STATISZTIKUS FIZIKA

1. előadás (09. 10.)

Legyen egy bázis: $\{\varphi_i(\underline{r}, s)\}_1^{\infty}$

s azt jelenti, hogy φ egy több-D-s vektor, és s értéke mondja meg, melyik a mi hullámfv.-ünk

Pl.:

3D-s dobozba zárt részecske megoldása a síkhullám:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi \Rightarrow \psi(x,y,z) = e^{-i\left(\frac{2\pi}{L_x} x n_x + \frac{2\pi}{L_y} y n_y + \frac{2\pi}{L_z} z n_z\right)}$$

és $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$ ez a HF miatt

ha bevezetjük a $k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x$, k_y, k_z

akkor $\psi(x,y,z) = e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$

Mivel n-ek egészek, k-k kvantáltak $\Rightarrow$ $\underline{k}$ vektor is a hullámtérben kvantált vektor lehet.

$\underline{k}$ lehetőségeit megszámolhatjuk, és ezzel indexeljük ψ-t is.

$\varphi_{\underline{k}}(x,y,z) = e^{i\underline{k}\underline{r}}$ $\leftarrow$ ez megszámlálható eset.

TFH $\{\varphi_i(\underline{r}, s)\}_1^{\infty}$ TONR, azaz: - bármely kettő szorzata δ
- minden hullámfv. felbontható ezekkel

teljesség: $\sum_{i=1}^{\infty} \varphi_i^*(\underline{r}, s)\varphi_i(\underline{r}', s') = \delta(\underline{r}-\underline{r}')\delta_{ss'}$

ON-ság: $\sum_s \int \varphi_i^*(\underline{r}, s)\varphi_j(\underline{r}, s)\, d^3r = \delta_{ij}$

Mi van több* részecske esetén? *: azonos részecske

(pl: elektronok)

1\. e^-: $\varphi_{\alpha_1}(\underline{r}_1, s_1)$

2\. e^-: $\varphi_{\alpha_2}(\underline{r}_2, s_2)$

$\vdots$

n. e^-: $\varphi_{\alpha_n}(\underline{r}_n, s_n)$

Pauli-elv: a fermionok teljes hullámfv.-je antiszimmetrikus kell legyen.

$\Rightarrow$ A φ_{α_i}-k szorzatának az összes permutációja kell.

pl: $n=2$ $\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_{\alpha_1}(\underline{r}_1, s_1)\varphi_{\alpha_2}(\underline{r}_2, s_2) - \varphi_{\alpha_2}(\underline{r}_1, s_1)\varphi_{\alpha_1}(\underline{r}_2, s_2)\right) =$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(\underline{r}_1, s_1) & \varphi_{\alpha_1}(\underline{r}_2, s_2) \\ \varphi_{\alpha_2}(\underline{r}_1, s_1) & \varphi_{\alpha_2}(\underline{r}_2, s_2) \end{vmatrix}$$ Slater-determináns.

3 féle index: – a TONR megindexelése

– a TONR-ből kiválasztunk n-t, és ezeket indexeljük. Ezek az elektronok kvantumszámai.

– Az elektronok sorszáma.

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{s_1}\cdots\sum_{s_n}\int \psi^*(\underline{r}_1, \underline{r}_2 \cdots \underline{r}_n, s_1 \cdots s_n)\, \phi(\underline{r}_1 \cdots \underline{r}_n, s_1 \cdots s_n)\, d^3r_1 \cdots d^3r_n$$

ahol ψ és ϕ is rendes, antiszimmetrikus hullámfv.-k.

Egy normált Slater-determináns egy jó bázis a teljes antiszimmetrikus n-részecske hullámfv.-hez.

$$\sum_{i_1=1}^{n}\cdots\sum_{i_n=1}^{n} \varepsilon_{i_1\cdots i_n}\, \varepsilon_{i_1\cdots i_n} = n!$$ Ezért az ált. Slater-determináns:

$$\hat{A}\left(\varphi_{\alpha_1}(\underline{r}_1, s_1)\cdots\varphi_{\alpha_n}(\underline{r}_n, s_n)\right) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{i_1=1}^{n}\cdots\sum_{i_n=1}^{n}\varepsilon_{i_1\cdots i_n}\,\varphi_{i_1}(\underline{r}_1, s_1)\cdots\varphi_{i_n}(\underline{r}_n, s_n)$$

mert $\langle\psi_{\underline{\alpha}}|\psi_{\underline{\alpha}}\rangle$ így lesz 1. Ezt végigírtuk, de túl hosszú, és lusta vagyok leírni.

Fermionoknál $(\alpha_1 \cdots \alpha_n)$ különbözőek. A teljesség miatt, legyen $\alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_n$

Mi van bozonokkal? (pl. ^4He) a spinje 0.

$\{\varphi_i(\underline{r}, s)\}_{i=1}^{n}$ TONR

A teljes hullámfv szimmetrikus kell legyen. pl.: $n=3$
$$\big(\varphi_1(\underline{r}_1, s_1)\varphi_1(\underline{r}_2, s_2)\varphi_2(\underline{r}_3 s_3) + \varphi_1(\underline{r}_1 s_1)\varphi_2(\underline{r}_2 s_2)\varphi_1(\underline{r}_3 s_3) + \varphi_2(\underline{r}_1 s_1)\varphi_1(\underline{r}_2 s_2)\varphi_1(\underline{r}_1 s_1)\big)$$

$\hat{S}f$

$$\psi^{B}_{\alpha_1\cdots\alpha_n} = \frac{1}{\left(n!\prod_{i=1}^{\infty} n_i!\right)^{1/2}}\sum_{\underline{\alpha}}\varphi_{\alpha_1}(\underline{r}_1, s_1)\cdots\varphi_{\alpha_n}(\underline{r}_n, s_n)$$

ahol n_i az i mint betöltöttség: $n = \sum_i n_i$ (occupation number)

$$\langle\psi^B_{\underline{\alpha}}|\phi^B_{\underline{\beta}}\rangle = \delta_{\underline{\alpha}\underline{\beta}}$$

Fock-space:

$|n_1 \cdots n_N \cdots\rangle \longleftrightarrow \psi_{\underline{\alpha}}(\underline{r}_1, s_1 \cdots \underline{r}_n, s_n)$ az előző és részecskeszámok izomorfak

A kinetikus operátor: $\sum_{i=1}^{n}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i\right)$ az összes részecskére $\longleftrightarrow$ mi lehet ennek a megfelelője?

