - \sum_{\mathbf{K}} c'_{\mathbf{K}} \sum_{n} \varepsilon | n_{\mathbf{k}} \rangle \langle n_{\mathbf{k}} | \mathbf{K}_{\mathbf{k}} \rangle,$$

kde sme využili, že stavy $|n_{\mathbf{k}}\rangle$ sú vlastnými stavmi hamiltoniánu: $H|n_{\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_{n\mathbf{k}}|n_{\mathbf{k}}\rangle$. Predpokladajme ďalej, že hamiltonián má tvar $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})$. Skalárnym súčinom získanej Schrödingerovej rovnice s rovinnou vlnou $\langle \mathbf{Q}_{\mathbf{k}}|$ dostaneme maticovú rovnicu $\sum_{\mathbf{K}} H'_{\mathbf{Q}\mathbf{K}}c'_{\mathbf{K}} = \varepsilon c'_{\mathbf{Q}}$ pre rozvojové koeficienty $c'_{\mathbf{Q}}$, kde

$$H'_{\mathbf{QK}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{Q}^2}{2m} \delta_{\mathbf{KQ}} + \langle \mathbf{Q_k} | U'(\mathbf{r}) | \mathbf{K_k} \rangle,$$

a namiesto potenciálnej energie sme zaviedli tzv. *pseudopotenciál* $U'(\mathbf{r})$:

$$U'(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) + \sum_{n} (\varepsilon - \varepsilon_{n\mathbf{k}}) |n_{\mathbf{k}}\rangle \langle n_{\mathbf{k}}|.$$

Keďže energie valenčných elektrónov ε sú väčšie než energie $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ a keďže projektory $|n_{\mathbf{k}}\rangle\langle n_{\mathbf{k}}|$ sú pozitívne definitné operátory, suma cez n je pozitívne definitná. Preto očakávame, že $|\langle \mathbf{K}_{\mathbf{k}}|U'(\mathbf{r})|\mathbf{K}_{\mathbf{k}}\rangle| <$ $|\langle \mathbf{K}_{\mathbf{k}}|U(\mathbf{r})|\mathbf{K}_{\mathbf{k}}\rangle|$. Ak podobná nerovnosť platí aj pre nediagonálne maticové elementy (čo predpokladáme), potom rozvoj podľa ortogonalizovaných rovinných vĺn konverguje naozaj rýchlejšie v porovnaní s rozvojom podľa obyčajných rovinných vĺn.

Teda pre stavy typu 4s je (z hľadiska numeriky) jednoduchšie namiesto plnej Schrödingerovej rovnice $\sum_{\mathbf{K}} H_{\mathbf{QK}} c_{\mathbf{K}} = \varepsilon c_{\mathbf{Q}}$ riešiť rovnicu $\sum_{\mathbf{K}} H'_{\mathbf{QK}} c'_{\mathbf{K}} = \varepsilon c'_{\mathbf{Q}}$, v ktorej potenciál $U(\mathbf{r})$ nahradíme pseudopotenciálom $U'(\mathbf{r})$ s omnoho menšími maticovými elementmi medzi rovinnými vlnami. Tento prístup naviac ukazuje, prečo sa stavy typu 4s správajú ako takmer voľné.

Všimnime si, že pseudopotenciál $U'(\mathbf{r})$ sa od obyčajnej potenciálnej energie líši dvomi črtami: po prvé, $U'(\mathbf{r})$ je funkciou vlastnej energie ε a vlnového vektora \mathbf{k} a po druhé, $U'(\mathbf{r})$ je nelokálny potenciál, t.j. výsledok pôsobenia pseudopotenciálu v bode \mathbf{r} na vlnovú funkciu $\psi(\mathbf{r})$ závisí od hodnôt $\psi(\mathbf{r})$ v celom priestore:

$$U'(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) + \sum_{n} (\varepsilon - \varepsilon_{n\mathbf{k}})\varphi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \int d^{3}\mathbf{r}'\varphi_{n\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}').$$

Ak definíciu pseudopotenciálu $U'(\mathbf{r})$ aplikujeme na potenciál jediného atómu, potom môžeme hovoriť o pseudopotenciáli ako o charakteristike chemického prvku (alebo presnejšie sféricky symetrického iónu s plnými vnútornými šupkami; v našom príklade iónu Cu⁺). V literatúre sa takéto pseudopotenciály často parametrizujú v tvare $U'(\mathbf{r}) = -\sum_{lm} V_l |lm\rangle \langle lm|$, kde $|lm\rangle$ sú sférické vlnové funkcie.

V praxi sa používajú dva typy pseudopotenciálov: empirické pseudopotenciály a tzv. pseudopotenciály "z prvých princípov",⁸² ktoré sa obvykle konštruujú fitovaním predpovedí Kohnovej-Shamovej teórie pre všetky elektróny. Na záver pre konkrétnosť uveď me jednoduchý fenomenologický pseudopotenciál s tzv. prázdnym jadrom, ktorý navrhol Ashcroft. Ide o lokálny sféricky symetrický pseudopotenciál, ktorý je nulový v tzv. jadre, t.j. pre $r < R_c$, a mimo jadra má tvar coulombovského potenciálu: $U'(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$, kde Ze je celkový náboj jadra a elektrónov vnútorných šupiek. Teda pseudopotenciál s prázdnym jadrom závisí od jediného parametra R_c , ktorý možno určiť napr. fitovaním účinného prierezu pre rozptyl elektrónov na atóme.

Cvičenia

1. Pomocou Thomasovej-Fermiho teórie preskúmajte základný stav atómu s (veľkým) protónovým číslom Z a s N = Z elektrón
mi, teda v rovnici (51) zoberte $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$. Vyriešte nasledovné čiastkové úlohy:

⁸²Marder pripomína, že takéto pomenovanie sľubuje priveľa, pretože pri ich odvodení sa používa množstvo priblížení.

a) Ukážte, že $\mu=0.$ Návod: preskúmajte rovnicu (51) pr
e $r \to \infty.$

b) Definujte potenciál $\varphi(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{d^3 \mathbf{r'} \rho(\mathbf{r'})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r'}|}$ a pomocou (51) (t.j. $c \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3}(\mathbf{r}) = e\varphi(\mathbf{r})$) ukážte, že platí:

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) = -\frac{Ze}{\epsilon_0} \delta(\mathbf{r}) + \frac{e}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}) = -\frac{Ze}{\epsilon_0} \delta(\mathbf{r}) + \frac{e}{\epsilon_0} \left(\frac{2me\varphi(\mathbf{r})}{c\hbar^2}\right)^{3/2}$$

c) Namiesto potenciálu $\varphi(r)$ zaveď
te $\varphi(r)=\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0r}\chi(r)$ a s pomocou vzťahu $\nabla^2(1/r)=-4\pi\delta({\bf r})$ ukážte

$$-\frac{Ze}{\epsilon_0}\delta(\mathbf{r})\chi(0) + \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r}\chi''(r) = -\frac{Ze}{\epsilon_0}\delta(\mathbf{r}) + \frac{e}{\epsilon_0}\left(\frac{2m}{c\hbar^2}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\chi(r)\right)^{3/2}$$

Ukážte ďalej, že túto rovnicu možno prepísať do tvaru $\chi''(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}\chi^{3/2}(x)$, kde $x = \frac{r}{l}$. Zaviedli sme pritom charakteristickú dĺžku $l = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{a_B}{Z^{1/3}}$ pre atóm s atómovým číslom Z; a_B je Bohrov polomer. Ukážte tiež, že funkcia $\chi(x)$ má spĺňať okrajovú podmienku $\chi(0) = 1$.

d) Numericky riešte rovnicu pre $\chi(x)$ s okrajovými podmienkami $\chi(0) = 1$ a $\chi(\infty) = 0$ (prečo?). Ukážte tiež, že pre veľké x má rovnica pre $\chi(x)$ asymptotické riešenie $\chi(x) = \frac{12^2}{x^3}$. Numericky ukážte, že derivácia $\chi'(0)$ je konečná a nájdite jej veľkosť.

e) Pomocou vzťahu medzi $\rho({\bf r})$ a $\varphi({\bf r})$ a pohybovej rovnice pr
e $\chi(x)$ ukážte, že platí

$$\rho(x) = \frac{32Z^2}{9\pi^3 a_B^3} \frac{\chi^{3/2}(x)}{x^{3/2}} = \frac{32Z^2}{9\pi^3 a_B^3} \frac{\chi''(x)}{x}.$$
(54)

Overte, že platí $\int d^3 \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) = Z$. Návod: ukážte $\int d^3 \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) = Z \int_0^\infty dx x \chi''(x)$, integrál počítajte per partes a použite známe asymptotické správanie funkcie $\chi(x)$.

f) Vypočítajte celkovú energiu atóm
u ${\cal E}(Z).$ Návod: najprv dokážte "Hellmanovu-Feynmanovu" vetu

$$\frac{\partial E}{\partial Z} = \int d^3 \mathbf{r} \frac{\partial \rho(\mathbf{r})}{\partial Z} \left[c \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V(\mathbf{r}) \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 \mathbf{r} \frac{\rho(\mathbf{r})}{r} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 \mathbf{r} \frac{\rho(\mathbf{r})}{r}$$

Pomocou nej ukážte, že $E(Z) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^Z dZ \int d^3 \mathbf{r} \frac{\rho(\mathbf{r})}{r}.^{83}$ Integrál cez **r** počítajte vo sférických súradniciach, použite výsledok (54) a ukážte, že

$$\frac{E(Z)}{E_B} = -\frac{16}{7\pi} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{1/3} \left[\chi'(\infty) - \chi'(0)\right] Z^{7/3} = -1.538Z^{7/3}$$

Výsledok porovnajte s experimentálnymi údajmi pre inertné plyny.

g) Zistite, ako rozmer atómu škáluje s atómovým číslom Z. Návod: rozmer atómu definujte ako taký polomer r_0 , vnútri ktorého sa nachádza Z - 1 elektrónov, čiže $4\pi \int_{r_0}^{\infty} dr r^2 \rho(r) = 1$. Pri výpočte použite asymptotiku funkcie $\chi(x)$ pre veľké x a overte konzistentnosť takéhoto priblíženia. Výsledok porovnajte s experimentálnymi údajmi pre inertné plyny.

10 Andersonov prechod kov-izolant

V tejto prednáške preskúmame pohyb neinteragujúcich elektrónov v silno neusporiadaných médiách pri nulovej teplote. Najprv metódou Greenových funkcií ukážeme, že v limite silnej neusporiadanosti sú všetky stavy elektrónov lokalizované bez ohľadu na typ mriežky. Potom metódou príbuznou metóde renormalizačnej grupy ukážeme, že v 1D a 2D systémoch sú elektrónové stavy lokalizované pre akúkoľvek konečnú hodnotu neusporiadanosti; preto prechod kov-izolant pri zvyšovaní neusporiadanosti je možný iba v 3D systémoch. Literatúra: Phillips, Marder, Ziman, II.4, III.4.

