

VI Metali - Proračun dielektričnih svojstava

Elektron-elektron interakcija u metalima - dielektrični "odgovor" metalnih elektrona

U kristalu izolatora elektron je vezan uz atom. Može se doduše izmjenjivati među atomima, ali nikad u WS ćeliji nemamo višak elektrona.

U kristalu vodiča elektroni nisu vezani (slobodni su!) => WS ćelija se može nabiti tj. imati višak ili manjak elektrona.

Već u WS metodi vidjeli smo (tj. pretpostavili u modelu) da će gibanje elektrona biti KORELIRANO tj. kad je negdje višak e⁻, drugdje je manjak => metal je prosječno neutralan i bez uvođenja Coulombovskih sila (weli smo Foulizy princip). Gibanje e⁻ u WS ćeliji je korelirano da bismo imali lokalnu neutralnost.

Sad želimo popraviti nešto korektniji model uvođeci dugodosežne Coul. sile tj. opisati tu globalnu neutralnost.

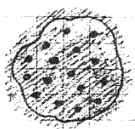
Dozvoljavamo lokalnu neutralnost i uvođimo eksplicite Coulombovske sile, a kao rezultat očekujemo zabranjivanje lokalnog nabijanja u danom vremenskom trenutku.

Na velikim udaljenostima (većim od jedne ćelije) nije nam važna znana struktura kristala => (dobra apro. u dugovalnom području k->0) gradimo model koji sadrži fizikalnu suštinu:

JELLIUM MODEL (model želea):

⊕ naboj je homogeno razmazana pozadina na kojoj se nalazi elektronski plin (koji bi da nema e⁻-e⁻ interakcije bio opisan ravnim valovima, zbog translacijske invarijantnosti)

Želimo pomiriti:
1) slobodne elektrone
2) dugodosežnost Coulombovske sile



← S₀ - gustota ⊕ naboja i ⊖ naboja: one su jednake jer je sistem neutralan!

Zbog gibanja elektrona u nekoj točki elektronska gustota može biti S₀ + δS = S₀ + S₁(r) (elektronima dozvoljavamo odstupanja) → u frekv. plozme

Imamo "normalne" Coulombove interakcije među nabojima:

- ⊖ - ⊖
- ⊖ - ⊖
⊖ - ⊖
- ⊖ - ⊖

koje su oblika:

$$\frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

→ to treba odrediti

→ Fourierov transformat: $\frac{e}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \int \frac{1}{q} V_q e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} d^3q$

$$\vec{r} - \vec{r}' = \vec{r}$$

$$1) \quad \rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} D_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad D_{\vec{q}} = \int d^3r e^{-i\vec{q}\vec{r}} \rho(\vec{r}) = 1$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

$$2) \quad \frac{e}{r} = \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad ; \quad V_{\vec{q}} = ? \quad \begin{matrix} \downarrow \text{uvrstimo (2)} \\ \downarrow \text{uvrstimo (1)} \end{matrix}$$

Vngedi iz elektrodinamike: $\nabla^2 \frac{e}{r} = -4\pi e \rho(\vec{r})$

$$(\nabla \vec{E} = 4\pi \rho \quad \rho = e \rho(\vec{r}) \quad \vec{E} = -\nabla V \Rightarrow \nabla^2 V = -4\pi \rho)$$

$$\Rightarrow \nabla^2 \frac{e}{r} = -4\pi e \rho(\vec{r})$$

$$- \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} V_{\vec{q}} \cdot q^2 = -4\pi e \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

$$\Rightarrow \sum_{\vec{q}} [q^2 V_{\vec{q}} - 4\pi e] = 0 \Rightarrow V_{\vec{q}} = \frac{4\pi e}{q^2}$$

Fourierov transformat Coulombovog potencijala

JELLIUM je najjednostavniji model. Zasto je moguće ovako jednostavnim modelom upće nešto pokrenuti? Jer se radi o dugodosežnoj sili => ne vidi se znata / kristalna struktura

↳ Blochova stanja su ravni valovi, e^{i\vec{k}\vec{r}}

(nema rešetke => promatramo ravne valove: $|\psi_{\vec{k}}\rangle = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{V}}$ jednoelektronska stanja)

- ravni valovi čine potpun skup stanja

$$\rightarrow \frac{e}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \sum_{\vec{q}} \frac{4\pi e}{q^2} e^{i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}$$

→ može se pokazati da u Hamiltonijanu sustava član q=0 (divergentan) propada

Hamiltonijan sustava:

$$H = H_{\text{slob. elektroni}} + H_{\text{e}^+ \text{e}^-} + H_{\text{pozadina}} + H_{\text{pozadina, e}^-}$$

dijagonalno (slobodne neinteragirajuće čestice)

Hint ← interakcija svih sa svima

Razmatranje člana u hamiltonijanu:

$$1^{\circ}) H_{e^-} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sum_{\substack{q \\ q \neq 0}} \frac{2\pi e^2}{q^2} e^{i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} =$$

$$= \sum_{\substack{q \\ q \neq 0}} \frac{2\pi e^2}{q^2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N e^{i\vec{q}\vec{r}_i} e^{-i\vec{q}\vec{r}_j}$$

razmotrimo:

$$S(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \sum_{i=1}^N \sum_{\vec{q}} S_{\vec{q}} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}_i)}$$

u biti koncentracija (a ne gustoća)

$$S(\vec{r}) = S_0 + \delta S(\vec{r})$$

$\langle S(\vec{r}) \rangle = S_0$
 kristal neutralan

$$S_{\vec{q}} = \int d^3r e^{-i\vec{q}\vec{r}} S(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \int d^3r e^{-i\vec{q}\vec{r}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \sum_{i=1}^N e^{-i\vec{q}\vec{r}_i}$$

$$\Rightarrow \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N e^{i\vec{q}\vec{r}_i} e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} = \sum_{i=1}^N e^{i\vec{q}\vec{r}_i} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} = \sum_{i=1}^N e^{i\vec{q}\vec{r}_i} \left[\sum_{j=1}^N e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} - 1 \right]$$

$$\Rightarrow H_{e^-} = \sum_{\vec{q}} \frac{2\pi e^2}{q^2} [S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} - S_0]$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} e V_{\vec{q}} [S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} - S_0]$$

ovdje je isključena interakcija elektrona sa samim sobom tj. član $i=j$ iz sume $\sum_{j=1}^N$ gdje je bio uvjet $i \neq j$

Promotrimo član $q=0$:

$$H_{e^-} = \frac{eV_0}{2} [S_0^2 - S_0] \approx \frac{1}{2} S_0^2 eV_0$$

$$V_0 = \iint d^3r_i d^3r_j \frac{e}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} e^{i\vec{0}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} = \iint d^3r_i d^3r_j \frac{e}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

$$H_{e^-} = \frac{1}{2} S_0^2 e^2 \iint d^3r_i d^3r_j \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

S_0 (gustoća homogene jednolike raspodjele) \Rightarrow član $q=0$ daje elektrostatsku vlastitu energiju distribuciji elektrona

$$H_{e^-} = \frac{1}{2} W \quad (\infty \text{ vlastita en. od } \infty \text{ homogene raspodjele})$$

$$2^{\circ}) \langle H_{+ \text{ pozod.}} \rangle = \frac{1}{2} \iint d^3r_1 d^3r_2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{2} S_0^2 e^2 \iint d^3r_1 d^3r_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{2} W$$

$$3^{\circ}) \langle H_{+ \text{ pozod.}, -e} \rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{(-e) \langle S(\vec{r}_1) \rangle e S_0}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{-S_0^2 e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = -W$$

Ukupna energija sustava $e^- + \text{pozodina}$:

$$U = \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \frac{S(\vec{r}) S(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad S(\vec{r}) = S_{el}(\vec{r}) + S_+(\vec{r})$$

$$= \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \frac{S_{el}(\vec{r}) S_{el}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \frac{S_+(\vec{r}) S_+(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \iint d^3r d^3r' \frac{S_{el}(\vec{r}) S_+(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Sumiramo:

$$\langle H_{int} \rangle = \langle H_{e^-} \rangle + \langle H_{+ \text{ pozod.}} \rangle + \langle H_{+ \text{ pozod.}, -e} \rangle = \frac{1}{2} W + \sum_{q \neq 0} \frac{2\pi e^2}{q^2} [S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} - S_0] + \frac{1}{2} W - W$$

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} \frac{4\pi e^2}{q^2} (S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} - S_0)$$

$$H_{int} = \int \frac{S(\vec{r}) S(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r'$$

$$S_{\vec{q}} = \int d^3r S(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

\hookrightarrow (bez dim!)

\hookrightarrow dakle, izbacili smo $q=0$ (divergentnog člana nema) jer znamo da osim e^- e^- interakcije imamo i interakciju s pozitivnom pozodinom (koja je homogena raspoređena)

$$\frac{1}{2} S_0 S_0 + \frac{1}{2} S_0 S_0 - S_0 S_0$$

\hookrightarrow on se u jellium modelu poništi $\frac{1}{2} W + \frac{1}{2} W - \frac{1}{2} W$
 $W = \infty$ (energija ∞ homogene raspodjele naboja)

! Divergentno ponašanje $V_{\vec{q}}$ za $q \rightarrow 0$ je direktna posljedica dugodosežnosti Coulombove interakcije. Tu je skrivena fizika

Pitanja:

- 1) Kako objasniti koreliranost?
- 2) Kako objasniti interakciju elektrona na velikim udaljenostima (ustvari nježno odsustvo).

Interakcija gustoća-gustoća je posljedica dugodosežnosti Coulombove sile.

Postupak:

Pravimo se da tražimo <Hint> - korekciju na energiji osnovnog stanja meinterogirajućeg elektronskog plina → to je povezano sa korelacionom funkcijom gustoća-gustoća <S_qS_{-q}> (≠ u istom trenutku t to je F.T. od <S(r)S(b)>)

Svaka aproksimacija na korel. funkciji odgovara aproksimaciji u energiji osnovnog stanja

(npr. d₁(ω) ~ <xx> Odzivna funkcija je proporcionalna korelacionoj - teorem fluktuacije i disipacije

$$\langle H_{int} \rangle = \sum_{q \neq 0} \frac{2\pi e^2}{q^2} (\langle S_q S_q^* \rangle - S_0)$$

$$\langle H_{int} \rangle \leftrightarrow \langle S_q^* S_q \rangle$$

kohezivna i dielektrna svojstva su intimno vezana

vezano uz ε_q

• Veza dielektrične i korelacione funkcije (odnosno energije i korelacione funkcije)

Maxwell:

1) $\vec{D}_q = \epsilon_q \vec{E}_q$ ← Fourierovi transformati funkcija (ovise o (q, ω))
- u inverznom prostoru to je produkt, a u direktnom je konvolucija

$$\left. \begin{aligned} \vec{D}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{q}} \vec{D}_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \\ S^{ext}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{q}} S_{\vec{q}}^{ext} e^{i\vec{q}\vec{r}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} \nabla \cdot \vec{D} &= 4\pi S^{ext} \\ \sum_{\vec{q}} [i\vec{q} \cdot \vec{D}_{\vec{q}} - 4\pi S_{\vec{q}}^{ext}] e^{i\vec{q}\vec{r}} &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 2) i\vec{q} \cdot \vec{D}_{\vec{q}} = 4\pi e S_{\vec{q}}^{ext}$$

$$3) i\vec{q} \cdot \vec{E}_{\vec{q}} = 4\pi e (S_{\vec{q}}^{ext} + S_{\vec{q}}^{ind})$$

S_q^{ind} → inducirana gustoća zbog vanjske smetnje

S^{ext}(r) - gustoća slobodnog ("vanjskog") naboja

(kako smo je definirali S(r) = ∑ S(r-r_i) to je u biti koncentracija)

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi \vec{P}$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = \nabla \cdot \vec{D} - 4\pi \nabla \cdot \vec{P} \\ \nabla \cdot \vec{E} = \frac{1}{4\pi e} S^{ext} - e S^{ind}$$

$$\vec{E} = -\nabla V$$

$$\vec{D} = -\nabla V^{ext}$$

$$\Rightarrow \vec{E} = -i\vec{q} V_q^{ext} \quad \vec{D} = -i\vec{q} V_q^{ext}$$

$$V_q = \frac{V_q^{ext}}{\epsilon_q}$$

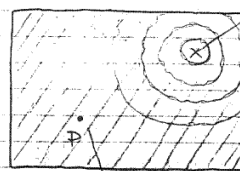
pot. u kristalu je vanjski pot. zasjenjen dielektrnom konstantom pozitivni naboj, a zasjenjen neg. naboj pa će izvana izgledati da se V_q smanji

$$1), 2) \text{ i } 3) \Rightarrow \frac{S_q^{ext}}{\epsilon_q} = S_q^{ext} + S_q^{ind}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\epsilon_q} - 1 = \frac{S_q^{ind}}{S_q^{ext}} \quad (**)$$

→ pomak gustoće e⁻ kao odgovor na vanjsku gustoću

↳ To je egzaktno.



oko vanjskog naboja redistribucija elektrona → zasjenjenje vanjskog naboja

$$V_q^{eff} = \frac{V_q^{ext}}{\epsilon_q}$$

$$\epsilon_q > 1 \Rightarrow V_q^{eff} < V_q^{ext}$$

u ovoj tački se vidi^o ukupni potencijal vanjskog naboja i redistribuiranih elektrona

• Hamiltonijan interakcije (q-ti član) sada pišemo u obliku: (H = ∑ H_q)

$$(*) H_q = \frac{4\pi e^2}{q^2} S_q^{ext} e^{i(\vec{k}\vec{r} + \omega t)} S_q^{ind} = V_q^{ext} \cdot S_q^{ind}$$

očekujemo da će pozit. rekviziton (pozitiv. konstanta) jer se ne umnožava udaljenost, nego se zasjenjuje

vanjski naboj pulsira ima raspored u prostoru i vremenu

↳ e⁻ gustoća se veže na vanjski potencijal.

$$S_q^{ind} = \left(\frac{1}{\epsilon_q - 1} \right) S_q^{ext} = \left[\left(\frac{1}{\epsilon_q - 1} \right) \frac{q^2}{4\pi e^2} \right] V_q^{ext} \quad (\text{za } \epsilon_q = 1 \text{ nema pomaka})$$

• Fluktuaciono-disipacioni teorem: veza funkcije odgovora (odzivne funkcije) sa korelacionom funkcijom

$$\Pi \langle S_q(\omega) S_{-q}(\omega) \rangle = -\frac{1}{4\pi e^2} \text{Im} \epsilon_q(\omega)$$

fluktuacija gustoće u odsustvu vanjskog otoka

isto što i S_q^{*}(ω)

↳ <S(r)S(b)> to je što se događa s ostalim elektronima (S(r) rad u o. stavimo S(b))

$$\langle H_{int} \rangle = -\frac{1}{2\pi} \sum_{q \neq 0} \left[\int \text{Im} \epsilon_q(\omega) d\omega + \frac{4\pi e^2}{q^2} S_0 \right]$$

↳ toka nam korel. funkcija ulazi u energiju osnovnog stanja

↳ ako V_q i V_ω znamo ε (Im ε⁻¹) tada znamo srednju energiju

* Dodatak:

Napomena: pretpostavljamo linearnost odziva inducirane gustoće na vanjsku smetnju.

def. $\phi^{ext} \equiv \int \tilde{\rho}^{ext}(\vec{q}) \frac{V_{\vec{q}}^{ext}}{|\vec{q}|} d^3q$

\leftarrow potencijalna energija vanjske smetnje V od gustoće $\tilde{\rho}^{ext}$ (to su ovdje u \vec{q} -prostoru produkti dok je u \vec{r} -prostoru konvolucija)
 \uparrow potencijal smetnje
 \uparrow potencijalna energija vanjske smetnje V od gustoće $\tilde{\rho}^{ext}$ (to su ovdje u \vec{q} -prostoru produkti dok je u \vec{r} -prostoru konvolucija)
 \uparrow

tj. $\phi = \int d^3r V(\vec{r}) \rho(\vec{r})$

Definirajmo odzivnu funkciju R' kao:

$\tilde{\rho}^{ind} = R' \phi^{ext} + R' \phi^{ext2} + \dots$ (linearnost odziva na pot. en. smetnje)

($\tilde{\rho} = e\rho$; ispuštamo oznake (\vec{q}, ω) , one se podrazumijevaju)

$\phi^{eff} = \phi^{ext} + \phi^{ind} = \tilde{\rho}^{ext} V^{ext} + \tilde{\rho}^{ind} V^{ext}$

$= (\tilde{\rho}^{ext} + \tilde{\rho}^{ind}) V^{ext}$ (efektivna pot. energija vanjskog i induciranog naboja)

$\tilde{\rho}^{ind} = R' (\tilde{\rho}^{ext} + \tilde{\rho}^{ind}) V^{ext}$

$\Rightarrow \tilde{\rho}^{ind} = \frac{R' V^{ext}}{1 - R' V^{ext}} \tilde{\rho}^{ext}$ $\Rightarrow \frac{R' V^{ext}}{1 - R' V^{ext}} = \frac{1}{\epsilon - 1}$

** $\tilde{\rho}^{ind} = \left(\frac{1}{\epsilon} - 1\right) \tilde{\rho}^{ext}$

\uparrow odzivna funkcija među gustoćama (konc.)

$R'_{\vec{q}, \omega}$ - odzivna funkcija inducirane gustoće i ukupne potencijalne energije

$\Rightarrow \epsilon_{\vec{q}, \omega} = 1 - R'_{\vec{q}, \omega} V_{\vec{q}}$

Ukupna energija:

$$U = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{\rho^{ext}(\vec{r}) \rho^{ext}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{\rho^{ind}(\vec{r}) \rho^{ind}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \int d^3r \int d^3r' \frac{\rho^{ind}(\vec{r}) \rho^{ext}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$H_{int} = \int d^3r V^{ext}(\vec{r}) \rho^{ind}(\vec{r}) \xrightarrow{\vec{q} \text{ prostor}} V_{\vec{q}}^{ext} \rho_{\vec{q}}^{ind} \Rightarrow (*)$

* Dodatak: (M. Šunjić: Kvantna fizika mnoštva čestica)

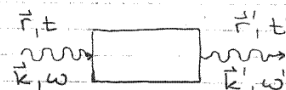
1. Korelativne funkcije

1.1. Procesi raspršenja i linearni odziv sistema

Svaki pokus koji izvodimo na nekom fizičkom sistemu (npr. atomu, atomskoj jezgri ili kristalu) što se sastoji od mnoštva jednakih ili različitih čestica, u načelu sadrži dva koraka:

- pobudjenje sistema pomoću meke vanjske pobude
- mjerenje odziva sistema na tu vanjsku pobudu (smetnju)

Shematski je taj postupak prikazan na slici:



(\vec{r}, t) prostorno-vremenske koordinate vanjske pobude
 $\rightarrow (\vec{k}, \omega)$ valni vektor i frekvencija vanjske pobude
 analogno za mjereni odziv na desnoj strani

Na taj način možemo, u načelu, svojstva sistema ispitivati mikroskopskom "sondom" - česticom ili valom. Pogodnost meke eksperimentalne metode ovisi:

- o interakciji probne čestice ili vala s onim dijelovima mikrostrukture sistema (npr. s elementarnim pobudjenjima kojih svojstva ispitujemo)
- o energetske i prostorne (angularne) rezoluciji izvora i detektora
- o mogućnosti korisne interpretacije mjerenih spektara i njihova povezivanja s osnovnim veličinama

Pogodan okvir za tumačenje rezultata takvih mjerenja je opća teorija linearnog odziva - koja se temelji na linearnosti odziva sistema: mjereni odziv sistema linearno je razmjerni nametnutoj uzbudi kojom djelujemo na sistem. Takva linearna veza uzbude i odziva djelotvorno vrijedi u tzv. linearnim sistemima. Tako nazivamo sisteme u kojima smetnja djeluje posebno na svaki element sistema, npr. elektron, ion ili spin, a ti elementi međusobno ne djeluju. No linearni su sistemi ili rijetki ili nezanimljivi jer pokusi na njima ne donose ništa novo što ne znamo već i o samim njihovim slobodnim djeljicima.

Većina je realnih sistema nelinearna, tj. nisu obična superpozicija svojih dijelova, nego njihovi djelci međusobno interagiraju, pa se djelatni smetnje prenosi s jednoga dijela sistema na drugi sistem. U takvim sistemima naša pretpostavka vrijedi samo za slabu smetnju.

Važna je posljedica linearnosti odziva s obzirom na vanjsku pobudu da mjerena svojstva sistema (ovise samo o svojstvenim stanjima slobodnog tj. nesmetanog sistema, pa su zato tokovi pokusi pogodni za ispitivanje vrlo složenih svojstava mnogočestih sistema.

1.2. Kinematika pokusa

Jedan od najčešćih načina ispitivanja sistema u kvantnoj mehanici jest raspršenje čestice (ili vala), tj. proces pri kojemu upadne čestice (ili val) djeluju na sistem kao vanjska smetnja.

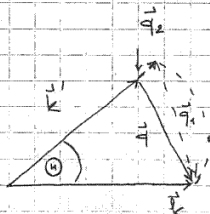
Stoga ćemo veličine koje mjerimo u pokusu raspršenja i njihove međusobne odnose promatrati na primjeru neelastičnog raspršenja čestice.

Za opisivanje čestice mogli bismo upotrijebiti koordinate (\vec{r}, t) , ali je mnogo pogodnije opisati pomoću karakterističnih veličina - impulsa (količine gibanja) i energije.

	Prije raspršenja	Poslije raspršenja	Razlika
impuls	\vec{k}	\vec{k}'	$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$
energija	$E = \frac{k^2}{2m}$	$E' = \frac{k'^2}{2m}$	$\omega = E - E'$

Tijekom raspršenja čestica ("sonda") predaje impuls \vec{q} i energiju ω koji služe za pobudnju sistema.

Dijagram impulsa:



Rastavimo promjenu impulsa na dva dijela:

$$\vec{q} = \vec{q}_1 + \vec{q}_2$$

\vec{q}_1 dolazi od "elastičnog" raspršenja i ne mijenja duljinu impulsa, nego samo daje odklon za kut θ .

\vec{q}_2 ne mijenja kut raspršenja, ali određuje prijenos energije ω , dokle, određuje "neelastični" proces.

To se vidi kod izračuna predanu energiju za pobudnju sistema:

$$\omega = \frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{m} = \frac{q^2}{2m}$$

$$\rightarrow \omega = \frac{k_1 \cdot q_2}{m} = \frac{q_2^2}{2m}$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{q} \cdot \vec{k} &= (\vec{k}' + \vec{k}) \cdot \vec{k} \\ &= |\vec{k}'| |\vec{k}| \cos \theta + k^2 \\ q^2 &= k^2 + k'^2 - 2|\vec{k}'| |\vec{k}| \cos \theta \\ |\vec{k}'| |\vec{k}| \cos \theta &= \frac{1}{2} (k^2 + k'^2 - q^2) \\ k_1 &= \vec{k} - \vec{q}_2 = k - q_2 \\ k'^2 &= k^2 + q_2^2 - 2kq_2 \end{aligned} \right\}$$

$$\frac{1}{2} q_1 = k \sin \frac{\theta}{2}$$

Za $q \ll k$ (mali θ):

$$q_1 \approx k \theta \quad q_2 \approx \frac{m\omega}{k} \quad \text{tj. } q_1 \text{ i } q_2 \text{ su međusobno nezavisni i okomit}$$

Ekperimentalno je katkad teško izmjeriti ω (npr. pri raspršenju neutralnih čestica), a kut θ se lako mjeri

Izmjerimo li θ i ω možemo naći q pomoću:

$$q^2 = q_1^2 + q_2^2 - 2q_1 q_2 \sin \frac{\theta}{2}$$

Za mali θ :

$$q \approx k \sqrt{\theta^2 + \left(\frac{\omega}{2E}\right)^2}$$

3. Diferencijalni udarni presjek i korelativne funkcije

Kao ogledni problem razmatramo neelastično raspršenje spornih neutrona na mnogočestnom sistemu, primjenice na kristalu.

PP neutron slabo interagira s česticama u kristalu \Rightarrow vrijedi Bornova aproks tj. čestica se raspršuje samo jedanput.

Diferencijalni udarni presjek, tj. broj čestica u intervalu E' do $E' + dE'$ izmjerenih nakon raspršenja u prostornom kutu Ω do $\Omega + d\Omega$ tada je

$$(*) \quad \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} \left(\frac{M}{2\pi}\right)^2 |\langle \vec{k}', \varphi | h | \vec{k}, i \rangle|^2 \delta(\omega - E + E')$$

M - masa čestice ; kinematički faktor k'/k dolazi od normiranja na jedinični intenzitet ulaznog i izlaznog snopa.

S -funkcija osigurava očuvanje energije u procesu $|\vec{k}, \varphi\rangle$ i $|\vec{k}, i\rangle$ jesu valne funkcije sistema neutron-kristal u konačnom i početnom stanju.

h je hamiltonijan interakcije, koji je općenito zbroj svih dvočestinih međudjelovanja upadne čestice (s koord. \vec{r}) i svake od N čestica u sistemu (s koord. \vec{r}_j):

$$h(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N v(\vec{r} - \vec{r}_j)$$

Sada želimo iskoristiti linearnost odziva: matricni element u (*) već sadrži interakciju h linearno, pa valne funkcije aproksimiramo funkcijama u kojima smo zadržali interakciju:

$$|\vec{k}', \varphi\rangle = |\vec{k}'\rangle |\varphi\rangle \quad ; \quad |\vec{k}, i\rangle = |\vec{k}\rangle |i\rangle$$

gdje su $|\varphi\rangle, |i\rangle$ stanja neinteragirajućeg sistema:

$$H_0 |i\rangle = E_i |i\rangle \quad H_0 |\varphi\rangle = E_\varphi |\varphi\rangle$$

a ulaznu i izlaznu česticu opisat ćemo ravnim valovima:

$$|k\rangle \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}; |k'\rangle \sim e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}$$

Kada to uvrstimo, dobivamo:

$$\langle k', \phi | h | k, i \rangle = \langle \phi | \int d^3r e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} h(\vec{r}) | i \rangle$$

Habitni element, dakle, ovisi o stanjima slobodnog sistema i o promjeni impulsa čestice $\vec{k}-\vec{k}'=\vec{q}$. Uvrstimo h :

$$\begin{aligned} \langle k', \phi | h | k, i \rangle &= V_{\vec{q}}^* \sum_j \langle \phi | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_j} | i \rangle \\ &= V_{\vec{q}}^* \langle \phi | S_{-\vec{q}} | i \rangle \quad (**) \end{aligned}$$

$$V_{\vec{q}} = \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) \quad \text{F.t. potencijala}$$

Također smo uveli Fourierovu komponentu gustoće:

$$S_{\vec{q}} = \sum_j e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_j} = S_{-\vec{q}}^+$$

koja odgovara (realnoj) gustoći čestica sistema:

$$S(\vec{r}) = \sum_j \delta(\vec{r}-\vec{r}_j)$$

U (***) prvi dio $V_{\vec{q}}$ ovisi samo o smetnji, a drugi dio, pak, samo o strukturi nesmetanog kristala!

Izraz (*) opisuje prijelaz iz određenog početnog stanja $|i\rangle$ u određeno konačno stanje $|\phi\rangle$. Općenito, moramo zbrojiti po svim konačnim stanjima kristala $|\phi\rangle$ (koja ne mjerimo, odnosno ne razlikujemo pojedinačno) i u srednjiti po svim početnim stanjima $|i\rangle$, koja su zastupljena s vjerojatnostima p_i :

$$\frac{d^2Z}{d\Omega dE'} = A_{\vec{q}} \sum_i p_i \sum_{\phi} \langle i | S_{\vec{q}} | \phi \rangle \langle \phi | S_{-\vec{q}} | i \rangle S(\omega-E+E')$$

gdje je:

$$A_{\vec{q}} = \frac{k'}{k} \left(\frac{H}{2\pi}\right)^2 |V_{\vec{q}}|^2$$

Napisat ćemo S -funkciju u integralnom obliku:

$$S(\omega-E+E') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega+E'-E)t}$$

gdje smo uočili da je gubitak energije čestice jednak i promjeni (povećanju) energije sistema:

$$E-E' = E_f - E_i$$

Iskoristimo zatim jednakost:

$$e^{iH_0 t} |i\rangle = e^{iE_i t} |i\rangle, \quad e^{-iH_0 t} |\phi\rangle = e^{-iE_{\phi} t} |\phi\rangle$$

Ako to uvrstimo, nestaje eksplicitne ovisnosti o konačnom stanju kristala, pa konačna stanja eliminiramo pomoću relacije potpunosti:

$$\sum_{\phi} |\phi\rangle \langle \phi| = 1$$

Sjetivši se definicije operatora u slici interakcije:

$$A(t) = e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t}$$

dobivamo poznatu formulu (van Hove-Peierls-Placzek) za udarni presjek:

$$\frac{d^2Z}{d\Omega dE'} = A_{\vec{q}} S(\vec{q}, \omega)$$

u kojoj je:

$$S(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} S(\vec{q}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle S_{\vec{q}}(t) S_{\vec{q}}^+(0) \rangle$$

$S \langle \dots \rangle$ označili smo stohistički prosjek u termički ravnotežnom stanju:

$$\langle \dots \rangle = \sum_i p_i \langle i | \dots | i \rangle$$

$S(\vec{q}, \omega)$ je korelativna (poredbena) funkcija ili dinamički strukturalni faktor koji potpuno opisuje strukturu i dinamiku sistema što ga ispitujemo u procesu raspršenja.

Značenje te funkcije možemo bolje shvatiti ako $S(\vec{q}, \omega)$ napišemo pomoću operatora gustoće u realnom prostoru:

$$S_{\vec{q}}(t) = \int d^3r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} S(\vec{r}, t) = \sum_j e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_j(t)}$$

$$\text{ili} \quad S(\vec{r}, t) = \sum_j \delta(\vec{r}-\vec{r}_j(t))$$

Uvrštavanjem dobivamo:

$$S(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int d^3r \int d^3r' e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \int dt e^{i\omega t} \langle S(\vec{r}, t) S^+(\vec{r}', 0) \rangle$$

Ta funkcija očito uspoređuje gustoće u točkama \vec{r} i \vec{r}' u vremenu t i 0.

To je tzv. gustoća - gustoća korelativna ili poredbena funkcija.

Ona ovisi o vjerojatnosti da fluktuacija gustoće u vremenu 0 u točki \vec{r}' proizvede promjenu gustoće u vremenu t u točki \vec{r} .

Kada smetnja u ima vektorski karakter, npr. pri interakciji em. polja sa strujom elektrona \vec{j} :

$$h \propto A_{\mu} j_{\mu}$$

na analogan način uvode se struja - struja korelativne funkcije:

$$S_{j_{\mu}, j_{\nu}}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int d^3 r \int d^3 r' e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \int dt e^{i\omega t} j_{\mu}(\vec{r}, t) j_{\nu}(\vec{r}', 0)$$

Sličan postupak provodi se i za druge slučajeve, npr. za interakciju spina čestice s magnetskim poljem, gdje se uvode spin-spin korelativne funkcije, i sl.

1.4. Svojstva korelativnih funkcija

Relacija: $\frac{d^2 \mathcal{Z}}{d\Omega dE'} = A_{\vec{q}} S(\vec{q}, \omega)$ (van Hove-Peierls-Placzek)

je u sklopu teorije linearnog odziva posve općenit izraz koji povezuje diferencijalni udarni presjek u nekom pokusu, s korelativnom funkcijom koja opet potpuno opisuje dinamičku strukturu mnogočestičnog sistema u osnovnom stanju. U izvodu nismo pobliže odredili vrstu čestica koje se raspršuju (to su mogli biti neutroni, ali i elektroni, γ -zrake ili X-zrake) ni sam proces raspršenja tj. interakciju $V_{\vec{q}}$, a nismo odredili ni \vec{k} , npr. proces elastičan ili neelastičan, itd.

To nam govori o općenitosti van Hoveove formule, prikladne za opis svakog procesa raspršenja na mnogočestičnom sistemu koji zadovoljava pp o linearnosti odziva.

Pomoću korelativnih funkcija proučavamo disipativne procese koji odgovaraju realnim prijelazima između stanja sistema, tj. nakon kojih se sistem ne vraća u početno stanje u toku samog eksperimenta. No mogući su također virtualni procesi koji odgovaraju deformaciji sistema, kada pokusna čestica samo izazove planzaciju sistema. Za ilustraciju može poslužiti usporedba s električnim krugom, u kojemu također postoji disipativni i reaktivni dio odziva, na primjer izmjenični potencijal.

Ti virtualni procesi mogu se opisivati pomoću odzivnih funkcija, koje ćemo poslije uvesti.