STAT FIZ

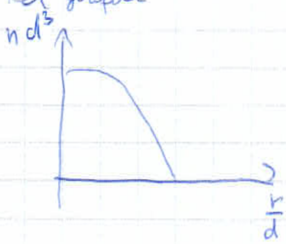
1. gyak (09.13)

lokális sűrűség közelítés

Ha V lassan változik csatolásmentes HF-ű dolog

akkor a kémiai potenciál : $\mu - V(r)$

Két grafikon



A potenciál 3D-ban: $V(r) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2$

$d = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$ ← oszcillátor length

Az energia: $E = \hbar\omega_0 (2n_r + l + \frac{3}{2})$

degenerált m szerint, és a spin szerint

Ismert példa: homogén tér

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$

periodikus HF

$\psi(\underline{k}) = e^{i\underline{k}\underline{r}}$

ahol $\underline{k} = \left(\frac{2\pi}{L_x} n_x, \frac{2\pi}{L_y} n_y, \frac{2\pi}{L_z} n_z\right)$

$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

véges T-n a FD eloszlás érvényes, ahol $n_{\underline{k}} = \frac{1}{e^{\beta(E_{\underline{k}} - \mu)} + 1}$

ha $T \to 0$, akkor ez lépcsőfv $\Rightarrow$ $\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ $\quad$ k_F a küszöbszint, ami alatt betöltöttek a szintek

Tehát elméletileg: $N = 2\sum_{n_x n_y n_z = -\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right)} + 1}$

valójában ez határozza meg μ értékét

Áttérés integrálra:

$$N = 2\int \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right)} + 1} \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z =$$

[Általánosságban $\sum_{\underline{k}} \to V\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$]

$$= 2V\int \Theta(k_F - k)\frac{d^3k}{(2\pi)^3} =$$

$$= 2V\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{V}{\pi^2}\frac{k_F^3}{3}$$

Tehát a $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ $\quad$ ebből $\mu = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m}$

$\Rightarrow n = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2}\right)^{3/2}$ $\quad$ ha $V \neq 0$, a lokális density appr. alapján:

$$n(\underline{r}) = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m(\mu - V)}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

STAT FIZ

2. előadás (09. 17.)

harmonikus oszcillátor energiaszintjei : $\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$

állapotai : $|n\rangle$

A Hamilton : $\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)$

$\psi(x) = \langle x|n\rangle$

$\hat{a}^+$: gerjesztő operátor (raising), $\hat{a}$: eltüntető operátor (lowering)

Ez az egyrészecskés rendszer szintjeit módosít.

A sokrészecskés rendszernél :

A i. nívón n_i részecske $\xrightarrow{\hat{a}_i^+}$ az i. nívón n_i+1 részecske

ez már egy kicsit más. bozonokra ez működik

fermionokra nem, mert ha már van egy részecske az i. állapotban, $\hat{a}_i^+$ azt is eltünteti.

$$\hat{a}_i^+|\dots 0_i \dots\rangle = \text{const}\,|\dots 1_i \dots\rangle$$
$$\hat{a}_i^+|\dots 1_i \dots\rangle = \emptyset$$

$\hat{a}^+$: keltő operátor

$\hat{a}$: eltüntető operátor

Az oszcillátornál $\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$ volt

itt azt akarjuk, hogy $\hat{a}_i^+\hat{a}_i|\dots n_i \dots\rangle = n_i|\dots n_i\dots\rangle$

A módszertan :

első kvantálás — második kvantálás

$$\psi^{B.F.}_{\underline{\alpha}}(x_1, x_2, \dots x_n) \xleftrightarrow{\text{izomorf}} |n_1 \dots n_i \dots\rangle$$

$$\left[\text{pl.: } \psi^{B}_{1123\dots}(x_1\dots x_n) \longleftrightarrow |211\dots\rangle\right]$$

(itt az x rövidítés: $x_i = (\underline{r}_i, s_i)$ $\Rightarrow \int dx_i = \sum_{s_i}\int d\underline{r}_i$)

ami érdekel minket, hogy hogyan kell az operátorokat áttranszformálni a Fock-térbe

Az ortogonalitás (csak azonos n-ű rendszerekre):

$$\int \psi_{\underline{\alpha}}(x_1\dots x_n)\,\psi_{\underline{\beta}}(x_1\dots x_n)\,dx_1\dots dx_n = \delta_{\underline{\alpha}\underline{\beta}} = \delta_{\alpha_1\beta_1}\delta_{\alpha_2\beta_2}\dots$$

ennek megfelelője Fock-térben :

$$\langle n_1 n_2 \dots | n_1' n_2' \dots\rangle = \delta_{n_1 n_1'}\delta_{n_2 n_2'}\dots$$

Ez általánosabb, mert a különböző n-ű alterek is összeszorozhatók

Első kvantálásnál ezt nem tudjuk megtenni.

A $|00\dots\rangle$ állapotot $|0\rangle$-val jelöljük. Ez a vákuum.

fermionokra $n_i \in \{0,1\}$, bozonokra $n_i \in \mathbb{N}$

Keltő operátor bozonokra:

$$\hat a_i^+ |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i+1}\,|n_1 n_2 \dots n_i+1 \dots\rangle$$ (a konstans a $\hat a_i^+ \hat a_i$ arányosság miatt)

kommutációs reláció: $[\hat a_i^+, \hat a_j^+] = 0 \quad \forall i,j$

$$\Rightarrow a_i^+ (a_1^+)^{n_1}(a_2^+)^{n_2}\cdots(a_i^+)^{n_i}\cdots|0\rangle = (a_1^+)^{n_1}(a_2^+)^{n_2}\cdots(a_i^+)^{n_i+1}\cdots|0\rangle$$

Keltő operátor fermionokra:

$$\langle x_1 \dots x_n| a_{\alpha_1}^+ \dots a_{\alpha_n}^+|0\rangle \sim \hat A(\varphi_{\alpha_1}(x_1)\cdots\varphi_{\alpha_n}(x_n))$$

egy újabb operátor egy újabb oszlopot ad a determinánshoz, tehát kicserélésre

$$\Rightarrow a_i^+ a_j^+ + a_j^+ a_i^+ = 0 \Rightarrow \{a_i^+, a_j^+\} = 0$$

$i=j$ eset: $2a_i^+ a_i^+ = 0$

pl.: $a_5^+ a_3^+ a_5^+ \cdots|0\rangle = -a_3^+ \underbrace{a_5^+ a_5^+}_{\text{ennek kell 0-nak lennie}} \cdots |0\rangle = 0$ (mi van ?)

$$a_i^+ |\dots n_i \dots\rangle = (-1)^{\Sigma_i}\sqrt{1-n_i}\,|\dots n_i+1 \dots\rangle \qquad \Sigma_i := \sum_{j=1}^{i-1} n_j$$

Tehát, ha $n_i=1$, akkor 0-t ad,
ha $n_i=0$, akkor stimmel

A prefaktor a antikommutációs szabály miatt van. (HF ellenőrizni)

Mi $a_i^+ a_j^+$ értéke..

- Triviális, csak akkor van értelme, ha $n_i=n_j=0$. A kérdés, hogy $i \gtrless j$?