Lokátorový rozvoj

Skúmajme pohyb neinteragujúcich elektrónov na mriežke s náhodným potenciálom. Hamiltonián systému je totožný s modelom skúmaným v kapitole $4:^{84}$

$$H = H_0 + H'; \qquad H_0 = \sum_i V_i c_i^{\dagger} c_i; \qquad H' = -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^{\dagger} c_j + c_j^{\dagger} c_i).$$

Pre jednoduchosť budeme opäť predpokladať, že potenciál V_i v bode *i* je náhodný a nezávislý od iných bodov mriežky. Naviac budeme predpokladať, že rozdeľovacia funkcia P(V) je rovnaká pre všetky

⁸³Presvedčte sa, že N elektrónov v škatuli s objemom $\mathcal{V} \to \infty$ má energiu základného stavu $E(Z=0) \to 0$.

 $^{^{84}\}mathrm{V}$ tejto prednáške pracujeme v kánonickom formalizme, preto v hamiltoniáne nevystupuje člen úmerný $\mu.$

mriežkové body a má tzv. krabicový tvar $P(V) = \frac{1}{W}$ pre $|V| < \frac{W}{2}$, inak P(V) = 0. Teda W je mierou neusporiadanosti študovaného systému. Na rozdiel od kapitoly 4 sa teraz zaujímame o prípad silnej neusporiadanosti, $W \gg t$. Preto sme hamiltonián rozdelili iným spôsobom: za veľkú (neporušenú) časť hamiltoniánu berieme sadu lokálnych hamiltoniánov H_0 a za poruchu berieme tunelovanie elektrónov medzi rôznymi bodmi mriežky.

Opäť budeme skúmať Greenovu funkciu $G(m, j, \tau)$, pre ktorú sme odvodili pohybovú rovnicu (20), v ktorej berieme $t_{im} = t$ pre susedné body i, m a inak $t_{im} = 0$. Rovnica pre Greenovu funkciu gneporušeného systému je samozrejme iná ako v (20), pretože sme zmenili definíciu H_0 , a má tvar

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau} + V_i\right]g(i, j, \tau) = -\delta_{ij}\delta(\tau).$$

Podobne ako v kapitole 4 teraz ľahko overíme, že diferenciálnu rovnicu pre $G(m, j, \tau)$ možno pomocou Greenovej funkcie neporušeného systému $g(m, j, \tau)$ prepísať ako integrálnu rovnicu

$$G(m,j,\tau) = g(m,j,\tau) - \sum_{kl} \int_0^\beta d\tau' g(m,k,\tau-\tau') t_{kl} G(l,j,\tau')$$

alebo po Fourierovej transformácii

$$\overline{G}(m,j,\omega_n) = \overline{g}(m,j,\omega_n) - \sum_{kl} \overline{g}(m,k,\omega_n) t_{kl} \overline{G}(l,j,\omega_n) + \sum_{kl} \overline{G}(l$$

kde $\overline{g}(i, j, \omega_n) = \frac{\delta_{ij}}{i\omega_n - V_i}$. Ak teraz prejdeme od Matsubarových Greenových funkcií k retardovaným funkciám, ktoré označíme $G_{mj}(\omega)$ a $g_m(\omega) = g(m, m, \omega)$, integrálnu rovnicu pre $G_{mj}(\omega)$ môžeme zapísať v tvare $G_{mj}(\omega) = g_m(\omega)\delta_{mj} - \sum_l g_m(\omega)t_{ml}G_{lj}(\omega)$ alebo ekvivalentne ako nekonečný rozvoj

$$G_{mj}(\omega) = g_m \delta_{mj} - g_m t_{mj} g_j + \sum_l g_m t_{ml} g_l t_{lj} g_j - \sum_{lk} g_m t_{ml} g_l t_{lk} g_k t_{kj} g_j + \dots,$$

kde na pravej strane explicitne neuvádzame závislosti od frekvencie $\omega.$

Anderson študoval správanie tzv. lokálnej Greenovej funkcie $G_m(\omega) = G_{mm}(\omega)$. Ľahko nahliadneme, že na hyperkubickej mriežke ku $G_m(\omega)$ prispievajú iba členy s párnym počtom preskokov t_{ij} :

$$G_m(\omega) = g_m + \sum_l g_m t_{ml} g_l t_{lm} g_m + \sum_{lkj} g_m t_{ml} g_l t_{lk} g_k t_{kj} g_j t_{jm} g_m + \dots$$

Lokálne Greenove $g_m(\omega)$ funkcie niekedy skrátene nazývame *lokátormi*, na rozdiel od Greenových funkcií $G_0(\mathbf{k}, \omega)$ pri fixovanej hybnosti \mathbf{k} , ktoré nazývame *propagátormi*. Rozvoj podľa mocnín $g_m(\omega)$ sa v literatúre zvykne nazývať lokátorovým rozvojom.

Cleny lokátorového rozvoja pre bod m možno interpretovať ako uzavreté dráhy elektrónu, ktorých počiatočný aj konečný bod je m. Treba si uvedomiť, že počas svojho putovania sa elektrón mohol dočasne vrátiť do bodu m a následne ho opustiť. Nekonečný rozvoj lokálnej Greenovej funkcie môžeme zjednodušiť zavedením vlastnej energie $\Sigma_m(\omega)$, ktorú definujeme ako fragment lokátorového rozvoja neobsahujúci bod m. Tak dostaneme $G_m(\omega) = g_m(\omega) + g_m(\omega)\Sigma_m(\omega)G_m(\omega)$, ktor

$$\Sigma_m(\omega) = \sum_{l}' t_{ml} g_l t_{lm} + \sum_{lkj}' t_{ml} g_l t_{lk} g_k t_{kj} g_j t_{jm} + \dots$$

a čiarka nad sumou znamená, že sumácie sa vedú cez mriežkové body rôzne od m. Ak využijeme explicitný tvar Greenovej funkcie $g_m(\omega)$, dostaneme Dysonovu rovnicu pre lokátor systému s konečnými preskokovými amplitúdami medzi bodmi mriežky

$$G_m(\omega) = \frac{1}{\omega + i\gamma - V_m - \Sigma_m(\omega)}.$$

Pripomíname, že dosiaľ sformulovaná teória je presná.

Kritérium lokalizovanosti⁸⁵

V tomto odstavci budeme analyzovať spektrálnu funkciu $A_m(\omega)$ pre lokátor $G_m(\omega)$. Podľa kapitoly 4 pri teplote T = 0 dostávame $A_m(\omega) = \sum_n \left[\left| \langle n | c_m^{\dagger} | 0 \rangle \right|^2 \delta(\omega - E_n + E_0) + \left| \langle n | c_m | 0 \rangle \right|^2 \delta(\omega - E_0 + E_n) \right]$, kde suma beží cez všetky (mnohočasticové) vlastné stavy $|n\rangle$ hamiltoniánu H s počtom elektrónov, ktorý sa líši o jednotku od počtu elektrónov v referenčnom stave $|0\rangle$. Avšak, keďže H popisuje systém neinteragujúcich elektrónov, prípustné stavy $|n\rangle$ sa od stavu $|0\rangle$ môžu líšiť iba zmenou obsadenosti jedného z jednočasticových vlastných stavov hamiltoniánu H, povedzme stavu $|\alpha\rangle$ s energiou ε_{α} a vlnovou funkciou $\phi_{\alpha}(m)$. Preto platí presný vzťah

$$A_m(\omega) = \sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}(m)|^2 \delta(\omega - \varepsilon_{\alpha}).$$

Všimnime si, že $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A_m(\omega) = 1$, čo vyplýva z úplnosti systému vlnových funkcií $\phi_{\alpha}(m)$, t.j. z podmienky $\sum_{\alpha} |\phi_{\alpha}(m)|^2 = 1$. Vychádzajúc z presného výrazu pre $A_m(\omega)$ teraz preskúmame tvar funkcie $A_m(\omega)$ v limitných prípadoch malej a veľkej neusporiadanosti.

Začnime prípadom $t \gg W$, kedy očakávame delokalizované vlnové funkcie $\phi_{\alpha}(m)$. Inými slovami, v mriežke s \mathcal{N} bodmi by pre ľubovoľný bod malo platiť $|\phi_{\alpha}(m)|^2 \sim \frac{1}{\mathcal{N}}$. Naviac očakávame, že vlastné energie ε_{α} kvázispojito, t.j. s rozostupmi úmernými $\frac{1}{\mathcal{N}}$, vypĺňajú pás dovolených energií. V takomto prípade teda spektrálna funkcia $A_m(\omega)$ pozostáva z hustej sady píkov s rozostupmi úmernými $\frac{1}{\mathcal{N}}$, pričom váha každého z píkov je tiež rádu $\frac{1}{\mathcal{N}}$. Ak za γ vezmeme energiu úmernú $\frac{1}{\mathcal{N}^{\mu}}$, kde exponent μ leží medzi 0 a 1, potom v limite $\mathcal{N} \to \infty$ bude $A_m(\omega)$ spojitou funkciou frekvencie ω .

V opačnej limite t = 0 máme $A_m(\omega) = \delta(\omega - V_m)$, t.j. celá spektrálna váha je vyčerpaná jedinou delta-funkciou. Anderson poukázal na to, že v limite malých (ale konečných) $t \ll W$ by všetky stavy mali byť lokalizované. V takom prípade by spektrálna funkcia v (ľubovoľnom, ale pevne zvolenom) bode m mala pozostávať zo sady delta-funkčných píkov pri energiách ε_{α} s váhami $|\phi_{\alpha}(m)|^2$, pričom tieto váhy budú rádu 1 iba pre konečný počet stavov, ktoré sú lokalizované v blízkosti skúmaného bodu m. Pre rôzne voľby bodu m však dostávame rôzne sady delta-funkčných píkov s váhami rádu 1. Preskúmajme preto správanie celkovej hustoty stavov, t.j. váhy, s ktorou možno elektróny vkladať alebo vyberať do systému bez ohľadu na mriežkový bod, kde sa tak stane:

$$N(\omega) = \sum_{m} A_{m}(\omega) = \sum_{\alpha} \delta(\omega - \varepsilon_{\alpha}).$$

Keďže očakávame, že spektrum energií ε_{α} je kvázispojité, ak za γ opäť vezmeme energiu úmernú $\frac{1}{N^{\mu}}$, hustota stavov $N(\omega)$ (na rozdiel od funkcie $A_m(\omega)$) bude spojitou funkciou energie aj v lokalizovanom režime. Anderson v tejto súvislosti o lokalizovanom režime hovorí ako o kontinuu v energii, ale nie v priestore.