Izvedimo neka svojstva korelativnih funkcija koja ćemo općenito označiti sa:

$$F_{AB}(t, t') = \langle A(t) B(t') \rangle \quad (\Delta)$$

Pri tome operatori A i B predstavljaju neke fizičke veličine u slici interakcije, a prosjek smo uzeli pomoću matrice gustoće za kvantni velekanonski ansambl:

$$S = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H - \mu N)} \quad Z = \text{Tr } S$$

Vremenska ovisnost F_{AB}

$$F_{AB}(t, t') = \sum_n p_n \langle n | A_{\lambda} B | n \rangle \quad \sum_m \langle m | \quad A(t) = e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t}$$

$$= \sum_{n,m} p_n \langle n | A(t) | m \rangle \langle m | B(t') | n \rangle$$

$$\Rightarrow F_{AB}(t, t') = \frac{\sum_{n,m} p_n e^{i(E_n - E_m)(t - t')}}{Z} \underbrace{\langle n | A | m \rangle}_{A_{nm}} \underbrace{\langle m | B | n \rangle}_{B_{mn}}$$

$$F_{AB}(t, t') = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{i(E_n - E_m)(t - t')} A_{nm} B_{mn}$$

↳ vidimo da F_{AB} ovisi samo o razlici vremena:

$F_{AB}(t, t') = F_{AB}(t - t')$ kada H ne ovisi o vremenu.

Dakle, opet smo dobili vezu između translacijske invarijantnosti u vremenu i očuvanja energije u sistemu.

Periodičnost korelativnih funkcija

$$F_{BA}(t', t + i\beta) = \frac{1}{Z} \text{Tr} [e^{-\beta H} e^{iHt'} B e^{-iHt'} e^{iH(t+i\beta)} A e^{-iH(t+i\beta)}]$$

$$\text{Tr}(AB \dots CD) = \text{Tr}(DAB \dots C) \quad (\text{cikličnost Tr})$$

$$\Rightarrow F_{BA}(t', t + i\beta) = F_{AB}(t, t')$$

$$F_{AB}(t) = F_{BA}(-t - i\beta)$$

Ta kvaziperiodičnost korelativnih funkcija posljedica je njihove definicije (A) pomoću stohističkog prosjeka.

Da bismo dobili jednoznačnu definiciju korelacijske funkcije, možemo uvesti imaginarni interval periodičnosti $i\beta$ u kompleksnoj vremenskoj ravni i ograničiti se na vrijednost funkcije u intervalu $0 \leq \text{Im} t \leq i\beta$.

Formalno se t i $i\beta = i/kT$ mogu jednako tretirati jer imaju istu dimenziju inverzne energije, što se često iskorišćuje u proučavanju sistema mnoštva čestica na konačnim temperaturama. Te periodičnosti, naravno, nestoje na $T=0$.

• Korelacijska funkcija i prijelazi među stanjima

Uvodimo Fourierov transformat korelacijske funkcije, ovisan o frekvenciji:

$$F_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} F_{AB}(t)$$

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

Zapažamo da $F_{AB}(\omega)$ opisuje sve prijelaze u sistemu između stanja n i m za koji je razlika energije $E_n - E_m = \omega$. Matični elementi A_{nm} i B_{mn} daju intenzitet tih prijelaza, a faktor $e^{-\beta E_n}$ izražava popunjenost stanja n .

• Obrnuta korelacijska funkcija

Potražimo vezu između $F_{AB}(t, t')$ i obrnute funkcije F_{BA} :

$$F_{BA}(t', t) = \langle B(t') A(t) \rangle$$

Uzjet periodičnosti:

$$F_{AB}(t) = F_{BA}(-t - i\beta)$$

\Rightarrow primijenimo Fourierovu transformaciju:

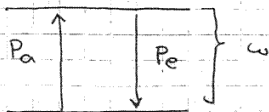
$$F_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{t} e^{-i\omega(\bar{t} + i\beta)} F_{BA}(\bar{t}) = e^{\beta\omega} F_{BA}(-\omega)$$

Te rezultate možemo iskoristiti za izvod poučka o mikroravnoteži.

1.5. Poučak o mikroravnoteži

Priglasmo razmotriti rasprišenje čestice na mnogostaničnom sistemu te našli vezu između udarnog presjeka i korelacijske funkcije:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = A_{\vec{q}} S(\vec{q}, \omega) = P_a(\vec{q}, \omega)$$



Dakle, $P_a(\vec{q}, \omega)$ je vjerojatnost da sistem dobije, tj. apsorbira energiju ω i impuls \vec{q} . Analogno tome:

$$A_{\vec{q}} S(-\vec{q}, -\omega) = P_e(\vec{q}, \omega)$$

jest vjerojatnost da sistem izgubi, tj. emitira energiju ω i impuls \vec{q} .

$$S(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \langle S_{\vec{q}}(t) S_{\vec{q}}^{\dagger}(0) \rangle = \frac{1}{2\pi} F_{S_{\vec{q}}^{\dagger} S_{\vec{q}}}(\vec{q}, \omega)$$

$$F_{S_{\vec{q}}^{\dagger} S_{\vec{q}}}(\vec{q}, \omega) = e^{\beta\omega} F_{S_{\vec{q}} S_{\vec{q}}^{\dagger}}(\vec{q}, -\omega)$$

$$\Rightarrow S(\vec{q}, \omega) = e^{\beta\omega} S(-\vec{q}, -\omega)$$

Za omjer vjerojatnosti emisije i apsorpcije dobivamo:

$$\frac{P_e}{P_a} = e^{-\beta\omega}$$

To je poučak o detaljnoj ravnoteži ili mikroravnoteži, ili o mikroreverzibilnosti. Granični slučajevi:

- $kT \ll \omega$, tj. vrlo niska temperatura u usporedbi s razlikom energija. Tada $e^{-\omega/kT} \rightarrow 0$, pa sistem može samo apsorbirati energiju, jer je vrlo velika vjerojatnost da se nalazi u osnovnom stanju.
- $kT \gg \omega$, tj. vrlo visoka temperatura, svi nivoi su podjednako popunjeni. Tada $e^{-\omega/kT} \rightarrow 1$, a $P_e \approx P_a$, pa je podjednaka vjerojatnost emisije i apsorpcije.

1.6. Stohički strukturalni faktor sistema

Stohički strukturalni faktor (ili form-faktor) sistema:

$$S_{\vec{q}} = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} d\omega S(\vec{q}, \omega)$$

Fizičko značenje $S_{\vec{q}}$ je očito:

$$N S_{\vec{q}} = S(\vec{q}, t=0)$$

Dakle, $S_{\vec{q}}$ mjeri trenutne korelacije gustoće sistema.

Napišimo sada stohički strukturalni faktor pomoću operatora gustoće:

$$\langle S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} \rangle = \sum_{i,j} \langle e^{i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \rangle = N^2 S_{\vec{q}=0} + \sum_{i \neq j} \langle e^{i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \rangle$$

Ovdje smo izvodili $q=0$ član, koji uopće ne sadrži podatke o strukturi sistema. U teoriji raspršenja taj član odgovara nerasprenom dijelu upadnog snopa koji ne pridonosi diferencijalnom udarnom presjeku. Drugi q član pravi stohastički strukturalni faktor:

$$S_q = \frac{1}{N} \langle S_q S_{-q} \rangle - N S_q = 0$$

1.7. Primjer: raspršenje na dinamičkoj rešetki

Formulaciju diferencijalnog udarnog presjeka pomoću korelacijske funkcije:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega dE'} = A_q S(\vec{q}, \omega)$$

možemo primijeniti na opis raspršenja čestice, npr. neutrona, na dinamičkoj rešetki, tj. periodičnoj strukturi čestica (npr. atoma u kristalu), koje vibriraju oko ravnotežnih položaja. Te vibracije pogodno je opisivati kvantima - fononima, koji u najnižoj approx. tvore približno nezavisan sistem.

Neutroni su posebno pogodni za ispitivanje stohastičke i dinamičke strukture kristalne rešetke.

Naime, valna dužina termalnih neutrona usporediva je s konstantom rešetke, pa elastičnim raspršenjem (logički ili difrakcijom) dobivamo ogibnu sliku i time informaciju o strukturi stohastičke rešetke.

Energije termalnih neutrona, pak, usporedive su s energijom fonona, pa nam neelastično raspršenje (emisija i apsorpcija fonona) daje izravno podatke o energijama i disperziji fonona.

Teorijski opis svih tih procesa sadržan je u korelacijskoj funkciji, ili u dinamičkom strukturalnom faktoru $S(\vec{k}, \omega)$, koji ovdje računamo.

Izračunamo najprije $S(\vec{k}, t)$:

$$S(\vec{k}, t) = \langle S_{\vec{k}}(t) S_{\vec{k}}^{\dagger}(0) \rangle$$

$$\vec{r}_j(t) = \vec{R}_j + \vec{u}_j(t)$$

$\vec{R}_j \equiv$ ravnotežni položaj (u čvoru kristalne rešetke).

$\vec{u}_j(t) \equiv$ vremenski ovisan operator pomaka

$$S(\vec{k}, t) = \sum_{i,j} e^{i\vec{k}(\vec{R}_j - \vec{R}_i)} \langle e^{-i\vec{k}\vec{u}_i(t)} e^{i\vec{k}\vec{u}_j(0)} \rangle$$

gdje prvi dio opisuje strukturu stohastične rešetke, a drugi opisuje gibanje (dinamiku) čestica oko ravnotežnih položaja.

Operator pomaka razvijamo pomoću operatora stvaranja i poništavanja fonona valnog vektora \vec{q} :

$$(\Delta) \quad u_i(t) = \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{2NM\omega_{\vec{q}}}} [a_{\vec{q}}(t) e^{i\vec{q}\vec{R}_i} + a_{\vec{q}}^{\dagger}(t) e^{-i\vec{q}\vec{R}_i}]$$

gdje je $a_{\vec{q}}(t) = e^{-i\omega_{\vec{q}}t} a_{\vec{q}}$. Radi jednostavnosti, uzeli smo samo jednu komponentu polarizacije - longitudinalne - u smjeru valnog vektora:

$$\vec{u}_i \parallel \vec{q}, \text{ dokle } \vec{u}_i \cdot \vec{k} = u_i k$$

Za operatore $a_{\vec{q}}, a_{\vec{q}}^{\dagger}$ vrijede uobičajena bozonska komutacijska pravila:

$$[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$$

$$[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}] = 0 = [a_{\vec{k}}^{\dagger}, a_{\vec{k}'}^{\dagger}]$$

Treba izračunati izraz oblika:

$$\langle e^{-i\vec{k}\vec{u}_i(t)} e^{i\vec{k}\vec{u}_j(0)} \rangle$$

dakle termodinamički (stohastički) presjek umnoška dvaju operatora koji u eksponentu imaju linearnu kombinaciju operatora a, a^{\dagger} . Za taj račun koristimo dva poučka o operatorima:

$$1. \quad e^A e^B = e^{A+B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{6}[A, [A, B]] + \dots} \quad (\text{Baker-Hausdorff})$$

gdje viši komutatori iščezavaju ako je $[A, B]$ kompleksan broj.

$$2. \quad \langle e^{L(a, a^{\dagger})} \rangle = e^{\frac{1}{2}\langle L^2 \rangle}$$

ako je L linearna kombinacija bozonskih operatora

$$L = \alpha a + \beta a^{\dagger}$$

Nakon računa i Fourierove transformacije po vremenu dobivamo:

$$(*) \quad S(\vec{k}, \omega) = e^{-2W} \sum_{i,j} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{Q_{ij}(t)}$$

gdje je:

$$2W = \frac{k^2}{2NM} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\omega_{\vec{q}}} (2n_{\vec{q}} + 1) \quad \text{Debye-Wallerov faktor}$$

$$Q_{ij} = \frac{k^2}{2NM} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\omega_{\vec{q}}} [(n_{\vec{q}} + 1) e^{i\vec{q}\vec{R}_j} e^{-i\omega_{\vec{q}}t} + n_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{R}_j} e^{i\omega_{\vec{q}}t}]$$

$$\vec{R}_{ij} \equiv \vec{R}_i - \vec{R}_j$$

Razvojem

$$e^{Q(t)} = 1 + Q + Q^2/2 + \dots$$

dobivamo sve redove procesa emisije i apsorpcije fonona.

Sada, gledamo detaljnije značenje pojedinih članova u (**)

• Elastično raspršenje i Debye-Wallerov faktor

Prvi član u razvoju e^Q daje:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = A_k e^{-2W} \sum_{\vec{G}} S(\vec{k}-\vec{G}) S(\omega) \quad (**)$$

jer je:

$$\sum_{i,j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{ij}} = N \sum_{\Delta\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\Delta\vec{R}} = N \frac{(2\pi)^3}{V} \sum_{\vec{G}} S(\vec{k}-\vec{G})$$

gdje je $\Delta\vec{R}$ vektor translacije rešetke, a \vec{G} su vektori recipročne rešetke.

$S(\omega)$ određuje oblik linije u spektru raspršenih neutrona i pokazuje da je nič σ elastičnom raspršenju pri kojemu se ne mijenja energija čestice.

Smjerovi elastičnog raspršenih čestica određeni su promjenom impulsa k , koja može biti samo jednak od vektora recipročne rešetke \vec{G} , tako da dobivamo ogibnu sliku elastičnog raspršenog snopa.

Izraz (**) opisuje Braggovo raspršenje na idealnoj kristalnoj rešetki.

Debye-Wallerov faktor ne mijenja ni oblik spektralne linije ni smjerove raspršenih čestica, nego određuje njihovu visinu, odnosno intenzitet - preraspodjeljuje ukupnu težinu spektra.

Možemo ga izraziti pomoću $\langle u_i^2 \rangle$, srednjeg kvadratnog pomaka čestica iz ravnotežnog položaja \vec{R}_i :

$$\langle u_i^2 \rangle = \frac{1}{2NM} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\omega_{\vec{q}}} [2n_{\vec{q}} + 1]$$

dok je Debye-Wallerov faktor za $3N$ st. sl.:

$$2W = \frac{k^2}{2(3N)M} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\omega_{\vec{q}}} [2n_{\vec{q}} + 1]$$

(jer smo prije uzeli samo longitudinalne tihre)

$$2W = -\frac{1}{3} k^2 \langle u_i^2 \rangle$$

Što govori da Debye-Wallerov faktor opisuje utjecaj termalnog gibanja čestica u rešetki, koje narušava periodičnost rešetke i tako smanjuje verogajnost elastičnog raspršenja (ogiba) $k \rightarrow k + \vec{G}$.

• Emisija i apsorpcija fonona

Slijedeći član u razvoju (Q) dat će nam vremenske integrale:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \left\{ \begin{array}{l} (n_{\vec{q}} + 1) e^{-i\omega t} \\ n_{\vec{q}} e^{i\omega t} \end{array} \right.$$

koji opisuju proces u kojemu neutron u sistemu emitira (pobuduje) fonon $\omega_{\vec{q}}$:

$$(n_{\vec{q}} + 1) S(\omega - \omega_{\vec{q}})$$

odnosno apsorpira fonon $\omega_{\vec{q}}$ koji je već termalno pobuden u sistemu:

$$n_{\vec{q}} S(\omega + \omega_{\vec{q}})$$

Isto tako razvojem dobivamo:

$$\sum_{i,j} e^{i(\vec{k} \pm \vec{q}) \cdot \vec{R}_{ij}} = \sum_{\vec{G}} S(\vec{k} - \vec{G} \pm \vec{q})$$

Što znači da neutron emitira/apsorbira fonon energije $\omega_{\vec{q}}$ uz promjenu impulsa $k = \vec{G} \pm \vec{q}$.

Ukupni je izraz za procese multog i prvog reda dakele:

$$S(\vec{k}, \omega) = \frac{(2\pi)^3}{V} N e^{-2W} \left\{ \begin{array}{l} \sum_{\vec{G}} S(\vec{k}-\vec{G}) S(\omega) \quad \text{elastični proces} \\ + \sum_{\vec{q}} \frac{q^2}{2NM\omega_{\vec{q}}} \left[(n_{\vec{q}} + 1) S(\omega - \omega_{\vec{q}}) \sum_{\vec{G}} S(\vec{k}-\vec{G}-\vec{q}) \right. \\ \left. + n_{\vec{q}} S(\omega + \omega_{\vec{q}}) \sum_{\vec{G}} S(\vec{k}-\vec{G}+\vec{q}) + \dots \right] \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{emisija} \\ \text{fonona} \\ \text{apsorpcija} \\ \text{fonona} \end{array}$$

• Normiranje ukupnog spektra:

$$\int d\vec{q} d\omega S(\vec{q}, \omega) = N$$

N broj čestica na kojim se raspršuje neutron

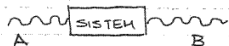
$$\int d\vec{q} d\omega \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega t} \left\langle \sum_{i,j} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \right\rangle \int e^{i\omega t} d\omega = 2\pi \delta(\omega)$$

$$\int d\vec{q} \sum_{i,j} \langle e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \rangle = \sum_{i,j} S(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \sum_i 1 = N //$$

2. Odzivne funkcije

2.1. Uvod

Prije smo vidjeli da su korelativne funkcije pogodnije za opisivanje realnih prijelaza u sistemu, uzrokovanih vanjskom smetnjom. Kada se u sistemu zbivaju i virtualni procesi, prikladan su način opisa linearnog odziva tzv. B-A odzivne funkcije, koje povezuju mjerenu promjenu (B) sistema sa smetnjom (A) koja je uzrokuje.



A i B su neke fizičke veličine koje mogu biti funkcije gustoće, sprina, struje i sl. Mi ćemo se uglavnom ograničiti na istovrston (i to skalarni) odziv, tj. A i B biti će funkcije gustoće.

2.2. Kubo formula

PP sistem se u $t = -\infty$ nalazi u ravnotežnom stanju, opisan hamiltonijanom H i svojstvenim valnim funkcijama ψ_i :

$$H|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle$$

Vjerovatnost da se nalazi u stanju $|\psi_i\rangle$ određena je nekom raspodjelom, npr.

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$$

U nekom trenutku adijabatski uključimo vanjski potencijal - smetnju h .

Kada potencijal djeluje na čestice u tačkama \vec{r}_i , smetnja ima oblik:

$$h(t) = \sum_i \phi(\vec{r}_i; t)$$

odnosno:

$$h(t) = \int d^3r \rho(\vec{r}) \phi(\vec{r}; t)$$

kada je gustoća čestica kontinuirana i opisana raspodjelom $\rho(\vec{r})$.

Adijabatska pp znači da se smetnja uključuje beskonačno sporo u $t = -\infty$, a isto tako isključuje u $t = +\infty$, odnosno da smetnja $h(t)$ ima dodatnu vremensku ovisnost $e^{-\eta|t|}$, gdje je $\eta = 0^+$

Ukupni je hamiltonijan tada $H+h$ i sva se stanja ψ_i mijenjaju:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi_i(t)\rangle = (H + h(t)) |\psi_i(t)\rangle$$

Prelazimo u sliku interakcije:

$$\tilde{A}(t) = e^{iHt} A(t) e^{-iHt}$$

$$|\tilde{\psi}_i(t)\rangle = e^{iHt} |\psi_i(t)\rangle$$

To daje novu diferencijalnu jednačinu:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}_i(t)\rangle = \tilde{h}(t) |\tilde{\psi}_i(t)\rangle$$

ili, kao formalno rješenje, ekvivalentnu integralnu jednačinu:

$$(*) \quad |\tilde{\psi}_i(t)\rangle = |\psi_i\rangle - i \int_{-\infty}^t dt' \tilde{h}(t') |\tilde{\psi}_i(t')\rangle$$

jer je $|\tilde{\psi}_i(-\infty)\rangle = |\psi_i\rangle$

PP da je smetnja mala i lineariziramo problem tj. jedanput iteriramo (*):

$$|\tilde{\psi}_i(t)\rangle = \left[1 - i \int_{-\infty}^t dt' \tilde{h}(t') \right] |\psi_i\rangle$$

Pomoću tih nadenih valnih funkcija možemo izračunati fizičke veličine npr. gustoća u stanju i :

$$\rho = e^{-iHt} \rho e^{iHt} = e^{iHt} \rho e^{-iHt}$$

$$S_i(\vec{r}, t) = \langle \psi_i(t) | \rho(\vec{r}) | \tilde{\psi}_i(t) \rangle = \langle \tilde{\psi}_i(t) | \tilde{\rho}(\vec{r}, t) | \tilde{\psi}_i(t) \rangle$$

$$= \langle \psi_i | \tilde{\rho}(\vec{r}, t) | \psi_i \rangle + i \int_{-\infty}^t dt' \langle \psi_i | [\tilde{h}(t'), \tilde{\rho}(\vec{r}, t)] | \psi_i \rangle$$

jer smo zanemarili članove 2. reda u h .

$$h(t) = \int d^3r \rho(\vec{r}) \phi(\vec{r}, t)$$

$$S_i(\vec{r}, t) - S_i(\vec{r}, -\infty) = -i \int_{-\infty}^t dt' \int d^3r' \langle \psi_i | [\tilde{\rho}(\vec{r}, t), \tilde{\rho}(\vec{r}', t')] | \psi_i \rangle \cdot \phi(\vec{r}', t')$$

gdje je ϕ jačina vanjske smetnje, dakle kompleksan broj.

Da bismo našli ukupnu promjenu gustoće u tački \vec{r} u vremenu t induciranu vanjskom smetnjom, moramo napraviti stohistički prosjek po stanjima $|\psi_i\rangle$, određen vjerovatnošima

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$$

To nam daje tzv. Kubo formulu:

$$\langle \Delta S(\vec{r}, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d^3r' R(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') \phi(\vec{r}', t')$$

u kojoj je odzivna funkcija R definirana kao:

$$R(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') = -i \Theta(t - t') \langle [\tilde{S}(\vec{r}, t), \tilde{S}(\vec{r}', t')]_- \rangle$$

Ovdje $\Theta(t - t')$ pokazuje da na promjenu gustoće u trenutku t djeluje smetnja samo u vremenima t' ranijima od t , što određuje kauzalnost odziva sistema, kao što smo i pretpostavili.

Takvu odzivnu funkciju nazivamo retardiranom zato što odziv kasni za smetnjom.

2.3. Veza između odzivnih i korelativnih funkcija

U sistemu koji je invarijantan na translacije u prostoru i vremenu vrijedi:

$$R(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') = R(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$$

Ej. svojstva sistema ovise samo o relativnim koordinatama

Tada Kubo formula, nakon Fourierove transformacije postaje:

$$\langle \Delta S(\vec{q}, \omega) \rangle = R(\vec{q}, \omega) \cdot \phi(\vec{q}, \omega)$$

gdje je: $R(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} R(\vec{q}, t)$ (**)

$$R(\vec{q}, t) = -i \Theta(t) \langle [\tilde{S}_{\vec{q}}(t), \tilde{S}_{-\vec{q}}(0)]_- \rangle$$

Napišemo li operator gustoće u Schrödingerovoj slici i umetnemo potpun skup stanja $|n\rangle$ dobivamo:

$$R(\vec{q}, \omega) = -i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{m,n} p_m (e^{-i\omega_{nm}t} |\langle m | S_{\vec{q}} | n \rangle|^2 - e^{i\omega_{nm}t} |\langle m | S_{-\vec{q}} | n \rangle|^2)$$

$$\omega_{nm} = E_n - E_m, \quad p_m \text{ vjerojatnost}$$

Nakon integracije po vremenu:

$$R(\vec{q}, \omega) = \sum_{m,n} p_m \left\{ \frac{|\langle m | S_{\vec{q}} | n \rangle|^2}{\omega - \omega_{nm} + i\eta} - \frac{|\langle m | S_{-\vec{q}} | n \rangle|^2}{\omega + \omega_{nm} + i\eta} \right\}$$

Kako bismo osigurali konvergenciju tog izraza $\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t}$ pomnožili smo podintegralnu funkciju u (***) s $e^{-\eta t}$, gdje je η infinitezimalno mala pozitivna veličina, što je u skladu s adijabatskom pp.

Korelativnu funkciju $S(\vec{q}, \omega)$ možemo napisati kao:

$$S(\vec{q}, \omega) = \sum_{m,n} p_m |\langle m | S_{\vec{q}} | n \rangle|^2 S(\omega - \omega_{nm})$$

Usporedbom izlazi:

$$R(\vec{q}, \omega) = \int_0^{\infty} d\omega' \left\{ \frac{S(\vec{q}, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta} + \frac{S(-\vec{q}, \omega')}{\omega + \omega' + i\eta} \right\}$$

$S(\vec{q}, \omega)$ ima, dakle, ulogu spektralne funkcije za odzivnu funkciju $R(\vec{q}, \omega)$.

S je REALNA I POZITIVNA FUNKCIJA, izraunom razmjerna udarnom presjeku, a R je naprotiv, KOMPLEKSNA funkcija.

Rastavimo li kompleksne razlomke pomoću relacije:

$$\frac{1}{x + i\eta} = P \frac{1}{x} - i\pi \delta(x)$$

dobivamo **TEOREM FLUKTUACIJE-DISIPACIJE:**

$$\begin{aligned} \text{Im } R(\vec{q}, \omega) &= -\pi \{ S(\vec{q}, \omega) - S(-\vec{q}, -\omega) \} \\ &= -\pi S(\vec{q}, \omega) (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \end{aligned}$$

koji povezuje realne (dissipativne) prijelaze u sistemu s fluktuacijama.

U sistemu invarijantnom na inverziju vremena može se pokazati da vrijedi:

$$|\langle m | S_{\vec{q}} | n \rangle|^2 = |\langle m | S_{-\vec{q}} | n \rangle|^2, \text{ pa prema}$$

tome:

$$S(\vec{q}, \omega) = S(-\vec{q}, \omega)$$

Sada realni dio odzivne funkcije možemo napisati u obliku:

$$\text{Re } R(\vec{q}, \omega) = \int_0^{\infty} d\omega' S(\vec{q}, \omega') P \frac{2\omega'}{\omega^2 - \omega'^2}$$

što je očito parna funkcija od ω . Analogno je vidljivo da je $\text{Im } R(\vec{q}, \omega)$ neparna funkcija od ω .

Na niskim temperaturama ($T \rightarrow 0$) dobivamo:

$$T=0: \quad \text{Im } R(\vec{q}, \omega) = \begin{cases} -\pi S(\vec{q}, \omega) & \omega > 0 \\ 0 & \omega < 0 \end{cases}$$

2.4. Veza između odziva i dielektrične funkcije

Odziv mnogostaničnog sistema često se opisuje dielektričnom funkcijom ϵ definiranom makroskopskom relacijom između vanjske smetnje

$$\Phi_{\text{vanj}} = \epsilon \text{ Svanj } V$$

(gdje je V vanjski potencijal koji djeluje na gustoću S_{vanj}) i ukupne promjene gustoće u sistemu koja se sastoji od vanjske S_{vanj} i inducirane promjene gustoće $\langle \Delta S \rangle = S_{\text{ind}}$:

$$S_{\text{ind}} + S_{\text{vanj}} = \frac{1}{\epsilon} S_{\text{vanj}}$$

odnosno

$$S_{\text{ind}} = \left(\frac{1}{\epsilon} - 1 \right) S_{\text{vanj}}$$

Imali smo da je:

$$\langle \Delta S(\vec{q}, \omega) \rangle = R(\vec{q}, \omega) \cdot \Phi(\vec{q}, \omega)$$

$$h(t) = \sum \Phi(\vec{r}_i; t) \quad \text{tj.} \quad h(t) = \int d^3r S(\vec{r}) \phi(\vec{r}, t)$$

↑
potencijal koji djeluje na gustoću $S(\vec{r})$

↳ tako možemo pisati smetnju

ϕ je ukupna smetnja u sistemu pa pa prethodnu relaciju možemo pisati kao:

$$S_{\text{ind}} = R (S_{\text{vanj}} + S_{\text{ind}}) V$$

odnosno

$$S_{\text{ind}} = \frac{RV}{1-RV} S_{\text{vanj}}$$

Usporedbom dobivamo:

$$\epsilon = 1 - RV$$

Što definira poprečnu dielektričnu funkciju stvarni ili efektivni potencijal koji djeluje na česticu u sistemu sastoji se od vanjskog potencijala i od dijela izazvanog promjenom gustoće $\langle \Delta S \rangle$:

$$\Phi_{\text{ef}} = \Phi_{\text{vanj}} + \langle \Delta S \rangle V = \frac{1}{\epsilon} \Phi_{\text{vanj}}$$

To pokazuje da inducirane promjene gustoće u sistemu zaslužuju vanjski potencijal za faktor $1/\epsilon$.

U homogenom sistemu dielektrična funkcija ovisi o različitim koordinatama:

$\epsilon(\vec{r}-\vec{r}'; t-t')$, odnosno o valnom vektoru i frekvenciji $\epsilon(\vec{q}, \omega)$, pa smo gornje relacije mogli izvesti algebarskim operacijama.

U nehomogenom sistemu dielektrična funkcija ima složeniju ovisnost.

Iz jednostavne veze između ϵ i R vidimo da se sve relacije i zaključci koji izvedemo za odzivnu funkciju R mogu primijeniti i na ϵ .

2.5. Apsorpcija energije u sistemu:

U mnogim pokusima mjerimo rad što ga vanjska smetnja izvrši u sistemu opisanome nekom odzivnom funkcijom $R(t)$. Na taj način zapravo određujemo oblik odzivne funkcije, odnosno dinamičku strukturu samog sistema.

Vanjska smetnja uzrokuje u sistemu promjenu gustoće $d\langle \Delta S \rangle$, što treba pomnožiti potencijalom ϕ da bismo dobili promjenu energije dW :

$$dW = \phi d\langle \Delta S \rangle$$

Nas ovdje zanima samo vremenska ovisnost odziva, pa nećemo eksplicitno označiti njegovu prostornu ovisnost. U vremenu T vanjska smetnja izvrši u sistemu rad:

$$W(T) = \int_0^T dt \phi(t) \left[\frac{d}{dt} \langle \Delta S(t) \rangle \right]$$

$$\langle \Delta S(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' R(t-t') \phi(t')$$

$$\Rightarrow W(T) = \int_0^T dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \phi(t) \frac{d}{dt} R(t-t') \phi(t')$$

$$\frac{d}{dt} R(t-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} (-i\omega) e^{-i\omega(t-t')} R(\omega)$$

Izaberimo periodičku realnu vanjsku smetnju:

$$\phi(t) = F \cos \omega t$$

gdje je F amplituda, a ω frekvencija.

(Općenito F može sadržavati cijeli spektar frekvencija)

Uvrštavanjem i integriranjem:

$$W(\tau) = \frac{F^2}{4} \left\{ i\omega R(-\omega) \left[\frac{e^{2i\omega\tau} - 1}{2i\omega} + \tau \right] - i\omega R\omega \left[\frac{e^{-2i\omega\tau}}{-2i\omega} + \tau \right] \right\}$$

Nas zapravo zanima brzina davanja rodnje ili apsorpcije energije u sistemu, za relativno velika vremena:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{W(T)}{T} = A(\omega)$$

jer bi ukupni rod bio ∞ za $T \rightarrow \infty$. Ostaje:

$$A(\omega) = \frac{F^2}{4} (-i)\omega [R(\omega) - R(-\omega)]$$

$$R(-\omega) = R^*(\omega) \Rightarrow A(\omega) = \frac{F^2}{2} \omega \text{Im} R(\omega)$$

Ta nam relacija govori o fizičkom zračenju imaginarnog dijela odzivne funkcije, on daje brzinu apsorpcije energije u sistemu koja nastaje zbog realnih prijelaza.

Mjerenjem apsorbirane energije, npr. em vala, možemo odrediti $\text{Im} R$, i obrnuto, znajući $R(\omega)$ ili $R(t)$, možemo izračunati apsorpcijski spektar u nekom eksperimentu.

10. 4. 2002.

disipacija vezana uz lansirsko polje

za ovaj naš slučaj: Ako je vanjski naboj mali (zr. em. odziv) $\langle S(S^*) S_0 \rangle$ desna strana kaže da & svejedno bio naboj vanjski ili unutarnji tj. korelacije odzivne funkcije opisuju istu stvar.