TFH $i<j$: $a_i^+ a_j^+ |\dots 0_i \dots 0_j \dots\rangle = a_i (-1)^{\Sigma_j} |\dots 0_i \dots 1_j \dots\rangle =$

$$= (-1)^{\Sigma_j+\Sigma_i} |\dots 1_i \dots 1_j \dots\rangle$$

TFH $j<i$: $a_i^+ a_j^+ |\dots 0_j \dots 0_i \dots\rangle = a_i (-1)^{\Sigma_j} |\dots 1_j \dots 0_i \dots\rangle =$

$$= (-1)^{\Sigma_i+1}(-1)^{\Sigma_j} |\dots 1_j \dots 1_i \dots\rangle$$

Tehát valóban $(a_i^+ a_j^+ + a_j^+ a_i^+)|\dots 0_i \dots 0_j \dots\rangle = [(-1)^{\Sigma_i}(-1)^{\Sigma_j} + (-1)^{\Sigma_i}(-1)^{\Sigma_j+1}]|\dots 1_i \dots 1_j \dots\rangle$

$$= \emptyset$$

Eltüntető operátor bozonokra

Analóg mátrixelem: $\langle n_1' .. n_i' .. | a_i^\dagger | n_1 .. n_i .. \rangle = \langle n_1 .. n_i .. | a_i | n_1' ... n_i' .. \rangle^* =$

$$= \sqrt{n_i+1}\,\delta_{n_i+1,\,n_i'}$$

Tehát $a_i | .. n_i .. \rangle = \sqrt{n_i}\, | .. n_i - 1 ... \rangle$

kommutációs reláció: $[a_i, a_j] = 0$

$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$ (HF. hogy ellenőrizzük)

Eltüntető operátor fermionokra

$$a_i | ... n_i ... \rangle = (-1)^{\Sigma_i} \sqrt{n_i}\, | ... n_i - 1 ... \rangle$$

Ez $n_i = 0$ -ra magát 0-t, $n = 1$ -re pedig jó.

itt is antikommutálás van:

$\{a_i, a_j\} = 0$

$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}$

Fock-tér

$$| n_1 .. n_i .. \rangle = \frac{1}{\left(\prod_{i=1}^{\infty} n_i!\right)^{1/2}} (a_1^\dagger)^{n_1} ... (a_i^\dagger)^{n_i} ... |0\rangle$$ bozonokra

$$| n_1 ... n_i .. \rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} .. (a_i^\dagger)^{n_i} ... |0\rangle$$ fermionokra

$$\langle n_1 .. n_i .. | n_1' ... n_i' .. \rangle = \delta_{n_1 n_1'} ... \delta_{n_i n_i'} ...$$ mindkettőre

hasznos azonosság: $[a_k, (a_k^\dagger)^n] = n\, (a_k^\dagger)^{n-1}$

Van egy jó kis Fock-terünk, de a fő probléma: hogyan írjuk fel $\hat{H}$-t a Fock-térben?

Általában van egy 1-részecske és 2 részecske része:

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ ahol $\hat{H}_0 = \left(\sum_{i=1}^{n} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{ext}(\underline{r}_i) \right) \right)$

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} \sum_{j=1}^{n} v(\underline{r}_i, \underline{r}_j)$$

Field operator

$$\hat{\psi}(\underline{r},s) = \sum_i \varphi_i(\underline{r},s)\,\hat{a}_i$$

ahol $\{\varphi_i(\underline{r},s)\}_{i=1}^{\infty}$ TONR

A vicc, hogy φ_i-k bázisfüggetlen.

$$\hat{\psi}^+(\underline{r},s) = \sum_i \varphi_i^*(\underline{r},s)\,\hat{a}_i^+$$

Ezek már a Fock-téren hatnak bázisfüggetlen módon, szóval tök jó.

Konvenció: egyes alatti jelölésnél a felső a bozon, a lenti a fermion

pl.: $\left[\psi(\underline{r},s),\psi(\underline{r}',s')\right]_{\mp} = \psi(\underline{r},s)\psi(\underline{r}',s') \mp \psi(\underline{r}',s)\psi(\underline{r},s) = 0$

bizonyítása triviális

egyéb cserereláció: $\left[\psi^+(\underline{r},s),\psi^+(\underline{r}',s')\right]_{\mp} = 0$

$$\left[\psi(\underline{r},s),\psi^+(\underline{r}',s')\right]_{\mp} = \delta(\underline{r}-\underline{r}')\,\delta_{ss'}$$

STATFIZ

3. előadás (09.24.)

A múltkori bizonyítása: $[\Psi(\underline{r},s),\Psi^+(\underline{r}',s')]_\mp = \delta(\underline{r}-\underline{r}')\delta_{ss'}$

$$[\cdot\cdot]_\mp = \sum_{ij}[\varphi_i(\underline{r},s)a_i,\ \varphi_j^*(\underline{r}',s')a_j^+]_\mp = \sum_{ij}\varphi_i(\underline{r},s)\varphi_j^*(\underline{r}',s')\underbrace{[a_i,a_j^+]}_{\delta_{ij}} =$$

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

Csordás tanácsa: ha választani kell az első és a második kvantálás között, a legtöbbször egyszerűbb a második, mert ott csak egy simple Fock-space van.

Ehhez viszont ismerni kell az operátorok alakját:

Első kvantálásban egy tipikus Hamilton:

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_i\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(\underline{r}_i)\right)}_{\text{Egyrészecske tagok}} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{\substack{ij\\ i\neq j}} v(\underline{r}_i,\underline{r}_j)}_{\text{2 részecske tagok}}$$

Keressük az egyrészecske tagok másodkvantált alakját!

Ált. alak: $\hat{\Psi}(\underline{r},s) = \sum_i \varphi_i(\underline{r},s)\hat{a}_i$

Legyen egy új bázis: $\tilde{\varphi}_j(x) = \sum_k U_{jk}\varphi_k(x)$ ahol U unitér azaz $U^{-1}=U^+$

mivel $\langle x|a_k^+|0\rangle = \varphi_k(x)$, $\langle x|\tilde{a}_j^+|0\rangle = \tilde{\varphi}_j(x)$ ezért

$$\langle x|\tilde{a}_j^+|0\rangle = \tilde{\varphi}_j(x) = \sum_k U_{jk}\varphi_k(x) = \sum_k U_{jk}\langle x|a_k^+|0\rangle = \langle x|\sum_k U_{jk}a_k^+|0\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\tilde{a}_j^+ = \sum_k U_{jk}a_k^+}$$

$$\Rightarrow \boxed{\tilde{a}_j = \sum_k U_{jk}^* a_k}$$

A teljes operátor: $\Psi(\underline{r},s) = \tilde{\Psi}(x) = \sum_j \tilde{a}_j\tilde{\varphi}_j(x) = \sum_{jkl} U_{jk}^* a_k U_{jl}\varphi_l(x) =$

$$= \sum_{jkl} a_k \underbrace{U^{-1}_{kj}U_{jl}}_{\delta_{kl}}\varphi_l(x) = \sum_k a_k\varphi_k(x) = \Psi(\underline{r},s)$$

$\Rightarrow$ Ez a teljes operátor független a bázisválasztástól. Ezzel majd lehet játszadozni.