Teraz sa vrátime k poruchovej teórii podľa H' a spektrálnu funkciu $A_m(\omega)$ vyjadríme pomocou Dysonovej rovnice pre $G_m(\omega)$. Ak reálnu a imaginárnu časť vlastnej energie označíme $\Sigma_m(\omega) = E_m(\omega) - i\Gamma_m(\omega)$, dostaneme:

$$A_m(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_m(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma + \Gamma_m}{(\omega - V_m - E_m)^2 + (\gamma + \Gamma_m)^2}$$

Existujú dve možnosti, ako môže byť spektrálna funkcia pri frekvenci
i ω v limite $\gamma \to 0$ nenulová:

(i) Prvou možnosťou je, že $\Gamma_m(\omega) \neq 0$. V tomto prípade očakávame, že $A_m(\omega)$ je hladkou funkciou ω ; preto tento prípad zodpovedá prípadu delokalizovaných stavov.

(ii) Druhou možnosťou je prípad $\Gamma_m(\omega) = 0$ a zároveň $\omega = V_m + E_m(\omega)$. V takomto prípade obsahuje $A_m(\omega)$ delta-funkčný príspevok. Ako sme explicitne videli v kapitole 4, pre (triviálny) prípad mriežky s jedným defektným bodom toto riešenie zodpovedá viazanému alebo antiviazanému stavu mimo pásu dovolených energií, lokalizované stavy však vtedy vytvárajú diskrétne spektrum. Na druhej strane, o (netriviálnej) Andersonovej lokalizácii hovoríme vtedy, ak energie lokalizovaných stavov vytvárajú kontinuum. Preto Anderson ako kritérium lokalizácie navrhol skúmať funkciu $\Gamma_m(\omega)$ v limite $\gamma \to 0$:

⁸⁵V tomto odstavci sa opierame o výklad v nobelovskej prednáške P.W. Anderson, Rev. Mod. Phys. 50, 191 (1978).

Ak v spojitom spektre identifikujeme interval energií, v ktorom $\Gamma_m(\omega) = 0$, potom hovoríme o Andersonovej lokalizácii stavov v tomto intervale.

Self-konzistentná teória lokalizácie⁸⁶

Doteraz skonštruovaná teória pre $G_m(\omega)$ je presná. V ďalšom výklade je potrebné urobiť zjednodušenia. Prvým priblížením je, že vlastnú energiu odhadneme pomocou najjednoduchšieho diagramu v lokátorovom rozvoji, v ktorom však neporušenú Greenovu funkciu $g_l(\omega)$ nahradíme plnou lokálnou Greenovou funkciou $G_l(\omega)$:⁸⁷

$$\Sigma_m(\omega) = t^2 \sum_{l(m)} G_l(\omega) = t^2 \sum_{l(m)} \frac{1}{\omega + i\gamma - V_l - \Sigma_l(\omega)},$$

kde symbol l(m) označuje mriežkové body l susediace s bodom m. V druhej rovnici sme použili Dysonovu rovnicu pre lokátor. Dostali sme teda sadu self-konzistentných rovníc pre vlastné energie $\Sigma_m(\omega)$. Ak uvážime, že vlastné energie sú komplexné funkcie, rovnice pre Σ_m môžeme písať ako dve rovnice pre reálnu a imaginárnu časť:

$$E_m(\omega) = t^2 \sum_{l(m)} \frac{\omega - V_l - E_l}{(\omega - V_l - E_l)^2 + (\gamma + \Gamma_l)^2}, \qquad \Gamma_m(\omega) = t^2 \sum_{l(m)} \frac{\gamma + \Gamma_l}{(\omega - V_l - E_l)^2 + (\gamma + \Gamma_l)^2}.$$

Keďže spektrá hamiltoniánov H_0 aj H' sú (po stredovaní) symetrické okolo $\omega = 0$, očakávame, že aj spektrum plného hamiltoniánu je (po stredovaní) symetrické okolo $\omega = 0$. Odteraz sa preto budeme zaujímať len o stavy s energiou $\omega \approx 0$, t.j. o stavy v blízkosti stredu pásu,⁸⁸ pre ktoré môžeme zvoliť riešenie rovnice pre reálnu časť vlastnej energie v tvare $E_l = 0$.

V ďalšom výklade budeme predpokladať, že sa nachádzame vo fáze izolantu, a preto pre $\gamma \to 0$ budeme žiadať, aby $\Gamma \to 0$. Kritickú hodnotu neusporiadanosti W_c pre prechod izolant-kov potom určíme ako minimálnu hodnotu parametra W, pri ktorej ešte stále dostávame konzistentnú teóriu.

Ak použijeme naše predpoklady $\omega = E_l = 0$ a $\gamma \to 0$ a ak namiesto Γ_l zavedieme bezrozmernú veličinu $y_l = \frac{\Gamma_l}{\gamma}$, ktorá by v limite $\gamma \to 0$ mala nadobúdať konštantnú hodnotu, rovnicu pre imaginárnu časť vlastnej energie môžeme zjednodušiť na nasledovný tvar:

$$y_m = t^2 \sum_{l(m)} \frac{1+y_l}{V_l^2}.$$
(55)

Kľúčovým bodom Andersonovej analýzy je, že na tomto mieste nezačal počítať strednú hodnotu y_m , ale počítal hustotu pravdepodobnosti p(y), že imaginárna časť vlastnej energie nadobúda hodnotu $\Gamma = y\gamma$. Slovami Andersona: žiaden reálny atóm nie je priemerným atómom a žiaden experiment sa nerobí na súbore vzoriek, preto potrebujeme poznať pravdepodobnosti výsledkov a nie iba stredné hodnoty výsledkov.

Naším cieľom teda bude vypočítať funkciu p(y). Táto funkcia nezávisí od polohy bodu m, ale závisí od W. Najprv vypočítajme hustotu pravdepodobnosti $\pi(\varepsilon_l)$, že funkcia $\frac{t^2(1+y_l)}{V_l^2}$ nadobúda hodnotu ε_l . Keďže hodnoty V_l sú popísané rozdelením pravdepodobnosti $P(V_l)$, ľahko nahliadneme, že

$$\pi(\varepsilon_l) = \int_{-W/2}^{W/2} dV_l P(V_l) \int_0^\infty dy_l p(y_l) \delta\left[\frac{t^2(1+y_l)}{V_l^2} - \varepsilon_l\right].$$
(56)

Podobne, ak budeme skúmať mriežku s koordinačným číslom z, potom z rovnice (55) vyplýva, že pre hustotu pravdepodobnosti p(y) platí vzťah

$$p(y) = \int_0^\infty d\varepsilon_1 \dots \int_0^\infty d\varepsilon_z \pi(\varepsilon_1) \dots \pi(\varepsilon_z) \delta(\varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_z - y).$$

⁸⁶Pri výklade sledujeme prácu R. Abou-Chacra, P.W. Anderson, and D.J. Thouless, J. Phys. C 6, 1734 (1973).

⁸⁷V tomto kroku sme nekonečný rad pre Σ_m nahradili iným nekonečným radom. Tento krok bohužiaľ nie je celkom pod kontrolou. Teória Andersonovej lokalizácie preto nie je uzavretá. Najspoľahlivejšie informácie nám poskytujú numerické simulácie, pozri napríklad P. Markoš, acta physica slovaca **56**, 561 (2006).

 $^{^{88}}$ V odstavci o škálovacej teórii uvidíme, že stavy v blízkosti stredu pásu je najťažšie lokalizovať, teda kritická hodnota W_c , ktorú nájdeme, bude postačovať na lokalizovanie všetkých stavov.

Ak teraz za hustotu pravdepodobnosti $\pi(\varepsilon_l)$ dosadíme jej vyjadrenie (56), napokon dostaneme integrálnu rovnicu pre hustotu pravdepodobnosti p(y):

$$p(y) = \int_0^\infty d\varepsilon_1 \dots \int_0^\infty d\varepsilon_z \delta(\varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_z - y) \int_0^\infty dy_1 \dots \int_0^\infty dy_z p(y_1) \dots p(y_z)$$

$$\times \int dV_1 \dots \int dV_z P(V_1) \dots P(V_z) \delta\left[\frac{t^2(1+y_1)}{V_1^2} - \varepsilon_1\right] \dots \delta\left[\frac{t^2(1+y_z)}{V_z^2} - \varepsilon_z\right].$$

Vo zvyšku tohto odstavca budeme integrálnu rovnicu pre p(y) riešiť pomocou Laplaceovej transformácie od p(y) k funkcii $f(\tau) = \int_0^\infty dy p(y) e^{-y\tau}$. Aplikovaním operácie $\int_0^\infty dy e^{-y\tau}$ na obe strany integrálnej rovnice dostaneme po jednoduchej úprave nasledovnú integrálnu rovnicu pre $f(\tau)$:

$$f(\tau) = \left[\int dV P(V) e^{-\frac{t^2 \tau}{V^2}} f\left(\frac{t^2 \tau}{V^2}\right)\right]^z.$$

Ak uvážime explicitný tvar rozdelenia P(V), integrálnu rovnicu pre $f(\tau)$ možno zjednodušiť na tvar:

$$f(\tau)^{1/z} = \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} dV e^{-\frac{t^2 \tau}{V^2}} f\left(\frac{t^2 \tau}{V^2}\right).$$
(57)

Teraz nám zostáva zistiť, za akých podmienok má rovnica (57) akceptovateľné riešenia. Najprv si všimnime, že z normovanosti hustoty pravdepodobnosti p(y) dostaneme podmienku f(0) = 1. Preto pre malé τ budeme predpokladať, že $f(\tau) \approx 1 - A\tau^{\beta}$. Naviac budeme žiadať, aby $0 \leq \beta \leq \frac{1}{2}$, pozri cvičenia. Ak tento ansatz dosadíme do integrálnej rovnice (57), porovnaním mocnín pri τ^{β} na ľavej a pravej strane dostaneme podmienku pre koeficient β :

$$\ln \frac{W}{2t} = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{z}{1 - 2\beta}.$$

Skúmajme pravú stranu ako funkciu β . Pre β idúce k 0 alebo 1/2 pravá strana diverguje, kým medzi týmito hodnotami existuje minimum v bode β_c . Hodnota β_c je pritom implicitne daná rovnicou

$$\frac{1}{1 - 2\beta_c} = \frac{1}{2\beta_c} \ln \frac{z}{1 - 2\beta_c}.$$
(58)

Keďže minimálna hodnota W_c , pre ktorú možno integrálnu rovnicu pre $f(\tau)$ riešiť, je daná vzťahom $\ln \frac{W_c}{2t} = \min_{\beta} \left[\frac{1}{2\beta} \ln \frac{z}{1-2\beta} \right]$, dostávame podmienku $\ln \frac{W_c}{2t} = \frac{1}{1-2\beta_c}$. Túto rovnicu možno prepísať ako self-konzistentnú rovnicu pre W_c :⁸⁹

$$\frac{W_c}{2t} = \mathrm{e}z\ln\frac{W_c}{2t}$$

Napríklad pre z = 6 odtiaľ to dostaneme $\frac{W_c}{2t} \approx 69$ a $\beta_c \approx 0.38$. Veličinu W_c treba interpretovať ako kritickú hodnotu neusporiadanosti prechodu izolant-kov: pre $W > W_c$ totiž vieme nájsť funkciu $f(\tau)$ vychádzajúc z predpokladu o izolujúcom správaní. V tejto oblasti teda dostávame konzistentnú teóriu pre izolanty. Naopak, pre $W < W_c$ nie je predpoklad o izolujúcom správaní vnútorne konzistentný. Túto skutočnosť interpretujeme ako nestabilitu izolantu voči delokalizácii elektrónov.