Fluktuaciono-disipacioni teorem:

$$\langle S_q(\omega) S_q^*(\omega) \rangle = \frac{1}{\pi} \frac{q^2}{4\pi e^2} \text{Im} \frac{1}{\epsilon_q(\omega)}$$

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} \frac{4\pi e^2}{q^2} (S_q S_q^* - S_0) \quad \text{odziv} \quad \text{u RPA}$$

$$\langle H_{int} \rangle = -\frac{1}{2\pi} \sum_{q \neq 0} \left\{ \left[\int d\omega \text{Im} \frac{1}{\epsilon_q(\omega)} \right] + \frac{4\pi e^2}{q^2} S_0 \right\}$$

- Račun korelacijske, odnosno dielektrone funkcije
- Najgeneralnije je računanje $\epsilon_q(\omega)$ jer je definirana u prostoru ($\leftrightarrow \vec{q}$) i vremenu ($\leftrightarrow \omega$)
- Za energiju treba samo sumirati po $\sum_i \dots$
- Za korel. funkciju imamo samo 1 rezoluciju po prostoru jer ju se gleda u istom trenutku $\langle S(\vec{r}, t) S(\vec{0}, t) \rangle$

Iz dielektroneg odziva može se sve izračunati tako da gledamo koje su korelacije važne npr. u energiji osnovnog stanja. Sada možemo položiti en. osnovnog stanja - to & rezultat našeg poznavanja korel. funkcije.

Jellium model - u njemu treba računati linearni odziv \leftrightarrow uz dovedeno malo polje \Rightarrow perturbaciona teorija (Nije baš baš odgladno iz H)

Proračun korelativne funkcije

- postupak:

1. Izračunamo korel. funkciju $\rightarrow \langle S(\vec{r}_1) S(\vec{r}_2) \rangle \sim |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|$
2. Izračunamo energiju (Hartree-Fock aprox.)

1. aprox.: Hartreejeva aprox. (H)

\hookrightarrow interakcija između elektrona zomigneni se srednjim poljem koje je izračunato samosuglasno

Hartreejeva stanja su ravni valovi. ravni valovi
valna funkcija produkt
 $\prod_{j=1}^N \psi_j(\vec{r}_j)$

$H: e^{i\vec{k}\vec{r}}, S_0$

\hookrightarrow u Hartree slučaju efektivno polje dolazi od gustoće S_0 , ali mi smo taj član ukinuli (interakcija e^- samih sa sobom, iona samih sa sobom)

\Rightarrow Hartree dopinos je nula

2. aprox.: Hartree-Fock (HF)

antisimetričnost valnih funkcija
ponova samosuglasni potencijal homogen

Pretpostavljavamo TRANSLACIONO INVARIJANTAN sistem (elektronski plin nije u nekom vanjskom potencijalu (gamma) itd.) \Rightarrow probne funkcije za HF aprox. su ravni valovi, ali uzimamo u obzir spin elektrona tj. njegov fermionski karakter \Rightarrow Paulijeu princip \rightarrow efekt izmjene! (da bismo to imali treba uvesti bar 2 elektrona)

Pp. valna funkcija para elektrona $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rightarrow$

\rightarrow tražimo funkciju korelacije parova \vec{r}_1, \vec{r}_2

\hookrightarrow mora biti antisimetrična (AS) valna funkcija obzirom na zamjenu čestica

1^o $\uparrow \downarrow$ spinovi \rightarrow antisimetrična u spinu \Rightarrow simetrična u koordinati (singlet)

Ako su spinovi 2 e^- antiparalelni, svaki elektron može biti u bilo kojem stanju - nema efekta izmjene!

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\vec{k}_1\vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2\vec{r}_2} + e^{i\vec{k}_1\vec{r}_2} e^{i\vec{k}_2\vec{r}_1})$$

pp. valnu funkciju u obliku: (koordinats)

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i\vec{k}_1\vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2\vec{r}_2}$$

→ mala prevara: nismo simetrizirali valnu funkciju, ali u 2. kvantizaciji dade se pokazati da se u ovom slučaju to dokine: ↑↑: ↑↑, ↓↓: ↓↓, ↑↓: ↑↓, ↓↑: ↓↑

• Vjerovatnost nalazenja elektrona 1. na mjestu \vec{r}_1 i el. 2. na mjestu \vec{r}_2 :

$$P = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |e^{i(\vec{k}_1\vec{r}_1 + \vec{k}_2\vec{r}_2)}|^2 = 1 \Rightarrow \text{nemaju međusobnog utjecaja jedan na drugi} \Rightarrow \text{za par elektrona sa spinovima} \uparrow\downarrow \text{ NE POSTOJI KORELACIJA}$$

2^o) ↑↑ spinovi (ili ↓↓) → simetrična u spinu, antisimetrična u koordinatama (TRIPLET)

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2) - \Psi_1(\vec{r}_2)\Psi_2(\vec{r}_1))$$

U ovom slučaju \exists efekt izmjene. Imamo u valnoj funkciji orbitalni dio

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\vec{k}_1\vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2\vec{r}_2} - e^{i\vec{k}_1\vec{r}_2} e^{i\vec{k}_2\vec{r}_1}) - \text{antisimetrična!}$$

$$P = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = \frac{1}{2} [1 + 1 - 2 \cos(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]$$

↳ vidimo da \uparrow POSTOJI KORELACIJA među 1 i 2 tj. vjerovatnost da 1 bude na \vec{r}_1 i 2 na \vec{r}_2 ovisi direktno o trenutnim \vec{r}_1 i \vec{r}_2 .

Dokle: $2e^-$; ↑↑ ↓↓

AS v. f. obzrom na zomjenu čestica

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{i(\vec{k}_1\vec{r}_1 + \vec{k}_2\vec{r}_2)} & - e^{i(\vec{k}_1\vec{r}_2 + \vec{k}_2\vec{r}_1)} \\ e^{i(\vec{k}_1\vec{r}_2 + \vec{k}_2\vec{r}_1)} & e^{i(\vec{k}_1\vec{r}_1 + \vec{k}_2\vec{r}_2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \uparrow\uparrow \\ \downarrow\downarrow \end{bmatrix} = \Psi(1,2)$$

mala prevara spinska degeneracija (3 puta degenerirano)

napomena: ovdje ne tretiramo spinsku degeneraciju

Vjerovatnost da je čestica 2 na poziciji 2 kod je čestica 1 na poziciji 1 (S₁₂ S₁₂ korel. funkcija)

$$|\Psi(1,2)|^2 = 1 - \cos[(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)]$$

↳ yedno daje i korelaciju među česticama

$$\vec{R} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \quad (\text{relativna udaljenost})$$

$$P = 1 - \cos(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{R}$$

↑ korelacija ovisi o njihovoj relativnoj poziciji

No, nos zanima mnoštvo elektrona (a ne samo 2) → tražimo korelacionu funkciju $g_{\uparrow\uparrow}(\vec{R})$ usrednjavanjem po svim korelacionim funkcijama od 2 elektrona (tj. uz pp. fermiona koji popunjavaju stanja sve do k_F).

Def.

$$g_{\uparrow\uparrow}(\vec{R}) = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_i, \vec{k}_j} |\Psi_{\vec{k}_i, \vec{k}_j}(\vec{R})|^2$$

→ po ožupiranim stanjima → sve do Fermijeve energije ϵ_f do k_F

↳ korelaciona funkcija (Σ prolazi po svim elektronskim stanjima)

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}_i, \vec{k}_j} [1 - e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_j) \cdot \vec{R}}] \cos(\vec{k}_i - \vec{k}_j) \cdot \vec{R}$$

možemo i tako zapisati uz uvjet da na kraju uzmemo realni dio

→ dolazi od dvostrukog sume $\sum_i \sum_j \dots$

$$= 1 - F^{\oplus}(k_F R)$$

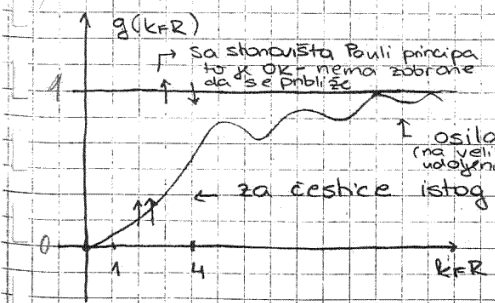
$$F(k_F R) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} = 3 \frac{\sin k_F R - k_F R \cos k_F R}{(k_F R)^3}$$

↳ Bessel

$$= 3 \frac{1}{k_F R} j_1(k_F R)$$

↳ FUNKCIJA KORELACIJE PAROVA - mjeni vjerovatnost da se u elektronskom plinu 2 elektrona nađu na udaljenosti R . (tj. $F(k_F R)$ daje vjerovatnost da se čestica 2 nađe na udaljenosti R oko se čestica 1 nalazi na udaljenosti nula).

Ponašanje korelacijske funkcije:



korakt. prostorna skala (izlazi iz 0) je data $\approx k_F^{-1}$. Prirodno jer je to jedina karakteristična veličina u jelliumu (nema Coulombovskih veličina)

- u samom proračunu HF korelacione funkcije nema interakcije

- Uvid u HF aprox: aproksimacija brine da čestice istog spina ne daju

↳ dvije čestice ne mogu se naći u istoj točki oko imaju isti spin

ne spali sebi korelacije od interakcije

→ računati korel. funkciju kao da imamo slobodni e^- uzima u obzir samo Pauli princip

$$S = S_{\uparrow} + S_{\downarrow}$$

Važno: u model je ugrađen Paulijev princip

$g(R) = 0$ za $k \neq R = 0$ za $\uparrow\uparrow$ ($\downarrow\downarrow$) \rightarrow posljedica Paulijevog principa \Rightarrow KORELACIJA! \Rightarrow 2 e^- sa istim spinom ne mogu doći u istu točku

Vidimo da iako smo u razmatranje uključili samo Paulijev princip dobivamo koreliranost \Rightarrow 2 e^- istog spina ne mogu se naći u istoj WS ćeliji: $R = 0 \Rightarrow g_{\uparrow\uparrow} \rightarrow 0!$ "Zabrana" slabi kako R raste.

Ali: Paulijev princip opisuje samo odbijanje $\uparrow\uparrow$ ili $\downarrow\downarrow$ elektrona, a za one $\uparrow\downarrow$ ga uopće nije bitno što se vidi iz korelativne funkcije $g_{\uparrow\downarrow} = 1 + R$, a znamo da se oni bar Coulombovski odbijaju \Rightarrow imamo stoga u biti pogrešnu korelativnu funkciju \Rightarrow pogrešne energije.

[Zapravo smo trebali uzeti antisimetrizirane fermionske funkcije + 2. kvantizaciju itd. - mi smo radije napravili trivijalan račun ali s fizikalnim uvidom]

S rezultatom za $\uparrow\downarrow$ nismo zadovoljni (znamo da u WS ćeliji ne mogu biti 2 el.)

Napomena: Pokažimo da bismo dobili istu stvar u slučaju $\uparrow\downarrow$ da smo simetrizirali valnu funkciju (tj. da opet u P ne bi bilo člana zomjene).

Hartree-Fockova valna funkcija za fermione:

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = A u_{e_1}(\vec{r}_1) \dots u_{e_N}(\vec{r}_N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{e_1}(x_1) & \dots & u_{e_N}(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ u_{e_1}(x_N) & \dots & u_{e_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{Slaterova} \\ \text{determinanta} \end{array}$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P$$

$\{e_1, e_2, \dots, e_N\} = L$
 $e_i \rightarrow$ kvantni brojevi
 $e_i = \{k_i, s_i, \dots\}$
 ili i, n_i, e_i, m_i, \dots

antisimetrizirani produkt - zbroj se po svim permutacijama p iz skupa L, a P_P je broj dvočestičnih permutacija (zamjena čestica) u ukupnoj permutaciji p koji je paran ili neparan

$$P_{\uparrow\uparrow}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \underbrace{S(\vec{r}_1, \vec{r}_1) S(\vec{r}_2, \vec{r}_2)}_{\text{Hartree}} - \underbrace{S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) S(\vec{r}_2, \vec{r}_1)}_{\text{Hartree-Fock}}$$

$$\rightarrow P_{\uparrow\downarrow}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = S(\vec{r}_1, \vec{r}_1) S(\vec{r}_2, \vec{r}_2) \quad \begin{array}{l} \text{član} \\ \text{zomjene} \end{array}$$

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[u_{\vec{k}_1, s_1}(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_2, s_2}(\vec{r}_2) - u_{\vec{k}_2, s_2}(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_1, s_1}(\vec{r}_2) \right]$$

odvojamo spinornu i prostornu komponentu

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[u_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_2}(\vec{r}_2) |s_1\rangle |s_2\rangle - u_{\vec{k}_2}(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_1}(\vec{r}_2) |s_2\rangle |s_1\rangle \right]$$

$$|\Psi(1,2)|^2 = \frac{1}{2} \left[u_{\vec{k}_1}^*(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_2}^*(\vec{r}_2) u_{\vec{k}_2}(\vec{r}_2) \langle s_2 | \langle s_1 | s_1 \rangle | s_2 \rangle \right. \\ \left. + u_{\vec{k}_2}^*(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_2}(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_1}^*(\vec{r}_2) u_{\vec{k}_1}(\vec{r}_2) \langle s_1 | \langle s_2 | s_2 \rangle | s_1 \rangle \right. \\ \left. - u_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_2}(\vec{r}_2) u_{\vec{k}_2}^*(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_1}^*(\vec{r}_2) \langle s_1 | \langle s_2 | s_1 \rangle | s_2 \rangle \right. \\ \left. - u_{\vec{k}_2}^*(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_1}^*(\vec{r}_2) u_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) u_{\vec{k}_2}(\vec{r}_2) \langle s_2 | \langle s_1 | s_2 \rangle | s_1 \rangle \right]$$

$$u_{\vec{k}_i}(\vec{r}_i) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} \quad i, j \in \{1, 2\}$$

$$\Rightarrow \text{za } \uparrow\downarrow \quad |\Psi(1,2)|^2 = \frac{1}{2} [1+1] = 1$$

Dakle, ako $\uparrow\downarrow$ mogu doći po volji blizu što ne odgovara Coulombovoj energiji \Rightarrow HF ne radi.

\rightarrow Kad bi HF mogao raditi? Kod je: $\frac{e^2}{r} \ll E_F$ (radi u toj granici) (formala $e \rightarrow 0$, r^2 ide prema malim unijednašima, granica velikih gustoba, E_F ovisi o r^3 , ...)

Za daljnji opis izračunajmo energiju osnovnog stanja. Radimo u Hartree-Fockovoj aproksimaciji, računamo na $T=0$ K za slobodni elektronski plin s interakcijom.

$$\bar{E} = \bar{E}_{kin} + \bar{E}_{in}$$

1) Kinetički dio:

$$1 \text{ čestica: } E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \text{sumiramo do } k_F \Rightarrow \bar{E}_{kin} = \sum_{\vec{k}, k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Statistički:

$$\bar{E}_{kin} = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE \quad \begin{array}{l} \text{jedna čestica} \\ \text{u } (1\vec{e}) \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{F=0 K} \\ f(E) = \Theta(E_F - E) \\ \text{Fermi-Diracova} \\ \text{raspodjela} \end{array}$$

Gustoba stanja:

$$g(E) = \sum_{\vec{k}} \delta(E - E(\vec{k})) = 2 \sum_{\vec{k}} \delta(E - E(\vec{k})) \\ = 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{R_F} d^3k \delta(E - E(\vec{k})) \quad E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ = 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int_0^{k_F} k^2 \delta(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}) dk$$

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|} \quad \begin{array}{l} x_i \text{ nultocke za} \\ \text{koje je } f'(x_i) \neq 0 \end{array}$$

$$\psi(k) = \epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad k_i = \pm \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar} \quad \psi'(k) = -\frac{\hbar^2 k}{m}$$

$$\Rightarrow g(\epsilon) = \frac{V}{\pi^2} \left[\int_0^{k_F} k^2 \delta\left(k - \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar}\right) dk + \int_0^{k_F} k^2 \delta\left(k + \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar}\right) dk \right]$$

$$= \frac{V m}{\hbar^3 \pi^2} \frac{\hbar}{\sqrt{2m\epsilon}} \left[\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} + \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right]$$

$$g(\epsilon) = \frac{2Vm}{\hbar^3 \pi^2} \sqrt{2m\epsilon}$$

$$\int_0^{\infty} \epsilon g(\epsilon) \psi(\epsilon) d\epsilon = \frac{2Vm\sqrt{2m}}{\hbar^3 \pi^2} \int_0^{\infty} \epsilon \sqrt{\epsilon} \Theta(\epsilon_F - \epsilon) d\epsilon$$

$$= \frac{2Vm\sqrt{2m}}{\hbar^3 \pi^2} \int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{3/2} d\epsilon$$

$$\int_0^{\infty} g(\epsilon) \psi(\epsilon) d\epsilon = \frac{2Vm\sqrt{2m}}{\hbar^3 \pi^2} \int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{1/2} d\epsilon$$

$$\Rightarrow \bar{E}_{kin} = \frac{\int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{3/2} d\epsilon}{\int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{1/2} d\epsilon} = \frac{\frac{2}{5} \epsilon_F^{5/2}}{\frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2}} = \frac{3}{5} \epsilon_F = \frac{3}{5} \mu_0$$

$$= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

Fermijev valni vektor određujemo iz definicije gustoće elektrona:

$$n = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \psi(\epsilon(\vec{k})) = \frac{1}{V} \cdot 2 \cdot \frac{V(4\pi)^3}{(2\pi)^3 \pi^2} \int_0^{k_F} k^2 \Theta(k_F - k) dk$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad n = \frac{N}{V}$$

$$\Rightarrow k_F = \sqrt[3]{\frac{3\pi^2 N}{V}} \quad \frac{N}{V} = \left[\frac{4\pi}{3} \bar{r}^3 \right]^{-1} \quad \bar{r} \rightarrow \text{srednji radijus po 1 elektronu}$$

$$\Rightarrow k_F = \frac{1}{\bar{r}} \sqrt[3]{\frac{9\pi}{4}} = \frac{1}{\bar{r} a_0} \quad a_0 = \frac{1}{\bar{r}} \quad \bar{a} = \sqrt[3]{\frac{4}{9\pi}} \approx 0.521$$

definiramo bezdimenzionalni parametar \bar{r}_s :

$$\bar{r} = a_0 \cdot \bar{r}_s \quad \bar{r}_s = \frac{\bar{r}}{a_0}$$

Boltrou radijus

Istu stvar bismo dobili iz gornje definicije = početka:

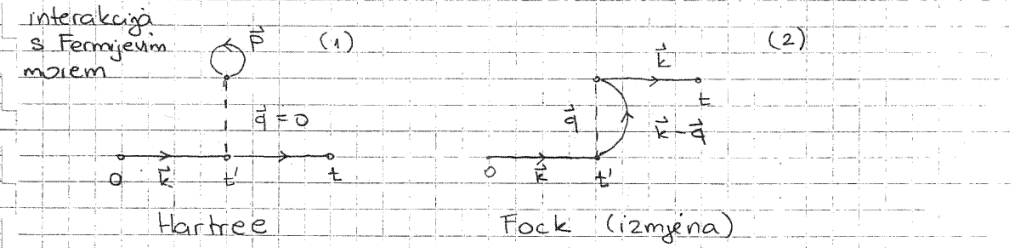
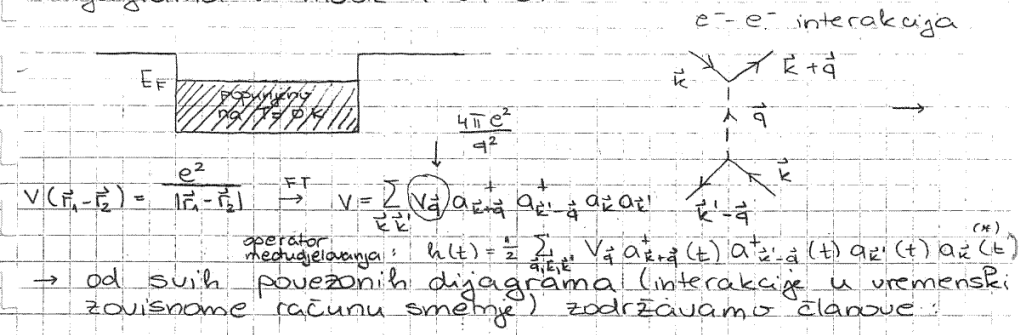
$$\bar{E}_{kin} = \sum_{\vec{k}, k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{k_F} k^4 dk$$

$$= 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{1}{5} k_F^5 = N \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = N \cdot \frac{3}{5} \epsilon_F$$

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

2°) dio zbog e-e interakcije: \rightarrow to je zeznuti dio!

To se računa u HF aprox. metodom Feynmanovih dijagrama u modelu (T=0):



Zbog interakcije među česticama u osnovnom stanju nastaju pobudjenja i virtualni prijelazi, koji opet završavaju vakuumom, ali uzrokuju promjenu energije osnovnog stanja (pod vakuum misli se na osnovno stanje.)

Razvoj S-matrice:

$$\langle \phi_0 | S | \phi_0 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots dt_n \langle \phi_0 | T \{ h(t_1) \dots h(t_n) \} | \phi_0 \rangle$$

$S^{(0)} = 1$ u sistemu ne nastaju nikakvi prijelazi

$$S^{(1)} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}, \vec{p}, \vec{p}'} V_{\vec{q}} \langle \phi_0 | T \{ a_{\vec{p}+\vec{q}}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}}^\dagger a_{\vec{p}'} a_{\vec{p}'-\vec{q}} \} | \phi_0 \rangle$$

$$T [a_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}'}(t')] = \begin{cases} a_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}'}(t') & t > t' \\ \pm a_{\vec{k}'}(t') a_{\vec{k}}(t) & t < t' \end{cases} \quad \pm \text{bazoni fermioni}$$

$$T [a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')] = \begin{cases} a_k(t) a_{k'}^\dagger(t') & t > t' \\ \pm a_{k'}^\dagger(t') a_k(t) & t < t' \end{cases}$$

↳ operator vremenskog uređenja

Wickov poučak (za temperaturu $T=0$) kaže da je T produkt operatora jednak zbroju normalnih produkata:

$$T(ABC \dots XYZ) = N(ABC \dots XYZ) + \underbrace{N(\overline{ABC} \dots)}_{\text{po 1 par}} + \underbrace{N(\overline{ABC} \dots)}_{\text{po 2 para}} + \dots + N(\overline{AB} \dots \overline{HN} \dots \overline{YZ}) \quad (\text{svi parovi kontrahirani!})$$

Normalni produkt operatora:

$$N(A_1, \dots, A_n) = (\pm)^P A_1 \dots A_n$$

Ovdje su operatori A_1, \dots, A_n poredani tako da su operatori stvaranja lijevo od operatora poništavanja, a P je broj transpozicija kojim ih dovedemo u taj poredak. (Gornji predznak vrijedi za bozone a donji za fermione.)

$$[a_k(t), a_{k'}^\dagger(t')]_{\mp} = [e^{-iE_k t} a_k, e^{iE_{k'} t'} a_{k'}^\dagger]_{\mp} = \delta_{kk'} e^{-iE_k(t-t')}$$

$$N[a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')] = a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')$$

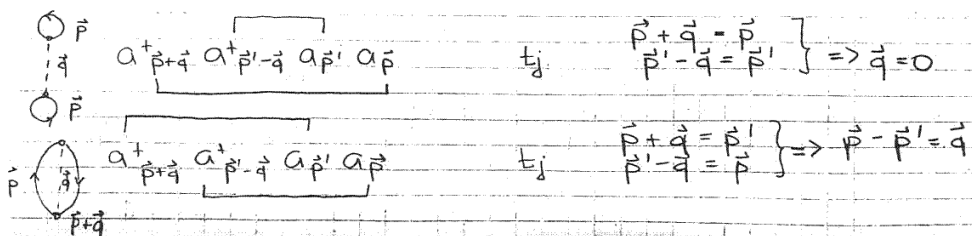
$$N[a_k^\dagger(t) a_{k'}^\dagger(t')] = a_k^\dagger(t) a_{k'}^\dagger(t')$$

$$N[a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')] = \begin{cases} a_k(t) a_{k'}^\dagger(t') & k, k' < k_F \\ \pm a_{k'}^\dagger(t') a_k(t) & k, k' > k_F \end{cases}$$

Kontrakcija dvaju operatora definirana je kao razlika:

$$\overline{UV} = T(UV) - N(UV)$$

Vratimo se sad na $S^{(1)}$: Sparivanje se može provesti na dva načina:



Feynmanovi dijagrami i Feynmanova pravila

Def. n -čestica (kauzalna) Greenova funkcija \rightarrow prosjek u osnovnom stanju operatora polja u Heisenbergovoj slici:

$$G(x_1, \dots, x_n; x'_1, \dots, x'_n) = (-i)^n \langle 0 | T \{ \psi(x_1) \dots \psi(x_n) \psi^\dagger(x'_1) \dots \psi^\dagger(x'_n) \} | 0 \rangle$$

$$x = (\vec{r}, t)$$

(operatori polja \rightarrow kosnije)

Greenova funkcija jedne čestice u osnovnom stanju sistema (kauzalna):

$$G^c(x; x') = -i \langle 0 | T \{ \psi(x) \psi^\dagger(x') \} | 0 \rangle$$

Greenova funkcija slobodne čestice:

$$G_0(\vec{k}, t) = -i \langle 0 | T (a_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}}^\dagger(0)) | 0 \rangle = -i e^{-iE_{\vec{k}} t} \begin{cases} 1 - \theta(t) & t > 0 \\ -\theta(t) & t < 0 \end{cases}$$

$$G_0(\vec{k}, \omega) = \frac{1 - \theta(\omega)}{\omega - E_{\vec{k}} + i\eta} + \frac{\theta(\omega)}{\omega - E_{\vec{k}} - i\eta}$$

propagira čestice propagira supline

Greenova funkcija u slici međudjelovanja:

$$G(\vec{k}, t) = \frac{1}{i} \frac{\langle \phi_0 | T \{ a_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}}^\dagger(0) S \} | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S | \phi_0 \rangle} = \frac{1}{i} \frac{\langle \phi_0 | S | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S | \phi_0 \rangle} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle \phi_0 | T \{ a_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}}^\dagger(0) h(t_1) \dots h(t_n) \} | \phi_0 \rangle$$

(*)

$$= \frac{1}{i} \langle \phi_0 | T \{ a_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}}^\dagger(0) S \} | \phi_0 \rangle_c \rightarrow \text{connected}$$

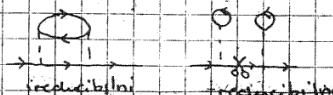
↳ samo po povezanim dijagramima (tj. onima u kojima linije čestica povezuju sve vrhove interakcija)

Dysonova jednačina:

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{G_0^{-1}(\vec{k}, \omega) - \Sigma(\vec{k}, \omega)}$$

$\Sigma(\vec{k}, \omega)$ definiramo kod zbroj svih ireducibilnih dijagrama (onih koje ne možemo podijeliti na dva dijela rezonuju jedne čestice linije)

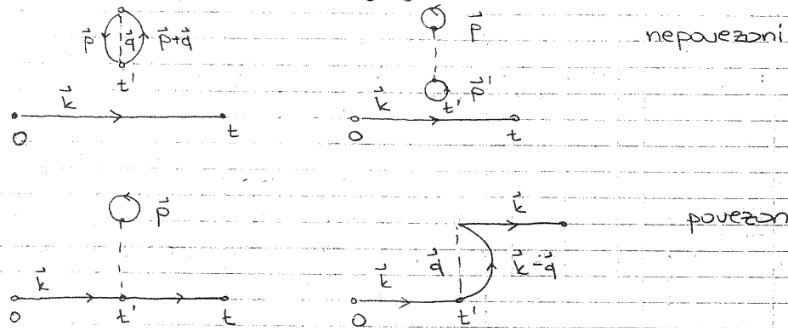
definićemo vlastitu energiju $\Sigma(\vec{k}, \omega)$ koju računamo pomoću Feynmanovih pravila



$$G^{(0)}(\vec{k}, t) = G_0(\vec{k}, t)$$

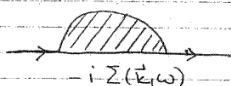
$$G^{(n)}(\vec{k}, t) = -\frac{i}{2} \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \langle \phi_0 | T \{ a_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}}^{\dagger}(0) a_{\vec{p}+\vec{q}}^{\dagger}(t') a_{\vec{p}-\vec{q}}^{\dagger}(t') a_{\vec{p}}(t') a_{\vec{p}'}(t') \} | \phi_0 \rangle$$

Kontroiranjem dobivamo dva nepovezana i dva povezana dijagrama:



Uzimamo samo povezane.

Svaki reducibilni dijagram može se dobiti ponavljanjem ireducibilnih niže reda. Definiramo li vlastitu energiju $Z(\vec{k}, \omega)$ kao zbroj svih ireducibilnih dijagrama i označimo sa:



tada razvoj za potpunu Greenovu $G(\vec{k}, \omega)$ možemo grafički prikazati u obliku:

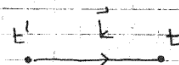


Feynmanova pravila:

$$a_{\vec{k}}^{\dagger}(t) \rightarrow \text{---} \vec{k} \text{---}$$

$$a_{\vec{k}}(t) \rightarrow \text{---} \vec{k} \text{---}$$

$$a_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}'}^{\dagger}(t') = i G_0(\vec{k}, t-t') \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$



=> spajanjem tih dvaju oznaka impulsi se izjednačavaju.

da bi se olakšalo snalaženje u velikom broju matricnih elemenata Feynman uvodi grafičke oznake za pojedine članove u (*)

$$\Rightarrow iG = iG_0 + (iG_0)(-iZ)(iG_0) + (iG_0)(-iZ)(iG_0)(-iZ)(iG_0) + \dots$$

$$\text{ili u ekvivalentnom (općenitijem matricnom) obliku:}$$

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G \Rightarrow \text{Dysonova jedn.}$$

Dalje navodimo pravila za računanje Feynmanovih dijagrama u (\vec{k}, ω) prostoru:

1. Wacrtom dijagram s usmjerenim linijama čestica (a pogodno je usmjeriti i linije interakcije), i na svakoj liniji označimo impuls i energiju, tako da zbroj impulsa, odnosno energija koje ulaze u neku točku bude jednak onima što izlaze.
2. Svakoj liniji čestice $\text{---} \vec{k} \text{---}$ pišemo $iG_0(\vec{k}, \omega)$
3. Svakoj liniji interakcije $\text{---} \vec{q} \text{---}$ pišemo $-iV_{\vec{q}}$
4. Svakom elementu $\text{---} \vec{q} \text{---}$ pišemo $n_0(\vec{q})$
5. Za svaku zatvorenu petlju dodamo faktor (-1) , osim elemenata u 4.
6. Integrirom po svim impulsima i energijama unutarnjih linija

$$\int \frac{d^3k_1 d\omega_1}{(2\pi)^4}, \dots, \int \frac{d^3k_n d\omega_n}{(2\pi)^4}$$

i zbrojimo po spinovima fermiona (što opet daje samo faktor 2 za svaku česticu).

Hartreejeva energija

Hartreejev doprinos energiji čestice opisan je Feynmanovim dijagramom (1) i dolazi od (kulonske) interakcije s gustoćom čestica u cijelom sistemu. Ako je riječ o elektron-elektron (odbojnoj) interakciji, radi neutralnosti treba ovom članu dodati i interakciju s pozitivnim nabojima, npr. s atomskom jezgrom u atomu.


U homogenom sistemu Hartreejev član u razvoju vlastite energije čestice \vec{k} odgovara kulonskoj interakciji (potencijal $V_{\vec{q}}$) s prosječnom gustoćom čestica ($n_{\vec{q}=\vec{0}}$), jer je iz dijagrama vidljivo da je $q=0$. To bi dovelo do divergencije, jer je odbojna energija beskonačno brojci elektrona u sistemu također beskonačna, no u homogenom sistemu elektroni konstantne gustoće $n(\vec{r})=n_0$ kreću se u homogenoj raspodjeli n. pozitivnog naboja, pa se doprinos $V_{\vec{q}=\vec{0}}$ mo. točno poništava s doprinosom interakcije elektrona i pozitivne pozadine.

Prema tome:

$$\Sigma_H(\vec{k}, \omega) \equiv \Sigma_H(\vec{k}) = 0$$

Važno je također uočiti da Hartreejev član ne ovisi o energiji ω , jer u procesu prvog reda nema virtualno pobudeni medustanja. U nehomogenom sistemu (npr. atom, molekula) Hartreejeva energija može biti znatan doprinos ukupnoj energiji.

Fockov član:

U ovom procesu  elektron \vec{k} ($|\vec{k}| > k_F$)

pobuduje iz Fermijeve kugle elektron u stanju \vec{q} ($|\vec{k}-\vec{q}| < k_F$) i tako stvara par elektron-suplina. Na kraju procesa početni elektron \vec{k} popunjava tako stvorenu suplinu, a pobudeni elektron vraća se na njegovo mjesto, tj. dolazi do zanjene.