A teljes Hamilton: $H_0 = \sum_i H_0(i)$ (itt i az i. részecske koordinátáira utal)

Legyenek a s.é-k: $H_0(i)\,\phi_j(\underline{r}_i) = E_0^j\,\phi_j(r_i)$

és $\varphi(\underline{r},s) = \phi(r)\,\chi(s)$ kimért valószínűk

Emiatt $H\,\Psi_{\alpha_1\ldots\alpha_N}(\underline{r}_1\ldots\underline{r}_N) = \left(\sum_{j=1}^{N} E_0^j\right)\Psi_{\alpha_1\ldots\alpha_N}$

Tehát a Hamilton nem lehet más mint: $H_0 = \sum_{\alpha_i} E_0^{\alpha_i}\, a_{\alpha_i}^+ a_{\alpha_i} = \sum_i E_0^i\, a_i^+ a_i$

Belátjuk, hogy ez azonos az alábbival:

$$\sum_s \int \Psi_0^+(\underline{r},s)\, \underbrace{H(\underline{r})\,\Psi_0(\underline{r},s)}\, d^3\underline{r} \qquad \text{ahol} \quad H(\underline{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\underline{r}} + V(r)$$

$$\sum_i a_i^+ \varphi_j^*(r) \quad \sum_j H_0(\underline{r})\, a_j\, \varphi_j(\underline{r}) = \sum_j E_j\, a_j\, \varphi_j(\underline{r})$$

$$= \sum_{ij} E_j\, a_i^+ a_j \underbrace{\int \varphi_i^*(r)\, \varphi_j(r)\, d^3\underline{r}}_{\delta_{ij}} = \sum_i E_i\, a_i^+ a_i$$

$\square$

Állítás: Ez a képlet minden elsőkvantált operátorra működik:

ha $\hat{O} = \sum_i O_i(\underline{r}_i, s_i)$

akkor $\Updownarrow$

$$O = \sum_s \int \Psi^+(\underline{r},s)\, \hat{O}(\underline{r},s)\, \Psi(\underline{r},s)\, d^3r$$

Sűrűség:

Van egy $\Psi(x_1,\ldots x_n)$ hullámfv, mekkora a sűrűsége?

Azaz: Mekkora valószínűséggel találom meg egy adott pontban?

A sűrűségoperátor elsőkvantálva: $\hat{\rho}(\underline{r},s) = \sum_i \delta(\underline{r}-r_i)\,\delta_{s,s_i}$

és ebből $\rho(\underline{r}) = \langle \Psi | \hat{\rho}(\underline{r},s) | \Psi \rangle$ -vel számoljuk tényleges sűrűséget.

Mi van másodkvantálva?

Alkalmazom a képletet: $\hat{\rho}(\underline{r},s) = \Psi^+(\underline{r},s)\,\Psi(\underline{r},s)$

Külső pot: $V = \sum_i V(\underline{r}_i) = \int V(r) \sum_i \delta(\underline{r}-\underline{r}_i)\, d^3\underline{r} = \int V(r)\, \hat{\rho}(\underline{r})\, d^3\underline{r}$

ugyanígy bizonyítás a képletre...

Pair ~~Part~~ - correlation:

~~$\hat{P}(\underline{r}, s, \underline{r}', s')$: Annak a valószínűségét adja meg, hogy mekkora a valószínűsége, hogy adott helyen találunk részecskét, függetlenül attól, hogy melyik részecskét.~~

~~(Ennek 1 az integrálja, a sűrűségfunk. N.)~~

Def alapján:

$$\hat{P}(\underline{r}, s, \underline{r}', s) = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\,\delta_{s s_i}\,\delta(\underline{r}' - \underline{r}_j)\,\delta_{s' s_j}$$

A várható értéke: $P(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = \langle \Psi | \hat{P}(\underline{r}, s, \underline{r}', s') | \Psi \rangle$

Pair - kölcsönhatás:

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} v(\underline{r}_i, \underline{r}_j)$$

Első kvantálás:

$$\frac{1}{2}\sum_{s}\sum_{s'} \int v(\underline{r}, \underline{r}')\,\hat{P}(\underline{r}, s, \underline{r}', s')\,d^3\underline{r}\,d^3\underline{r}' = \frac{1}{2}\sum_{s}\sum_{s'} \int v(\underline{r}, \underline{r}') \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\,\delta_{s s_i}\,\delta(\underline{r}' - \underline{r}_j)\,\delta_{s' s_j}\,d^3\underline{r}\,d^3\underline{r}' =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} v(r_i, r_j)$$

A másodkvantáláshoz előbb a Pair correlationt átalakítjuk. A számolásban a $i \neq j$ feltétel nehézség, ezért azt elhagyjuk:

$$\hat{P}(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = \sum_{i,j} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\,\delta_{s s_i}\,\delta(\underline{r}' - \underline{r}_j)\,\delta_{s' s_j} - \sum_{i} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\,\delta_{s s_i}\,\delta(\underline{r}' - \underline{r}_i)\,\delta_{s' s_i} =$$

$$= \hat{\rho}(\underline{r}, s)\,\hat{\rho}(\underline{r}', s') - \delta(\underline{r} - \underline{r}')\,\delta_{s s'}\,\hat{\rho}(\underline{r}, s)$$

Ezt már át tudjuk írni másodkvantálásba:

$$\hat{P}(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = \hat{\rho}(\underline{r}, s)\,\hat{\rho}(\underline{r}', s') - \delta(\underline{r} - \underline{r}')\,\delta_{s s'}\,\hat{\rho}(\underline{r}, s) =$$

$$= \Psi^+(\underline{r}, s)\Psi(\underline{r}, s)\Psi^+(\underline{r}', s')\Psi(\underline{r}', s') - \delta(\underline{r} - \underline{r}')\,\delta_{s s'}\,\Psi^+(\underline{r}, s)\Psi(\underline{r}, s) =$$

$$= \pm\Psi^+(\underline{r}, s)\Psi^+(\underline{r}', s')\Psi(\underline{r}, s)\Psi(\underline{r}', s') = \Psi^+(\underline{r}, s)\Psi^+(\underline{r}', s')\Psi(\underline{r}', s')\Psi(\underline{r}, s)$$

Így a KH:

$$H_1 = \frac{1}{2}\sum_{s}\sum_{s'} \int v(\underline{r}, \underline{r}')\,\hat{P}(\underline{r}, s, \underline{r}', s')\,d^3\underline{r}'\,d^3\underline{r} =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{s}\sum_{s'} \int \Psi^+(\underline{r}, s)\Psi^+(\underline{r}', s')\,v(\underline{r}, \underline{r}')\,\Psi(\underline{r}', s')\Psi(\underline{r}, s)\,d^3\underline{r}'\,d^3\underline{r}$$

Néhány esetben a jelölés:

$$\boxed{H = \sum_{ij} \langle i | H_0 | j \rangle a_i^+ a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij | v | kl \rangle a_i^+ a_j^+ a_l a_k}$$

Adott problémára adott alakra kell hozni az egyenletet.

$$H_0 = \sum_s \int \Psi^+(\underline{r}, s) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r})\right) \Psi(\underline{r}, s)\, d^3\underline{r} = \sum_{ij} a_i^+ a_j \sum_s \int \varphi_i^*(r, s) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r})\right) \varphi_j(r, s)\, d^3\underline{r}$$

Adott problémánál φ_i-ket ismerjük, így ezek kiszámíthatók.