Podľa self-konzistentnej teórie lokalizácie kritická hodnota neusporiadanosti W_c/t závisí iba od koordinačného čísla z mriežky a napr. v 1D a 2D systémoch má konečnú hodnotu. Ako ukážeme v nasledujúcom výklade, tento výsledok self-konzistentnej teórie lokalizácie je však kvalitatívne nesprávny. Zdá sa, že self-konzistentná teória podhodnocuje tendenciu k lokalizácii.

Škálovacia teória lokalizácie

Skúmajme vodivosť G hyperkubickej vzorky s hranou L v d rozmeroch. Napätie V nech je aplikované pozdĺž jednej z hrán. Predpokladáme, že vzorka je efektívne izotrópna, preto vodivosť je skalárna

 $\overline{ ^{89}\text{Rovnicu (58)}}$ možno prepísať do tvaru $\frac{1}{1-2\beta_c} - 1 = \ln \frac{z}{1-2\beta_c}$, preto minimálna hodnota W_c musí spĺňať vzťah $\ln \frac{W_c}{2t} - 1 = \ln \frac{z}{1-2\beta_c}$. Exponenciovaním oboch strán dostaneme $\frac{W_c}{2ezt} = \frac{1}{1-2\beta_c}$, kde e je základom prirodzených logaritmov. Ak na pravej strane využijeme vzťah $\frac{1}{1-2\beta_c} = \ln \frac{W_c}{2t}$, napokon dostaneme spomínaný výsledok.

veličina a prúd I = GV tečie v smere aplikovaného napätia. Bude nás zaujímať závislosť G od veľkosti L vzorky. Najprv preskúmame limitné prípady slabej a silnej neusporiadanosti.⁹⁰

Začnime prípadom slabej neusporiadanosti. V tomto prípade predpokladáme, že možno zaviesť mernú vodivosť σ . Odpor vzorky bude priamo úmerný jej dĺžke L a nepriamo úmerný jej prierezu $S = L^{d-1}$, t.j. $R = \sigma^{-1}L/S$, čo možno písať v tvare $G = \frac{1}{R} = \sigma L^{d-2}$. Všimnime si, že σ je materiálová konštanta nezávislá od veľkosti vzorky L.

V limite silnej neusporiadanosti očakávame, že elektróny budú lokalizované, t.j. vlnová funkcia stavu α bude exponenciálne klesať so vzdialenosťou od "stredu" vlnovej funkcie \mathbf{r}_{α} : $|\psi_{\alpha}(\mathbf{r})| \propto e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\alpha}|/\xi_{\alpha}}$, kde ξ_{α} je polomer lokalizácie stavu α . Intuitívne je zrejmé, že takéto vlnové funkcie prispievajú k transportu náboja z jedného konca vzorky na druhý, t.j. o vzdialenosť L, iba faktorom úmerným $e^{-c_{\alpha}L/\xi_{\alpha}}$, kde číslo c_{α} rádu 1 závisí od polohy stredu vlnovej funkcie α vo vzorke. Pre súčet príspevkov všetkých stavov, t.j. pre vodivosť vzorky G(L), potom bude platiť $G(L) \propto e^{-cL/\xi}$, kde ξ je charakteristický polomer lokalizácie vo vzorke.⁹¹

Všimnime si, že rozmer vodivosti G je rovnaký ako rozmer kombinácie fundamentálnych konštánt $\frac{e^2}{h}$, kde e je náboj elektrónu a h je Planckova konštanta. Preto namiesto o vodivosti G budeme odteraz hovoriť o bezrozmernej vodivosti g, pričom $G = \frac{e^2}{h}g$.

Teraz začneme riešiť nasledovnú úlohu. Vyberieme si veľkosť referenčnej vzorky L_0 a jej bezrozmernú vodivosť označíme $g(L_0)$. Budeme sa pýtať, ako sa pri zväčšovaní vzorky na rozmer $L = L_0 e^t$ (kde t > 0) mení jej vodivosť g(L). Túto úlohu budeme riešiť formulovaním diferenciálnej rovnice pre g(t). Pri jej hľadaní opäť rozlíšime limitné prípady dobre vodivej a lokalizovanej vzorky.

Ak vzorku veľkosti L môžeme považovať za dobre vodivú, potom zo vzťahu $g = \frac{h}{e^2} \sigma L^{d-2}$ vyplýva, že pri infinitezimálnom zväčšení vzorky o dL dostaneme zmenu vodivosti dg, pričom $\frac{dg}{dL} = (d-2)\frac{g}{L}$ alebo

$$\frac{d\ln g}{dt} = d - 2.$$

Na druhej strane, ak je vzorka veľkosti L lokalizovaná, potom na základe vzťahu $g(L) = ke^{-\frac{c}{\xi}L}$ dostaneme $\frac{dg}{dL} = -\frac{c}{\xi}g(L)$ alebo

$$\frac{d\ln g}{dt} = \ln g - \ln k \approx \ln g,$$

kde posledná približná rovnosť platí v limite $L \gg \xi$, keďže konštanta k je rádu 1.

Základným predpokladom škálovacej teórie lokalizácie je, že diferenciálne rovnice pre $\frac{d \ln g}{dt}$, ktoré sme odvodili v limitných prípadoch dobre a zle vodivých vzoriek, možno zovšeobecniť pre všetky hodnoty g zavedením pojmu beta funkcie $\beta(g)$, pozri kapitolu 3:

$$\frac{d\ln g}{dt} = \beta(g). \tag{59}$$

Správanie funkcie $\beta(g)$ pre veľké a malé hodnoty g sme už našli: pre malé hodnoty g platí $\beta(g) \approx \ln g < 0$ bez ohľadu na rozmernosť systému. Na druhej strane, pre veľké hodnoty g je $\beta(g) = d - 2$, čiže $\beta > 0$ pre trojrozmerné systémy s d = 3, $\beta = 0$ pre dvojrozmerné systémy s d = 2 a $\beta < 0$ pre jednorozmerné systémy s d = 1. Ak naviac predpokladáme, že beta funkcia je monotónne rastúca a hladká, pre d = 1, 2, 3 dostaneme priebeh funkcie $\beta(g)$ schematicky znázornený na obrázku 21.

Šípky na obrázku 21 zobrazujú, ako sa mení vodivosť g (alebo ekvivalentne $\ln g$) pri raste veľkosti systému L: v oblastiach s $\beta(g) < 0$ nárast veľkosti systému vedie k poklesu jeho vodivosti, kým v oblastiach s $\beta(g) > 0$ s rastom L vodivosť rastie. Z obrázka je zrejmé, že v 1D a 2D systémoch dostaneme $g \to 0$ v limite $L \to \infty$ bez ohľadu na hodnotu referenčnej vodivosti $g(L_0)$.⁹² To znamená, že všetky makroskopické 1D a 2D vzorky sú izolanty. V 3D systémoch však má rovnica $\beta(g) = 0$ riešenie v bode $g = g_c$. Ak teda vodivosť referenčnej vzorky spĺňa nerovnosť $g(L_0) > g_c$, potom s rastom L vodivosť rastie a v limite $L \to \infty$ diverguje. Takáto vzorka je teda kovová.

⁹⁰Ako sme zdôraznili v predošlom odstavci, pri štúdiu náhodných systémov by sme mali študovať pravdepodobnostné rozdelenia P(G) vodivosti súboru rovnako pripravených vzoriek. V tomto odstavci skúmame jednoduchšiu otázku o závislosti "charakteristickej" vodivosti G [napr. maxima G_{\max} rozdelenia P(G)] od lineárneho rozmeru vzorky L.

 $^{^{91}\}mathrm{V}$ ýsledok tohto typu sme dostali explicitným výpočtom pre 1D systém v III.4.

⁹²Pre 1D systémy sme tento výsledok ukázali explicitným výpočtom v III.4.



Obr. 21: Kvalitatívny náčrt beta funkcie pre jedno-, dvoj- a trojrozmerné systémy (d = 1, 2, 3).

S existenciou kritickej hodnoty vodivosti g_c súvisí dôležitý pojem medze pohyblivosti zavedený v II.4. Na základe Drudeho formuly $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ totiž očakávame, že vodivosť g je malá, ak vodivostný pás je takmer plný alebo takmer prázdny, pretože vtedy koncentrácia n nosičov náboja (dier alebo elektrónov) je malá. Preto ak sa Fermiho energia nachádza dostatočne blízko ku krajom pásu, potom $g < g_c$ a vzorky sú nevodivé.⁹³ Na druhej strane, ak vzorka neobsahuje príliš veľa defektov, potom môže existovať interval hodnôt Fermiho energie v blízkosti stredu pásu $\langle \varepsilon_{m1}, \varepsilon_{m2} \rangle$, pre ktorý sú vzorky kovové. Energie ε_{m1} a ε_{m2} sa nazývajú medzami pohyblivosti. Pri zvyšovaní neusporiadanosti W sa energie ε_{m1} a ε_{m2} navzájom približujú, až pri medznej hodnote W_c sa všetky stavy v páse stanú lokalizovanými.

Pri numerickom štúdiu Andersonovho prechodu kov-izolant je užitočné poznať funkčný tvar závislosti vodivosti g systému v blízkosti kritického bodu kov/izolant od veľkosti vzorky L. Túto závislosť možno nájsť pomocou škálovacej teórie lokalizácie: Za referenčnú veľkosť L_0 vezmime najmenšiu študovanú mriežku⁹⁴ a predpokladajme, že hodnota referenčnej vodivosti $g_0 = g(L_0)$ je blízka ku g_c . Ak teraz beta funkciu v blízkosti bodu g_c aproximujeme vzťahom $\beta(g) \approx \frac{g-g_c}{\nu g_c}$, ⁹⁵ pre g(L) na mriežkach veľkosti $L = L_0 e^t$ dostaneme rovnicu $\frac{dg}{dt} = g \frac{g-g_c}{\nu g_c}$, ktorú možno pre $g \approx g_c$ zjednodušiť na tvar $\frac{dg}{dt} \approx \frac{g-g_c}{\nu}$. Integrovaním tejto rovnice dostaneme $\int_{L_0}^L \frac{dg}{g-g_c} \approx \frac{t}{\nu}$, alebo explicitne

$$g(L) \approx g_c + (g_0 - g_c) \left(\frac{L}{L_0}\right)^{1/\nu}$$

Tento výsledok samozrejme platí len pre nie príliš veľké mriežky, pretože použité aproximácie platia iba pre $g \approx g_c$. Výsledok pre závislosť vodivosti od veľkosti systému môžeme zapísať aj v tvare $g(L) = g_c \left[1 \pm (L/\xi)^{1/\nu} \right]$, kde

$$\xi = L_0 \left(\frac{g_c}{|g_0 - g_c|} \right)^{\nu}.$$

Dĺžková škála ξ teda plne popisuje vlastnosti vzorky blízko kritického bodu. Naviac, ξ diverguje v kritickom bode. Preto je prirodzené jej priradiť jednoduchý fyzikálny zmysel: na izolujúcej strane prechodu kov-izolant, t.j. pre $g_0 - g_c < 0$, je dĺžka ξ totožná s lokalizačnou dĺžkou.