Odgovarajući Feynmanov dijagram koji nam:

$$-i \Sigma_F(\vec{k}, \omega) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} (-i V_{\vec{q}=\vec{k}}) \int_{-\infty}^{\infty} i G_0(\vec{q}, \omega - \nu) \frac{d\nu}{2\pi}$$

$$G_0(\vec{q}, \omega) \equiv \frac{1 - f_{\vec{q}}}{\omega - \epsilon_{\vec{q}} + i\eta} + \frac{f_{\vec{q}}}{\omega - \epsilon_{\vec{q}} - i\eta}$$

Integral po frekvencijama jest:

$$i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \left\{ \frac{1 - f_{\vec{q}}}{\omega - \nu - \epsilon_{\vec{q}} + i\eta} + \frac{f_{\vec{q}}}{\omega - \nu - \epsilon_{\vec{q}} - i\eta} \right\}$$

Integrirat ćemo zatvorivši konturu integracije u gornjoj ili donjoj poluravnini, obuhvativši residue u polovima:

$$\nu = \omega - \epsilon_{\vec{q}} \begin{cases} +i\eta & \text{prvi član} \\ -i\eta & \text{drugi član} \end{cases}$$

Ako odaberemo primjerice donju poluravinu tj. pol $\nu = \omega - \epsilon_{\vec{q}} - i\eta$, samo drugi član daje konačan doprinos. Smjer integracije (u smjeru kazaljke sata) daje predznak (-), residuum je (-1), pa je rezultat:

$$2\pi i \cdot \frac{1}{2\pi} (-1)(-1) f_{\vec{q}} = -f_{\vec{q}}$$

Vidimo da ni Fockova energija Σ_F ne ovisi o ω .

Slijedeći integral po impulsima:

$$- \int_0^{k_F} \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{2\pi} \int_{-1}^1 dz \frac{4\pi e^2}{k^2 + q^2 - 2kqz} = - \frac{e^2}{\pi} \int_0^{k_F} \frac{q^2 dq}{2kq} \frac{k+q}{2 \ln|k-q|}$$

$$\int dx x \ln(x+A) = \frac{x^2-A^2}{2} \ln(x+A) - \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{2} - Ax \right)$$

odnosno:

$$J(x) \equiv \int dx x \ln \frac{x+A}{|x-A|} = \frac{x^2-A^2}{2} \ln \frac{x+A}{|x-A|} + Ax$$

Dobivamo:

$$\Sigma_F(\vec{k}) = - \frac{e^2}{\pi} \left\{ k_F + \frac{k_F^2 - k^2}{2k} \ln \frac{k_F + k}{|k_F - k|} \right\}$$

↳ korekcijska energija osnovnog stanja po jednoj čestici zbog interakcije

Integracija 1. člana po gornjoj poluravnini dala bi identični rezultat, ali bi granice integracije po impulsima bile nezgodnije.

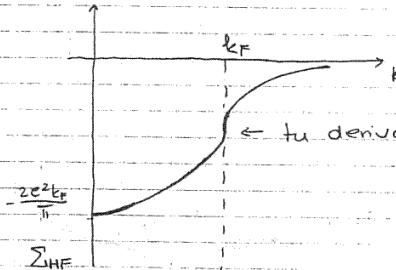
(HF)

Energija u Hartree-Fockovoj aproksimaciji:

Ukupna energija elektrona impulsa \vec{k} :

$$\tilde{E}_k = \frac{k^2}{2m} + \Sigma_{HF}(\vec{k}) \quad \Sigma_{HF} \equiv \Sigma_F < 0$$

Energija $\Sigma_{HF}(\vec{k})$ prikazana je na sljedećoj slici:



Vidimo da je $\Sigma_{HF}(\vec{k})$ svuda neprekinuta i konačna, ali na k_F ima ∞ derivaciju, pa dakle na Fermijevoj plohi i ukupna energija E_k ima ∞ derivaciju.

Iako mala, ta promjena ima važne fizičke implikacije koje pokazuju da Hartree-Fockova aproksimacija daje loše rezultate u elektronskom plinu. Naime u blizini Fermijeve plohe mijenja se energija elektrona jer zbog Paulijeve principe dolazi do odbijanja elektrona i stvaranja supline oko elektrona (engl. exchange hole), što je ekvivalentno stvaranju pozitivnog noboja: gustoba stanja čestica na Fermijevoj plohi za $k = k_F$ isčezava:

$$g(E_F) \sim \frac{1}{\frac{\partial E_k}{\partial k} \Big|_{k=k_F}} \rightarrow 0 \quad \text{jer} \quad \frac{\partial E_k}{\partial k} \rightarrow \infty$$

Ovo je nefizički rezultat, u suprotnosti s mnogim mjerenim fizikim veličinama koje ovisе o $g(E_F)$, npr. vodljivost, specifična toplina i sl., a koji ne pokazuju takvo ponašanje. Uzrok je tome prejak utjecaj nezajenjenog procesa zanjene, koji se u homogenom sistemu osjeća na ∞ udaljenostima ($q \rightarrow 0$).

$$\bar{E}_{1e} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{HF} = \frac{1}{N} 2 \cdot 4\pi \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^2 \sum_{HF}(k) dk$$

$$= -\frac{V}{N} \frac{e^2 k_F^4}{4\pi^3} \quad V = \frac{4\pi}{3} r_s^3 \quad N = \frac{4\pi a_0^3}{3} r_s^3 \cdot N$$

$$\Rightarrow \bar{E}_{1e} = -\frac{3}{4\pi} e^2 k_F$$

$$\approx -\frac{0.916}{r_s} R_y$$

$$R_y = \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{2a_0} = 13.6 \text{ eV}$$

(Prosječna) energija osnovnog stanja po 1 čestici (usrednjeno) u HF aproksimaciji:

$$E_{HF} = \left[\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right] \frac{e^2}{2a_H} = \left[\frac{2.21}{r_s} - \frac{0.916}{r_s} \right] R_y$$

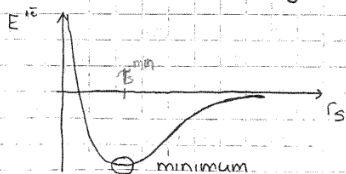
↳ (Rezultat koji je Banšić naveo)

$\bar{r} \leftarrow$ prosječni radijus kugle koju zauzima $1e^-$
 $r_s \equiv a_H$

↳ izgleda kao početak razvoja po malom r_s , ali taj razvoj nije regularan. (pol. 2 reda, pa pol. 1. reda)

↳ ovaj formalno izgleda kao razvoj po velikoj gustoći

- taj oblik ima stabilnu točku - stabilnu gustoću t_j $\exists r_s$ koji minimizira energiju osnovnog stanja. (+ i - naboj a noći volumen koji ih drži skupa, kohezija...)

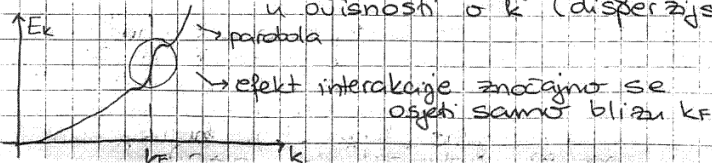


$r_s \rightarrow$ dobiju se srednje udaljenosti tipične za komete (nekoliko a_H)

• Paulijev princip ključan za stvaranje stabilnosti sistema.

napomena: Kvaliteta rezultata u HF aproksimaciji

$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sum_{HF} \rightarrow$ energija osnovnog stanja $1e^-$ u ovisnosti o k (dispersijska relacija)



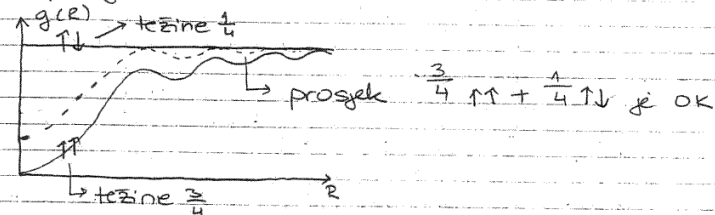
$$g(E) \sim \frac{1}{\sqrt{E-E_F}} \xrightarrow{10} \frac{1}{\left| \frac{dE_k}{dk} \right|} \rightarrow \frac{1}{\infty} \rightarrow 0$$

Taj rezultat je paradoksalan: na Fermi nivou nema niti jednog elektrona, a znamo da ih je tomo moguće. To je posljedica Pauli prinipa koji je toliko jak da ih sve od tomo "raspi". Za bolji rezultat trebalo je uzeti u obzir dijagrame višeg reda i zosjerenje Coulombovog potencijala.

! Rezultat možda i nije dobar zbog pogrešne korelacione funkcije za $\uparrow\uparrow$, ali dobro je to što nam kaže da E_{1e} ima minimum u stabilni položaj \Rightarrow "žele" se, neće razletjeti zbog Coulombovih sila (klasični bi se razletio), a to je posljedica kvantnih efekata: Pauli princip \Rightarrow Fockov član izmjene spašava stvar.

Traženjem 2. derivacije dobili bismo elastičnu konstantu.

Korelacione funkcije $g_{\uparrow\uparrow}$ i $g_{\uparrow\downarrow}$ dobivene su antisim. fije koordinate (TRIPLET) i sim fije koordinate (SINGLET) pa u prosjeku imamo:



Zelimo obići korak dalje i uvesti članove koji koreliraju elektrone ne samo zbog Paulijevog prinipa nego i zbog INTERAKCIJE, a to je RPA aprox

Dakle, sada uzimamo u obzir Coulombovu interakciju među elektronima, Paulijev prinap i činjenicu da e^- međusobno ^{interagiraju} uzimamo u obzir u proračunu korelacione funkcije. Ne računamo direktno korelacionu funkciju, nego di električnu konstantu.

$$H = H_0 + H_{int} + \sum_q eV_q^{ext} S_{-q}$$

(*) vanjsko polje (ovisi eventualno u prostoru i vremenu)

singulantet za mali q \rightarrow suma po sumi Fourierovim komponentama
 $\frac{4\pi e^2}{q^2} S_q S_{-q}$
 q je u vezi s dugodosežnošću Coulombove interakcije
 taj član onemogućava svatkoje problema na 1 elektronski
 Coulombova interakcija između vanjskog naboja i lokalnog naboja

- sada se „pravimo“ da računamo odziv na polje (*)
 ↳ perturbativni račun

Najjednostavnija granica: Vanjsko polje vremenski neovisno: $\omega = 0$ i $q \ll k_F$

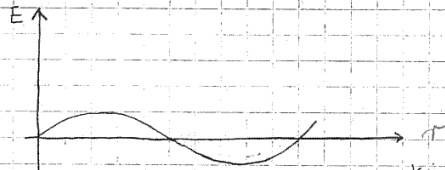
↳ Thomas-Fermijeva aproksimacija

PP imamo ext. polje ovisno o prostoru i inducira se gustocá s istim q . (PP linearni odziv)

V_q^{ext} elektroni vide samosuglasni potencijal $V_q = \frac{V_q^{ext}}{\epsilon_q}$ to smo utrdili iz Maxwellovih jednažbi

- Crtamo neki samosuglasni potencijal malog valnog vektora

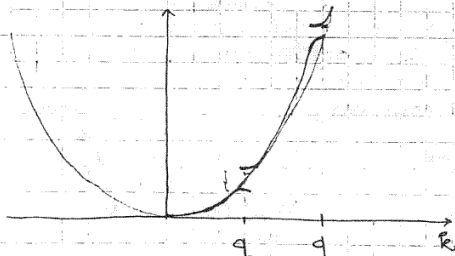
- ELEKTRONI SLOBODNI, VIDE V_q



Energija elektrona u $E = E(k) + eV_q = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + eV_q$

↳ izgleda kao egzaktna formula, ali mi smo napravili već dosta aproksimacija
 - elektrone gledamo kao da se nalaze u nekom jednoel. potencijalu
 - opisujemo ih klasično

Da ih opisujemo kvantno, recimo u 1D dobili bismo:



$n = \frac{2\pi}{q}$ Imamo e^- u periodičnom potencijalu
 $q = \frac{2\pi}{\lambda}$
 ↳ vrpčast spektor periodicitet: q

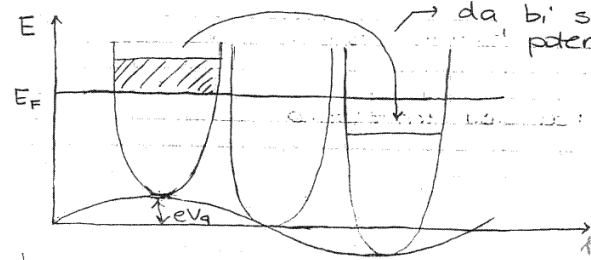
⇒ e^- ima vrpčast spektor s 1.BZ od $-\frac{q}{2}$ do $\frac{q}{2}$

Zašto to možemo zonedirati?
 ↳ gap ide sa sve višim i višim potencijalima

$k_F \gg q$ Fermi nivo daleko toli da su gapovi mali.

↳ spektor više nije parabolican nego se na rubu BZ otvara gap.

⇒ spektor kvadrati samo pomaknut za V_q gore ili dole:



da bi se izjednačio kemijski potencijal:

Elektroni će imati dovoljno vremena da se preraspodjela da kemijski potencijal bude u cijelom kristalu isti.

↳ E_F je u cijelom kristalu ista, gustocá stonja na Fermi nivou

$S_q = -n_F e V_q$
 $= -e n_F \frac{V_q^{ext}}{\epsilon_q} = -\frac{4\pi e^2}{q^2} n_F (S_q^{ext} + S_q)$
 $V_q^{ext} = \frac{4\pi e^2}{q^2} (S_q^{ext} + S_q)$ V_q negativan S_q pozitivan

$\frac{S_q}{S_q^{ext}} = \left[-\frac{4\pi e^2 n_F}{q^2} \right] / \left[1 + \frac{4\pi e^2 n_F}{q^2} \right] = \frac{1}{\epsilon_q} - 1$

↳ dobivamo gustocú koja se odazvala vanjskoj gustoci

Dielektrična konstanta:

$\epsilon_q = 1 + \frac{4\pi e^2 n_F}{q^2} k_{TF}^2$ $k_{TF} \rightarrow$ Thomas-Fermijev valni vektor

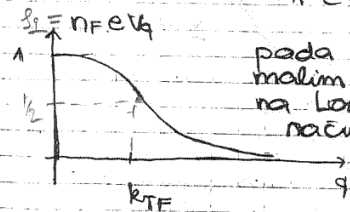
↳ i ona sama je singularna za mali $q \Rightarrow$ zospenjeni potencijal V_q^{ext} / ϵ_q nije singularan! (VAŽNO!)

$eV_q = \frac{eV_q^{ext}}{\epsilon_q} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2}$; $n_F eV_q = \frac{k_{TF}^2}{q^2 + k_{TF}^2} \rightarrow$

↳ formula koja vrijedi za $q \ll k_F$; ujet $k_{TF} \ll k_F$

Vidimo: zospenjena interakcija je za mali q nesingularna ali je ≈ 1

$n_F eV_q \approx 1$ za $q \rightarrow 0$



pada prema malim vrijednostima na Lorentzianski način

Izlaz za konvergenciju? Kažemo da je marginalno područje malo: $k_{TF} \ll k_F$

(situacija kod $e \rightarrow 0$)

$n_F \frac{q^2}{k_{TF}^2} \ll 1$, odnosno:

Coulombovska veličina $k_{TF} \ll k_F$ (inverzna Coul. skala) ↳ avisi o broju čestica

U granici $r_s \ll 1$ stvar funkciona (kod je gustoća velika stoga stvar je ok)

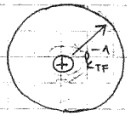
$r_s \ll 1 \rightarrow$ nije realno (tipično ≈ 1)

$$V(r) = \frac{e^2}{R} e^{-k_{TF} r}$$

Furierov transformat Lorentziana u 3D

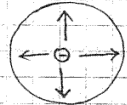
Yukawa potencijal

\rightarrow primjećujemo: radi se o potencijalu koji više nije dugodosežno



elektron koji tu sjedi vidi kratkodosežni potencijal

- skupiti će se naboj preko udaljenosti k_{TF}^{-1}
 \rightarrow točkasti naboj se ne vidi - zosjerenje



isto zosjerenje

\rightarrow to ujedno daje odgovor na pitanje korelacija

\rightarrow cijelu stvar smo predstavili kao odgovor na mali vanjski naboj, ali po fluktuaciono-disipacionom teoremu možemo gledati i e- koji nije vanjski

- bez obzira na spin \exists korelacijska supljina oko svakog elektrona

- točka korelacijska funkcija isto je bolja od Hartree-Fockove jer u sebi sadrži čimjenicu da se elektroni odbijaju

Problem koji je preostao?

Rezultat (*) nije do kraja dobar

1. Integrali smo preko svih q (dobili formulu (*)), a ne samo do $q \ll k_F$ (širenje formule)

\rightarrow na molim q dobili smo dobar rezultat...

2. Želimo promijeniti $\omega = 0$ tj. može nas zanimati odziv elektronskog plina na dinamičko, a ne samo statičko polje.

\rightarrow tj. vremenski ovisno ($\omega \neq 0$)

\rightarrow rezonancije...

8.5.2002.
 generalizacija:

RPA (Random phase approx.) (Aproximacija slučajnih faza)

Stvar se svodi na računanje dielektrnog odziva VREMENSKI-ZAVISNOM SAMOSUGLASNOM METODOM.
 Podrazumijevamo slobodni e- plin izložen vremenski - prostorno zavisnoj smetnji (EH val, gdje zonedmarujemo B tj. magnetske efekte)
 Bit RPA svodi se na čimjenicu da pod određenim uvjetima suma eksponencijalnih članova toguma faza vanra slučajno može biti zonedmarena u odnosu na N:

$$\sum_i e^{i(\epsilon - \epsilon_i) \vec{r}_i} \approx N \delta_{\epsilon, \epsilon_i}$$

Ta se aproksimacija koristi za račun zosjerenja, ali \exists duže bitne aprox. u odnosu na Thomas-Fermigeuu aprox.:

- 1.) u RPA gustoća zosjerenja je konačna u ishodištu
- 2.) u RPA gustoća zosjerenja osailira za veće vrijednosti r

Aproksimacija je primjenjiva samo na sisteme slabe veze. To je mikroskopska teorija makroamplitudnih vibracija višefermionskih sustava.

Gellman-Bruckner 1955 - napravili račun za kohezivnu energiju.

Nozières-Pines: napravili račun za $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ i iz njega izračunali kohezivnu energiju. - dobili isto!

Smetnja:

$$V_q^{ext}(\omega) e^{i(\vec{q}\vec{r} + \omega t)} + c.c. \rightarrow V_q e^{i(\vec{q}\vec{r} + \omega t)}$$

$$V_q(\omega) = \frac{V_q^{ext}}{\epsilon_q(\omega)}$$

kompleksno konjugirani dio
 kulonski potencijal
 zamenjen je samosugl. potencijalom (zosjerenim)

[sam samosuglasni pot. bit će mali...]

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} \rightarrow \psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + \frac{b_{\vec{k}+\vec{q}}(t)}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}} e^{i(\vec{k}+\vec{q})\vec{r}}$$

e- na početku neovisni! (opisani računom valovima)

dan perturbativnom teorijom

$$b_{\vec{k}+\vec{q}}(t) = \frac{V_q(\omega) e^{i\omega t} e^{i\vec{q}\vec{r}}}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\omega - i\eta}$$

sve je samosuglasno pod uvjetom da je $V_q(\omega)$ mala velicina

η - adijabatski faktor

ds: \rightarrow smetnja: $V_q \text{ent} (\omega) e^{i(\vec{q}\vec{r} + \omega t)} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \text{c.c.}$
 $\delta v \rightarrow 0$ & $\delta t < 0$
 ↳ kompl. konj. dio da bi V bio HERMITSKI
 $V = V + V^\dagger$
 (realnost potencijala)

- adijabatski faktor osigurava adijabatsko uključivanje smetnje (pomaže u integraciji nekih singulariteta)
 - smetnja se u dijelu koji nas zanima ponaša OSCILATORNO

Radiamo u perturbacionom računu: uzimamo sistem slobodnih elektrona: $\psi \rightarrow e^{i\vec{k}\vec{r}}$ (ravni val) (to je aprox.)

! Budući je smetnja valnog vektora \vec{q} može stajati sl. e-impulsa $|\vec{k}\rangle \sim e^{i(\vec{k}\vec{r} + (\vec{k}\vec{k})t)}$ bit će miješano sa stanjem $|\vec{k} + \vec{q}\rangle$ pa nom je valna funkcija za račun smetnje:

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle + b_{\vec{k}+\vec{q}}(t)|\vec{k}+\vec{q}\rangle + b_{\vec{k}-\vec{q}}(t)|\vec{k}-\vec{q}\rangle$$

↳ vremenski zavisna ↳ $b^2 \sim$ vrem. zav. vjerojatnosti priglaza iz $|\vec{k}\rangle \rightarrow |\vec{k}+\vec{q}\rangle$

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = e^{i(\vec{k}\vec{r} + \frac{\hbar k^2}{2m}t)} ; \omega_{\vec{k}} \equiv \frac{\hbar k^2}{2m}$$

↳ ne treba \Rightarrow drugačija norma gustoća $S \rightarrow g(\vec{r})$

(u slučaju bi trebalo biti:

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle + b_{\vec{k}+\vec{q}}(t)|\vec{k}+\vec{q}\rangle + b_{\vec{k}-\vec{q}}(t)|\vec{k}-\vec{q}\rangle,$$

ali je prethodno dovoljno jer se ne razlikuje rezultat)

* Dodatak: izvod b iz računa smetnje

$$H = H_0 + V_q(\omega) e^{i(\vec{q}\vec{r} + \omega t)} + V_q^\dagger(\omega) e^{-i(\vec{q}\vec{r} + \omega t)}$$

perturbacija po zosyjenjenu pot

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle + b_{\vec{k}+\vec{q}}(t)|\vec{k}+\vec{q}\rangle + b_{\vec{k}-\vec{q}}(t)|\vec{k}-\vec{q}\rangle$$

$$H |\psi_{\vec{k}}\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{\vec{k}}\rangle$$

$$D = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\vec{k}\rangle + b_{\vec{k}+\vec{q}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\vec{k}+\vec{q}\rangle + b_{\vec{k}-\vec{q}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\vec{k}-\vec{q}\rangle$$

+ $i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} b_{\vec{k}+\vec{q}} \right) |\vec{k}+\vec{q}\rangle + i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} b_{\vec{k}-\vec{q}} \right) |\vec{k}-\vec{q}\rangle$

$$I = H_0 |\psi_{\vec{k}}\rangle + V |\psi_{\vec{k}}\rangle$$

$$V |\psi_{\vec{k}}\rangle = i\hbar \frac{\partial b_{\vec{k}+\vec{q}}}{\partial t} |\vec{k}+\vec{q}\rangle + i\hbar \frac{\partial b_{\vec{k}-\vec{q}}}{\partial t} |\vec{k}-\vec{q}\rangle$$

- (i) $\langle \vec{k}+\vec{q} |$
- (ii) $\langle \vec{k}-\vec{q} |$

$$(i) \langle \vec{k}+\vec{q} | V |\psi_{\vec{k}}\rangle = i\hbar \frac{\partial b_{\vec{k}+\vec{q}}}{\partial t} + 0$$

$$i\hbar \frac{\partial b_{\vec{k}+\vec{q}}}{\partial t} = \langle \vec{k}+\vec{q} | V | \vec{k} \rangle + b_{\vec{k}+\vec{q}} \langle \vec{k}+\vec{q} | V | \vec{k}+\vec{q} \rangle + b_{\vec{k}-\vec{q}} \langle \vec{k}+\vec{q} | V | \vec{k}-\vec{q} \rangle$$

$|\vec{k}\rangle = e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i\omega_{\vec{k}}t} = |\vec{k}\rangle_0 e^{i\omega_{\vec{k}}t}$

$$\langle \vec{k}+\vec{q} | V | \vec{k} \rangle \sim \{ \langle \vec{k}+\vec{q} | \vec{k} + 2\vec{q} \rangle + \langle \vec{k}+\vec{q} | \vec{k} \rangle \} = 0$$

$$\langle \vec{k}+\vec{q} | V | \vec{k}-\vec{q} \rangle \sim \{ \langle \vec{k}+\vec{q} | \vec{k} \rangle + \langle \vec{k}+\vec{q} | \vec{k}-2\vec{q} \rangle \} = 0$$

$$\langle \vec{k}+\vec{q} | V | \vec{k} \rangle \sim \{ \langle \vec{k}+\vec{q} | \vec{k}+\vec{q} \rangle + \langle \vec{k}+\vec{q} | \vec{k}-\vec{q} \rangle \} \neq 0$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial b_{\vec{k}+\vec{q}}}{\partial t} = V_q(\omega) \langle \vec{k}+\vec{q} | e^{i(\vec{q}\vec{r} + \omega t)} e^{i\vec{k}\vec{r}} | \vec{k} \rangle$$

$$= V_q(\omega) \underbrace{\langle \vec{k}+\vec{q} | e^{i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle}_1 e^{-i\omega_{\vec{k}+\vec{q}}t} e^{i\omega_{\vec{k}}t} e^{i\omega t} = V_q(\omega) e^{i(\omega + \omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}+\vec{q}})t}$$

$$b_{\vec{k}+\vec{q}} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t V_q(\omega) e^{i(\omega + \omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}+\vec{q}})t} e^{i\omega t} dt$$

$$= \frac{1}{i\hbar} V_q(\omega) \frac{1}{i(\omega + \omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}+\vec{q}}) + \delta} e^{i(\omega + \omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}+\vec{q}})t} e^{i\omega t} - \frac{V_q(\omega) e^{i(\omega + \omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}+\vec{q}})t} e^{i\omega t}}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\omega - i\hbar\delta}$$

$$(ii) i\hbar \frac{\partial b_{\vec{k}-\vec{q}}}{\partial t} = \langle \vec{k}-\vec{q} | V |\psi_{\vec{k}}\rangle$$

$$= \langle \vec{k}-\vec{q} | V | \vec{k} \rangle + b_{\vec{k}+\vec{q}} \langle \vec{k}-\vec{q} | V | \vec{k}+\vec{q} \rangle + b_{\vec{k}-\vec{q}} \langle \vec{k}-\vec{q} | V | \vec{k}-\vec{q} \rangle$$

$$\langle \vec{k}-\vec{q} | V | \vec{k} \rangle \sim \{ \langle \vec{k}-\vec{q} | \vec{k} + \vec{q} \rangle + \langle \vec{k}-\vec{q} | \vec{k} - \vec{q} \rangle \}$$

$$i\hbar \frac{\partial b_{\vec{k}-\vec{q}}}{\partial t} = V_q^\dagger(\omega) \langle \vec{k}-\vec{q} | e^{-i(\vec{q}\vec{r} + \omega t)} e^{i\vec{k}\vec{r}} | \vec{k} \rangle$$

$$= V_q^\dagger(\omega) \underbrace{\langle \vec{k}-\vec{q} | e^{-i\vec{q}\vec{r}} | \vec{k} \rangle}_1 e^{-i\omega_{\vec{k}-\vec{q}}t} e^{-i\omega t} e^{i\omega_{\vec{k}}t}$$

$$= V_q^+(w) e^{i(kz - \omega t - \omega z - q) t} e^{dt}$$

$$b_{k-q}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_q^+(w) e^{i(\omega z - \omega z - q - \omega) t} e^{dt} dt$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \frac{V_q^+(w) e^{i(\omega z - \omega z - q - \omega) t} e^{dt}}{i(\omega z - \omega z - q - \omega) + d}$$

$$= -\frac{V_q^+(w) e^{i(\omega z - \omega z - q - \omega) t} e^{dt}}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \hbar\omega - i\hbar d}$$

$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = e^{i(\vec{k}\vec{r} + wt)}$
 $\langle \vec{r} | \psi_k \rangle = \psi_k(\vec{r}, t)$

↳ smetnja prebacuje $\vec{k} \rightarrow \vec{k} \pm \vec{q}$, $\forall \vec{k}$.

⇒ Smetna valna funkcija u $\{\vec{r}\}$ -reprezentaciji:

$$\psi_k(\vec{r}, t) = e^{i(\vec{k}\vec{r} + \omega t)} - \frac{V_q(w) e^{i(\omega z - \omega z - q - \omega) t} e^{dt}}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} + \hbar\omega - i\hbar d} e^{i(\vec{k} + \vec{q})\vec{r}}$$

$$- \frac{V_q^+(w) e^{i(\omega z - \omega z - q - \omega) t} e^{dt}}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} - \hbar\omega - i\hbar d} e^{i(\vec{k} - \vec{q})\vec{r}}$$

$$= e^{i(\vec{k}\vec{r} + \omega t)} \left[\frac{V_q(w) e^{i\omega t} e^{dt}}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} + \hbar\omega - i\hbar d} e^{i\vec{q}\vec{r}} - \frac{V_q^+(w) e^{i\omega t} e^{dt}}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \hbar\omega - i\hbar d} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right]$$

Dvije važne stvari:

1. perturbacija po samosuglasnom (zasjenjenom) potencijalu
2. elektroni su na početku nezavisni (ne interagiraju) → opisani ravnim valom.

Zamislimo da smetnja potječe od malog naboja $v \propto \frac{1}{q^2}$ (divergencija za $q \ll$). Ta divergencija za male q dovodi u pitanje račun smetnje. Ideja je da uzmemo da se radi o djelovanju svih elektrona i smetnje u nadi da će to ukloniti singularitet ($\rightarrow 1$.)

$$\Rightarrow V_q^{ext} e^{i(\vec{q}\vec{r} + \omega t)} e^{dt} \rightarrow V_q e^{i(\vec{q}\vec{r} + \omega t)} e^{dt} \quad \text{↗ zasjenjeni potencijal}$$

određujemo samosuglasno i nadamo se da je malen. Ako nam to bude za rukom onda je PP za račun smetnje OK.

gustoća naboja: (bez $(-e)$) → koncentracija

1. prije smetnje - konstantna homogena raspodjela; $\rho \sim |\psi|^2$

$$\rho = e \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} |e^{i(\vec{k}\vec{r} + \omega t)}|^2 = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \cdot 1$$

za $T=0$
bilo bi $\sum_{\vec{k}} 1$

(ne promatramo ovisnost o spinu - trenutno nam ona nije važna)

2. kod djeluje smetnja ⇒ ovisnost o (\vec{r}, t)

$$\rho = e \sum_{\vec{k}, \vec{r}} f_{\vec{k}} |\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)|^2$$

→ Fluktuaciono disipacioni teorem → trik: možemo se vratiti na sl. e^- plin

⇒ Pomaknuti naboj (inducirana gustoća tj. koncentracija) $\rightarrow \delta S(\vec{r}, t)$

gustoća je inducirana v. i deg. $f_{\vec{k}} e^{-\epsilon_{\vec{k}}}$
↑
bez $(-e)$

$$\delta S(\vec{r}, t) = e \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left[|\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)|^2 - 1 \right]$$

↳ inducirana promjena gustoće ↳ Fermijeve raspodjele (posirenje teorije na $T \neq 0$) ↳ oduzimanje modula ravnog vala

$$\approx e \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left[\tilde{b}_{\vec{k}+\vec{q}}(t) e^{i\vec{q}\vec{r}} + \tilde{b}_{\vec{k}+\vec{q}}^*(t) e^{-i\vec{q}\vec{r}} + \tilde{b}_{\vec{k}-\vec{q}}(t) e^{-i\vec{q}\vec{r}} + \tilde{b}_{\vec{k}-\vec{q}}^*(t) e^{i\vec{q}\vec{r}} \right]$$

↳ radimo LINEARNI ODZIV tj. uzimamo samo članove linearne u V_q tj. linearne u b .

$$= e \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left\{ \left[\tilde{b}_{\vec{k}+\vec{q}}(t) + \tilde{b}_{\vec{k}-\vec{q}}^*(t) \right] e^{i\vec{q}\vec{r}} + \left[\tilde{b}_{\vec{k}+\vec{q}}^*(t) + \tilde{b}_{\vec{k}-\vec{q}}(t) \right] e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right\}$$

$$= \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left\{ \left[\frac{e V_q(w) e^{i\omega t} e^{dt}}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} + \hbar\omega - i\hbar d} - \frac{e V_q^+(w) e^{i\omega t} e^{dt}}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \hbar\omega + i\hbar d} \right] e^{i\vec{q}\vec{r}} + c.c. \right\}$$

$$\delta S = -e \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left\{ \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} + \hbar\omega - i\hbar d} + \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \hbar\omega + i\hbar d} \right\} \frac{V_q^{ext}(w)}{\epsilon_k(w)} e^{i\vec{q}\vec{r}} e^{-i\omega t} e^{dt} + c.c.$$

↑
parametar razvoja, želimo da bude malen

↳ analogna računu za inducirani dipolni moment od prij.