pl.: szabad részecskék síkhullám

harm. osc. -ról a harm osc. megoldásra

Így a felírt képletben a mátrixelemek:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle i | H_0 | j \rangle &= \sum_s \int \varphi_i^*(\underline{r}, s) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\underline{r}} + V(\underline{r})\right) \varphi_j(\underline{r}, s)\, d^3\underline{r} \\ \langle ij | H_1 | kl \rangle &= \sum_s \sum_{s'} \int \varphi_i^*(\underline{r}, s) \varphi_j^*(\underline{r}', s') v(\underline{r}, \underline{r}') \varphi_k(\underline{r}, s) \varphi_l(\underline{r}', s')\, d^3\underline{r}\, d^3\underline{r}' \end{aligned}}$$

Ha $\varphi_i(\underline{r}, s) = \phi_i(\underline{r}) \chi_{m_i}(s)$ alakú, úgy, hogy $\sum_{m_i} \chi_{m_i}(s) \chi_{m_i}(s') = \delta_{ss'}$

$$\sum_s \chi_{m_i}(s) \chi_{n_i}(s) = \delta_{m_i n_i}$$

akkor az alábbi mátrixelem:

$$\langle ij | H_1 | kl \rangle = \delta_{m_i m_k} \delta_{m_j m_l} \int \phi_i^*(\underline{r}) \phi_j^*(\underline{r}') v(\underline{r}, \underline{r}') \phi_k(\underline{r}) \phi_l(\underline{r}')\, d^3\underline{r}'\, d^3\underline{r}$$

STAT FIZ

4. előadás (10.01.)

Homogén rendszer

$$\hat{\psi}(\underline{r},s)=\sum_i \varphi_i(\underline{r},s)\,\hat{a}_i \qquad i=(\underline{k},m)$$

homogén = dobozba zárt rendszer

A megoldás a síkhullám: $\varphi_{\underline{k}m}=\frac{1}{\sqrt{V}}\,e^{i\underline{k}\underline{r}}\,\chi_m(s)$

A spinorok nagy-ja általában

ha $s=\frac{1}{2}$

$$\chi_m(s)=\begin{cases}\alpha(s)=\delta_{ms}\\ \beta(s)=\delta_{ms}\end{cases}$$

ez a nagy azért jó mert: $\sum_s \chi_{m_1}(s)\chi_{m_2}(s)=\delta_{m_1m_2}$

$$\sum_m \chi_m(s)\chi_m(s')=\delta_{ss'}$$

$$H_0=\sum_s\int\hat{\psi}^+(\underline{r},s)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)\hat{\psi}(\underline{r},s)\,d^3r=\sum_{\substack{k_1m_1\\k_2m_2}}\sum_s\int \hat{a}^+_{k_1m_1}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{-ik_1r}\chi_{m_1}(s)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)\frac{1}{\sqrt{V}}e^{ik_2r}\chi_{m_2}(s)\,\hat{a}_{k_2m_2}\,d^3r$$

$$=\sum_{\substack{k_1m_1\\k_2m_2}}\hat{a}^+_{k_1m_1}\hat{a}_{k_2m_2}\delta_{m_1m_2}\int\frac{1}{V}e^{-i\underline{k_1}\underline{r}}\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)e^{i\underline{k_2}\underline{r}}}_{\frac{\hbar^2k_2^2}{2m}e^{i\underline{k_2}\underline{r}}}d^3\underline{r}=$$

$$=\sum_{\substack{k_1m_1\\k_2m_2}}\hat{a}^+_{k_1m_1}\hat{a}_{k_2m_2}\delta_{m_1m_2}\frac{\hbar^2k_2^2}{2mV}\underbrace{\int e^{i(\underline{k_2}-\underline{k_1})\underline{r}}\,d^3\underline{r}}_{\delta_{k_1k_2}V}=\sum_{k_1m_1}\frac{\hbar^2k_1^2}{2m}\hat{a}^+_{k_1m_1}\hat{a}_{k_1m_1}=$$

$$\boxed{H_0=\sum_{ks}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\hat{a}^+_{ks}\hat{a}_{ks}}$$

Mi van kölcsönhatással:

első kvantálás: $H_1=\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\i\neq j}}v(\underline{r_i},\underline{r_j})$

második kvantálás:

$$H_1=\frac{1}{2}\sum_{ss'}\iint\psi^+(\underline{r}',s')\psi^+(\underline{r}'',s'')\,\underline{v}(\underline{r}',\underline{r}'')\,\psi(\underline{r}'',s'')\psi(\underline{r}',s')\,d^3\underline{r}''d^3\underline{r}'=$$

$$=\sum_{\substack{k_1m_1\\k_2m_2\\k_3m_3\\k_4m_4}}\frac{1}{2}\sum_{s's''}\int\frac{1}{\sqrt{V}}e^{-ik_1r'}\chi_{m_1}(s')\,a^+_{k_1m_1}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{-ik_2r''}\chi_{m_2}(s'')\,a^+_{k_2m_2}\,v(\underline{r}',\underline{r}'')\cdot$$

$$\cdot\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\underline{k_3}\underline{r}''}\,a_{k_3m_3}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{V}}}_{\chi_{m_3}(s'')}e^{i\underline{k_4}\underline{r}'}\chi_{m_4}(s')\,a_{k_4m_4}\,d^3r''d^3r'=$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1 m_1 \\ k_2 m_2 \\ k_3 m_3 \\ k_4 m_4}} a^+_{k_1 m_1} a^+_{k_2 m_2} a_{k_3 m_3} a_{k_4 m_4} \delta_{m_1 m_4} \delta_{m_2 m_3} \cdot I$$

ahol

$$I = \iint \frac{1}{V^2} e^{-i\underline{k}_1 \underline{r}'} e^{-i\underline{k}_2 \underline{r}''} e^{i\underline{k}_3 \underline{r}''} e^{i\underline{k}_4 \underline{r}'} v(\underline{r}', \underline{r}'')\, d^3\underline{r}''\, d^3\underline{r}'$$

áttérve: $\underline{r}' = \underline{R} + \frac{\underline{r}}{2}$ $\quad \underline{r}'' = \underline{R} - \frac{\underline{r}}{2}$ $\quad d^3\underline{r}'\, d^3\underline{r}'' = 1 \cdot d^3\underline{R}\, d^3\underline{r}$

$$I = \frac{1}{V^2} \int e^{-i(\underline{k}_1 + \underline{k}_2 - \underline{k}_3 - \underline{k}_4)\underline{R}}\, d^3\underline{R} \int v(r) e^{-\frac{i}{2}(\underline{k}_1 - \underline{k}_2 + \underline{k}_3 - \underline{k}_4)\underline{r}}\, d^3\underline{r} =$$

$$= \delta_{\underline{k}_1 + \underline{k}_2, \underline{k}_3 + \underline{k}_4} \cdot \frac{1}{V} \int v(\underline{r})\, e^{-i\underline{q}\underline{r}}\, d\underline{r}$$ ahol $\underline{k}_3 - \underline{k}_2 = \underline{k}_1 - \underline{k}_4 = \underline{q}$

$$= \frac{1}{V} \tilde{v}(\underline{q})$$

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} \sum_{s_1 s_2} \tilde{v}(\underline{q})\, a^+_{k_1 s_1} a^+_{k_2 s_2} a_{k_3 s_2} a_{k_4 s_1} \delta_{k_1 + k_2, k_3 + k_4} \frac{1}{V} =$$