 $^{^{93}}$ Drudeho formula obvykle celkom dobre popisuje elektrickú vodivosť. Hoci sa podľa tejto formuly zdá, že k vodivosti prispievajú všetky elektróny (aj tie hlboko vo Fermiho mori) nie je tomu tak a v skutočnosti vodivosť ovplyvňujú iba elektróny v blízkosti Fermiho energie, pozri napr. I.18. Teda fakt, že vzorka je nevodivá, znamená, že pri Fermiho energii vzorky sa nachádzajú lokalizované stavy.

 $^{^{94}}$ Hodnota L_0 však musí byť dostatočne veľká, aby sme mohli použiť škálovaciu teóriu. Dĺžka L_0 by určite mala byť omnoho väčšia než mriežková konštanta.

 $^{^{95}}$ Tu sa nachádzame v zaujímavej situácii. Presný tvar funkcie $\beta(g)$ nie je analyticky známy, teda ani hodnoty g_c a ν nie sú a priori známe. Predpokladáme však, že uvedená formula platí. Z numerických simulácií funkcie g(L) potom možno určiť napríklad parameter ν .

Cvičenia

1. Numericky vyriešte rovnicu (57) pre funkciu $f(\tau)$. Overte ansatz $f(\tau) \approx 1 - A\tau^{\beta}$ pre malé τ .

11 Neporuchové metódy: exaktná diagonalizácia

V tejto prednáške riešime Schrödingerovu rovnicu mnohočasticového problému jej preformulovaním na úlohu o diagonalizácii matíc. Zaoberáme sa pritom dvomi úlohami: (i) ako možno minimalizovať rozmer matíc a (ii) ako možno efektívne hľadať minimálne vlastné číslo a k nemu príslušný vlastný vektor. Literatúra: SISSA.

Pod exaktnou diagonalizáciou rozumieme priame riešenie mnohočasticového problému. Skúmajme povedzme antiferomagnetický Heisenbergov model pre spiny S = 1/2 na štvorcovej mriežke s $\mathcal{N} = N \times N$ mriežkovými bodmi a periodickými okrajovými podmienkami. Fockov priestor tohto modelu má veľkosť $\mathcal{D} = 2^{\mathcal{N}}$ a obsahuje tzv. spinové konfigurácie $|\psi\rangle$. Numerické riešenie potom pozostáva z dvoch krokov:

1. vypočítať maticové elementy hamiltoniánu $\langle \psi | H | \chi \rangle$ pre všetky dvojice stavov $| \psi \rangle$ a $| \chi \rangle$

2. diagonalizovať hamiltonián, t.j. maticu prvkov $\langle \psi | H | \chi \rangle$ s rozmermi $\mathcal{D} \times \mathcal{D}$.

Hlavnou komplikáciou je, že \mathcal{D} veľmi rýchlo rastie s lineárnym rozmerom mriežky N. Napríklad pre N = 6 dostaneme $\mathcal{D} \approx 6.9 \times 10^{10}$. Teda dokonca ani mriežka 6×6 zrejme nebude hrubou silou zvládnuteľná.

Pokiaľ máme do činenia s problémom, ktorého jednočasticový Hilbertov priestor je nekonečný, pred prvý krok musíme zaradiť ešte jeden krok: musíme sa obmedziť na konečnú sadu jednočasticových stavov. Obvykle berieme do úvahy povedzme M najnižších jednočasticových orbitálov a pre túto voľbu riešime už popísanú úlohu. Striktne vzaté, po vyriešení úlohy pre dané M by sme mali overiť konvergenciu výsledkov pri zväčšovaní M.

Nasledujúci príklad ukazuje, ako s využitím symetrie problému vhodnou voľbou bázy možno maticu $\mathcal{D} \times \mathcal{D}$ previesť na blokovo diagonálny tvar, a teda na diagonalizáciu menších matíc.

Príklad: molekula H_2

Skúmajme nasledovný najjednoduchší model pre molekulu vodíka. Hilbertov priestor jednočasticových stavov nech pozostáva iba z dvoch ortonormálnych orbitálov: orbitál $|1\rangle$ je lokalizovaný v blízkosti atómu 1 a (identický) orbitál $|2\rangle$ sa nachádza v blízkosti atómu 2.⁹⁶ Predpokladáme, ze molekulu vodíka možno opísať nasledovným hamiltoniánom:

$$H = -t \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma}) + U(n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow}), \tag{60}$$

v ktorom prvý člen popisuje tunelovanie elektrónov medzi stavmi $|1\rangle a |2\rangle$, pričom amplitúda tunelovania je t. Druhý člen (v ktorom $n_{\alpha\sigma} = c^{\dagger}_{\alpha\sigma}c_{\alpha\sigma}$ je operátor počtu elektrónov v orbitáli $|\alpha\rangle$) modeluje coulombovskú interakciu medzi elektrónmi. Pripomíname, že plnú coulombovskú interakciu $V(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ by bolo treba popísať hamiltoniánom $H_{\text{coulomb}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{\sigma\sigma'} V_{\alpha\beta\delta\gamma} c^{\dagger}_{\beta\sigma'} c_{\delta\sigma'} c_{\gamma\sigma}$, kde

$$V_{\alpha\beta\delta\gamma} = \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{y} \varphi^*_{\alpha}(\mathbf{x}) \varphi^*_{\beta}(\mathbf{y}) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_{\delta}(\mathbf{y}) \varphi_{\gamma}(\mathbf{x})$$

V našom tzv. Hubbardovom modeli (60) zanedbávame všetky členy $V_{\alpha\beta\delta\gamma}$ okrem $V_{1111} = V_{2222} = U$, pretože sú obvykle omnoho menšie než U.

Keďže v molekule vodíka sú 2 elektróny, Fockov priestor pozostáva z $\frac{4!}{2!(4-2)!} = 6$ stavov typu $c^{\dagger}_{\alpha\sigma}c^{\dagger}_{\beta\sigma'}|0\rangle$. Teda na vyriešenie úlohy o základnom stave molekuly vodíka potrebujeme diagonalizovať hamiltonián s maticou 6 × 6. Ukážeme, že s využitím symetrií možno túto úlohu vyriešiť analyticky.

Začnime pozorovaním, že molekula vodíka má zrkadlovú symetriu. Formálne túto symetriu popíšeme pomocou operátora parity P, ktorý vymieňa indexy 1 a 2, t.j. $Pc_{1\sigma}^{\dagger}P = c_{2\sigma}^{\dagger}$ a $Pc_{1\sigma}P = c_{2\sigma}$.

 $^{^{96}}$ Orbitály $|1\rangle$ a $|2\rangle$ si možno predstaviť ako ortonormalizované orbitály typu 1s atómov 1 a 2.

Naviac žiadame, aby $P^2 = 1$. Predpokladáme tiež, že vákuum je symetrické voči P, t.j. $P|0\rangle = |0\rangle$. Okrem zrkadlovej symetrie očakávame, že hamiltonián (60) sa nezmení ani pri natočení kvantovacej osi pre spin. Formálnym prejavom týchto symetrií je, že operátor parity, operátor celkového spinu \mathbf{S}^2 a operátor S^z komponenty celkového spinu v smere z komutujú s hamiltoniánom (60). Dá sa ukázať (pozri cvičenia), že operátory H, \mathbf{S}^2, S^z, P vytvárajú systém komutujúcich operátorov:

$$[H, P] = [H, \mathbf{S}^2] = [H, S^z] = [P, \mathbf{S}^2] = [P, S^z] = 0.$$
(61)

Vďaka výsledku (61) môžeme vlastné stavy hamiltoniánu voliť ako vlastné stavy operátorov P, \mathbf{S}^2 a S^z . V ďalšom výklade skonštruujeme také lineárne kombinácie stavov $c^{\dagger}_{\alpha\sigma}c^{\dagger}_{\beta\sigma'}|0\rangle$, ktoré sú vlastnými stavmi týchto operátorov. Začneme konštrukciou stavu $|T_1\rangle$ s celkovým spinom S = 1 a projekciou spinu $S^z = 1$. Postupným aplikovaním znižovača celkového spinu S^- dostávame:

$$|T_1\rangle = c_{1\uparrow}^{\dagger}c_{2\uparrow}^{\dagger}|0\rangle, \qquad |T_0\rangle = 2^{-1/2}(c_{1\uparrow}^{\dagger}c_{2\downarrow}^{\dagger} + c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{2\uparrow}^{\dagger})|0\rangle, \qquad |T_{-1}\rangle = c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{2\downarrow}^{\dagger}|0\rangle.$$

Ľahko možno overiť, že celkový spin každého z trojice tzv. tripletných stavov $|T_n\rangle$ je S = 1 a že projekcie spinu týchto stavov sú $S^z |T_n\rangle = n |T_n\rangle$, t.j. sú navzájom rôzne. Naviac, parita tripletných stavov je P = -1.

Na druhej strane, ľahko overíme, že nasledovný stav s projekciou $S^z = 0$, ktorý je kolmý na $|T_0\rangle$, má kvantové čísla $S = S^z = 0$ a P = 1:

$$|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (c^{\dagger}_{1\uparrow}c^{\dagger}_{2\downarrow} - c^{\dagger}_{1\downarrow}c^{\dagger}_{2\uparrow})|0\rangle.$$

Zvyšné dva stavy obsahujú dvojnásobne obsadené orbitály 1 a 2:

$$|S_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{1\uparrow}^{\dagger} c_{1\downarrow}^{\dagger} + c_{2\uparrow}^{\dagger} c_{2\uparrow}^{\dagger})|0\rangle; \qquad |S_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{1\uparrow}^{\dagger} c_{1\downarrow}^{\dagger} - c_{2\uparrow}^{\dagger} c_{2\uparrow}^{\dagger})|0\rangle.$$

Kvantové čísla stavu $|S_2\rangle$ sú $S = S^z = 0$
aP = 1, kým kvantové čísla stavu $|S_3\rangle$ sú
 $S = S^z = 0$ a P = -1.