(standardno stavljamo $\hbar=1$)

Prethodni rezultat možemo pisati i na sledeći način:

$$\delta S = -e \sqrt{V_q(w)} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} + \omega - i d} \right\} e^{i\vec{q}\vec{r}} e^{-i\omega t} e^{dt} + c.c.$$

↳ stavljamo $\hbar=1$ $\delta S_q(\omega)$

($\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q} \rightarrow$ prelazimo u II. članu na sumaciju po \vec{k}')

Dalje radimo samosuglasni korak \rightarrow Koeficijent proporcionalno izmedu δS i varijskog potencijala nalazimo iz Maxwellovih jednačina:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 4\pi \rho^{ext} = -\nabla^2 \phi^{ext} \quad \phi = \frac{V}{e} \quad \rightarrow \text{pot. em.}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi (\rho^{ext} + \rho^{ind}) = 4\pi (\rho^{ext} + \delta S) \quad \rightarrow \text{potencijal}$$

$$\vec{E} = -\nabla \phi \quad \vec{D} = -\nabla \phi^{ext} \quad \phi = \phi^{ext} + \delta \phi$$

$$\delta \phi = \phi e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\omega t} e^{i\omega t} + c.c.$$

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{q}} \int d\omega e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{i\omega t} \vec{D}_{\vec{q}}(\omega)$$

$$+ q^2 \phi_{\vec{q}}(\omega) = 4\pi \rho_{\vec{q}}^{ext}(\omega) \quad \phi_{\vec{q}}(\omega) = \frac{\phi_{\vec{q}}^{ext}(\omega)}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)}$$

$$+ q^2 \phi_{\vec{q}}^{ext}(\omega) = 4\pi \rho_{\vec{q}}^{ext}(\omega) + 4\pi \delta S_{\vec{q}}(\omega)$$

$$\Rightarrow \rho_{\vec{q}}^{ext}(\omega) = + \frac{q^2}{4\pi} \frac{\phi_{\vec{q}}^{ext}(\omega)}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)} = + \frac{q^2}{4\pi e} \frac{V_{\vec{q}}^{ext}(\omega)}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)}$$

$$\Rightarrow + \frac{q^2}{e} V_{\vec{q}}^{ext}(\omega) = + \frac{q^2}{e} \frac{V_{\vec{q}}^{ext}(\omega)}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)} + 4\pi \delta S_{\vec{q}}(\omega)$$

$$\delta S_{\vec{q}}(\omega) = - \frac{q^2}{4\pi e} \left[\frac{1}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)} - 1 \right] V_{\vec{q}}^{ext}(\omega) \quad e < 0$$

Usporedbom dobijemo:

$$\frac{e}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega - i\delta} \right\}$$

$$= \frac{q^2}{4\pi e} \left[\frac{1}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)} - 1 \right] \quad \text{samosuglasna jednačina za } \epsilon_{\vec{q}}(\omega)$$

{ trik: treba naći $\epsilon_{\vec{q}}(\omega)$ t. da $V_{\vec{q}}$ bude malen }

1. $\epsilon_{\vec{q}}(\omega)$

$$\sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega - i\delta} \right\} = \frac{q^2}{4\pi e^2} \left[1 - \epsilon_{\vec{q}}(\omega) \right]$$

$$\Rightarrow \epsilon_{\vec{q}}(\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega - i\delta} \right\} \quad \text{LINDHARDTIN IZRAZ}$$

$\epsilon_{\vec{q}}(\omega)$ je funkcija valne dužine i frekvencije primarne smetnje (perturbacije)

\rightarrow dielektrična funkcija

Mi smo izveli taj rezultat za jednu Fourierovu komponentu, ali buduci smo linearizirali jednačine možemo uzeti da se doprinosi pojedinih Fourierovih komponenti zbrojavaju.

$$V^{ext}(\vec{r}, t) = \iint V^{ext}(\vec{q}, \omega) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{i\omega t} d\vec{q} d\omega$$

\rightarrow ako uzmemo tokav varijski potencijal, efektivni potencijal koji vide elektroni možemo napisati u obliku:

$$V(\vec{r}, t) = \iint \frac{V^{ext}(\vec{q}, \omega)}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{i\omega t} d\vec{q} d\omega$$

Vrijedi relacija: $\lim_{s \rightarrow +0} \frac{1}{x \pm is} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x)$

(\mathcal{P} \rightarrow principalna vrijednost)

Rezultat:

\rightarrow izrazi za dielektričnu konstantu u aprox. slučajnih faza

$$\text{Re } \epsilon_{\vec{q}}(\omega) = 1 - \frac{8\pi e^2}{q^2} \sum_{\vec{k}} \frac{(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}) f_{\vec{k}}}{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})^2 - \omega^2} \quad \text{KONKRETNI IZRAZI!}$$

$$\text{Im } \epsilon_{\vec{q}}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left[\delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega) - \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \omega) \right]$$

Izvod prethodnih relacija:

integriramo dugodosećni članac a mi polazimo od stabilnog aproks. je u tome što je pp. da su e- na početku opisani ravnom valovima. Svakom su oni uo. na početku opisani elektonnim stanjima koja uključuju njihovu interakciju. Treba ispitati početno pp. na rezultatu.

$$S = \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega - i\delta} = \sum_{\vec{k}} \left[\frac{f_{\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega - i\delta} + \frac{f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - \omega + i\delta} \right]$$

$$= \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left[\frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega - i\delta} + \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \omega + i\delta} \right]$$

\rightarrow u 2. članu $\vec{k} + \vec{q} \rightarrow \vec{k}$
 $\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \vec{q}$
 \rightarrow iz toga je acit $\text{Im } \epsilon_{\vec{q}}(\omega)$

$$\text{Re } S = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left[\frac{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega}{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega)^2 + \delta^2} + \frac{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \omega}{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \omega)^2 + \delta^2} \right]$$

$$\cong \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left[\frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega} + \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \omega} \right]$$

$$= \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega} + \sum_{\vec{k}'} \frac{f_{\vec{k}'}}{\epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}} - \omega} \quad \vec{k}' = -\vec{k}$$

Fermijeva raspodjela $f_{\vec{k}} = f(\epsilon(\vec{k}))$
 $f_{\vec{k}'} = f_{\vec{k}}$ $\epsilon(\vec{k}') = \epsilon(-\vec{k})$
 $\epsilon_{\vec{k}'} = \epsilon_{\vec{k}}$

$$\text{Re } S = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega} + \sum_{\vec{k}'} \frac{f_{\vec{k}'}}{\epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}} - \omega}$$

$$= \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \omega} + \sum_{\vec{k}'} \frac{f_{\vec{k}'}}{\epsilon_{\vec{k}'} - \epsilon_{\vec{k}'-\vec{q}} - \omega}$$

$$\Rightarrow \text{Re } S = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega} + \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega} \right]$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \frac{2(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 - \omega^2}$$

RPA:
 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ u
 plinu opisani
 rovnim
 volumna
 odnosa
 stanja
 pri na naj
 prosti
 ravni
 voluje...

$$\Rightarrow \text{Re } \epsilon_{\mathbf{q}}(\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \text{Re } S$$

$$\Rightarrow \text{Re } \epsilon_{\mathbf{q}}(\omega) = 1 + \frac{8\pi e^2}{q^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}) f_{\mathbf{k}}}{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 - \omega^2}$$

Treba uočiti: Dobili smo $S(\mathbf{r}, t)$ koji je iste frekvencije kao vanjska smetnja. To je posljedica linearizacije u jednakom od prethodnih koraka.

[veza $S(\mathbf{r}, t)$ i $V_{\mathbf{q}}$ pod pp. da je on malen vodi na rezultat da $S(\mathbf{r}, t)$ ima istu frekvenciju kao vanjska pobuda]

LINEARNI ODGOVOR

- odgovor nije sasvim u fazi sa poljem $\rightarrow \exists \text{Im } \epsilon_{\mathbf{q}}(\omega)$
 \rightarrow ima dodatni imaginarni dio

[Kramers-Kronigove relacije - posljedica kauzalnosti. Kauzalnost je skrivena u činjenici da odgovor sistema može ovisiti o vanjskim polju u ranijim trenutcima, a ne u kasnijim; retordiranost \rightarrow odziv kasni za pobudom]

Sadržaj RPA najbolje se može očitati iz $\text{Im } \epsilon_{\mathbf{q}}(\omega) \leftrightarrow$ vanjsko polje inducira prijelaze $\epsilon_{\mathbf{k}} \leftrightarrow \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ predjom ili uzimanjem energije ω od sustava (proces najnižeg reda)

Samosuglasnost: vanjsko polje je zasjenjeno. teorija je perturbativna

Odgovor sistema je istog valnog vektora \mathbf{q} i iste frekvencije ω kao vanjska pobuda (posljedica Im odgovora)

\rightarrow otuda ime RPA (oprostimacija slučajnih faza)

prije: \rightarrow nije se razumjelo zašto se me gledaju viši harmonici, pa su mislili da je razlog tome

što imaju slučajne faze pa se sumiraju u nulu (ponište)

(-kooperni odziv ima isti valni vektor kao i upad, nekad se mislilo (što nije tačno) da nekoj od stanja u rasponu za slučajnu fazu, pa se u sumama ponište. Čak i to nije tačno ostalo je ista RPA)

\rightarrow mi kažemo da je teorija perturbativna po zasjenjenom potencijalu pa nam ne treba mistična pp. da su viši harmonici random faza.

Razmotrimo još malo rezultat koji smo dobili:

Bavimo se linearnim odzivom na malo vanjsko polje. (tj. malen je zasjenjeni potencijal)

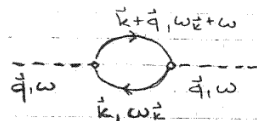
Što se u biti događa?



\rightarrow Fermijeve kugla na $T=0K$

\rightarrow smetnjom smo pobudili par elektron-supljina koji se može anihilirati i nastaviti tako dalje pobudu

To odgovara dijagramu:



(POLARIZACIJSKI DIJAGRAM)

! Rodi se o procesu 1. reda, ali račun je samosuglasan, pa imamo odgovor ne samo na vanjsko polje već na ukupno polje!

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{V_{\mathbf{q}}^{\text{ext}}}{\epsilon_{\mathbf{q}}(\omega)}$$

\rightarrow to smo dobili!

\Rightarrow rezultat: zasjenjena Coulombska interakcija (svakog elektrona plinom)

Da bismo kraja izračunali stvar treba još provesti sumaciju (tj. integraciju) po \mathbf{k} ($\epsilon_{\mathbf{q}}(\omega) \sim \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int d^3k$), a to je vrlo težnuto (komplificiranije što su veće dimenzionalnosti)

Integriranje u relacijama za $\text{Re } \epsilon_{\mathbf{q}}(\omega)$ i $\text{Im } \epsilon_{\mathbf{q}}(\omega)$ može se provesti u sve tri dimenzije.

U 3D fonone formule za Re & $\text{Im } \epsilon_{\mathbf{q}}(\omega)$ zovu se Lindhardove relacije (formule) \rightarrow (komplificirane su, pa ih ne pišemo)

Rezultat koji se dobije kod provedemo $\sum_{\mathbf{k}}$ u $\epsilon_{\mathbf{q}}(\omega)$ je Lindhardova funkcija.

Rezultat je fizikalno jako zanimljiv: zbog zasjenjenja interakcije svakog elektrona elektroni u plinumu se ponašaju kao da su SLOBODNI I NE INTERAGIRAJU. (gotovo slobodni)

Dodatok: Lindhardova funkcija

$$\epsilon_{\vec{q}}(\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left\{ \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{a}} + \omega - i\delta} - \frac{1}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{a}} - \epsilon_{\vec{k}} + \omega - i\delta} \right\}$$

Računamo $R(\vec{q}, \omega)$ na $T=0K$:

$\Rightarrow f_{\vec{k}}(T=0K) = \Theta(\epsilon_F - \epsilon_{\vec{k}})$
 (2) od spina elektrona

$$R(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} 2\pi k^2 dk \int_{-1}^1 dZ \left\{ \omega - \frac{q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q}{m} Z - i\delta - \omega + \frac{q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q}{m} Z - i\delta \right\}$$

$R(\vec{q}, \omega)$ odzivna funkcija (retordirana) za sl. e- plin.

$$Z \equiv \cos \theta$$

$$= \frac{m}{2\pi^2 q} \int_0^{k_F} k dk \left\{ \ln \left| \frac{A+k}{A-k} \right| + \ln \left| \frac{B-k}{B+k} \right| \right\}$$

(pomnožili smo sve s faktorom 2 zbog zbrojanja po spinu elektrona i uveli oznake

$$A = \frac{m\omega}{q} - \frac{q}{2} - i\delta, \quad B = \frac{m\omega}{q} + \frac{q}{2} - i\delta$$

$$\int dx x \ln(A+x) = \frac{x^2 - A^2}{2} \ln(x+A) - \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{2} - Ax \right)$$

$$\Rightarrow R(\vec{q}, \omega) = -\frac{m}{4\pi^2 q} k_F^2 \left\{ [1 - (\omega+Z)^2] \ln \left| \frac{\omega+Z+1}{\omega+Z-1} \right| - [1 - (\omega-Z)^2] \ln \left| \frac{\omega-Z+1}{\omega-Z-1} \right| + 4Z \right\}$$

gdje su uvedene oznake:

$$Z \equiv \frac{q}{2k_F}, \quad u \equiv \frac{|\omega|}{q v_F}, \quad \omega \equiv u - i\delta$$

$$\text{Re} \ln(x+iy) = \frac{1}{2} \ln(x^2+y^2)$$

$$\text{Im} \ln(x+iy) = \text{arctg} \frac{y}{x}$$

$$\frac{q}{2k_F} + \frac{|\omega|}{q v_F} < 1$$

$$\frac{|\omega|}{v_F} < q - \frac{q^2}{2k_F}$$

Za $\delta \rightarrow 0^+$ je očito:

$$\text{Re} R(\vec{q}, \omega) = -\frac{m}{4\pi^2 q} k_F^2 \left\{ [1 - (u+Z)^2] \ln \left| \frac{u+Z+1}{u+Z-1} \right| - [1 - (u-Z)^2] \ln \left| \frac{u-Z+1}{u-Z-1} \right| + 4Z \right\}$$

Kod $\text{Im} R(\vec{q}, \omega)$ u granici $\delta \rightarrow 0^+$ ostaje:

$$\text{Im} R(\vec{q}, \omega) = -\frac{m}{4\pi^2 q} k_F^2 \begin{cases} 4\pi Z u & \text{za } Z+u < 1 \\ \pi [1 - (u-Z)^2] & \text{za } |Z-u| < 1 < Z+u \\ 0 & \text{za } |Z-u| > 1 \end{cases}$$

gdje je $\text{arctg} \frac{y}{x} = \begin{cases} 0 & \text{za } u > 0 \\ \pi & \text{za } u < 0 \end{cases}$

$$\epsilon_{\vec{q}}(\omega) = \text{Re} \epsilon_{\vec{q}}(\omega) + i \text{Im} \epsilon_{\vec{q}}(\omega)$$

$$\text{Im} R(\vec{q}, \omega) \sim S(\vec{q}, \omega)$$

↑
korektivna funkcija

$$\text{Re} \epsilon_{\vec{q}}(\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \text{Re} R(\vec{q}, \omega)$$

$$\text{Im} \epsilon_{\vec{q}}(\omega) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} \text{Im} R(\vec{q}, \omega)$$

Pogledajmo u kojem je dijelu $\text{Im} R \neq 0$:

$$\text{Im}[R] \neq 0 \text{ za: } \begin{cases} Z+u < 1 \\ |Z-u| < 1 < Z+u \end{cases} \quad Z = \frac{q}{2k_F} \quad u = \frac{|\omega|}{q v_F}$$

$$1^\circ) Z+u < 1 \Rightarrow \frac{q}{2k_F} + \frac{|\omega|}{q v_F} < 1 \Rightarrow (*) \frac{|\omega|}{v_F} < q - \frac{q^2}{2k_F}$$

$$|\omega| > 0 \Rightarrow q < 2k_F$$

$$2^\circ) |Z-u| < 1 < Z+u$$

$$|Z-u| < 1 \Rightarrow -1 < (Z-u) < 1$$

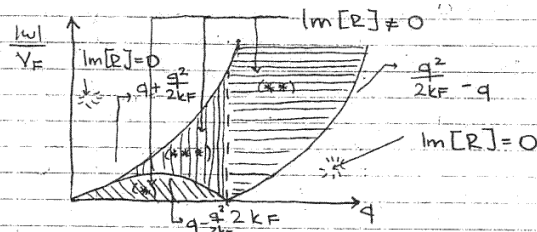
$$|Z+u| > 1 \Rightarrow -1 > (Z+u) > 1$$

$$2a) -1 < (Z-u) < 1 \Rightarrow -1 < \left[\frac{q}{2k_F} + \frac{|\omega|}{q v_F} \right] < 1$$

$$(**) \Rightarrow \frac{q^2}{2k_F} - q < \frac{|\omega|}{v_F} < q + \frac{q^2}{2k_F} \quad q > 2k_F \rightarrow \text{jer } \frac{|\omega|}{v_F} > 0$$

$$b) -1 > (Z+u) > 1 \Rightarrow -1 > \left[\frac{q}{2k_F} + \frac{|\omega|}{q v_F} \right] > 1$$

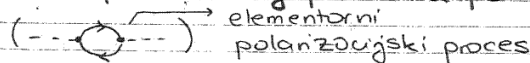
$$(*) \Rightarrow q - \frac{q^2}{2k_F} < \frac{|\omega|}{v_F} < q + \frac{q^2}{2k_F} \quad q < 2k_F \rightarrow \text{jer } \frac{|\omega|}{v_F} > 0$$



$\text{Im}[R] \neq 0$ u iscrtkanom području.

Objasnimo još linearnost u odzivu:

Odziv fermionskog plina na pobudu je u biti polarizacija sistema.



(kugli)

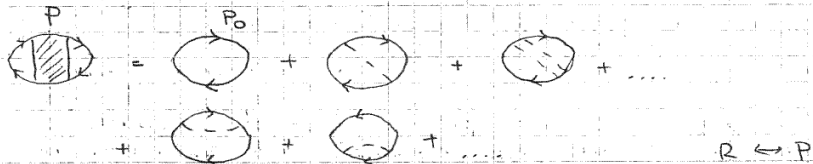
Pobuda "pogoda" jedan e^- u Fermi moru i pobuduje ga van, čime stvara elektron-supljina par s kojim se prije anihilacije može nešto dogoditi ovisno o uvjetima:



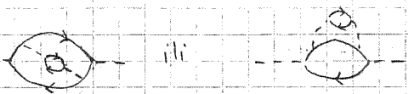
može doći do raspršenja čestice i supljine, odnosno raspršenja samo čestice ili supljine. Ovi zadržaji daju vlastitu ϵ_c odnosno supljine i tako dovode do njihovih priroga.

Procese u kojima sudjeluju 1 čestica i supljina zovemo vršne korekcije (vertex corrections)

Sve zajedno te procese koji pridonose ireducibilnoj polarizaciji P a koji idu iznad osnovnog dijagrama polarizacije P_0 , tj. iznad RPA, zovemo lokalne korekcije (local field corrections)



Mogu se desiti i procesi:



Isto je tako moguća i interakcija tih parova

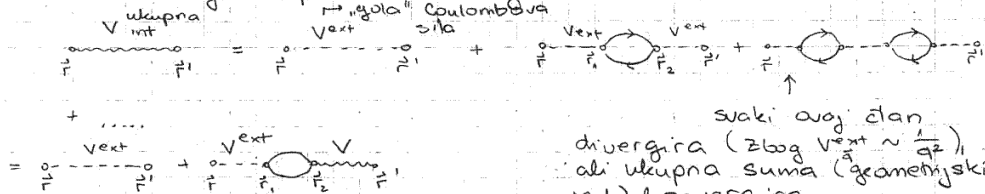


itd.

Bit RPA i linearnosti odziva jest da je u uvjetima fermionskog plina VELIKE GUSTOĆE najvjerovatniji proces kreacija običnog para i njegova anihilacija prije nego se ista s njim shigne drugo dogoditi (---○---), te iz svih procesa izdvajamo

$$\text{---}\bigcirc\text{---} = R(\vec{q}, \omega)$$

Interakcija se prenosi linearno: možemo je napisati na sljedeći način:



svaki ovaj član divergira (zbog $V_{ext} \sim \frac{1}{q^2}$), ali ukupna suma (geometrijski red) konvergira

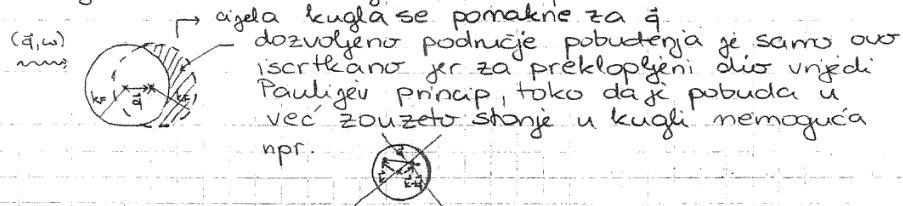
$$(\vec{r}, \omega) \text{ prostor: } V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega) = V^{ext}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \iint d^3r_1 d^3r_2 V^{ext}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) R(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega) V(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

$$(\vec{q}, \omega) \text{ prostor: } V_{\vec{q}}(\omega) = V_{\vec{q}}^{ext} + V_{\vec{q}}^{ext} R(\vec{q}, \omega) V_{\vec{q}}(\omega)$$

$$\Rightarrow V_{\vec{q}}(\omega) = \frac{V_{\vec{q}}^{ext}}{1 - R(\vec{q}, \omega) V_{\vec{q}}^{ext}} = \frac{V_{\vec{q}}^{ext}}{E_{\vec{q}}(\omega)} \quad // \quad \text{Rezultat je ZASJENJENA COULOMBOVA INTERAKCIJA!}$$

Hi nećemo razmatrati Lindhard funkciju općenito, već samo neke specijalne slučajeve, ali razmatramo najprije kakav izgleda to pobudivani parova u Fermi moru i u kojim područjima je moguće:

• Na $T=0K$, fermioni su (u impulsnom prostoru) unutar Fermijeve kugle. Zamislimo da svaki e^- u kugli pogodimo smetnjom (\vec{q}, ω) i gledamo dozvoljena područja kamo se kugla može preslikati:



Ovisno o \vec{q} imamo više slučajeva:

1°) (sve je dozvoljeno) $|\vec{k} + \vec{q}| > k_F$

2°) $|\vec{q}| = 2k_F \Rightarrow$ tu dolazi do specijalnog efekta (Fridelove oscilacije)

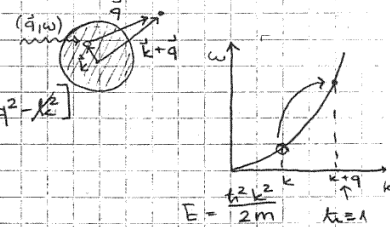
Dakle, zbog Paulijeveog principa mora biti ispunjeno:

$$|\vec{k} + \vec{q}| > k_F \quad \rightarrow \text{to će definirati granice integracije u Lindhardovoj funkciji}$$

\Rightarrow gledamo prijelaz $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{q}$

$$\omega = \omega_{\vec{k} + \vec{q}} - \omega_{\vec{k}} = \frac{1}{2m} [k^2 + 2kq \cos \psi + q^2 - k^2] = \frac{1}{2m} [q^2 + 2kq \cos \psi]$$

$$|\vec{k}| < k_F \quad (\text{u kugli})$$



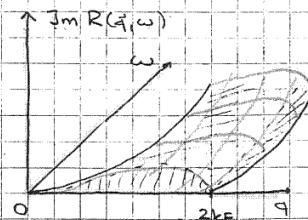
Ekstremne situacije:

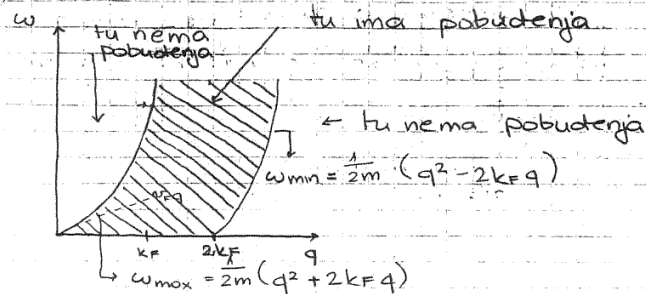
1°) $k_{max} = k_F$ (pobuden je fermion s Fermi plohe)
 $\cos \psi = 1$

$$\Rightarrow \omega_{max} = \frac{1}{2m} [q^2 + 2k_F q]$$

2°) $k_{max} = k_F$
 $\cos \psi = -1$

$$\Rightarrow \omega_{min} = \frac{1}{2m} [q^2 - 2k_F q]$$





Može se pokazati da je brzina opsorpcije energije u sredstvu proporcionalna imaginarnom dijelu odzivne funkcije $P(\omega) \sim \text{Im}[R(\omega)]$, dokle u dijelovima gdje nema pobudjenja je $\text{Im} R(\omega) = 0$

Ima još jedan trik u području ①, a to je odziv bez opsorpcije energije - svojstveni modovi bitronja elektronskog plina - plazmoni, ali to ćemo razmotriti kasnije.

Izgled dielektrične konstante za $\omega = 0$:

$$\epsilon_q(\omega=0) = 1 + \frac{k_{TF}}{q^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_F}{2q} \left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{q+2k_F}{q-2k_F} \right| \right] \quad 3D$$

↳ Lindhard formula u 3D refleksija Fermijevе stohistike

↳ za $q \ll k_F$ dobivamo Thomas-Fermijev rezultat (formulu) ($q \gg 2k_F$)

TF aproksimacija ne valja za $q \sim 2k_F$ jer tada \ln postaje singularan. (singularitet se javlja u derivaciji ϵ po q , imamo sedlenu točku za $q = 2k_F$)

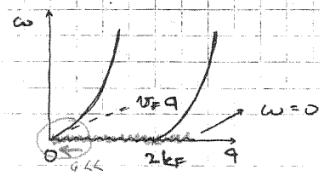
→ taj \ln reflektira činjenicu da integracija po k (u izrazima za $\epsilon_q(\omega)$, $\text{Re} \epsilon_q(\omega)$, $\text{Im} \epsilon_q(\omega)$) ide samo do Fermijevе energije (taj integral je singularan kada je u gornjoj granici singularitet nazivnika → posljedica Paulijevog principa (Fermi raspodjela) - da nema Pauli principa ne bismo imali tu granicu ⇒ singularitet bi se razmazao

⇒ \ln je refleksija Fermijevе stohistike, odnosno Paulijevog principa.

Specijalni slučajevi za Lindhardovu funkciju:

① STATIČKA DUGOVALNA GRANICA (THOMAS-FERMIJEVA APROKSIMACIJA)

$$q \ll k_F \text{ \& } \omega = 0 \quad (\omega \ll v_F q)$$



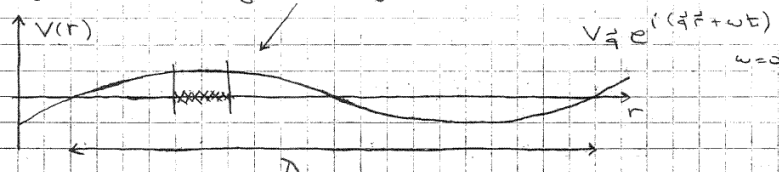
oprx. linearni odziv!

$$\frac{2\pi}{q} = \lambda$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} \ll k_F$$

1) Izvod s fizikalnim uvidom:

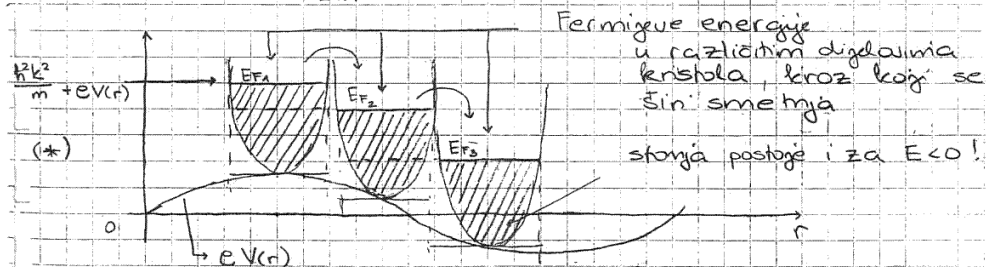
$q \ll k_F \Rightarrow \lambda \gg \lambda_F \Rightarrow$ možemo smatrati da pr dijelovima imamo elektronski plin u homogenom potencijalu (valna duljina nehomogenosti je λ_F)



Možemo reći da je ukupna energija u toku komadu

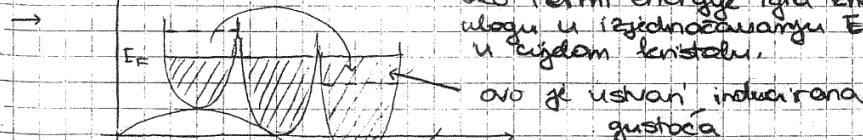
$$(*) \quad E_{\Sigma}(r) = E_{\Sigma}^0 + eV(r), \quad (e = -|e|) \quad e < 0$$

↳ $\frac{q^2 k^2}{2m}$ ↳ ukupan lokalni potencijal ($v_F^2 + v_{ind}$)



• zahtjev za izjednačavanjem Fermi nivoa vodi na fluktuacije gustoće. Potencijal spop ($\omega=0$ stat, aprox.) pa elektroni imaju dovoljno vremena da izjednače kem. pot.

Jedino tanak sloj elektrona oko Fermi energije igra značajnu ulogu u izjednačavanju E_F u cijelom kristalu.



ovo je usvan inducirana gustoća

*) Pretpostovljamo da je potencijal mali ⇒ elektrone na Fermijevom nivou možemo tretirati kao klasične $E = E_{\Sigma}^0 + eV_0 e^{iqr}$ $E = p^2/2m$ (klasično, a ne kvantno) vanjsko gledano trebamo uvesti i da e^- u periodičkom pot. ima spektar risan vrticama. Na rubu BZ imamo papove, g. i n. koji su gapovi sv.

4.5 eV, višeg reda u V_q ($q \ll k_F$) \Rightarrow zonedmarujemo gornje. Za $k_F \rightarrow q$ Fermi-nivo dolje, pa su gornji mali. bitan bitan struktura vrpce

Pa (*) izlazi da bi Fermijeva energija bila različita za različite dijelove kristala, ali znamo da to nije tako u termodinamičkoj ravnoteži. Nakon kratkog vremena kem. potencijal (Fermi en.) se može izjednačiti u cijelom volumenu (a vremena je dovoljno jer je $\omega=0$).

Treba dokle izjednačiti lokalne kemijske potencijale \Rightarrow to znači da se na različitim mjestima mora promijeniti broj čestica! \Rightarrow Javlja se val naboga (gustoća) i to je onda inducirana gustoća.