$k_1 = k + q$

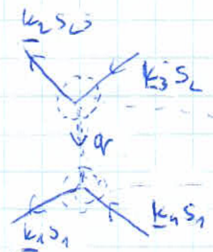
$k_2 = k' - q$

$k_3 = k'$

$k_4 = k$

$$\boxed{H_1 = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\underline{k}' \underline{k} \\ \underline{q}}} \sum_{s_1 s_2} \tilde{v}(\underline{q})\, a^+_{\underline{k}+\underline{q}\, s_1} a^+_{\underline{k}'-\underline{q}\, s_2} a_{\underline{k}' s_2} a_{\underline{k}_4 s_1}}$$

szemléletes jelentés:



$k_3 = q + k_2$

$k_4 + q = k_1$

Ez olyan kH, ami nem változtatja meg a spint, de ha olyannal találkozunk, ami nagy, azt [illegible] kell kezelni.

$\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N}$ $\quad$ $\hat{N}$: részecskeszám operátor

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$

$K = K_0 + K_1$ ahol $K_0 = H_0 - \mu N$

$K_1 = H_1$ $\qquad$ $\hat{N} = \sum_s \int \hat{\psi}^+(\underline{r}, s)\hat{\psi}(\underline{r}, s)\, d^3\underline{r}$

A nagykanonikus sokaság.

$Z_G = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{K}} = e^{-\beta \Omega(T,V,\mu)}$ $\quad$ ahol $\mathrm{Tr}\{\hat{A}\} = \sum_i \langle i|\hat{A}|i\rangle = \sum_{N_j q} \langle N_j|\hat{A}|N_j\rangle$ (???)

Egyébként: $\langle \hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_G \hat{A})$ ahol $\rho_G = \frac{e^{-\beta K}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta K}} = \frac{e^{-\beta \hat{K}}}{Z_G}$

Heisenberg-kép:

$$\hat{O}_K(\tau) = e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}\, \hat{O}_S\, e^{-\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}} \qquad (\hat{O}_K(\tau=0) = \hat{O}_S)$$

tehát $\hat{\psi}(\underline{r}, s, \tau) = e^{\frac{K\tau}{\hbar}}\hat{\psi}(\underline{r}, s) e^{-\frac{K\tau}{\hbar}}$

$\hat{\psi}^+(\underline{r}, s, \tau) = e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}\hat{\psi}^+(\underline{r}, s) e^{-\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}$ $\quad$ Vigyázat! $\psi(\underline{r}, s, \tau)^+ \neq \psi^+(\underline{r}, s, \tau)$

kommutációs relációk:

$[\psi(\underline{r}, s, \tau), \psi(\underline{r}', s', \tau)]_\mp$

$[\psi(\underline{r}, s, \tau), \psi^+(\underline{r}', s', \tau)]_\mp = \delta(\underline{r}-\underline{r}')\delta_{ss'}$

$[\psi^+(\underline{r}, s, \tau), \psi^+(\underline{r}', s', \tau)]_\mp = 0$ $\qquad$ τ és τ'-re nincs képlet.

Biz a 2.:

$$[\;]_\mp = \psi(\underline{r}, s, \tau)\psi^+(\underline{r}', s', \tau) - \psi^+(\underline{r}', s', \tau)\psi(\underline{r}, s, \tau) =$$

$$= e^{\frac{K\tau}{\hbar}}\psi(\underline{r}, s) e^{-\frac{K\tau}{\hbar}} e^{\frac{K\tau}{\hbar}} \psi^+(\underline{r}', s') e^{-\frac{K\tau}{\hbar}} \mp e^{\frac{K\tau}{\hbar}}\psi^+(\underline{r}', s', \tau) e^{-\frac{K\tau}{\hbar}} e^{\frac{K\tau}{\hbar}}\psi(\underline{r}, s, \tau) e^{-\frac{K\tau}{\hbar}} =$$

$$= e^{\frac{K\tau}{\hbar}} \underbrace{(\psi(\underline{r}, s)\psi^+(\underline{r}', s') \mp \psi^+(\underline{r}', s')\psi(\underline{r}, s))}_{\delta(\underline{r}'-\underline{r})\delta_{ss'}} e^{-\frac{K\tau}{\hbar}} = \delta(\underline{r}-\underline{r}')\delta_{ss'}$$

Mivel $[\hat{K}, e^{\frac{K\tau}{\hbar}}] = 0 \Rightarrow \hat{K}(\tau) = \hat{K}$

Ha $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$ (általában igen)

$[\hat{H}, \hat{K}] = 0 \Rightarrow \hat{H}(\tau) = \hat{H}$

Mi az operátor időfejlesztése:

$$\frac{d\hat{O}_H(\tau)}{d\tau} = \frac{d}{d\tau}\left(e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}\hat{O}_S e^{-\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}\right) = \frac{\hat{K}}{\hbar} e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}\hat{O}_S e^{-\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}} - e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}\hat{O}_S \frac{\hat{K}}{\hbar} e^{-\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}} =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\left[\hat{K}, \hat{O}_H(\tau)\right]$$

itt maradt még pár dolog a LPA-ról, de
majd videóval [illegible]

STAT FIZ

2. gyak (10.04.)

Első kvantálás

$$\hat{\rho}(\underline{r}, s) = \sum_{i=1}^{n} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\, \delta_{s s_i} \qquad \rho(\underline{r}, s) = \langle \psi | \hat{\rho}(\underline{r}, s) | \psi \rangle$$

kiszámolva: $$\rho(\underline{r}, s) = \sum_{s_1 \dots s_n} \int \psi^*(\underline{r}_1 s_1 \underline{r}_2 s_2 \dots \underline{r}_n s_n) \sum_{i=1}^{n} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\, \delta_{s s_i}\, \psi(\underline{r}_1 s_1 \dots \underline{r}_n s_n)\, d^3 r_1 \dots d^3 r_n =$$

= A s_i és $\underline{r}_i$ változók elnevezése az i. változóval $\underline{r}$ és s ennek. Mivel ezek nem vagy antiszimmetrikus átcserélve az első helyre, a maradék 2-től n-ig átcserélve.