Všimnime si, že trojice kvantových čísiel S, S^z a P sú rôzne pre ľubovoľnú dvojicu stavov $|T_n\rangle$, $|S_m\rangle$. Jedinou výnimkou je pár stavov $|S_1\rangle$ a $|S_2\rangle$, ktorých kvantové čísla sú rovnaké. Preto všetky nediagonálne maticové elementy hamiltoniánu H v báze $|T_n\rangle$, $|S_m\rangle$ sú nulové, okrem maticových elementov $\langle S_1|H|S_2\rangle$ a $\langle S_2|H|S_1\rangle$. To nám umožňuje jednoducho nájsť spektrum hamiltoniánu (60), pozri cvičenia.

Konfiguračné interakcie

V kvantovej chémii sa exaktná diagonalizácia nazýva metódou konfiguračných interakcií. Keďže jednočasticový Hilbertov priestor je pre kvantovochemické problémy nekonečný, kľúčovú rolu zohráva výber jednočasticovej bázy. Jednou z možností je skúmať bázu Hartreeho-Fockových stavov, t.j. stavov riešiacich self-konzistentnú Schrödingerovu rovnicu⁹⁷

$$H_{HF}^{\sigma}\varphi_{\alpha\sigma}(\mathbf{x}) = \varepsilon_{\alpha\sigma}\varphi_{\alpha\sigma}(\mathbf{x}),\tag{62}$$

kde pôsobenie operátora H^{σ}_{HF} je popísané vzťahom

$$H_{HF}^{\sigma}\varphi_{\sigma}(\mathbf{x}) = [h(\mathbf{x}) + V_{H}(\mathbf{x})]\varphi_{\sigma}(\mathbf{x}) - \int d^{3}\mathbf{y}v_{\sigma}(\mathbf{x} - \mathbf{y})\varphi_{\sigma}(\mathbf{y}).$$

Lokálny Hartreeho potenciál $V_H(\mathbf{x})$ a hustota nelokálneho výmenného potenciálu $v_{\sigma}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ sú dané sumáciami cez obsadené orbitály $\alpha \sigma$:

$$V_H(\mathbf{x}) = \int d^3 \mathbf{y} V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sum_{\alpha \sigma} |\varphi_{\alpha \sigma}(\mathbf{y})|^2, \qquad v_{\sigma}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha \sigma}^*(\mathbf{y}) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_{\alpha \sigma}(\mathbf{x}).$$

⁹⁷Pozri napr. III.5.

Pri fixovaných potenciáloch $V_H(\mathbf{x})$ a $v_{\sigma}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ možno Hartreeho-Fockovu rovnicu (62) chápať ako rovnicu pre vlastné čísla $\varepsilon_{\alpha\sigma}$ a vlastné vektory $\varphi_{\alpha\sigma}(\mathbf{x})$ hermitovského operátora H_{HF}^{σ} . Sada stavov $\varphi_{\alpha\sigma}(\mathbf{x})$ potom tvorí úplný ortonormálny systém jednočasticových stavov, z ktorých môžeme budovať Fockov priestor. Keďže $\varphi_{\alpha\sigma}(\mathbf{x})$ sú optimálne jednočasticové stavy, je predpoklad, že v metóde konfiguračnej interakcie bude postačujúce uvažovať ako bázu jednočasticových stavov malý počet M takýchto orbitálov.

Ak zoberieme do úvahy symetriu problému, úlohu možno opäť zjednodušiť. Skúmajme pre konkrétnosť atómy so zaplnenými elektrónovými šupkami. V takom prípade sa dá ukázať,⁹⁸ že hamiltonián H_{HF}^{σ} je rotačne symetrický a jeho riešenia teda možno separovať na radiálnu a orbitálnu časť, $\varphi_{nlm}(\mathbf{x}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$ kde $Y_{lm}(\theta,\phi)$ sú sférické harmoniky. Radiálna vlnová funkcia mnohoelektrónového atómu $R_{nl}(r)$ závisí okrem hlavného kvantového čísla n aj od orbitálneho kvantového čísla l, pretože špeciálna symetria rovnice pre atóm vodíka pre necoulombovský potenciál nie je prítomná. Pre dané n, l teda existuje s ohľadom na spin 2(2l+1) degenerovaných riešení s $m = -l, \ldots, l$ a spinmi \uparrow, \downarrow . Teraz môžeme sformulovať, čo rozumieme pod atómom so zaplnenými šupkami: v takomto atóme je každá hladina ε_{nl} s radiálnou vlnovou funkciou $R_{nl}(r)$ alebo celkom prázdna, alebo obsadená 2(2l+1)elektrónmi. Keďže hamiltonián atómu komutuje s celkovým momentom hybnosti \mathbf{L}^2 a jeho priemetom L_z , ako aj s celkovým spinom \mathbf{S}^2 a jeho priemetom, môžeme sa pri exaktnej diagonalizácii obmedziť na štúdium podpriestorov s danými L, L_z, S, S_z . Napríklad v základnom stave atómu so zaplnenými šupkami očakávame $L = S = L_z = S_z = 0$.

Ak za jednočasticové stavy vezmeme Hartreeho-Fockove orbitály, dostaneme ďalšie zjednodušenie problému, ktoré síce nie je veľmi dôležité z numerického hľadiska, ale dáva nový pohľad na samotné priblíženie Hartreeho-Focka. Označme Hartreeho-Fockov Slaterov determinant ako $|HF\rangle$ a kreačné a anihilačné operátory pre jednočasticové stavy $\varphi_{\alpha\sigma}(\mathbf{x})$ nech sú $c^{\dagger}_{\alpha\sigma}$ a $c_{\alpha\sigma}$. Ak stavy budeme namiesto orbitálneho a spinového indexu zjednodušene indexovať jediným indexom: $a = \alpha\sigma, b = \beta\tau$, atď., potom hamiltonián H interagujúceho systému elektrónov možno zapísať v tvare

$$H = \sum_{a,a'} h_{a'a} c_{a'}^{\dagger} c_a + \frac{1}{2} \sum_{ab,a'b'} U_{a'b'ba} c_{a'}^{\dagger} c_{b'}^{\dagger} c_b c_a,$$

kde $h_{a'a} = \delta_{\sigma'\sigma} \int d^3 \mathbf{x} \varphi_{a'}^*(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \varphi_a(\mathbf{x})$ a $U_{a'b'ba} = \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{\tau'\tau} V_{\alpha'\beta'\beta\alpha}$. Pri pôsobení hamiltoniánu H na stav $|HF\rangle$ formálne dostaneme stavy 3 typov: (i) stav úmerný $|HF\rangle$, (ii) stavy s jedným časticovodierovým párom a (iii) stavy s dvomi časticovo-dierovými pármi. Teraz ukážeme, že v skutočnosti je časť vlnovej funkcie s jedným časticovo-dierovým párom nulová. Na jednej strane totiž platí, že tá časť vlnovej funkcie $H|HF\rangle$, ktorá obsahuje jeden časticovo-dierový pár, je daná vzťahom

$$H|HF\rangle_{1\text{pair}} = \sum_{a,a'} \left[h_{a'a} + \sum_{b} n_b (U_{a'bba} - U_{a'bab}) \right] c^{\dagger}_{a'} c_a |HF\rangle.$$

Ale na druhej strane skalárnym súčinom rovnice (62) so stavom $\varphi_{a'}$ dostaneme rovnicu

$$h_{a'a} + \sum_{b} n_b (U_{a'bba} - U_{a'bab}) = \varepsilon_a \delta_{a'a}$$

Preto pre $a' \neq a$ dostaneme nulový príspevok k $H|HF\rangle_{1\text{pair}}$. Inými slovami, maticový element hamiltoniánu medzi Hartreeho-Fockovým základným stavom a všetkými excitovanými stavmi s jedným (hartreeho-fockovským) časticovo-dierovým párom je nulový. Tento výsledok sa nazýva *Brillouinova* veta.

Exaktnú mnohočasticovú vlnovú funkciu $|\Psi\rangle$ možno hľadať rozvojom podľa počtu párov časticadiera pridaných k vlnovej funkcii $|HF\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \left[\kappa + \sum_{a'}^{\text{empty full}} \sum_{a}^{\text{full}} \kappa_{a';a} c_{a'}^{\dagger} c_a + \sum_{a'b'}^{\text{empty full}} \sum_{ab}^{\text{full}} \kappa_{a'b';ab} c_{a'}^{\dagger} c_{b'}^{\dagger} c_b c_a + \sum_{a'b'c'}^{\text{empty full}} \sum_{abc}^{\text{full}} \kappa_{a'b'c';abc} c_{a'}^{\dagger} c_{b'}^{\dagger} c_c c_b c_a + \dots\right] |HF\rangle$$

⁹⁸Pozri napríklad B. H. Bransden and C. J. Joachain, Physics of atoms and molecules, Longman, 1983.

Očakávame pritom malé hodnoty koeficientov $\kappa_{a';a}$ napr. oproti koeficientom $\kappa_{a'b';ab}$.⁹⁹

Diagonalizácia veľkých matíc

Vráťme sa k štúdiu antiferomagnetického spinového modelu. V tomto prípade sa zachováva celková hodnota spinu S, ako aj jeho priemet S_z . Podobne ako pre feromagnetický model, podpriestory s rôznymi hodnotami S_z možno ľahko separovať. Povedzme, že počet mriežkových bodov \mathcal{N} je párny. V takom prípade vieme, že základný stav antiferomagnetického Heisenbergovho modelu je singlet, t.j. $S = S_z = 0$. Pri hľadaní základného stavu sa teda môžeme obmedziť na skúmanie podpriestoru $S_z = 0$, ktorý obsahuje $\mathcal{D}_0 = \begin{pmatrix} \mathcal{N} \\ \mathcal{N}/2 \end{pmatrix}$ konfigurácií. Ak využijeme Stirlingovu formulu $n! \approx \sqrt{2\pi n} (n/e)^n$, potom sa ľahko presvedčíme, že veľkosť \mathcal{D}_0 je o niečo menšia ako veľkosť \mathcal{D} celého Fockovho priestoru: $\mathcal{D}_0 \approx \mathcal{D}\sqrt{\frac{2}{\pi \mathcal{N}}}$. Pre mriežku 6×6 tak dostaneme $\mathcal{D}_0 \approx 9.2 \times 10^9$. Projekcia na stavy s daným celkovým spinom S = 0 je netriviálna, pretože by sme museli spomedzi všetkých stavov $S_z = 0$ eliminovať všetky stavy, ktoré vznikajú znižovaním projekcie celkového spinu stavov s $S \neq 0$, a obvykle sa nerobí. Aplikovanie priestorových symetrií však ďalej redukuje veľkosť najväčšieho bloku a mriežky 6×6 sú dnes numericky zvládnuteľné.¹⁰⁰

Modifikovaný Lanczosov algoritmus

Kľúčovým pozorovaním je, že obvykle nás nezaujíma celé spektrum problému, ale iba základný stav a niekoľko excitovaných stavov s malou energiou. Túto úlohu možno efektívne riešiť Lanczosovým algoritmom, ktorého zjednodušenú verziu (tzv. modifikovaný Lanczosov algoritmus, MLA) teraz vyložíme.