(T.D. ravnoteža stigne se postići jer su energije smetnje male \rightarrow prostorno se smetnja sporo mijenja pa su razlike među susjedima male) pushan koncentracija

$$\delta S_q = -n_q(E) \delta(eV_q) \approx -n_F eV_q$$

gustoća stonja gustoća stonja na Fermi nivou PP $eV_q \ll E_F$ (obzirom na Fermi energiju) $e n_F V_q \ll 1$

Fourierov transformat promjene gustoće na mjestu r u kristalu

$$n(E) \sim (E_F - V(x))^{3/2}$$

PP $eV_q \ll E_F$ (obzirom na Fermi energiju) $e n_F V_q \ll 1$

za dovoljno malu smetnju možemo gledati kao da se samo tonki sloj na Fermi nivou preseli na susjeda i on je konst. gustoća stonja.

$$N = \int_0^{E_F} n(E) dE = \frac{N}{V}$$

gustoća stonja po jedinici volumena

$$\frac{N}{V} = \int \psi(E) m(E) dE = \int_0^{E_F} m(E) dE$$

(broj elektrona isti na $T=0$; $T \neq 0$)

$$\delta S_q = -e n_F \frac{V_q^{ext}}{\epsilon_q}$$

$V \rightarrow$ potencijal
 $eV \rightarrow$ potencijalna energija

$$-\nabla^2 V_q^{ext} = 4\pi e S_q^{ext}$$

$$+ q^2 V_q^{ext} = 4\pi e S_q^{ext} \Rightarrow V_q^{ext} = \frac{4\pi e}{q^2} S_q^{ext}$$

$$\Rightarrow \delta S_q = - \frac{4\pi e^2 n_F}{q^2} \frac{1}{\epsilon_q} S_q^{ext}$$

$$\frac{\delta S_q}{S_q^{ext}} = - \frac{4\pi e^2 n_F}{q^2} \frac{1}{\epsilon_q}$$

Prigje smo izveli:

$$\delta S_q = \left(\frac{1}{\epsilon_q} - 1 \right) S_q^{ext}$$

$$\Rightarrow \frac{1 - \epsilon_q}{\epsilon_q} = - \frac{4\pi e^2 n_F}{q^2} \frac{1}{\epsilon_q} \Rightarrow$$

\rightarrow Vanjski naboj ("ext") ne znači da se naboj nalazi izvan metala; naboj je u metalu. "Ext" se odnosi na njegov porijeklo koji je izvan sistema elektrona

$$\Rightarrow \epsilon_q = 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2}; \quad k_{TF}^2 = 4\pi e^2 n_F$$

(gustoća stonja na Fermi nivou)

Thomas-Fermijev valni vektor predstavlja novu karakterističnu duljinu u elektronskom plinu k_{TF}^{-1} (vidjet ćemo da je to dometa zasjenjenja)

! Ovaj rezultat mogli smo dobiti analitički razvijanjem Lindhardove funkcije za $\omega=0, q \ll k_F$. Ovaj je rezultat izveden "fizički"

- 3 pretpostovke:
- $n_F e V_q \ll 1$ (pp. $e V_q \ll E_F$, malen obzirom na Fermi en.)
 - $q \ll k_F$ (E_F je naša energijska skala)
 - $\omega = 0$
- \Rightarrow Thomas-Fermi aprox
- Bazične pp:
- na početku elektroni slobodni
 - perturbacija
 - dugovalno - može se tretirati klasično

RPA: $S_{ind} \sim V$ (inducirana gustoća je proporcionalna ukupnom potencijalu V)

TF: ne moramo imati $S_{ind} \sim V$; bitan je sporo varirajući vanjski potencijal. ①

$$k_{TF}^2 = 4\pi e^2 n_F$$

k_{TF} u sebi sadrži Coulomb interakciju za razliku od k_F .
 \downarrow karakteristika sistema
karakteristika Coulomb interakcije

Zasjenjenje vanjskim nabojim

pp vanjski naboj je točkast i jednak e

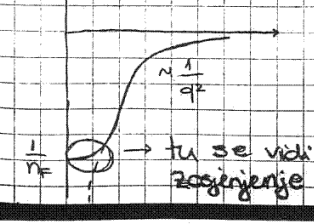
Promotrimo daju veličinu: $e n_F V_q$ (bez dim) (vanjski potencijal spram sinine vrpce)

$$\epsilon_q = 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} \xrightarrow{q \rightarrow 0} \infty \text{ (divergira)}$$

$$V_q^{ext} = \frac{4\pi e}{q^2}, \text{ ali } eV_q^{ext} = \frac{4\pi e^2}{q^2} \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{4\pi e^2}{k_{TF}^2} =$$

$$\frac{4\pi e^2}{4\pi e^2 n_F} = \frac{1}{n_F} \rightarrow \text{nema divergencije!}$$

\rightarrow Coulomb potencijal $\rightarrow \infty$ za $q=0$. Ako uzmemo u obzir zasjenjenje dobivamo da je pot. konstantan (za $q \rightarrow 0$) tj. nemamo singularitet



U jellium modelu eliminiran je singularitet za male q .

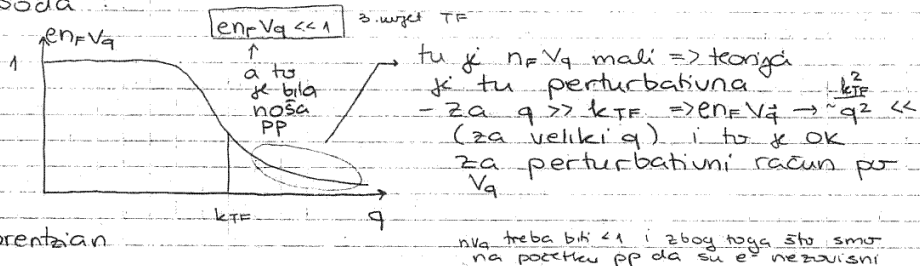
Nasza velicina $\epsilon_{\mathbf{q}} = N_F V_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}}^{\text{ext}} = N_F \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2}} =$

$$= N_F \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{q^2 + k_{TF}^2}$$

$\epsilon_{\mathbf{q}} = \frac{k_{TF}^2}{q^2 + k_{TF}^2}$ & $N_F V_{\mathbf{q}} \rightarrow 1$ za $q \ll k_{TF}$

↳ zosjenjeni potencijal

Ali, iako je singularitet za male q eliminiran, ostaje čimbenica da $\epsilon_{\mathbf{q}} \sim 1$ (konstanta, a to može biti veliko!). Zosjenjeni potencijal, dakle nije mali već reda veličine 1 za $q \rightarrow 0$, ali kako q raste, $N_F V_{\mathbf{q}}$ pada:



Da bi mogli roditi perturbativno moramo se ograničiti na područje malog $V_{\mathbf{q}}$, a to je za $q \gg k_{TF}$ & $k_{TF} \ll k_F$, a to će roditi **ZA SIROKU VRPCU!** \Rightarrow mala gustoća stanja ($N_F V_{\mathbf{q}} \ll 1$)

↳ za široku vrpcu gustoća stanja sve manja (u normalnim metalima)

U jellium modelu je slobodni e^- plin i to se manifestira kao:

Thomas-Fermi aprox $\rightarrow \frac{k_{TF}}{k_F} \ll 1 \Leftrightarrow \frac{r_s}{a_H} \ll 1 \Rightarrow$ svar radi za **GUSTI ELEKTRONSKI PLIN** (za veliki k_F tj. mali r_s imamo puno elektrona, pa je zosjenjenje veliko)

u vezi s gustoćom plina $k_F = \sqrt[3]{\frac{3\pi^2 N}{V}}$ $\hookrightarrow n \sim F^3 = (a_H r_s)^3$

što je veći k_F , r_s je manji

RPA, dokle radi za gusti elektronski plin. Možemo RPA shvatiti kao razvoj po malom r_s .

(napomena: analogija s Hartree Fockom aprox. $\sim \frac{a}{r_s} + \frac{b}{r_s^2}$ \rightarrow Me Laurentov razvoj na singularnim čimbenicima, a dalje je Taylorov razvoj)

Možemo roditi Fourierov transformat $V_{\mathbf{q}}$ (iako to sigurno nije točno jer F.T. je definiran $\forall q$, a mi imamo fizikalna ograničenja na q):

F.T. ($e V_{\mathbf{q}}$) = F.T. ($\frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2}$) = $\frac{e^2}{r} e^{-k_{TF} r}$

\rightarrow rezultat je YUKAWIN POTENCIJAL: (zosjenjeni Coulombovski potencijal)

F.T. ($\frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2}$) = $\frac{e^2}{r} e^{-k_{TF} r}$ (elektroni zosjenjuju polje vanjskog naboja)

↳ potencijalna energija $eV(r)$ "dugi rep" Coulombove interakcije "odrezani" exp. članom s parametrom k_{TF} (k_{TF} je reda veličine W_S -čelije)

Usprkos prevani kod integracije preko svih q rezultat vrijedi i za male q !

Objašnjenje koreliranosti:

Odgovor jelliuma: \rightarrow gustoća naboja

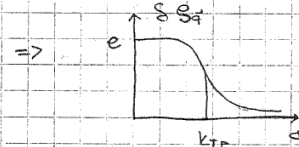
$\delta S_{\mathbf{q}} = \left(\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{q}}} - 1 \right) S_{\mathbf{q}}^{\text{ext}}$

uzmimo: $S^{\text{ext}}(\vec{r}) = e \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ $e = -|e| < 0$

$S_{\mathbf{q}}^{\text{ext}}(\vec{r}) = e$ F.T. δ -funkcije je konstanta

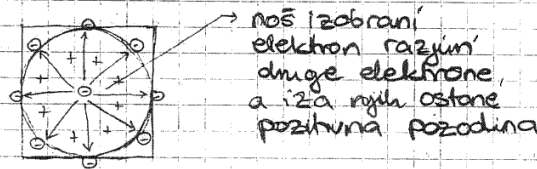
$\Rightarrow S_{\mathbf{q}} = e \frac{k_{TF}^2}{q^2 + k_{TF}^2}$

↳ odgovor



Dovedemo naboj e u sistem na što ovaj odgovor preraspodjelom naboja oko njega koji u njegovoj k_{TF}^{-1} okolini iznose $+|e|$. (na udaljenosti k_{TF}^{-1} potencijal pada na $|e|$ a dalje se gasi eksponencijalno) \Rightarrow uzimamo da je radijus suprotno nabijene kugle iz koje elektron razjini druge elektrone $R = k_{TF}^{-1}$

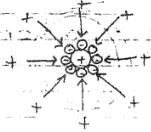
[$k_{TF}^{-1} \approx R_{WS}$] i eto objašnjenja zašto imamo $1e^-$ u W_S čeliji (svaki elektron iz plina možemo "izobrti" i za njega turčiti ovo prethodno razmatrano)



\Rightarrow tako nekako se vide elektroni u jellium modelu, u metalu

Takva cjelina (elektron + pozitivna pozadina) u kugli radijusa k_{TF}^{-1} je u cjelini neutralna i tokve kugle se jedna prema drugoj ponašaju kao dugodosežna neinteragirajuća. Jedina interakcija elektrona s elektronom iz druge kugle je ona kratkodosežna koja prijači da se kugle međusobno preklape!

Da smo u sistem doveli \ominus naboj:



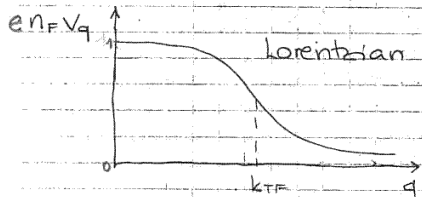
Elektroni se "sjate" oko dovedenog naboja i tako ga zasjone.

2. elektrona na udaljenosti većoj od k_{TF}^{-1} se skoro "ne vide" (da TF approx. uvijek egzaktno, tu bi bilo sauršeno točno)

k_{TF}^{-1} je relativno velika udaljenost $\Rightarrow r_s = 1$! vidimo da baš ne uvijek, ali ov je kvalitativna slika

Sumirajmo sve skupa još jednom:

- Za male q dobivamo $m_F V_q = 1$ a ne $m_F V_q \rightarrow 0$ kao što smo pretpostavili:



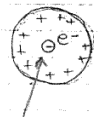
- Zosjenjenje:



▷ izvana izgleda da je vanjski potencijal umanjn $m_F V_q = 1$ ali nedovoljno (ne uvijek $m_F V_q \ll 1$)

↳ nedovoljno zosjenjenje

Ista priča uvijek za fluktuacijsko-disipacijski teorem



(ovdje je interakcija reda velicine 1)

Znači, imamo kontradikciju na 2 nivoa:

PROBLEMI:

1. Imamo zosjenjenje koji ne smije biti mal
2. Pošli smo od pp o slob. elektronima, a sad smo dobili da elektrona interakcija nije mala tj. misao mogu konstiti perturbacionu teoriju

RIJEŠENJE tj. TRIK:

pp. $k_{TF} \rightarrow 0 \Rightarrow$ smanjimo interakciju po volji, $m_F \rightarrow 0 \Rightarrow n_F V_q \rightarrow 0$

$$\text{odnosno: } k_{TF} \ll k_F$$

To je kao da uzmemo $e \rightarrow 0$ (elek. naboj $\rightarrow 0$).

Nije naročito uspunjeno u realnim materijalima. Matematički to možemo napraviti ali je fizikalno upitno.

Uzjet $k_{TF} \ll k_F$ je ekvivalentan:

$$\left[r_s = \frac{F}{a_H} \ll 1 \right]$$

Znači moramo promatrati vrlo gustu plazmu

Znači $[n_F (eV_q)] < 1$ tek ako pretpostavimo $k_{TF} < k_F$

- Za ovakov $n_F eV_q$ želimo naći F.T. od $\frac{eV_q}{4\pi e^2 q^2 + k_{TF}^2}$

$$eV(\vec{r}) = \frac{e^2}{r} e^{-k_{TF} r}$$

Integralali smo po svim q -ovima iako smo pretpostavili $q \ll k_F$. Izraz je dobiven proširenjem $q \ll k_F$ na sve q ove.

▷ zosjenjeni elektron vidi potencijal koji exp. opada na udaljenosti $r > k_{TF}^{-1}$. Znači naš promatrani elektron izbjegavaju drugi elektroni u njegovoj k_{TF}^{-1} okolini, bez obzira na spin. Imamo jako malu interakciju tj. gotovo slobodne elektrone. Također imamo lokalnu neutralnost na udaljenosti $> k_{TF}^{-1}$, neovisno o spinu.

Elektroni djeluju dugodosežnim silama, ali imamo zosjenjenje \Rightarrow slobodni elektroni

Ovo je fundamentalno objašnjenje slobodnog elektronskog plina u metalima. Analogno, ako je $1 e^-$ u WS celije drugi ga izbjegavaju. Znači efektivna interakcija između elektrona je slaba i kratkodosežna. To opravdava konstenje perturbacione teorije.

Sumiranjem po svim elektronima, dobivamo:

$$E = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + 0.062 \ln r_s$$

od kratkodosežne Coul. sile

kao Laurentov razvoj s dva člana

od zosjenjenog Coulombovog potencijala (Jell-Mann & Bruckner, 1956)

Hartree član = 0
Fockov član

Perturbacionu teoriju ne možemo provesti po vanjskom pot. nego tek po zosj. samos. pot. (izračun tek ob-ili budućno)

Teorija je dobra za $r_s \ll 1$.

Aprox. RPA: gledamo interakciju WS-čelija, zbrojamo po parovima i računamo E_q.

Jedino u normalnim metalima zosjenjenje možemo tretirati kao lin. odziv.
(u prijelaznim metalima to ne možemo raditi)

Thomas-Fermijev izraz možemo dobiti i razvojem E_q(ω=0) za mali q;

$$E_q(\omega=0) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_F}{2q} \left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{q+2k_F}{q-2k_F} \right| \right]$$

$$\ln \left| \frac{q+2k_F}{q-2k_F} \right| = \ln \left| \frac{1 + \frac{q}{2k_F}}{\frac{q}{2k_F} - 1} \right| = \ln \frac{1 + \frac{q}{2k_F}}{1 - \frac{q}{2k_F}} \approx \frac{q}{2k_F}$$

\downarrow
 $q > 0$
 $k_F > 0$
 $q \ll k_F$

$$\ln \frac{1+x}{1-x} \underset{\uparrow}{=} \left[\frac{1+x}{1+x} \frac{1-x+1+x}{(1-x)^2} \right]_{x=0} x + \dots$$

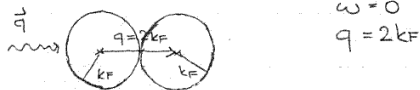
$\approx 2x$

$$\Rightarrow E_q(q, \omega=0) \approx 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_F}{2q} \left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \frac{q}{2k_F} \right]$$

$$\approx 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right] \approx 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} \quad \text{TF rezultat}$$

Khonova anomalija ↔ Friedelove oscilacije

Interesantna stvar se događa u statičkom limesu ω=0 (smetnja nema vremensku ovisnost) za pobudu valnog vektora iznosa |q|=2k_F. Tada se osnovna i pobudena Fermijeva kugla baš dodirnu:



$$\omega = 0$$

$$q = 2k_F$$

$$*) E_q(\omega=0) = 1 + \frac{k_{TF}^2}{q^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_F}{2q} \left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{q+2k_F}{q-2k_F} \right| \right]$$

↳ krećemo od $E(q, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \int_0^{\infty} \frac{k^2 dk}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q}} - X$

$\frac{\omega_k - \omega_{k+q}}{\omega + \omega_k - \omega_{k+q}} = X$
 ne treba jer $\omega=0$

$$= 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{1}{2m} \frac{1}{kq \cos \theta}$$

dobijemo (*)

(*) → imamo SINGULARITET i to u derivaciji $\frac{\partial E}{\partial q}$ u točki q=2k_F

$$\xi = \frac{q}{2k_F} \quad q \rightarrow 2k_F \Rightarrow \xi \Rightarrow 1 \quad \frac{1}{\xi^2} = \frac{4k_F^2}{q^2} \quad \frac{1}{\xi} = \frac{2k_F}{q}$$

$$E(\xi, 0) = 1 + \left(\frac{k_{TF}}{k_F} \right)^2 \frac{1}{4\xi^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4\xi} (1 - \xi^2) \ln \left| \frac{\xi+1}{\xi-1} \right| \right]$$

$$= 1 + \left(\frac{k_{TF}}{k_F} \right)^2 \frac{1}{4\xi^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{(1-\xi^2)}{4\xi} \ln(\xi+1) - \frac{(1-\xi^2)}{4\xi} \ln(1-\xi) \right]$$

$$= 1 + \left(\frac{k_{TF}}{k_F} \right)^2 \left\{ \frac{1}{8\xi^2} + \frac{(1-\xi^2)}{16\xi^3} \ln(\xi+1) - \frac{(1-\xi^2)}{16\xi^3} \ln(1-\xi) \right\}$$

① ② ③

$$\lim_{\xi \rightarrow 1} \textcircled{1} = \frac{1}{8} \quad \lim_{\xi \rightarrow 1} \textcircled{2} = 0$$

$$\lim_{\xi \rightarrow 1} \textcircled{3} = \lim_{\xi \rightarrow 1} \frac{(\xi^2-1)}{16\xi^2} \cdot \lim_{\xi \rightarrow 1} \frac{\ln(1+\xi)}{\xi} = 0 \cdot 1 = 0$$

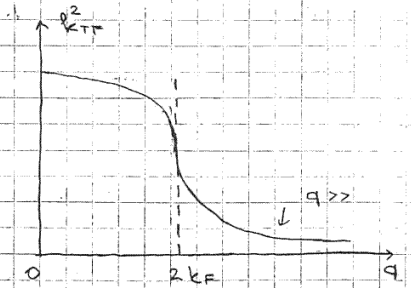
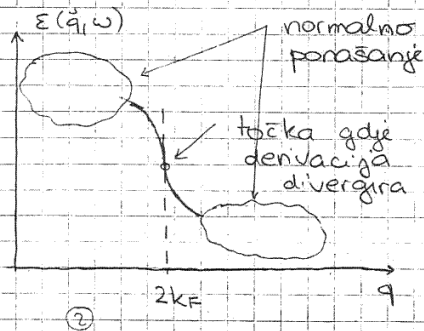
$$\Rightarrow E(\xi, 0) = 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_{TF}}{2k_F} \right)^2 \quad \text{konocan}$$

$$\frac{dE(\xi, \omega)}{d\xi} = 1 + \left(\frac{k_{TF}}{k_F} \right)^2 \left\{ -\frac{1}{4\xi^3} + \frac{-32\xi^4 - 3 \cdot 16\xi^2(1-\xi^2)}{(16\xi^3)^2} \right\} \left[\ln(\xi+1) - \ln(1-\xi) \right]$$

$$+ \frac{(1-\xi^2)}{16\xi^3} \left[\frac{1}{\xi+1} + \frac{1}{1-\xi} \right]$$

$$= 1 + \left(\frac{k_{TF}}{k_F} \right)^2 \left\{ -\frac{1}{4\xi^3} + \frac{\xi^2-3}{16\xi^4} \ln \frac{\xi+1}{1-\xi} + \frac{1}{8\xi^3} \right\}$$

ξ → 1 → ∞ → ovo je za 3D (za 2D bi bilo singularno već u E_q)



↳ duljina zasjenjenja (1/k_T) raste s q (sve je teže zasjeniti potencijal male valne duljine)

Q Kohnovom efektu i Friedelovim oscilacijama

Neka nam se kristalom, giba "fonon valnog vektora \vec{q} " što se svodi na miranje čvorova rešetke (iona), kao da nam se u jellium modelu stvaraju zgušnjavanja \oplus naboja \rightarrow elektroni jurju da zaspine te ralekupine koje odgovaraju gibanju iona. Sada ioni interagiraju preko time zosjenjenih polja koja su drnuto razmjerna $E(\vec{q})$. Time je sod. izmjenjena sila među čvorovima rešetke \Rightarrow promijenjena je i frekvencija tog moda titronja (fonona) i ovisi o $E_{\vec{q}}$ \rightarrow to je KHOV EFEKT.

Singularitet u derivaciji od $E_{\vec{q}}$ vodi na poseban efekt. Zamislimo da dovedemo točkasti naboj u sistem. (potencijal $V_{\vec{q}}^{ext} = \frac{4\pi e}{q^2}$)

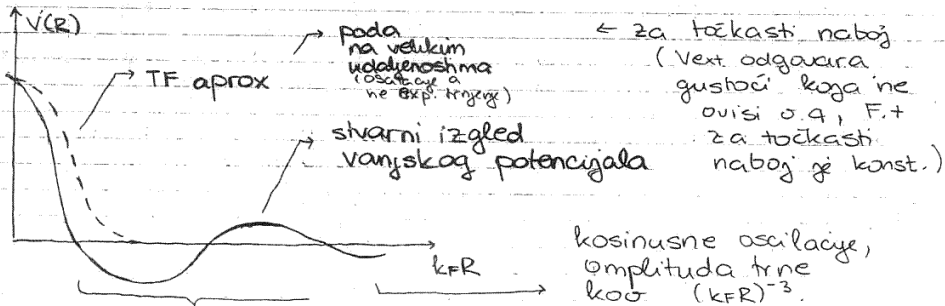
$V_{\vec{q}} = \frac{1}{E_{\vec{q}}} \frac{4\pi e}{q^2}$ (uvrstimo izraz za $E_{\vec{q}}(\omega=0)$)

Fourierov transformat: $V(\vec{r}) \sim \int d^3q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} V_{\vec{q}}$

Nakon duge integracije i gnjavaže:

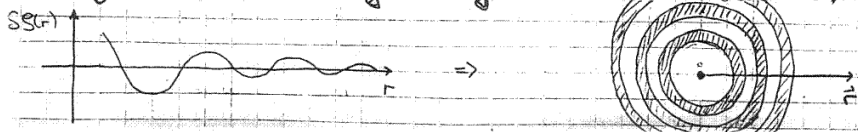
$V(\vec{r}) \sim \frac{\cos(2k_F r)}{(k_F r)^3}$ (za $r \ll$ se ponaša kao Yukavin potencijal)

\rightarrow vidimo da smo na velikim udaljenostima od izvora pobude (točkasti naboj) umjesto glatke exp. trnuće raspodjele dobili oscilacije valnog vektora $2k_F$

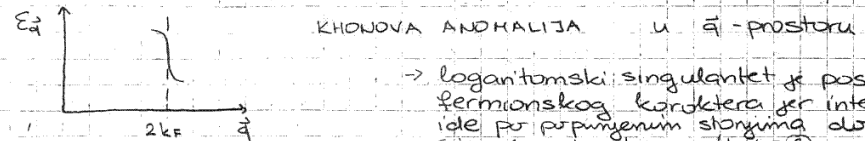


Friedelove oscilacije - refleksija Fermionskog karaktera e- plina

Te oscilacije za $V(\vec{r})$ odgovaraju oscilacijama u gustoći induciranoj naboja oko izvora (daleko)



\rightarrow taj efekt nazivamo FRIEDELVE OSCILACIJE. (u 3D prostoru)

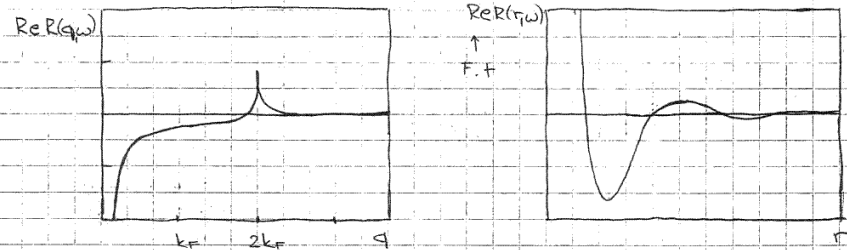


\rightarrow logaritmiski singularitet je posljedica fermionskog karaktera jer integracija ide po potpunim slojima duž singular. $k = -k_F \neq k_F$

Takvo oscilatorno ponašanje $V(\vec{r})$ rezultat je doprinosa od singulariteta $E_{\vec{q}}$ za $q = 2k_F$ u Fourierovom transformatu (da ga nije bilo imali bismo kontinuiranu exp. gušenu funkciju). Takve oscilacije dobili smo i u Hartree-Fockovoj aproksimaciji.

Statički odziv slobodnog elektronskog plina:

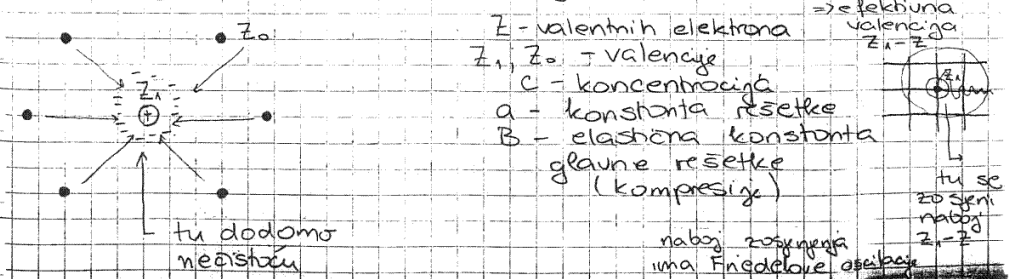
$Re R(\vec{q}, \omega) = -\frac{m}{2\pi^2} k_F \left[1 + \frac{k_F}{q} \left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{q+2k_F}{q-2k_F} \right| \right]$



\rightarrow Kohnova anomalija tj. logaritmiska divergencija na $q = 2k_F$ \rightarrow to vodi do Friedelovih oscilacija zasjenjene interakcije u elektronskom plinu.

Friedelove oscilacije mogu se eksperimentalno mjeriti. Kako se one eksperimentalno vide?

Ubacimo u sistem nečistoću npr. atom drugačije valencije. Donor će otpustiti svoj elektron u vodljivu vrpcu \Rightarrow ostaje šupljina, odnosno \oplus naboj koji se ponaša kao uljez \rightarrow stvara zasjenjeni potencijal (ostali naboji se raspoređuju tako da zaspine \oplus naboj) \Rightarrow pomoći u kristalnoj rešetki (jer ioni ipak interagiraju s tako redistribuiranim elektronima) \Rightarrow javljaju se elastične sile (zbog elektronskih sila)



Dakle, model: elektroni iz neutralne nečistoće ulaze u kolektivnu vrpču \Rightarrow ponovno su privučeni. Gustoća nije translaciono invarijantna zbog nečistoće. Elektroni se preraspodjeljuju tako da potencijal fluktuirá na lokalnim čvorovima. (na velikim udaljenostima dolazi do oscilacija - fluktuacija). Efekte kristalne rešetke uzimamo vrlo grubo (efekt osail. reda veličine stope kristalne rešetke Jellium - znatnu strukturu zamjenjujemo kontinuiranim medijem. (fluktuacije gustoće kao u Jelliumu). Ion vidi efektivni potencijal koji fluktuirá - ovisno o predznaku sile on je odbijen ili privučen (1. susjedi odbijeni ili privučeni). Kratkodosežne veze uvijek modeliramo konstantom veze, pojavljuje se otpor tj. javlja se elastična sila.

Uvedemo nečistoću (neizoelektronsku) u neku matricu (npr. Cu u Ni, Zn, Ga)
 \rightarrow nečistoća

Cu	Ni	Zn	Ga
$Z_i - Z_0$	-1	1	2
eksp. teorijski	-29	55	77
	-20	20	40

\rightarrow predznak je u redu, ali nije baš meko sloganje \rightarrow tu se ne vide Friedelove oscilacije

$\frac{\Delta a}{a} \cdot 10^3$ \rightarrow promjena volumena kristala pri koncentraciji nečistoća c

relativna valencija spram rešetke

\rightarrow sinus drži svoj predznak. Sva promjena predznaka dolazi od $(Z_i - Z_0)$.

Al	Hg	Si
$Z_i - Z_0$	-1	1
eksp. teorijski	60	50
	35	35

- ako je već na 1. susjedima došlo do promjene predznaka sin. \rightarrow kompenzacija predznaka sinusom \Rightarrow Friedelove oscilacije (unatoč promjeni sign. $(Z_i - Z_0)$ nije došlo do promjene sign. $[\frac{\Delta a}{a} \cdot 10^3]$

\rightarrow može se reći da su na ovoj način detektirane Friedelove oscilacije na eksp. razini.

\rightarrow imamo mekđiko elektrona viška/manjka spram matrice i oni idu u vrpču. Mora se uspostaviti zaozjenjenje oko iona nečistoće \Rightarrow elektroni se razmještaju oko nečistoće na udaljenosti $\sim \frac{1}{k_F}$.



\rightarrow elektroni se mogu vratiti u to područje i zaozjeniti nečistoću; zaozjenjenje mora biti sa prethodnom dielektroničkom konstantom.

\rightarrow nečistoća djeluje na okolne elektrone zaozjenjenim potencijalom koji na velikim udaljenostima ima oblik:

$$V(R) \sim \frac{\cos(2k_F R)}{(k_F R)^3}$$

$R \gg$

(u derivaciji zanemarimo član $\sim \frac{1}{R^4}$ jer $R \gg$)

\rightarrow promjena sile u odnosu na silu u matrici: $\frac{\sin(2k_F R)}{(k_F R)^3}$ (od denudiranja samosuglasnog pot. po udaljenosti)

\Rightarrow sila: $\sim (Z_i - Z_0) e^2 \frac{\sin(2k_F R)}{(k_F R)^3}$

(grobno je potencijalne energije) \rightarrow na dovoljno velikoj udaljenosti R

Nečistoća također djeluje na atome rešetke zaozjenjenim potencijalom:

sila: $\sim (Z_i - Z_0) \cdot Z_0 \frac{\sin(2k_F R)}{(k_F R)^3} \rightarrow$ elektostatska sila

Rešetka će se elastičnim silama odupirati promjeni (platit će se elastična energija) računat ćemo poboj elastičnom silom

elastična konst. za volumena deformaciju $\frac{\Delta a}{a} \sim (Z_i - Z_0) Z_0 \frac{\sin(2k_F R)}{k_F R}$ \rightarrow jednako da bi došlo do promjene pozicije kristal se smršava ili povećava ovisno o deformaciji.

$$\frac{\Delta a}{a} \sim \frac{c}{B} [(Z_i - Z_0) Z_0 \frac{\sin(2k_F R)}{(k_F R)^3}]$$

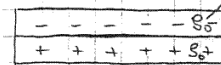
\rightarrow ukupna promjena volumena - posebne linearne dimenzije kristala s obzirom na prethodnu c - koncentracija nečistoća $R_0 \rightarrow$ može i a \rightarrow gubi račun \rightarrow možemo uzeti u gubio da je efekt oscilacija reda veličine stope kristalne rešetke.

$\frac{\Delta a}{a}$ može imati različite predznake zbog smjera oscilacija (predznak od sin) ali i zbog predznaka razlike valencija (sign. $(Z_i - Z_0)$). Gledamo promjenu predznaka izraza $\frac{\Delta a}{a}$ i gledamo da li se promijenio predznak od $a^c (Z_i - Z_0)$, ako nije stvar je u faktoru $\sin(2k_F R)$ koji je promijenio predznak \Rightarrow postoje oscilacije!

Slična teorija može se primijeniti na "gde" metale (tj. one bez nečistoća)

Poboljšanje računa za kohezivnu energiju

U Jellium modelu smo razmazali pozitivnu gustoću, pa se u "dijanom" Jellium modelu zbog homogenosti ne javlja Hartreejev član (pokratit se). To je zbog energija distribucija naboga zbog vlastite energije i energije interakcije.



operativna gustoća koji ulaze u H.W. = $S_-(\vec{r}) = S_0 + S_+(\vec{r})$
 $S_+(\vec{r}) = S_0$

$W_{Hartree} = W_{--} + W_{++} + W_{+-}$

$= \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{e^2 S_0 S_0}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{e^2 S_0 S_0}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{e^2 S_0 S_0}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = 0$

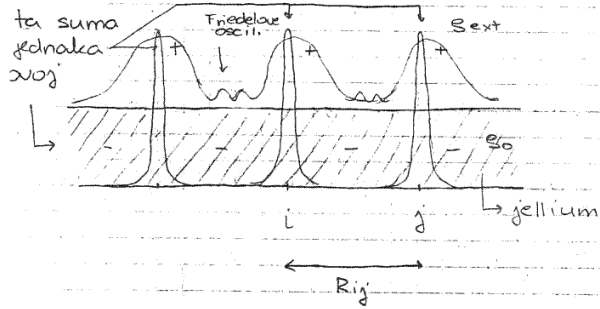
$\langle S_-(\vec{r}) \rangle = S_0$ ($\langle S_+(\vec{r}) \rangle = 0$)

$\langle S_+(\vec{r}) \rangle = S_0$

Uzmimo sad u obzir zrnatost kristala tj. uzmimo da je distribucija točkasta.