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{s_2 \dots s_n} \int |\psi(\underline{r}, s, \underline{r}_2 s_2 \dots \underline{r}_n s_n)|^2\, d^3 \underline{r}_2 \dots d^3 r_n =$$

$$= N \cdot \sum_{s_2 \dots s_n} \int |\psi(\underline{r}, s, \underline{r}_2 s_2 \dots \underline{r}_n s_n)|^2\, d^3 \underline{r}_2 \dots d^3 \underline{r}_n$$

Kiszámolás: valószínűség

$$\hat{\rho}(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\, \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j)\, \delta_{s s_i}\, \delta_{s' s_j} \;\rightarrow\; \rho(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle$$

$$\rho(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sum_{s_1 \dots s_n} \int \psi^*(\underline{r}_1, s_1 \dots \underline{r}_n s_n)\, \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)\, \delta_{s s_i}\, \delta(\underline{r}' - \underline{r}_j)\, \delta_{s' s_j}\, \psi(\underline{r}_1 s_1 \dots \underline{r}_n s_n)\, d^3 \underline{r}_1 \dots d^3 \underline{r}_n =$$

$$= \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \sum_{s_3 \dots s_n} \int |\psi(\underline{r}, s, \underline{r}', s', \underline{r}_3, s_3 \dots \underline{r}_n, s_n)|^2\, d^3 \underline{r}_3 \dots d^3 \underline{r}_n =$$

$$= N(N-1) \sum_{s_3 \dots s_n} \int |\psi(\underline{r}, s, \underline{r}', s', \underline{r}_3, s_3 \dots \underline{r}_n, s_n)|^2\, d^3 \underline{r}_3 \dots d^3 \underline{r}_n$$

A sűrűség mátrix:

$$\rho(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = N \sum_{s_2 \dots s_n} \int \psi^*(\underline{r}, s, \underline{r}_2 s_2 \dots \underline{r}_n, s_n)\, \psi(\underline{r}', s', \underline{r}_2, s_2 \dots \underline{r}_n s_n)\, d^3 \underline{r}_2 \dots d^3 \underline{r}_n$$

a diagonális eleme:

$$\rho(\underline{r}, s, \underline{r}' = \underline{r}, s' = s) = \text{kiszámolva} = \rho(\underline{r}, s)$$

Számoljuk ki ezeket nem kH bozonok alapállapotára

$$\Psi(\underline{r}_1, s_1, \dots \underline{r}_n, s_n) = \varphi(\underline{r}_1, s_1)\,\varphi(\underline{r}_2, s_2) \cdots \varphi(\underline{r}_n, s_n)$$

a sűrűség: $\rho(\underline{r}, s) = N \sum\limits_{s_2 \dots s_n} \int |\varphi(\underline{r}, s)|^2 |\varphi(\underline{r}_2, s_2)|^2 \cdots |\varphi(\underline{r}_n, s_n)|^2 \, d^3\underline{r}_2 \cdots d^3\underline{r}_n =$

$= $ ha egy ilyen 1-re normált $= N \cdot |\varphi(\underline{r}, s)|^2$

a páreloszlás: $\rho(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = N(N-1) \sum\limits_{s_3 \dots s_n} \int |\varphi(\underline{r}, s)|^2 |\varphi(\underline{r}', s')|^2 |\varphi(\underline{r}_3, s_3)|^2 \cdots |\varphi(\underline{r}_n, s_n)|^2 \, d^3\underline{r}_3 \cdots d^3\underline{r}_n =$

$$= N(N-1)\, |\varphi(\underline{r}, s)|^2 |\varphi(\underline{r}', s')|^2 =$$

$$= \left(1 - \frac{1}{N}\right) \rho(\underline{r}, s)\, \rho(\underline{r}', s')$$

Számoljuk ki ezeket nem kH fermionokra:

ezt Slaterrel írjuk le:

$$\Psi(\underline{r}_1, s_1, \dots \underline{r}_n, s_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i_1=1}^{n} \cdots \sum_{i_n=1}^{n} \varepsilon_{i_1 \dots i_n}\, \varphi_{i_1}(\underline{r}_1, s_1) \cdots \varphi_{i_n}(\underline{r}_n, s_n)$$

néhány azonosság: $\sum\limits_{i_1=1}^{n} \cdots \sum\limits_{i_n=1}^{n} \varepsilon_{i_1 \dots i_n} \varepsilon_{i_1 \dots i_n} = n!$

$$\sum_{i_2=1}^{n} \cdots \sum_{i_n=1}^{n} \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} \varepsilon_{j_1 i_2 \dots i_n} = \delta_{i_1 j_1} (n-1)!$$

$$\sum_{i_3=1}^{n} \cdots \sum_{i_n=1}^{n} \varepsilon_{i_1 i_2 i_3 \dots i_n} \varepsilon_{j_1 j_2 i_3 \dots i_n} = (\delta_{i_1 j_1}\delta_{i_2 j_2} - \delta_{i_1 j_2}\delta_{i_2 j_1})\, (n-2)!$$

A sűrűség mátrix:

$$\rho(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = N \frac{1}{N!} \sum_{i_1 \dots i_n} \sum_{j_1 \dots j_n} \sum_{s_2 \dots s_n} \int \varepsilon_{i_1 \dots i_n} \varepsilon_{j_1 \dots j_n} \left(\varphi^*_{i_1}(\underline{r}, s)\, \varphi^*_{i_2}(\underline{r}_2, s_2) \cdots \varphi^*_{i_n}(\underline{r}_n, s_n)\right) \cdot$$
$$\cdot \left(\varphi_{j_1}(\underline{r}', s')\, \varphi_{j_2}(\underline{r}_2, s_2) \cdots \varphi_{j_n}(\underline{r}_n, s_n)\right) d^3\underline{r}_2 \cdots d^3 r_n =$$

$$= \sum_{i_1 \dots i_n} \sum_{j_1 \dots j_n} \frac{1}{(N-1)!} \varepsilon_{i_1 \dots i_n} \varepsilon_{j_1 \dots j_n} \varphi^*_{i_1}(\underline{r}, s)\, \varphi_{j_1}(\underline{r}', s')\, \delta_{i_2 j_2} \cdots \delta_{i_n j_n} =$$

$$= \frac{1}{(N-1)!} \sum_{i_1, j_1} \varphi^*_{i_1}(\underline{r}, s)\, \varphi_{j_1}(\underline{r}', s') \sum_{i_2 \dots i_n} \varepsilon_{i_1 \dots i_n} \varepsilon_{j_1 i_2 \dots i_n} = \frac{1}{(N-1)!} \sum_{i_1 j_1} \varphi^*_{i_1}(\underline{r}, s)\, \varphi_{j_1}(\underline{r}', s')\, \delta_{i_1 j_1} (N-1)! =$$

$= \sum\limits_{i_1=1}^{N} \varphi^*_{i_1}(\underline{r}, s)\, \varphi_{i_1}(\underline{r}', s') = $ mint az egyrészecske állapotokra

$= \sum\limits_{i} n_i\, \varphi^*_i(\underline{r}, s)\, \varphi_i(\underline{r}', s')$

A sűrűség pedig: $\rho(\underline{r}, s) = \sum\limits_{i=1}^{\infty} n_i |\varphi_i(\underline{r}, s)|^2$ minden állapot egyszeres [illegible]

STATFIZ

5. előadás (10.08.)

[Itt az első fél órában az előző előadás előjelhibáit javítottam ki.]

Green-fv. mégegy bevezetése (AKA termodinamikai Green-fv.)

$$G(\underline{r},s,\tau,\underline{r}',s',\tau') = -\langle T_\tau\left(\psi(\underline{r},s,\tau)\psi^+(\underline{r}',s',\tau')\right)\rangle =$$

Tau-rendező operátor.

$$= \begin{cases} -\langle \psi(\underline{r},s,\tau)\psi^+(\underline{r}',s',\tau')\rangle & \text{ha } \tau>\tau' \\ \mp\langle \psi^+(\underline{r}',s',\tau')\psi(\underline{r},s,\tau)\rangle & \text{ha } \tau'>\tau\end{cases}$$

A $\mp$ előjel azért, mert T_τ a fermionokra is megtartja a felcserélési relációt.