MLA štartuje zo znalosti skúšobnej normalizovanej vlnovej funkcie $|\phi_0\rangle$, ktorá nesmie byť ortogonálna k skutočnému základnému stavu $|\psi\rangle$. Po *n* krokoch pomocou MLA nahradíme počiatočný odhad vlnovej funkcie základného stavu $|\phi_0\rangle$ vlnovou funkciou $|\phi_n\rangle$. Teraz ukážeme, ako funguje tzv. krok MLA algoritmu, ktorý generuje zo známej vlnovej funkcie $|\phi_n\rangle$ vylepšený normalizovaný odhad $|\phi_{n+1}\rangle$.

Skúmajme hamiltonovskú maticu v dvojrozmernom podpriestore tvorenom stavmi $|\phi_n\rangle$ a $H|\phi_n\rangle$. L'ahko overíme, že ak stredné hodnoty mocnín hamiltoniánu vo vlnovej funkcii $|\phi_n\rangle$ označíme $\Omega_i = \langle \phi_n | H^i | \phi_n \rangle$, potom v tomto podpriestore možno zaviesť ortonormálnu bázu s bázovými vektormi $|\phi_n\rangle$ a $|\phi'_n\rangle$, kde

$$|\phi'_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega_2 - \Omega_1^2}} \left[H|\phi_n\rangle - \Omega_1|\phi_n\rangle\right].$$

V podpriestore s bázou $|\phi_n\rangle$ a $|\phi'_n\rangle$ sa hamiltonián redukuje na maticu 2×2^{101}

$$H = \begin{pmatrix} \Omega_1 & \sqrt{\Omega_2 - \Omega_1^2} \\ \sqrt{\Omega_2 - \Omega_1^2} & \frac{\Omega_3 + \Omega_1^3 - 2\Omega_1 \Omega_2}{\Omega_2 - \Omega_1^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}.$$

Vlastné čísla a im príslušné vlastné vektory tejto matice označme E_{\pm} a $\begin{pmatrix} c_{1\pm} \\ c_{2\pm} \end{pmatrix}$, pozri dodatok. Ak $b \neq 0$, potom energia E_{-} je nižšia ako energia a stavu $|\phi_n\rangle$. V takom prípade za n + 1-vú iteráciu k základnému stavu vezmeme

$$|\phi_{n+1}\rangle = c_{1-}|\phi_n\rangle + c_{2-}|\phi_n'\rangle.$$

Na druhej strane, ak b = 0, potom $|\phi_n\rangle$ je vlastným stavom hamiltoniánu, pretože vtedy platí $\langle \phi_n | (H - \Omega_1)^2 | \phi_n \rangle = 0$, čo je možné iba ak $H | \phi_n \rangle = \Omega_1 | \phi_n \rangle$.

Všimnime si ďalej, že ak počiatočný stav $|\phi_0\rangle$ je vlastným stavom symetrie U hamiltoniánu H s vlastnou hodnotou λ , potom pre všetky stavy $|\phi_n\rangle$ tiež platí $U|\phi_n\rangle = \lambda |\phi_n\rangle$; inými slovami, ich

⁹⁹V prvom ráde poruchovej teórie sú koeficienty $\kappa_{a';a}$ nulové. Vyššie rády poruchovej teórie však dávajú konečný príspevok ku $\kappa_{a';a}$, pozri napr. A. Szabo and S. Ostlund, Modern quantum chemistry, Dover, 1996.

 $^{^{100}}$ Poučný príklad uvádza Mattis na str. 185-186. Naivný Fockov priestor mriežky 4×4 s periodickými okrajovými podmienkami má veľkosť $2^{16} = 65536$. Podpriestor s $S_z = 0$ má veľkosť 12870. Keďže Heisenbergov hamiltonián komutuje s operátorom posunutia o mriežkovú konštantu, všetky stavy možno charakterizovať (mriežkovou) hybnosťou. Skúmajme stav, ktorý vznikne z klasického Néelovho stavu a má nulovú mriežkovú hybnosť. Podpriestor stavov s rovnakou priestorovou symetriou ako tento stav má veľkosť iba 153.

 $^{^{101}}$ Všimnime si, že $\Omega_{1,2,3}$ sú reálne čísla. Na ich určenie potrebujeme nájsť stavy $H|\phi_n\rangle$ a $H^2|\phi_n\rangle$ a vhodné skalárne súčiny medzi nimi.

symetria je rovnaká ako symetria počiatočného stavu. Ak poznáme symetriu základného stavu, potom voľbou počiatočného stavu $|\phi_0\rangle$ s tou istou symetriou môžeme podstatne urýchliť konvergenciu MLA algoritmu.

A ako hľadať vlnové funkcie excitovaných stavov? Existujú dve možnosti: ak kvantové čísla λ_i excitovaného stavu, ktorý nás zaujíma, sú rôzne od kvantových čísel základného stavu, MLA algoritmus stačí spustiť s počiatočným stavom s požadovanými symetriami. Ak nás zaujímajú excitované stavy vnútri daného sektora symetrie, môžeme postupovať nasledovne: zvoľme počiatočný stav $|\phi_0\rangle$ s požadovanou symetriou a nájdime základný stav $|\psi\rangle$ v danom sektore symetrie. Excitované stavy dostaneme naštartovaním MLA algoritmu z vlnovej funkcie $|\chi_0\rangle$, ktorá je explicitne ortogonálna k $|\psi\rangle$:

$$|\chi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{1-|c|^2}} \left[|\phi_0\rangle - c |\psi\rangle \right],$$

kde $c = \langle \psi | \phi_0 \rangle$. K tomu stačí ukázať, že všetky iterácie $|\chi_n\rangle$ stavu $|\chi_0\rangle$ sú kolmé na $|\psi\rangle$. Dôkaz indukciou je triviálny: ak $\langle \psi | \chi_n \rangle = 0$, potom aj $\langle \psi | H | \chi_n \rangle = E_0 \langle \psi | \chi_n \rangle = 0$, kde E_0 je energia základného stavu. Ale ak $|\chi_n\rangle$ aj $H|\chi_n\rangle$ sú ortogonálne k $|\psi\rangle$, potom to platí aj pre ich ľubovoľnú lineárnu kombináciu. Preto musí byť $\langle \psi | \chi_{n+1} \rangle = 0$. Dôkaz je hotový.

Vyššie excitované stavy dostaneme postupnou ortogonalizáciou štartovacieho stavu k všetkým nižším stavom s danou symetriou.

Iné metódy

Plná Lanczosova metóda je podobná MLA metóde: opäť začíname so štartovacou vlnovou funkciou $|\phi_0\rangle$, ktorá nesmie byť ortogonálna k základnému stavu a konštruujeme sekvenciu stavov $|\phi_n\rangle$. Na rozdiel od MLA metódy, ktorá mnohorozmerný problém redukuje na opakovanú diagonalizáciu matíc 2×2 , plná Lanczosova metóda pôvodný problém prevádza na diagonalizáciu tridiagonálnej matice. Pekný text o Lanczosovej metóde možno nájsť napríklad v prednáškach SISSA.

Spomenieme ešte tzv. mocninnú metódu, ktorá je síce menej efektívna v porovnaní s MLA a s Lanczosovou metódou, ale je konceptuálne jednoduchá a ľahko sa programuje. Aj v tejto metóde začíname so štartovacou vlnovou funkciou $|\phi_0\rangle$, ktorá nesmie byť ortogonálna k základnému stavu. Sekvenciu vylepšených stavov pritom konštruujeme jednoduchým aplikovaním mocnín operátora \widetilde{H} : $|\phi_n\rangle = \widetilde{H}^n |\phi_0\rangle$.

A ako sa volí operátor \tilde{H} ? Predpokladajme, že spektrum hamiltoniánu H vieme zhora ohraničiť hodnotou ε_{\max} . Za operátor \tilde{H} zvoľme hamiltonián posunutý o konštantu: $\tilde{H} = H - E$, kde $E > \varepsilon_{\max}$. Vlastné stavy $|\psi_i\rangle$ operátorov H a \tilde{H} sú potom rovnaké. Vlastné čísla λ_i operátora \tilde{H} sú triviálne posunuté voči vlastným číslam operátora H a všetky sú záporné: $\lambda_i \leq \varepsilon_{\max} - E < 0$.

Teraz overíme, že postupnosť (nenormalizovaných) stavov $|\phi_n\rangle = \tilde{H}^n |\phi_0\rangle$ konverguje k násobku základného stavu $|\psi_0\rangle$. Za tým účelom rozložme počiatočný stav $|\phi_0\rangle$ podľa úplného systému stavov $|\psi_i\rangle$: $|\phi_0\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle$. Predpokladajme pre jednoduchosť, že základný stav je nedegenerovaný. Ak využijeme, že $|\psi_i\rangle$ sú vlastné stavy operátora \tilde{H} a že pre všetky excitované stavy platí $|\lambda_i/\lambda_0| < 1$, v limite $n \to \infty$ dostaneme

$$|\phi_n\rangle = \widetilde{H}^n |\phi_0\rangle = \sum_i c_i \lambda_i^n |\psi_i\rangle = \lambda_0^n \sum_i c_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0}\right)^n |\psi_i\rangle \to c_0 \lambda_0^n |\psi_0\rangle.$$

Teda za predpokladu $c_0 \neq 0$ mocninná metóda z vlnovej funkcie $|\phi_0\rangle$ vyprojektuje zložku rovnobežnú s $|\psi_0\rangle$. Efektívnosť metódy je daná veľkosťou $|\lambda_1/\lambda_0|$, kde λ_1 je vlastné číslo pre prvý excitovaný stav a kvalitou počiatočnej vlnovej funkcie $|\phi_0\rangle$: čím je $|\lambda_1/\lambda_0|$ menšie a $|c_0/c_1|$ väčšie, tým rýchlejšie metóda konverguje.

Cvičenia

1. Dokážte platnosť komutačných vzťahov (61).

2. Nájdite základný stav molekuly vodíka popísanej modelom (60). Vypočítajte energiu základného stavu.

3. Zdôvodnite, prečo je MLA algoritmus efektívnejší ako mocninná metóda. Návod: nech aktuálna aproximácia k základnému stavu je $|\phi_n\rangle$. Preskúmajte konvergenciu oboch metód v prípade, kedy presný základný stav je lineárnou kombináciou stavov $|\phi_n\rangle$ a $H|\phi_n\rangle$.