Dodavamo pozitivnu gustoću naboja u točkama i gledamo kako se ponasa elektronski plin.

Uvođenjem vanjske gustoće reorganizira se gustoća naboja elektrona, ali uzmimo da prosječna gustoća ostaje ϵ_0 .



→ oko ⊕ točaka dolazi do zosjajenja - preraspodjela ⊖ naboja, nemamo više homogenu distribuciju ⇒ Hartreejev član ≠ 0
→ može se opisati s RPA

Tretiramo plin perturbativno oko točkastih naboja, a dio koji vodi na Hartreejev član glasi: $\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{z_i z_j e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \frac{\cos(2k_F R_{ij})}{(k_F R_{ij})^3}$

efekt interakcije dvoju pozitivnih naboja nakon što su zosjajeni na velikom udaljenosti

$$V(R_{ij}) = \frac{z_0^2 e^2}{\pi \epsilon(2k_F)} \frac{\cos 2k_F R_{ij}}{(2k_F R_{ij})^3}$$

z_0 → valencija metala koji otključuje koliki je k_F

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{z_0^2 e^2}{\pi \epsilon} \frac{\cos(2k_F R_{ij})}{(k_F R_{ij})^3}$$

kako jedan pozitivan naboj vidi drugi zosjajen (na udaljenosti reda velicine šipe kristalne rešetke)

→ dati će koheziunu energiju metala

Friedelove oscilacije javljaju se za $q=2k_F$. Ukupna energija sistema zasj. naboja (na velikim udaljenostima):

$$V(\vec{r}) \sim \sum_j \frac{z_0 e \cos(2k_F |\vec{r} - \vec{r}_j|)}{(k_F |\vec{r} - \vec{r}_j|)^3}$$

$$S(\vec{r}) = \frac{z_0 e}{\epsilon(2k_F)} = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

$R_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ → udaljenost med. nabojima

$$U = \frac{1}{2} \int V(\vec{r}) S(\vec{r}) d\vec{r} \sim \frac{z_0^2 e^2}{\epsilon(2k_F)} \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{\cos(2k_F R_{ij})}{(k_F R_{ij})^3}$$

$$= \frac{z_0^2 e^2}{\epsilon(2k_F)} \left\{ \frac{1}{2} \sum_i \frac{\cos(2k_F R_{ii})}{(k_F R_{ii})^3} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{\cos(2k_F R_{ij})}{(k_F R_{ij})^3} \right\}$$

- za apsolutnu koheziunu energiju treba uzeti i lokalne članove $i \neq j$

- Ruder Boškovićev potencijal

→ pitamo se kakov metal može biti stabilan na ovakvu Friedelovu/Boškovićevu interakciju $V(R_{ij})$ kohez. en → vidimo koji su kristalne rešetke stabilne (razlika između plošno centrirane ili heksagonalne...)

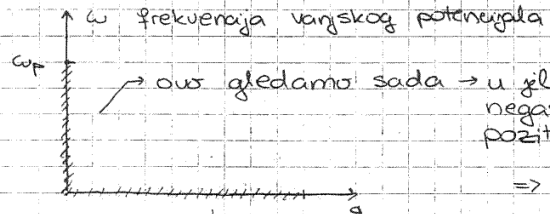
(- također se stvara pitanje ekvivalencije WS i RPA metode)

pp. eff. polje zasjajeno ⇒ pert. račun. ⇒ diel. funkcija → linearni odgovor → to ne vrijedi za prijelazne metale → posljedica toga što aproksimacija pseudopotencijala ne vrijedi za prijelazne, ali vrijedi za normalne metale.

slika funkcionira → dobivaju se razumni rezultati (uz relativno glup pristup) → velika vanjska gustoća.

Slijedeće - frekventne ovisnosti dielektrične konstante.

II DINAMIČKA GRANICA - dielektrična konstanta na konačnim frekvencijama ($\omega \gg \omega_p$ & $q \ll k_F$)



→ ovdje gledamo sada → u jellium modelu to je pomak negativnog naboja prema pozitivnoj pozadini

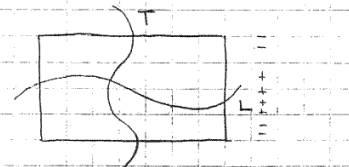
⇒ valne duzine reda velicine kristala

→ to smo već gledali

→ gledamo područje $q=0$ → gledamo relativni pomak negativnog spram pozitivnog naboja

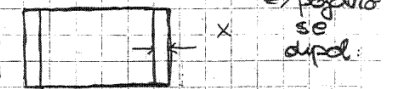
→ gledamo valne duzine koji su reda velicine dimenzije kristala

→ očekujemo longitudinalno-longitudinalno osiliranje



U longitudinalnom slučaju se

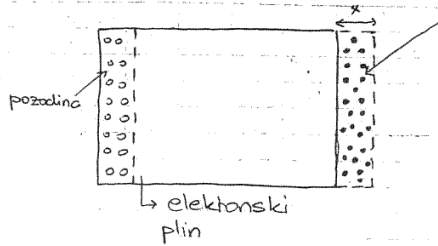
sistem longitudinal. oscilira (paralelno s pomakom)



→ Transverzni slučaj → tada bi faza mijenjala na način:

- ako smo produžili x i pustili sistem da se vrati u polozaj $x=0$

* Izvod na prste (Klasiona plazma)



elektronski plin van ravnoteže
 => dipoli - pp. svi jednaki: ex
 => polarizacija (dipolni moment po jedinici volumena):
 konc. (broj el. po jed. vol.)
 $P = e \cdot S \cdot x$

↳ Svi elektroni u plinu se pomaknu jednako => kolektivni pomak plina

ω_p - frekvencija kolektivnih oscilacija plazme (svojevremeno mod titranja elektronskog plina).
 Opravdanost rezultata je za valove \propto valnih duljina (zanemarena je konačnost sistema što bi u razvoju dovelo do članova $\sim k^2, \sim k^4, \dots$)

Kolektivne oscilacije plazme zovu se PLAZMONI (po karakteru - statistika - to su bozoni)

Longitudinalni pomak: $\vec{q} \parallel \vec{E}, \vec{P}, \vec{x}$ (valni vektor je duž pomaka)

Znamo (svojevremeno smo pokazali)

$\epsilon(\omega_L) = 0 = \epsilon(\omega_p) \Rightarrow$

↳ uz dugodosežnu silu dielektrična konstanta koja odgovara longitudinalnom modu.

$\Rightarrow \vec{D} = 0 \quad (\vec{D} = \epsilon \vec{E})$

$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} \Rightarrow \vec{E} = -4\pi \vec{P}$

=> sila koja djeluje na e^- :

$m \ddot{x} = eE = -4\pi e P = -4\pi e^2 S x$

↳ jednadžba gibanja svih e^- (u fazi) (sila djeluje na svaki e^- mase m)

$\ddot{x} + \frac{4\pi e^2 S}{m} x = 0$

$\omega_L^2 = \frac{4\pi e^2 S}{m} = \omega_p^2$

Uzimamo da je $\perp e^-$ odmaknut iz ravnoteže za x i pp. da se svi gibaju u fazi

→ prepoznamo frekvenciju plazme koji smo već svojevremeno našli

↳ svi oni zajedno titraju fazi tom frekvencijom

KLASIČNA FREKVENCIJA TITRANJA PLAZME

(za slobodne i vezane dobili smo isto → zato)

vidje se radi o visokim ω na kojima se ne vidi razlika.

Odmah znamo napisati dielektričnu konstantu → već smo vidjeli ponašanje $\epsilon(\omega)$ kod kolektivnih oscilacija rešetke (fononi)

$\epsilon_q(\omega) = \epsilon_{00} \frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_p^2 - \omega^2}$

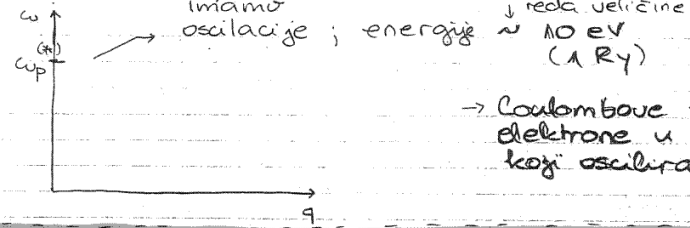
↳ vidje = 1; u jelliumu nema kratkodosežnih sila

U jellium modelu nema otpora transverzalnog gibanju (jer je modul smicanja plina = 0) => $\omega_p^2 = 0$ ($\& \omega_L^2 = \omega_p^2$)

(Rickardova formula također to daje)

$\Rightarrow \epsilon_R(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$

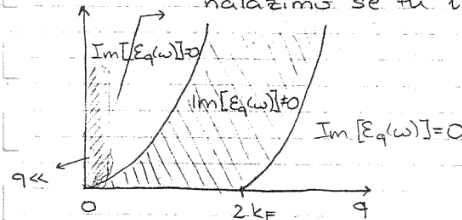
↳ eto rezultata izvedenog na prste



→ Coulombove sile povezale elektrone u kolektiv koji oscilira

Ozbiljniji izvod:

nalazimo se tu i tu je $\text{Im}[\epsilon_q(\omega)] = 0$



U zelenom području je $\text{Im}[\epsilon] = 0 \Rightarrow$ možemo promatrati samo $\text{Re}[\epsilon]$

$\text{Re} \epsilon_q(\omega) = 1 - \frac{8\pi e^2}{q^2 V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{f_{\vec{k}}(E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})}{(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})^2 - \omega^2}$

Razvoj $(E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}})$ po \vec{q} ($q \ll$):

$E(\vec{k}+\vec{q}) - E(\vec{k}) = E(\vec{k}) + \vec{q} \cdot \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) + \frac{q^2}{2} \nabla_{\vec{k}}^2 E(\vec{k}) + \dots - E(\vec{k})$

$\Rightarrow \text{Re} \epsilon_q(\omega) \approx 1 - \frac{8\pi e^2}{q^2 V} \left\{ \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{f_{\vec{k}} q_{\vec{k}}}{\omega^2} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{f_{\vec{k}} q_{\vec{k}}^2}{2m^* \omega^2} \right\}$

dió $(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}})^2$ zanemarimo spram ω^2

$\sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}} q_{\vec{k}}}{\omega^2} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}} q_{\vec{k}}}{\omega^2} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}=-\vec{k}'} \frac{f_{-\vec{k}'} q_{-\vec{k}'}}{\omega^2}$

$= 0 \quad \text{jer } f_{-\vec{k}'} = f_{\vec{k}'}$

$\Rightarrow \text{Re} \epsilon_q(\omega) \approx 1 - \frac{8\pi e^2}{q^2 V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{f_{\vec{k}} q_{\vec{k}}^2}{2m^* \omega^2}$

tu je glavni faktor ∇ ako uzmemo rešetku stonja e^- pri smo uzmi bez toga

Velicina koju promatramo, a koja se može i mijenjati je - aspršenjem na elektronskom plinu je udarni presjek elektrona u plinu:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = A_{\vec{q}} S(\vec{q}, \omega)$$

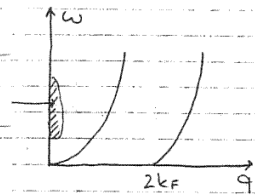
$$S(\vec{q}, \omega) = \langle \rho_{\vec{q}}(\omega) \rho_{-\vec{q}}(-\omega) \rangle \sim \text{Im} \left[\frac{1}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)} \right]$$

Promatramo, dakle $\text{Im } \epsilon$. Zgodno je promatrati $\text{Im} \left[\frac{1}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)} \right]$ zbog prethodnoga, a i jer je to ulazilo u ukupnu energiju osnovnog stanja. Zgodno ga je promatrati kao:

$$\text{Im} \frac{1}{\epsilon} = \frac{-\epsilon_I}{\epsilon_R^2 + \epsilon_I^2}$$

$\epsilon = \epsilon_R + i\epsilon_I$
 $\frac{1}{\epsilon} = \frac{\epsilon_R - i\epsilon_I}{\epsilon_R^2 + \epsilon_I^2}$
 zbog toga što smo radili sa amplitudom $\sim e^{i\omega t}$ a ne $e^{-i\omega t}$

Kako će to izgledati u našem plazmnom području (u području frekvencija plazme)?



Realni dio

$$\epsilon_R = \frac{\omega^2 - \omega_p^2}{\omega^2}$$
 razvijemo to u blizini $\omega \approx \omega_p$
 (u granici $q \ll 1$)

$$\epsilon_R = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} = 1 - \omega_p^2 \left[\frac{1}{\omega_p^2} - \frac{2}{\omega_p^3} (\omega - \omega_p) + \dots \right]$$

$$f(\omega) = \frac{1}{\omega^2} = \frac{1}{\omega_p^2} + \left\{ \frac{\partial}{\partial \omega} \left[\frac{1}{\omega^2} \right] \right\}_{\omega = \omega_p} (\omega - \omega_p) + \dots$$

T. Razvoj u $\omega = \omega_p$

$$= \frac{1}{\omega_p^2} - \frac{2}{\omega_p^3} (\omega - \omega_p) + \dots$$

$$\Rightarrow \epsilon_R = \frac{\omega^2 - \omega_p^2}{\omega^2} \approx \frac{2(\omega - \omega_p)}{\omega_p} \quad (\text{blizu pola})$$

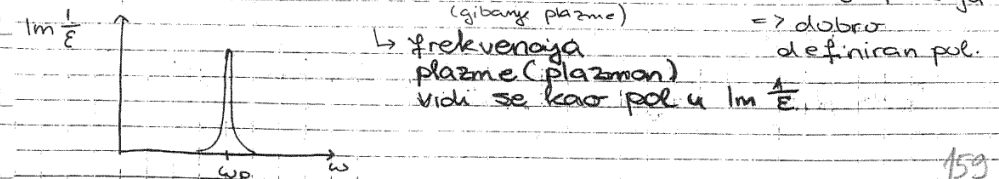
Ea imaginarni dio stavimo: $\epsilon_I = 0^+$ tj. definiramo velicinu $\epsilon_I \equiv \eta \rightarrow 0$

Dakle, u blizini ω_p i $q \ll 1$ imamo:

$$\text{Im} \frac{1}{\epsilon} = \text{Im} \left[\frac{1}{\frac{2}{\omega_p} (\omega - \omega_p) + i\eta} \right] = -\pi \delta \left[\frac{2}{\omega_p} (\omega - \omega_p) \right] = -\pi \frac{\omega_p}{2} \delta(\omega - \omega_p)$$

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = P \frac{1}{x} \mp \pi \delta(x)$$

$\omega \rightarrow \omega_p$
 $q \ll 1$ dobivamo δ -funkciju



$$\text{Re } \epsilon_{\vec{q}}(\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2 V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{f_{\vec{k}} f_{\vec{k}'}}{2m^* \omega^2}$$

od spina

$$= 1 - \frac{4\pi e^2}{V m^* \omega^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} f_{\vec{k}} = 1 - \frac{4\pi e^2}{m^* \omega^2} \frac{V \cdot 2}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int_0^{\infty} f(k) k^2 dk$$

$$= 1 - \frac{4\pi e^2}{V m^* \omega^2} \frac{V \cdot 2}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int_0^{k_F} \Theta(k_F - k) k^2 dk$$

$$= 1 - \frac{4\pi e^2}{V m^* \omega^2} \frac{V \cdot 2}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \cdot \frac{k_F^3}{3} = 1 - \frac{4\pi e^2}{m^* \omega^2} \frac{k_F^3}{3}$$

Ukupan broj elektrona N (ish pri sumi T):

$$N = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \Theta(k_F - k) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{k_F^3}{3}$$

$$\Rightarrow \frac{k_F^3}{3} = \left(\frac{N}{V} \right) \frac{\pi^2}{3} \Rightarrow \frac{k_F^3}{3} = \pi^2 S$$

$$\Rightarrow \text{Re } \epsilon_{\vec{q}}(\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{m^* \omega^2} \pi^2 S = 1 - \frac{4\pi e^2 S}{m^* \omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

\rightarrow puno veća energija jednodimenzionalnih pobudena

$$\text{Re } \epsilon(\vec{q} \ll 1, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad \omega_p^2 \equiv \frac{4\pi e^2 S_0}{m^*}$$

\rightarrow isto kao i za vezane čestice (fononi)

Što nam taj rezultat govori? Da bismo to shvatili promotrimo:

$$V_{\vec{q}} = \frac{V_{\vec{q}}^{\text{ext}}}{\epsilon_{\vec{q}}(\omega)} = \frac{1}{\epsilon_R + i\epsilon_I} V_{\vec{q}}^{\text{ext}}$$

= 0 u našem području

U slučaju da je $i\epsilon_I = 0$ imali bismo:

$$V_{\vec{q}} = \frac{1}{0} V_{\vec{q}}^{\text{ext}} \Rightarrow V_{\vec{q}} \neq 0 \text{ za } V_{\vec{q}}^{\text{ext}} \rightarrow 0$$

tj. imali bismo konačan odgovor na infinitesimalno malu pobudu

\Rightarrow to odgovara svojstvenim modovima titranja el. plina

\Rightarrow PLAZMONI.

"Traženje" plazmoma u (ω, q) prostoru svodi se stoga na traženje multiačke funkcije $\epsilon_R(\vec{q}, \omega)$ (u području gdje je $\epsilon_I(\vec{q}, \omega) = 0$). Vec vidimo da je u granici $q \rightarrow 0$ to ispunjeno za $\omega = \omega_p$

početna točka plazmona (za $q \rightarrow 0$)

FD teorem:

$$\langle \epsilon \epsilon \rangle \sim \text{Im} \frac{1}{\epsilon}$$

(knjžolu)

↳ ako uzmemo elektrone i raspršujemo ih na metalu mjerit ćemo $\text{Im} \frac{1}{\epsilon}$ (tj. $\langle \epsilon \epsilon \rangle$ preko udarnog presjeka)

↳ na taj način moguće je mjeriti plazmone → rezonancije

→ modovi ω_p proizvode samo nulto gibanje → $\omega_p/2$ je doprinos svakog od tih modova

(nemoguće ih je termički pobuditi jer su previsoki da bi se pobudili: $10 \text{ eV} \approx 10000 \text{ K}$)

to znači da nam treba ovisnost o q

(Našli smo samo točku (*), sada nam treba ovisnost o q).

Na osnovu promatranja veličine $\text{Im} \frac{1}{\epsilon}$ želimo odrediti disperzijsku relaciju plazmona $\omega(q)$ (za končni q)!

Metoda je praćenje pola funkcije $\text{Im} \frac{1}{\epsilon}$ (u području $\epsilon_I = 0$)

$$\text{Im} \frac{1}{\epsilon} = \text{Im} \frac{1}{\epsilon_R + i\epsilon_I} = -\pi \delta(\epsilon_R)$$

$\xrightarrow{\epsilon_I \rightarrow 0}$

1° razvoj po malom q (ali ipak većem od gornjeg slučaja)

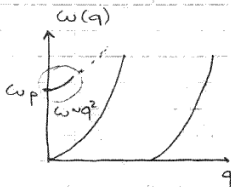
- razvijamo $\epsilon(q, \omega)$ do viših potencija q (viših od q^2) i izvlačimo vrijednost funkcije $\omega(q)$:

- rezultat [bez izvoda]:

$$\omega(q) \approx \omega_p + \frac{3\sqrt{2}}{10} q^2 + \dots$$

→ disperzijska relacija plazmona za mali q

samo pame potencij zbog izotropnosti



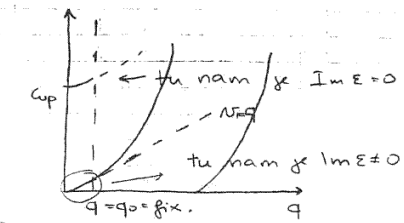
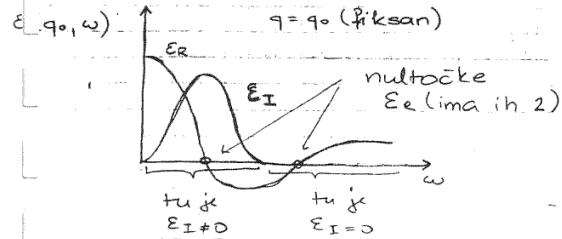
2° Numerički: Traženjem nultoeke funkcije $\epsilon_R(q, \omega)$

→ dobit ćemo "cijelu" disperzijsku relaciju plazmona

→ crtajući funkciju $\text{Im} \frac{1}{\epsilon(q, \omega)}$ disperzijska relacija plazmona vidjet će se kao "zid δ -funkcija" (neizolirani singularitet)

Rezultat:

1°) područje $\omega > v_F q$



Indikatora odzivna funkcija u području malih (q, ω) ima zanimljiv ponašanje. Naime $R(q, \omega)$ ima različite dinamičke i stacionarne limese: nije svejedno kojim redom q , odnosno ω , puštamo u nulu. Granica koja dijeli ta dva limesa u spektru pobudjenja:

$$\omega_{\text{max}} = \frac{1}{2m} (q^2 + 2qk_F) \quad \text{za } T=0$$

$$\omega_{\text{min}} = \begin{cases} \frac{1}{2m} (q^2 - 2qk_F) & \text{za } q > 2k_F \\ 0 & \text{za } q < 2k_F \end{cases}$$

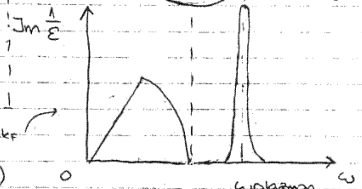
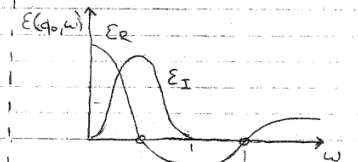
↳ (samo vanjska smetnja koja ima ω i q u području između ω_{max} i ω_{min} može izazvati prijelaze - pobudena

poruka čestica - supljina - u sistemu slobodnih fermiona, što je izravna posljedica zoe i zoi kao i oblika disperzije fermiona)

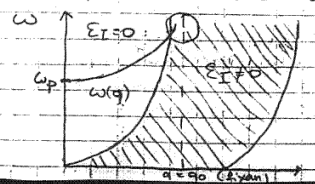
(Na $T \neq 0$ fermijeva raspodjela nije toliko oštra pa su područja u spektru dopuštenih prijelaza modificirana)

ost pravac $\omega = v_F q$

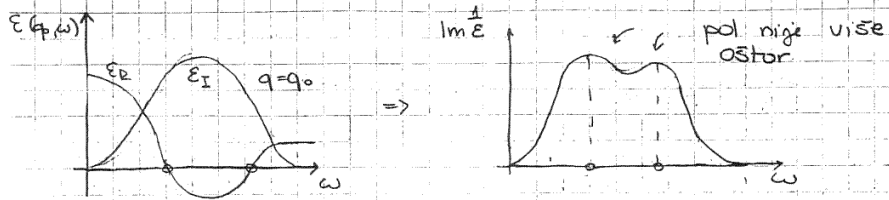
$$\text{Im} \frac{1}{\epsilon} \sim \sim \text{Im} R(q, \omega) \sim \delta(q, \omega)$$



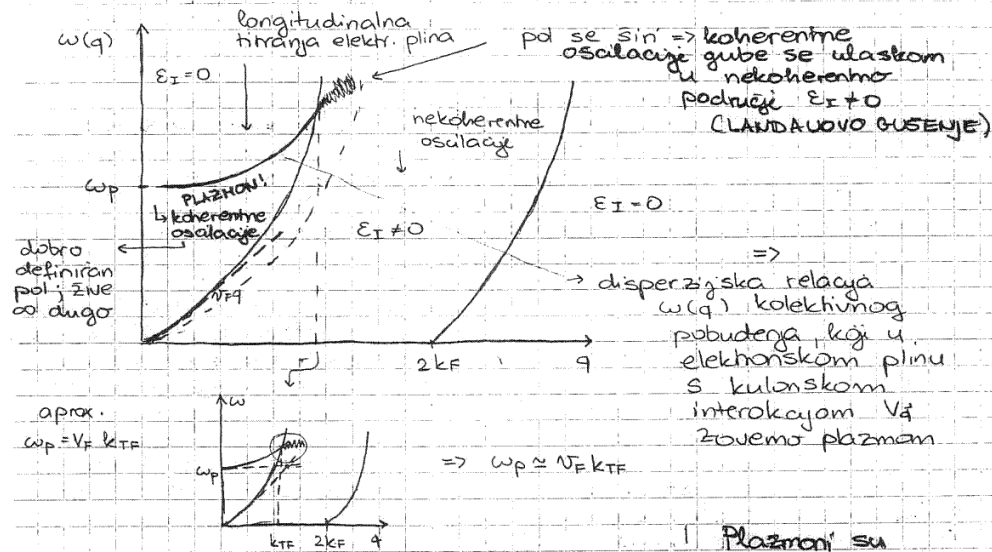
2°) područje $\omega < v_F q$ → u stvari ovo razmatranje vrijedi za područje kod disperzijska krivulja plazmona ude u područje gdje je $\epsilon_I \neq 0$ tj. dodirne prvu parabolu.



→ tu uvijek isto razmatranje kao gore tj. plazmon se guši (nema više oštor pol)

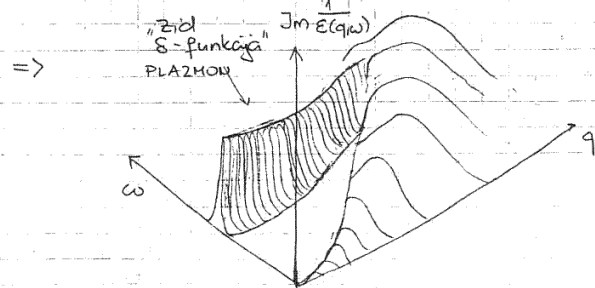


Ukupni rezultat:



Plazmoni su posljedica dugodosežnih Coulombovih sila

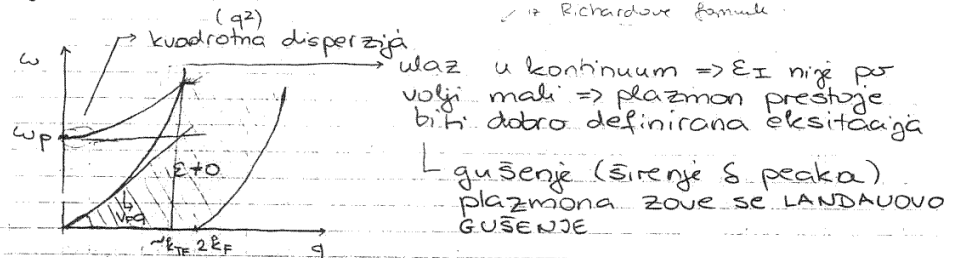
$$V_q \sim \frac{1}{q^2}$$



Plazmonski pol se nalazi u dinamičkom dijelu spektra ($\omega \gg v_F q$). Plazmoni su mogući u dinamičkom dijelu (q, ω) ravnine ($\omega = v_F q$). Dispersijska kolina polazi od klasične frekvencije ω_p i približava se kontinuumu, gdje su moguća pobudjenja parova ($\text{Im } \epsilon \neq 0$). U tom je dijelu moguć i raspad plazmona u parove čestica - supljina, što dovodi do tzv. Landauovog gušenja: isprva do rezonantnog oblika plazmonskeg spektra, a kasnije do nestanka plazmona kao dobro definiranih oscilacija.

Za male valne vektore spektar isprva sadrži kontinuum jednočestičnih pobudjenja parova, a na energiji ω_p (plazmon) nalazi se savršeno oštar plazmonski siljak. Za veće valne vektore kontinuum jednočestičnih pobudjenja raste i približava se plazmonskeg siljku dok ga za neki kritični valni vektor $q_c \approx \omega_p / v_F$ ne dohvati. Za $q > q_c$ moguća su realna jednočestična pobudjenja koja dovode do tzv. Landauovog gušenja kolektivnog pobudjenja raspadom u parove. Time plazmon prestaje biti pravo svojstveno pobudjenje sistema. Ako u račun uključimo lokalne korekcije koje nisu sadržane u RPA, plazmon se može raspasti u parove i za $q < q_c$, pa ne postoji oštar prilaz na $q = q_c$.

Richardson formula



=> plazmon dobro def. do do nekog kritičnog vektora reda veličine k_{TF} (do $v_F k_{TF}$)

- grubo govoreći: $\omega_p \approx v_F k_{TF}$ u ω_p $k_{TF} = \left(\frac{4\pi^2 m k_F}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$

=> kod gledamo doprinos plazmona energiji, gledamo samo plazmone koji postoje => s frekvencijom $\omega_{plazmon}$ i s $q < k_{TF}$

Mjerenje plazmona

raspršujemo elektronski snop (~ 1 keV) na metalnom filmu i mjerimo udarni presjek

$$S(q, \omega) \sim \text{Im} \frac{1}{\epsilon(q, \omega)}$$

pažiti: $\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 S_0}{m^*} < \omega_p$ jer je $m^* > m$ (efektivna masa je veća u kristalu)

m^* varira od materijala do materijala! \rightarrow za e^- u valentnoj vrpci

3) "normalan" mod je da se gibaju samo elektroni u valentnoj vrpci (m^*): $\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 S_0}{(m^*)^2}$

za visoke frekvencije ($\omega \gg$) svi elektroni sudjeluju u kolektivnim oscilacijama (više ne šljive atom):

$$\text{vnjedi: } \omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 S_0}{m}$$

Rezultati: br. e- u valentnoj vrpci / atom

materijal	Z ₀	ω _p [*] [eV]
Be	2	19
Nb	1	5
Ga	3	14
Ge	4	16
Ba	2	6.5

(Može se upotrijebiti i em zračenje!)

Goldstoneov tm.: za kratkodosežne int. ω → 0, k → 0

(Sad to znamo!)

KOHEZIVNA ENERGIJA

WS: Pogledajmo sada da li je WS metodom dobro opisana koheziorna energija normalnih metala

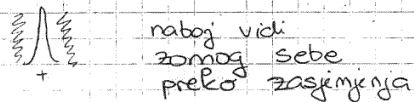
Energija osnovnog stanja:

$$E_0 = \underbrace{E_B + E_{kin}}_{E_{ws}} + E_{SFE} + E_{(H)F} + E_{korekcijska}$$

E_B: energija dna vrpe
 E_{kin}: kinetički član
 E_{SFE}: self energy (Hartreejev član povezan s + gustoćom točkastih iona)
 E_{(H)F}: Hartree-Fock
 E_{korekcijska}: korekcijska (Fock)

vidjet ćemo da nam to treba radi doprinosa E_HF i E_{SFE} (da li WS metoda na kraju ispala dobro) + (sve ostalo)

self-energy:



E_{SFE}, E_HF, E_{cor} ~ 10 eV > E_c ~ 1 eV, a WS metoda ih zanemaruje?!
 Pokazot ćemo kasnije u čemu je stvar.

RPA: Ovisnost en. osnovnog stanja o korelacijama:

$$H = H_{kin} + H_{int} = \sum \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{q \neq 0} \frac{2e^2 \pi}{q^2} (S_q S_q^* - S_0)$$

Energija osnovnog stanja definirana je kao očekivana vrijednost od H:

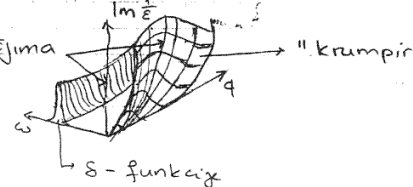
$$E_0 = \langle H \rangle = E_{kin} + E_{int}$$

Energija e- plina (jelium): FD tm. self-en. od elekt. gust.

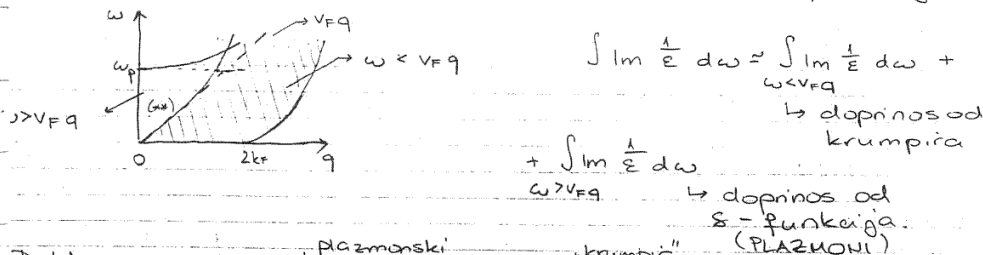
$$E_{int} = \langle H_{int} \rangle = - \frac{1}{2\pi} \sum_{q \neq 0} \int_0^\infty \text{Im} \frac{1}{\epsilon_q(\omega)} d\omega - \sum_{q \neq 0} \frac{2\pi C^2 S_0}{q^2}$$

samo potencijalni član (inter.) tu nema kin. en.

u područjima (tamo gdje je ε_I ≠ 0) na plazmnskoj krivulji (zid S-funkcija)



Aproksimativno tog integral dijelimo na dva područja:



Dakle:

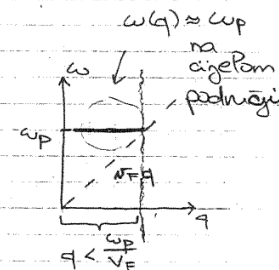
$$E_{int} = - \frac{1}{2\pi} \sum_{q \neq 0} \int_{\omega > v_F q} \text{Im} \frac{1}{\epsilon} d\omega - \frac{1}{2\pi} \sum_{q \neq 0} \int_{\omega < v_F q} \text{Im} \frac{1}{\epsilon} d\omega - \sum_{q \neq 0} \frac{2e^2 \pi S_0}{q^2}$$

= E_{int}^{pl.} (plazmnski dopinos)

E_{int}^{pl} ćemo izračunati aproksimativno uzevši

$$tj: \text{Im} \frac{1}{\epsilon} = -\pi \frac{\omega_p}{2} \delta(\omega - \omega_p)$$

izveli prije (razvoj ε_r blizu pola, itd...)



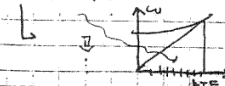
$$E_{int}^{pl} = - \frac{1}{2\pi} \sum_{q \neq 0} \int_{\omega > \frac{\omega_p}{v_F}} \left(-\frac{\pi}{2}\right) \omega_p \delta(\omega - \omega_p) d\omega$$

$$\Rightarrow E_{int}^{pl} = \sum_{q < \frac{\omega_p}{v_F}} \frac{\omega_p}{4}$$

← dopinos od plazmona u području malih valnih vektora

→ samo potencijalni član, a F ekviparticijska energija → ide mu pola energije

→ plazmnski dopinos (vidjet ćemo da sliči na ekviparticioni teorem za HO; svaki plazmon (v_F q) će u E₀ dopinosti jednako; sa ω_p/2)



$$\Rightarrow \tilde{H}_{int} = -\frac{1}{2\pi} \sum_k \int \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} d\omega =$$

$$= \sum_{k < k_{TF}} \frac{\omega_p}{4} + \sum_{k > k_{TF}} \left[\text{perturbativno po } V_q \text{ nezasićenom} \right]$$

fizikalno \rightarrow za velike valne dužine nema zasićenja \Rightarrow čista Coulomb interakcija (mezo i makro)

od kulnske interakcije - tu više nema zasićenja (jer $k > k_{TF}$), na velikim valnim dužinama \Rightarrow mala

$(k > k_{TF}) \rightarrow$ taj dio možemo računati perturbativno po V_q nezasićenom

Sada ćemo uvesti "PAULIJEV TRIK" - omogućava nam da iz E_{int} dobijemo E_0 :

$$E_0 = \langle H \rangle = \langle \psi_0 | H_{kin} | \psi_0 \rangle + E_{int}$$

- pretpostavimo da je interakcijski član linearna funkcija nekog parametra λ ; u našem slučaju je $\lambda = e^2$

$$E_{int} = \mathcal{L}(\lambda) \Rightarrow \frac{\partial E_{int}}{\partial \lambda} = \mathcal{L}' = \frac{E_{int}}{\lambda}$$

"ostatak" - ono što nije $e^2 = \lambda$ neovisno λ

- izračunajmo: $H_{kin} + H_{int} \leftarrow$ linearno u λ

$$\frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = \langle \psi_0 | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \psi_0 \rangle + \langle \frac{\partial \psi_0}{\partial \lambda} | H | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | H | \frac{\partial \psi_0}{\partial \lambda} \rangle$$

$$= \langle \psi_0 | \frac{H_{int}}{\lambda} | \psi_0 \rangle + E_0 \frac{\partial \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}{\partial \lambda} = 0 \quad / \int d\lambda$$

$$\Rightarrow E_0(\lambda) - E_0(0) = \int_0^\lambda \frac{E_{int}}{\lambda} d\lambda$$

energija osnovnog stanja sistema s interakcijom

energija osnovnog stanja NEINTERAKIRAJUĆEG plina čestica

\rightarrow što je koji iz poznatog H_{int} tj. E_{int} daje energiju osnovnog stanja E_0

\leftarrow to mi je općenito kinetički dio među osm. stanjima

n el. plin na $T=0$

$$E_0(0) = N \cdot \frac{3}{5} E_F = \frac{3}{5} N \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

\uparrow prije izveli

$$\Rightarrow E_0(\lambda) = \frac{3}{5} N \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} + \int_0^\lambda \frac{H_{int}(\lambda)}{\lambda} d\lambda, \quad \lambda \equiv e^2$$

Sada to primjenimo na plazmone čiji smo H_{int}^{PI} gore izračunali:

$$E_{int}^{PI} = \sum_{q < \frac{\omega_p}{v_F}} \frac{\omega_p}{4}, \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 S_0}{m} \Rightarrow \omega_p \sim \sqrt{\lambda} \quad \text{tj. } \sqrt{e^2}$$

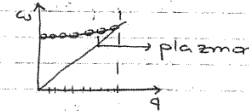
$$E_0^{PI} = \sum \int_0^{\omega_p} \frac{1}{\omega} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{4\pi S_0}{m}} \omega d\omega = \sum \frac{1}{4} \sqrt{\frac{4\pi S_0}{m}} \frac{1}{2} \omega_p^2$$

$$= \sum \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4\pi S_0 e^2}{m}} = \sum \frac{\omega_p}{2}$$

Dakle, plazmonski doprinos energiji osnovnog stanja jest:

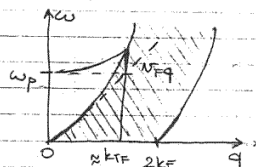
$$E_0^{PI} = \sum_{q < \frac{\omega_p}{v_F}} \frac{\omega_p}{2} \rightarrow \text{kao ekviparticioni teorem za HO} \Rightarrow \text{svaki plazmon } (\forall q) \text{ doprinosi u } E_0^{PI} \text{ jednako; sa } \frac{\omega_p^2}{2}$$

Energija 0-tog gibanja plazmone: pda od kinetičke i pda od interakcije



Plazmoni su bozoni!

To je bio plazmonski doprinos (S-funkcija doprinos dugodosežnih sila u području gdje nema zasićenja), a što je s doprinosom "krumpira" (kratkodosežne sile, zasićenje):



2 načina da to izračunamo:

- 1) Normalno integriramo dalje po području definicije funkciji $\text{Im} \frac{1}{\epsilon}$.
- 2) Vidimo da je doprinos S-funkcija većinski $\frac{\omega_p}{v_F}$ doprinos u području $q < v_F$, a u području $q > k_{TF}$ možemo računati perturbativno po V_q nezasićenom (zasićenja interakcija = "golej interakcija" \leftarrow).

Doprinos "krumpira" računamo u 2. redu računom smetnje, a konačni rezultat energiji osnovnog stanja je:

$$E_0 = \underbrace{\frac{2.21}{r_s^2}}_{\text{kin en.}} - \underbrace{\frac{0.916}{r_s}}_{\text{Hartree-Fockova korekcija}} + 0.062 \ln r_s - 0.096 + \text{cor. [Ry]} + \dots + r_s \ln r_s$$

\rightarrow konst plazmonski doprinos \rightarrow sprječava $\uparrow \uparrow e^-$ da dođu blizu

\ln i od \leftarrow zasijenog Coulombovog pot perturbativno po V_q nezasićenom

- još pristup preko dielektrine konst. je bolji → sve preko 1. reda računa smetnje

(*) RPA izraz za energiju osnovnog stanja jelliuma.

↳ potvrđuje da se radi o razvoju po malom r_s odnosno po velikoj gustoći

Gell-Hann & Bruckner, 1956 - to dobili grubom silom

To nije Taylorov ili Laurentov razvoj po malom r_s nego ima logaritamske članove (prijeklo tog $\ln r_s$ u dugodosežnim Coulombovim silama) $(\frac{4\pi e^2}{a^2})$

$$E_0^{RPA} = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + 0.062 \ln r_s - 0.096 + \dots r_s \ln r_s + \dots$$

$r_s \ll 1$
↳ $\frac{k_{TF}}{k_F}$

korelaciona energija

Cor' predstavlja daljnje članove razvoja koje bi po uocenom principu mogli napisati:

$$Cor = \alpha r_s + \beta r_s \ln r_s + \dots$$

→ Rezultat je red po r_s (nije ni Laurentov ni Taylorov). stvar se kako vidimo, bazira na razvoju po malom r_s ⇒ velika gustoća el. plina (znači: razvoj po malom $\frac{k_{TF}}{k_F}$ ⇒ sistem slobodje vjze). To pokazuje da RPA radi $\frac{k_{TF}}{k_F}$ za velike gustoće el. plina. Logaritam upućuje na to da je cijela stvar suštinski neperturbativna (Coulombovske sile)

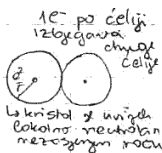
Gell-Hann i Bruckner su dobili isti rezultat drugom metodom (grubom silom - sumiranjem ∞ sume divergentnih članova - eksplicitna pert. teorija)

Gdje je to u odnosu na Wigner-Seitzov rezultat?

↳ u odnosu off nose z m

$$E_{ws} = E_B + \frac{2.21}{r_s^2}$$

usporedba s WS metodom



↳ najniže stanje, en. dna vrpce

($k=0$ stanje)

↳ kinetički član = popunjenje do Fermijevog nivoa

Pretpostavke su bile:

- išezavanje derivacije valne funkcije na rubu WS ćelije
- koreliranost el. (1 el. / WS ćeliji)

Pitanje je šta uzrokuje razliku kod su pretpostavke RPA i WS metode iste? Da li se može prevesti jedan rezultat u drugi?

Kako su u WS metodi ioni točkasti naboji u centru ćelije, a ne razmazana pozodina ⇒ tu se Hartreejev član ne dokida

U jelliumu nema Hartree člana (dokida se): $S_0 S_0 + S_0 S_0 - 2 S_0 S_0$. Za točkaste naboje se Hartree član ne dokida.

U E_0^{RPA} treba dodati član:

$$E_{SFE} = e^2 \iint_{WS \text{ ćelija}} \frac{S(\vec{r}) S(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}'$$

int. S unutar WS ćelije

↳ int. e⁻ sa ionom u WS ćeliji

↳ prvo po WS ćeliji pa onda izvan

i treba dodati E_B → tada se svi članovi reda veličine Ry pokrate na nulu i ostaje samo WS rezultat!

$$E_0^{RPA} + E_B + E_{SFE} = E_B + \frac{2.21}{r_s} + E_{SFE} - \frac{0.916}{r_s} + 0.062 \ln r_s - 0.096 + \dots r_s \ln r_s + \dots$$

↳ ti članovi se uklinu i dobijemo WS rezultat.

MODIFIKACIJA WS-metode:

↳ gledamo kristal

↳ Hartreejev član u WS metodi → sve elektrone osim onog kojeg gledamo zamjenimo efektivnom gustoćom, a on je jednoliko raspodijeljen po svim ćelijama što znači da iz svake ćelije vladima 1/N elektrona, pa izabrani elektron vidi praktično neutralne ćelije.

Treba gledati interakciju elektronskog oblaka sa samim sobom u WS ćeliji pa onda interakciju između različitih ćelija.

Elektron interagira sam sa sobom zbog izvlačenja 1/N mjege iz svake ćelije, pa čini plin gustoće 1/N (u svakoj ćeliji), a u mjegevoj ćeliji (N=1) dječica $\frac{e}{N}$ od ostalih elektrona - s njima još elektron interagira u WS ćeliji:

$$\text{Self-energija (sam sa sobom): } E_{SFE} = \frac{e^2}{2} \iint_{WS \text{ ćelija}} \frac{S_1(\vec{r}) S_1(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r'$$

* Vlasita energija uniformne raspodjele elektrona unutar sfere radijusa $a_0 r_s$:

r_s bezdim. parametar
 a_0 Bohrov radijus

$$I = \frac{1}{2} \iint \frac{S(\vec{r}) S(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}'$$

$$= \frac{e^2}{2V_0^2} \iint \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}'$$

$$V_0 = \frac{4}{3} (a_0 r_s)^3 \pi$$

$$I = \int \frac{d\vec{r}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \int d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{a_0 r_s} \frac{r^2 dr}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \vartheta}}$$

$$= 2\pi \int_0^{a_0 r_s} r^2 dr \int_{-1}^1 \frac{dz}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'z}} = \left[zB = -\frac{dx}{2rr'} \right]$$

$$\begin{aligned}
&= 2\pi \int_0^{a_0 r_s} \frac{1}{r^2} dr \frac{1}{2\pi r'} \int_{|r-r'|}^{r+r'} \frac{dx}{|x|} = 2\pi \int_0^{a_0 r_s} dr \frac{r}{r'} \left[|r+r'| - |r-r'| \right] \\
&= 2\pi \left\{ \int_0^{a_0 r_s} dr \frac{r}{r'} \cdot 2r + \int_{a_0 r_s}^{a_0 r_s} dr \frac{r}{r'} \cdot 2r' \right\} \quad \begin{matrix} 2r & r > r' \\ 2r' & r < r' \end{matrix} \\
&= 4\pi \left\{ \int_0^{a_0 r_s} \frac{r^2}{r'} dr + \int_{a_0 r_s}^{a_0 r_s} r dr \right\} = 4\pi \left\{ \frac{1}{r'} \frac{r^3}{3} + \frac{(a_0 r_s)^2}{2} - \frac{r^2}{2} \right\} \\
&= 4\pi \left\{ \frac{(a_0 r_s)^2}{2} - \frac{r^2}{6} \right\} \\
\Rightarrow I &= \frac{e^2}{2V_s^2} \cdot 4\pi \cdot 4\pi \int_0^{a_0 r_s} r'^2 dr' \left\{ \frac{(a_0 r_s)^2}{2} - \frac{r'^2}{6} \right\} \\
&= \frac{8e^2 \pi^2}{V_s^2} \left\{ \frac{(a_0 r_s)^2}{2} \frac{(a_0 r_s)^3}{3} - \frac{1}{6} \frac{(a_0 r_s)^5}{5} \right\} = \frac{8e^2 \pi^2}{V_s^2} (a_0 r_s)^5 \frac{2}{15} \\
&= \frac{16e^2 \pi^2}{18} \cdot \frac{8}{16\pi^2 a_0^4 r_s^4} (a_0 r_s)^5 = \frac{3e^2}{5a_0} \frac{1}{r_s} = \frac{6}{5} \frac{e^2}{2a_0} = 1.2 \frac{e^2}{r_s} = 1.2 R_y //
\end{aligned}$$

Još treba uračunati i interakciju između različitih čelija: Fock-izmena i korelaciona energija:

$$\begin{aligned}
\Rightarrow E_0 &= E_B + \frac{2.21}{r_s^2} + \frac{1.2}{r_s} + \frac{0.916}{r_s} + 0.062 \ln r_s - 0.096 + \text{[daljnje korekcije]} \\
&\downarrow \\
&E_{ws} \quad (*)
\end{aligned}$$

Za najb. $r_s = 4 \Rightarrow$ dio (*) daje $0.3 - 0.229 + 0.085 - 0.096 + \dots$ daje cca. 0.05 eV/atomu (vrlo malo), a svaki član je reda veličine $\sim 10 \text{ eV}$ (reda veličine) $\sim 1 R_y$

$\Rightarrow WS$ je OK Banšić: "Ovo je za mene spektakularno"

\Rightarrow To znači da je referentna točka za proračun E_{ws} dobro odabrana jer WS iako gruba uz sve ono zanemareno ipak daje dobar rezultat (razlike se međusobno "pojeduu")

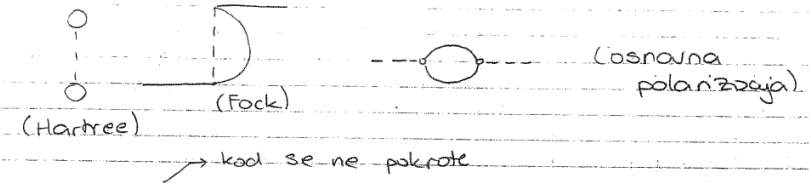
Kohesivna energija metalnog natrija po atomu: $\frac{1.2}{r_s}$ sef. energija = $0.30 R_y$

$$\begin{aligned}
E_{coh} &= E_{e^- \text{ metalu}} - E_{e^- \text{ neutralnom atomu}} = E(k=0) + E_0 + E_2 - E_I \\
&= E_B - 0.16 R_y + \text{[korekcija zbog razlike između atoma natrija]} - E_I \\
&\approx -0.60 R_y \text{ za Na} \quad \begin{matrix} \text{kin. en. elektrona} \\ \text{[korekcija zbog razlike između atoma natrija]} \\ \text{[u uljevanoj suč. ostalo]} \end{matrix} \\
r_s = 4 \text{ za Na} & \quad \begin{matrix} \text{kin. en. elektrona} \\ \text{[korekcija zbog razlike između atoma natrija]} \\ \text{[u uljevanoj suč. ostalo]} \end{matrix} \quad \begin{matrix} \text{kin. en. elektrona} \\ \text{[korekcija zbog razlike između atoma natrija]} \\ \text{[u uljevanoj suč. ostalo]} \end{matrix} \quad \begin{matrix} \text{kin. en. elektrona} \\ \text{[korekcija zbog razlike između atoma natrija]} \\ \text{[u uljevanoj suč. ostalo]} \end{matrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow E_{coh} &= (-0.60 - 0.16 + 0.30 + 0.38) R_y = -0.08 R_y = -1.1 \text{ eV} \\
&\text{što je vrlo blizu opaženog vrijednosti od } -1.13 \text{ eV. //} \\
E_{coh}^{WS} &= E^{WS} - E_I = [-0.60 + 0.138125 + 0.38] R_y \approx -0.08 \\
\Rightarrow WS &\text{ OK //}
\end{aligned}$$

Prethodna razmatranja su logična: jer RPA uvodi iste korelacije kao i WS (kod WS-unaprijed smo rekli kakve će biti korelacije, a u RPA smo prihvatili da se te korelacije same razvijaju)

Napomena: Naša teorija je odgovarala uzimanju u obzir dijagrama!



Hartreejevi članovi koji opisuju interakciju između raznih dijelova upravo je s tim koja će rešetka biti stabilna.

USPOREDBA RPA I WS METODE

Energija RPA:

$$E_{RPA} = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + 0.062 \ln r_s - 0.096 + \dots$$

↓ plazmonski dio

kin. član (slobodni pi(n)) ME član korelacijski članovi

Izvedeno uz pretpostavke:

1. U jelliumu $E_{Hartree} = 0$
2. perturbacija po zamjenom potencijalu ($E_i(\omega)$, flukt. dis. tm)
3. dugodosežna interakcija (Coulombska) \rightarrow plazmonski dio
4. zamjenjiv

WS:

$$E_{ws} = \frac{2.21}{r_s^2} + E_B \quad E_c = E_{ws} - E_{at} \approx -1.1 \text{ eV}$$

Pretpostavke:

1. Kratkodosežna Coulombska interakcija: e^- & ion $\propto \frac{Ze^2}{r}$
- "gdi" nezamjenjivi Coul. potencijal izjgre

$\frac{e^2}{r}$ ulazi u E_B , tu su skrivene korelacije

2. Korelacija \rightarrow 1 elektron po WS ćeliji, lokalizacija elektrona onemogućava ulazak ostalim elektronima (ćelija biva izbjegavana)

3. Zasjenjenje: interakcija (e^- , e^-) je potpuno zasjenjena, a interakcija (e^- , ion) je potpuno nezasjenjena.

Hogu li se metode svesti jedna na drugu?

Jellium: jednoliko razmazana pozadina + jednoliko raspodijeljen e^- plin

WS: točkasti ioni oko kojih je opisana WS kugla u kojoj se nalazi 1 $e^- \Rightarrow$ u tokuom sustavu je Hartree i Fock član = 0 (Hartree član je = 0 jer ne može 1 lokalizirani e^- unutar WS ćelije interagirati sam sa sobom, a one izvan ne vidi osim u smislu korelacije, \Rightarrow Fock član = 0, također ioni se u susjednim ćelijama uopće ne vide)

\Downarrow

Modificiramo WS model:

Ostavljamu točkaste ione, ali pp jednoliko raspodijeljeni e^- plin. To znači da se u jednoj WS ćeliji ne nalazi 1 e^- nego $\frac{1}{N}$ svakog elektrona. (sustav je i dalje neutralan) U tokuom modificiranom modelu moguće je definirati Hartree i Fock član:

I Hartree: Jednogi elektron tj. $\frac{e}{N}$ u WS ć interagira s preostalih $(N-1)e$ čestica svih ostalih e^- u "svoj" WS ćeliji i to je kao da "vidi sam sebe" (nije u WS točkasti) \Rightarrow doprinos self energije

$$E_{HF} = \frac{1}{2} e^2 \iint_{WS \text{ ćelija}} \frac{\psi_i(r) \psi_i(r')}{|r-r'|} d^3r d^3r' = \frac{1.2}{r_s} Ry$$

II Fock: interakcija među susjednim ćelijama tj. izmjena elektrona \Rightarrow analogno jelliumu

$$E_{HF} = - \frac{0.916}{r_s}$$

III korelacijski efekti (dugodosežni i kratkodosežni) analogno jelliumu:

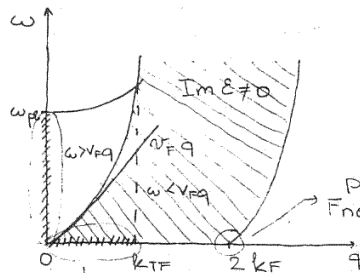
$$+ 0.062 \ln r_s - 0.096 \quad \rightarrow \text{SPEKTAKULARNO!}$$

Finalno I+II+III (za $r_s=4$) = 0.05 eV/atoma a $E_c = -1.1 \text{ eV}$

Spektakularno: Hartreejev član dokida sve jelliumske korelacije (iako su svi članovi u 1 Ry, dokle jako veliki!) Stoga je dovoljno za proračun kohezivne metala i grube konstit "grube" WS metodu, jer se

priroda opet pokazala kao puna iznenađenja! (\Rightarrow Svi članovi koji su WS metodi bili zanemareni ispod da se na kraju međusobno "pogodu" iako su veliki!)

15.5.2002.



- dinamičko i statičko područje

$$\epsilon(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_F^2}{\omega^2}$$

statičko zasjenjenje

(bozon)

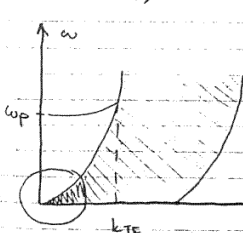
dugodosežne sile organizirane / ops. u plazmon (dvostr. sl.), preostali stupnjevi slobode - ponašaju se kao da su slobodni (e^- plin) (u području malih valnih duljina - velikih udaljenosti e^- se ponašaju kao gotovo slobodni; prebrze promjene - ne vide se sile)

- osnovno - sustav kojem su nametnute dugodosežne sile organizira se t. da postigne lokalnu neutralnost (na što manjoj skali)

ista separacija pojavljuje se i na razini energije \rightarrow rezultati za C_V

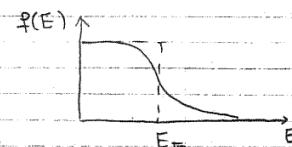
Model sl. e^- plina često se upotrebljava u teoriji metala; ne gledajući se dugodosežne sile nego lokalna neutralnost kao efektni problem nam je ostao slobodni elektronski plin koji još eventualno interagira kratkodosežnim silama. Kod smu likvidirali dugodosežne sile standardni korak dalje u FCS je tretirati kratkodosežne sile (posebno)

Elektronska specifična toplina (u modelu slobodnih elektrona)



$$f_k = \frac{1}{e^{k_B T (E_k - E_F)} + 1}$$

\rightarrow Fermijeva raspodjela za slobodni el. plin

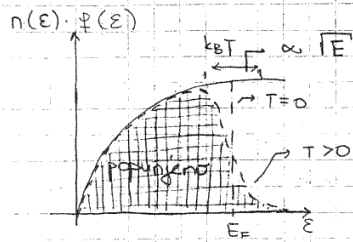


\rightarrow gotovo slobodni e^- plin ako je frekvencija sudara $\ll \omega_p$

$$E(T) = \int_{-\infty}^{\infty} E \varphi(E) n(E) dE$$

→ gustota stanja (brine se o pravom spektru)

↳ integracija po spektru slobodnih elektrona



Vidimo da su termicki pobudjeni samo elektroni za $\sim k_B T$ udaljeni od E_F

$$\Rightarrow \Delta E \approx k_B T$$

$$C_{el} = \frac{\partial E(T)}{\partial T}$$

$E_F = E_F(T)$ nalazimo tu ovisnost o T iz uvjeta sačuvanja broja čestica

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(E) m(E) dE$$

→ ne mijenja se s T

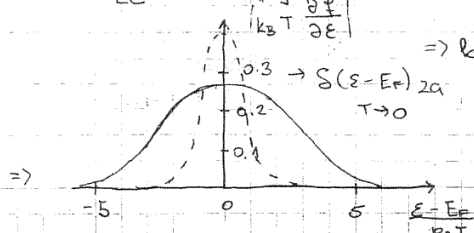
$$(1) \frac{dN}{dT} = 0 \quad \& \quad (2) C_{el} = \frac{dE}{dT} = \int_{-\infty}^{\infty} E \cdot n(E) \frac{\partial \varphi(E)}{\partial T} dE$$

$$(2) - E_F \cdot (1) = C_{el} - 0$$

↳ da se dobije ista dimenzija (kao Lagrangeov multiplikator)

$$\hookrightarrow C_{el} = \int (\varepsilon - E_F) n(\varepsilon) \frac{\partial \varphi}{\partial T} d\varepsilon$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial T} = \frac{e^{-\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}}}{\left[e^{\frac{1}{k_B T} (\varepsilon - E_F)} + 1 \right]^2} \quad \text{promatramo} \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} = - \frac{e^{-\frac{1}{k_B T} (\varepsilon - E_F)} \frac{1}{k_B T}}{\left[e^{\frac{1}{k_B T} (\varepsilon - E_F)} + 1 \right]^2}$$



$$\Rightarrow k_B T \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} = - \frac{e^{-\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}}}{\left[e^{\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}} + 1 \right]^2}$$

za $T \ll$ možemo zanemariti ovisnost E_F o T

$$\Rightarrow \text{iz oblika } \frac{\partial \varphi}{\partial T} \text{ vidimo da je: } \frac{\partial \varphi}{\partial T} = - \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon - E_F}{T}$$

$$\& \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} = - \frac{T}{\varepsilon - E_F} \frac{\partial \varphi}{\partial T}$$

$$T \rightarrow 0 \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Theta(\varepsilon - E_F)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\varepsilon - E_F) d\varepsilon = -1$$

$$\hookrightarrow - \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon - E_F)$$

$$C_{el} = \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - E_F) m(\varepsilon) \cdot (-1) \frac{(\varepsilon - E_F)}{T} \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$

$$= - \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - E_F)^2 n(\varepsilon) \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \quad \rightarrow \text{iz slike (*) vidimo da } C_{el} \text{ u najviše doprinosi (bivaju pobudena) stanja u } k_B T \text{ okolini od } E_F$$

aproximiramo

$$n(\varepsilon) \rightarrow n(E_F) = n_F; T \ll$$

$$\Rightarrow C_{el} \approx - \frac{n_F}{T} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - E_F)^2 \frac{\partial \varphi}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = \frac{n_F}{k_B T^2} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - E_F)^2 \frac{e^{-\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}}}{\left[e^{\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}} + 1 \right]^2} d\varepsilon$$

$$= k_B^2 T n_F \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{-\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}}}{\left[e^{\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}} + 1 \right]^2} d\left(\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T} \right) \quad X = \frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}$$

$$C_{el} = k_B^2 T n_F \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 e^x dx}{(e^x + 1)^2} \quad X = \frac{\varepsilon - E_F}{k_B T}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^n e^x dx}{(e^x + 1)^2} = 2^n (1 - 2^{1-n}) \zeta(n)$$

$$\zeta(x) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^x}; \quad \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} \quad \text{Riemannova } \zeta\text{-funkcija}$$

$$\Rightarrow C_{el} = k_B^2 T n_F \cdot 2 \cdot 2! \cdot \left(1 - \frac{1}{2} \right) \zeta(2) = k_B^2 T n_F \frac{\pi^2}{3} \quad \text{za } T \ll$$

↳ $\sim \frac{1}{E_F} \rightarrow$ na $T=0K$

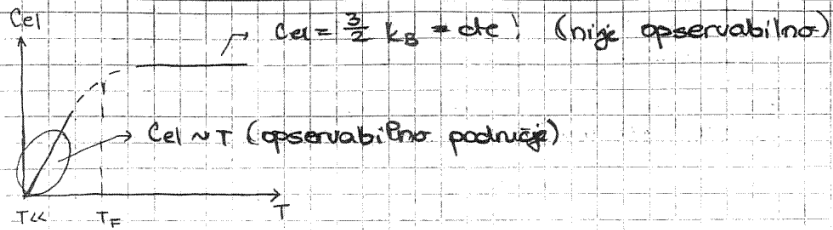
Dakle:

$C_{el} \sim \frac{1}{E_F} \cdot T \rightarrow$ toplinski kapacitet degeneriranog fermionskog plina za $T \ll$ je linearan u T (tu je $n_F = \frac{N_0}{E_F}$)

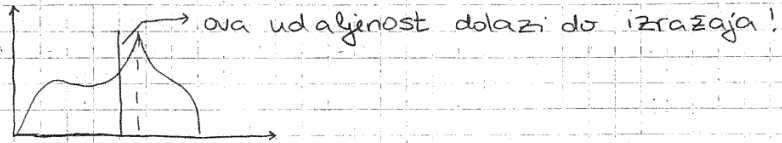
\rightarrow razvoj po maloj temperaturi s obzirom na E_F ($k_B T \ll E_F$)

Fermionski karakter plina: $T \rightarrow 0 \Rightarrow C_{el} \rightarrow 0$ jer se pobuduje samo usku područje oko $E_F \rightarrow C \sim T$

Za vrlo visoke temperature ($T \gg$) \Rightarrow klasična granica (Fermijeiv liiv je izvan vrpce). Temperatura degeneracije (Fermijeva) je za metale vrlo visoka $T_F \sim 10^5 K$ (materijal (kristal) se rastopi prije nego je dostigne) $[E_F \text{ u eV}]$



Mala EF: 1) Van Hoveov singularitet \rightarrow energija pada u singularitet



Dakle, rezultati:

$C_v^{el} = \gamma T$ e^- doprinos specifičnoj toplini
 linearan je s temperaturom
 $\hookrightarrow \propto$ gustoći stanja, n_F (na Fermijevoj nivou)

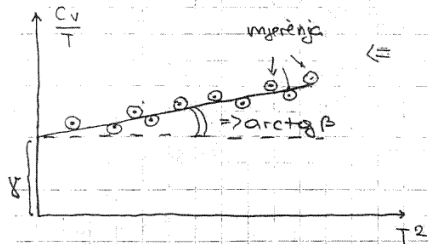
$C_v = \gamma T + \beta T^3$ \rightarrow ovo funkcioniše u gotovo svim metalima (osim kod se pojave magnetski tj. spinski slobode (tada nastaju problemi) ali tada izlazimo iz granice slobodnog plina \rightarrow javljaju se sile kratkog dosega)

od fonona

Mjerenje C_v :

Ukupni C_v kristala: $C_v^{TOT} = \gamma T + \beta T^3$ $T \ll$
 \uparrow \uparrow
 elektroni fononi (rešetka)

$\Rightarrow \frac{C_v}{T} = \gamma + \beta T^2$ \rightarrow mjerimo C_v^{TOT} i T i crtamo odabire iz nagiba i odsjeka pravca određujemo β i γ (relativno lako mjeriti, fit \Rightarrow dobiju se β i γ)



- metali (imaju elektronski plin): C_v pada linearno ($\sim T$) sa T
- izolatori (nemaju e^- plin): C_v pada $\sim T^3$ sa T .