12 Dodatok

Priestorová Fourierova transformácia

Obvykle skúmame systémy v tvare (veľkého) rovnobežnostenu s objemom \mathcal{V} a s periodickými okrajovými podmienkami. Dovolené hodnoty vlnových vektorov **q** sú potom diskrétne a Fourierove transformácie pre ľubovoľnú veličinu $F(\mathbf{r})$ definujeme vzťahmi

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}.$$

Fourierovsky transformovanú funkciu $F_{\mathbf{q}}$ teda obvykle označujeme tým istým písmenom ako pôvodnú funkciu $F(\mathbf{r})$. Aby sme tieto dve rôzne funkcie rozlíšili, závislosť od vlnových vektorov \mathbf{q} píšeme ako index. Inverzná Fourierova transformácia má tvar:

$$F_{\mathbf{q}} = \int d^3 \mathbf{r} F(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}.$$

Časová Fourierova transformácia

K ľubovoľnej časovo závislej veličine F(t) definujeme jej Fourierovu transformáciu F_ω vzťahom

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} F_{\omega} e^{-i\omega t}$$

Inverzná Fourierova transformácia má tvar:

$$F_{\omega} = \int_{-\infty}^{\infty} dt F(t) e^{i\omega t}$$

Stirlingova formula

pre $n\gg 1$ platí $n!\approx \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n.$

Diagonalizácia hermitovskej matice 2×2

prvky matice 2 × 2: $H = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}$ vlastné čísla: $E_{\pm} = \frac{a+c}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a-c}{2}\right)^2 + |b|^2}$ vlastné vektory: $\begin{pmatrix} c_{1\pm} \\ c_{2\pm} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 \mp \alpha} \\ \pm \sqrt{1 \pm \alpha} \end{pmatrix}$, kde $\alpha = \frac{(c-a)/2}{\sqrt{|b|^2 + (c-a)^2/4}}$

Často používané operátory

operátor nábojovej hustoty (pozri napr. III.10):

1. kvantovanie	$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_i})$
Fourierova transformácia	$ \rho_{\mathbf{q}} = \sum_{i} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{i}} $
druhé kvantovanie pre bezspinové častice	$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}$

operátor prúdovej hustoty pre častice s hmotnosťou m (pozri napr. III.10):

1. kvantovanie	$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \sum_{i} \left[\mathbf{p}_{i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i}) \mathbf{p}_{i} \right]$
Fourierova transformácia	$\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2m} \sum_{i} \left[\mathbf{p}_{i} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{i}} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{i}} \mathbf{p}_{i} \right]$
druhé kvantovanie pre bezspinové častice	$\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{k}} (2\mathbf{k} - \mathbf{q}) a_{\mathbf{k} - \mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}$

Reprezentácia operátorov spinu pomocou elektrónových operátorov

Nech \mathbf{S}_i a \mathbf{S}_j sú operátory spinu pre elektróny v ortogonálnych orbitáloch *i* a *j*. Zvyšovacie a znižovacie operátory potom sú $S_i^{\pm} = S_i^x \pm i S_i^y$. Pre tieto operátory platia nasledovné komutačné vzťahy:

$$[S_i^{\alpha}, S_j^{\beta}] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\delta_{ij}S_i^{\gamma}; \quad [S_i^z, S_j^{\pm}] = \pm\delta_{ij}S_i^{\pm}; \quad [S_i^+, S_j^-] = 2\delta_{ij}S_i^z$$

Na druhej strane, nech $c_{i\alpha}^{\dagger}$ a $c_{i\alpha}$ sú kreačné a anihilačné operátory pre elektrón v orbitáli *i* s priemetom spinu $\alpha, \alpha \in (\uparrow, \downarrow)$, ktoré spĺňajú kánonické (anti)komutačné vzťahy:

$$\{c_{i\alpha}, c_{j\beta}\} = \{c_{i\alpha}^{\dagger}, c_{j\beta}^{\dagger}\} = 0; \qquad \{c_{i\alpha}, c_{j\beta}^{\dagger}\} = \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}.$$

Pomocou $c_{i\alpha}^{\dagger}$ a $c_{i\alpha}$ možno spinové operátory reprezentovať nasledovne:

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} c^{\dagger}_{i\alpha} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta},$$

kde $\vec{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ je trojica Pauliho matíc, ktorých explicitný tvar je

$$\sigma^{x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \sigma^{y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \qquad \sigma^{z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

zvyšovacie a znižovacie operátory: $S_i^+ = c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}, S_i^- = c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\uparrow}$ identita pre Pauliho matice: $\sigma^i \sigma^j + \sigma^j \sigma^i = 2\delta_{ij} \mathbf{1}$ skalárny súčin: $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} \left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right)$

Atómové jednotky

dĺžka: $a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529$ Å energia: $\varepsilon_B = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} = \frac{1}{2}\frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} = 13.6$ eV

Štatistická mechanika: kánonický súbor

kánonický hamiltonián: H kánonická štatistická suma: $Z = \text{Tr}e^{-H/T}$; $Z = Z(T, \mathcal{V}, N)$ rovnovážna matica hustoty: $\rho = \frac{1}{Z}e^{-H/T}$ stredná hodnota veličiny X: $\langle X \rangle = \text{Tr}\rho X$ voľná energia: $F = -T \ln Z$; $F = F(T, \mathcal{V}, N)$ logaritmovanie definície ρ : $-T \ln Z = H + T \ln \rho$ štatistická fyzika: $F = -T \ln Z = \langle H \rangle + T \langle \ln \rho \rangle$ termodynamika: F = E - TSporovnanie štatistiky a termodynamiky: vnútorná energia $E = \langle H \rangle$, entropia $S = -\langle \ln \rho \rangle = -\text{Tr}\rho \ln \rho$

 $dF = -pd\mathcal{V} - SdT + \mu dN; \quad p = -\left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{V}}\right)_{T,N}; \quad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{\mathcal{V},N}; \quad \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,N};$

nech hamiltonián závisí od parametra: $H = H(\lambda)$ potom $Z = Z(T, \mathcal{V}, N, \lambda) = \text{Tr}e^{-H(\lambda)/T}, F = F(T, \mathcal{V}, N, \lambda) = -T \ln \text{Tr}e^{-H(\lambda)/T}$ analóg Feynmanovej-Hellmanovej vety: $\left(\frac{\partial F}{\partial \lambda}\right)_{T,\mathcal{V},N} = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[\frac{\partial H}{\partial \lambda}e^{-H(\lambda)/T}\right] = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle_{T,\mathcal{V},N,\lambda}$

Statistická mechanika: grandkánonický súbor

grandkánonický hamiltonián: $\mathcal{H} = H - \mu N$ grandkánonická štatistická suma: $\mathcal{Z} = \operatorname{Tr} e^{-\mathcal{H}/T}$; $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}(T, \mathcal{V}, \mu)$ rovnovážna matica hustoty: $\rho = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\mathcal{H}/T}$; preto $-T \ln \mathcal{Z} = H - \mu N + T \ln \rho$ stredná hodnota veličiny $X: \langle X \rangle = \operatorname{Tr} \rho X$ grandkánonická voľná energia: $\mathcal{F} = -T \ln \mathcal{Z} = \langle H \rangle + T \langle \ln \rho \rangle - \mu \langle N \rangle = E - TS - \mu N$ entropia: $S = -\langle \ln \rho \rangle = -\operatorname{Tr} \rho \ln \rho$

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(T, \mathcal{V}, \mu); \quad d\mathcal{F} = -pd\mathcal{V} - SdT - Nd\mu; \quad p = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{V}}\right)_{T, \mu}; \quad S = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T}\right)_{\mathcal{V}, \mu}; \quad N = -\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu}\right)_{T, \mathcal{V}};$$

nech hamiltonián závisí od parametra: $\mathcal{H}(\lambda) = H(\lambda) - \mu N$ analóg Feynmanovej-Hellmanovej vety: $\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda}\right)_{T,\mathcal{V},\mu} = \left\langle\frac{\partial H}{\partial \lambda}\right\rangle_{T,\mathcal{V},\mu,\lambda}$ veta o malých prírastkoch pri zmene δH : $(\delta F)_{T,\mathcal{V},N} = \langle\delta H\rangle_{T,\mathcal{V},N,\lambda} = \langle\delta H\rangle_{T,\mathcal{V},\mu,\lambda} = (\delta \mathcal{F})_{T,\mathcal{V},\mu}$

13 Literatúra

- "AGD": A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski, Methods of quantum field theory in statistical physics, Dover, 1975
- 2. P. W. Anderson, Basic notions of condensed matter physics, Addison Wesley, 1984
- 3. A. Auerbach, Interacting electrons and quantum magnetism, Springer, 1994
- 4. K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Superconductivity, Vols. 1 & 2, Springer, 2008
- 5. H. B. Callen, Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, 2nd Ed., Wiley, 1985
- 6. J. Celý, Kvazičástice v pevných látkách, VUT Brno, 2004
- 7. P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, Principles of condensed matter physics, Cambridge University Press, 1995
- 8. P. G. de Gennes, Superconductivity of metals and alloys, Westview, 1999
- 9. G. Giuliani and G. Vignale, Quantum Theory of the Electron Liquid, Cambridge, 2005
- 10. D. L. Goodstein, States of matter, Dover, 1985
- 11. W. Jones and N.H. March, Theoretical Solid State Physics, Wiley, 1973
- 12. C. Kittel, Kvantová teória tuhých látok, Alfa, 1977
- 13. G. Mahan, Many particle physics, Plenum Press, 1981
- 14. M. P. Marder, Condensed matter physics, Wiley, 2000
- 15. D. C. Mattis, The theory of magnetism I, Springer, 1988
- 16. J. W. Negele and H. Orland, Quantum many-particle systems, Addison Wesley, 1988
- 17. "NP1": P. Nozières and D. Pines, The theory of quantum liquids, Vol. 1, Addison-Wesley, 1989
- 18. "NP2": P. Nozières and D. Pines, The theory of quantum liquids, Vol. 2, Addison-Wesley, 1990
- 19. R. D. Parks, Superconductivity, Vols. 1 & 2, Marcel Dekker, 1969
- 20. R. G. Parr and W. Yang, Density functional theory of atoms and molecules, Oxford, 1989
- 21. P. Phillips, Advanced solid state physics, Westview, 2003
- 22. G. Rickayzen, Green's functions and condensed matter, Academic Press, 1980
- 23. J. P. Sethna, Statistical mechanics: entropy, order parameters, and complexity, Oxford, 2006
- 24. J. R. Schrieffer, Theory of superconductivity, Westview, 1999
- 25. "SISSA": S. Sorella, G. Santoro and F. Becca, Numerical methods for strongly correlated electrons, http://people.sissa.it/~sorella/lecture.html
- 26. M. Tinkham, Introduction to superconductivity, 2nd Ed., Dover, 2004
- 27. G. Volovik, The universe in a helium droplet, Oxford University Press, 2003
- 28. "Zelená kniha": J. Pišút, L. Gomolčák a V. Černý, Úvod do kvantovej mechaniky, Alfa, 1983
- 29. J. Ziman, Models of disorder, Cambridge, 1979