Nem folytonos, ha $\tau=\tau'$

- Azonos időkre:

$\tau'=\tau+\eta$ ahol η infinitezimálisan kicsi, pozitív idő.

$$\sum_s G(\underline{r},s,\tau,\underline{r},s,\underset{\tau+\eta}{\tau}) = \mp\sum_s \mathrm{Tr}\left[\frac{e^{-\beta\hat K}}{Z_G}\underset{e^{\frac{\hat K\tau}{\hbar}}\psi^+e^{-\frac{\hat K\tau}{\hbar}}}{\psi^+(\underline{r},s,\tau)}\underset{e^{\frac{\hat K\tau}{\hbar}}\psi e^{-\frac{\hat K\tau}{\hbar}}}{\psi(\underline{r},s,\tau)}\right] =$$

$$= \mp\sum_s \mathrm{Tr}\left[e^{-\frac{\hat K\tau}{\hbar}}\frac{e^{-\beta\hat K}}{Z_G}e^{\frac{\hat K\tau}{\hbar}}\psi^+(\underline{r},s)\psi(\underline{r},s)\right] = \mp\sum_s \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta\hat K}}{Z}\psi^+(\underline{r},s)\psi(\underline{r},s)\right) =$$

ez a kettő kommutál

$$= \mp\sum_s\langle\underbrace{\psi^+(\underline{r},s)\psi(\underline{r},s)}_{\hat n(\underline{r},s)}\rangle = \mp\langle\hat n(\underline{r})\rangle$$

Ez a sűrűségoperátor termodinamikai átlaga.

- A(z említett) Green-fv tulajdonságai

1) Ha $\hat H$ időfüggetlen, akkor csak az időkülönbségtől függ:

$$G(\underline{r},s,\tau,\underline{r}',s',\tau') = G(\underline{r},s,\tau-\tau',\underline{r}',s',0)\ \left(= G(\underline{r},s,\tau-\tau_0,\underline{r}',s',\tau'-\tau_0)\right)$$

jelölés innentől: $X=(\underline{r},s,\tau)$, $x=(\underline{r},s)$

bizonyítás: a) $\tau>\tau'$

$$G(\underline{r},s,\tau,\underline{r}',s',\tau') = -\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta\hat K}}{Z_G}e^{\frac{\hat K\tau}{\hbar}}\psi(x)\underbrace{e^{-\frac{\hat K\tau}{\hbar}}e^{\frac{\hat K\tau'}{\hbar}}}_{e^{\frac{\hat K(\tau'-\tau)}{\hbar}}}\psi^+(x')e^{-\frac{\hat K\tau'}{\hbar}}\right) = \text{mint az előbb}$$

$$= -\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta\hat K}}{Z_G}\underbrace{e^{\frac{\hat K(\tau-\tau')}{\hbar}}\psi(x)e^{-\frac{\hat K(\tau-\tau')}{\hbar}}}_{\psi(x,\underbrace{\tau-\tau'}_{>0})}\underbrace{\psi^+(x')}_{\psi^+(x',0)}\right) = G(\underline{r},s,\tau-\tau',\underline{r}',s',0)$$

b) ugyanígy kell bizonyítani

2)

Ha $-\beta\hbar < \tau < 0$

$$G(x,\tau,x',0) = \pm G(x,\tau+\beta\hbar,x',0)$$

bizonyítás: (jelölés: $G(x,\tau,x',0) \equiv G(x,x',\tau)$)

$$G(x,x',\tau) = -\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta K}}{Z_G}\underbrace{T_\tau\left(\psi(x,\tau)\psi^+(x',0)\right)}_{\pm\psi^+(x',0)\psi(x,\tau)}\right) = \mp\mathrm{Tr}\left(\psi(x,\tau)\underset{\uparrow\, e^{-\beta K}e^{\beta K}}{}\frac{e^{-\beta K}}{Z_G}\psi^+(x,0)\right) =$$

$$= \mp\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K}e^{\frac{K}{\hbar}(\tau+\beta\hbar)}\psi(x)e^{-\frac{K}{\hbar}(\tau+\beta\hbar)}\frac{1}{Z_G}\psi^+(x,0)\right) =$$

$$= \mp\mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta K}}{Z_G}\psi(x,\tau+\beta\hbar)\psi^+(x',0)\right) = \pm G(x,\tau+\beta\hbar,x',0)$$

Nem kölcsönható Green-fv (Avagy szabad Green-fv)

$K = K_0 + K_1$ volt, ha csak K_0-t exponenciálisan:

$$\langle\ldots\rangle_0 := \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta K_0}}{Z_0}\ldots\right)$$

$$K_0 = \sum_s\int\psi^+(\underline{r},s)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r}) - \mu\right)\psi(\underline{r},s)$$

A bázis: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\varphi_k(\underline{r},s) = \varepsilon_k\varphi(\underline{r},s)$

$$\psi(\underline{r},s) = \sum_k\varphi_k(\underline{r},s)\hat{a}_k$$

bázisban K_0 kifejtése:

$$K_0 = \sum_k(\varepsilon_k-\mu)a_k^+a_k$$

Tudjuk, hogy $\psi(\underline{r},s) = \psi(x) = \sum_k\varphi_k(\underline{r},s)a_k$

$\psi^+(\underline{r},s) = \psi^+(x) = \sum_k\varphi_k^*(x)a_k^+$

Mi lehet $\psi(x,\tau)$

$$\psi(x,\tau) = e^{\frac{K\tau}{\hbar}}\psi(x)e^{-\frac{K\tau}{\hbar}} = \sum_k\varphi_k(x)e^{\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}}a_k e^{-\frac{\hat{K}\tau}{\hbar}} = \sum_k\varphi_k(x)a_k(\tau)$$

$$\psi^+(x,\tau) = \sum_k\varphi_k^*(x)a_k^+(\tau)$$

Azt is tudjuk, hogy $[O_1O_2,O_3]_\mp = O_1[O_2,O_3]_\mp - [O_3,O_1]_\mp O_2$

$a_k(\tau)$ időfejlődése:

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}a_k(\tau) = [\hat{K}_0, a_k(\tau)] = e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}K_0e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}}e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}a_k(\tau)e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}} - e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}a_k(\tau)e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}}e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}K_0e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}} =$$

τ-független, így ezt $K_0(\tau)$-t mindig írhatom

$$= e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}[K_0,a_k]e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}} = e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}\left[\sum_{k'}(\varepsilon_{k'}-\mu)a_{k'}^+a_{k'},a_k\right]e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}}$$

$$= \sum_{k'} (\varepsilon_{k'} - \mu)\, e^{\frac{K_0 \tau}{\hbar}} \left[a_{k'}^+ a_{k'} , a_k \right] e^{-\frac{K_0 \tau}{\hbar}} = \sum_{k'} (\varepsilon_{k'} - \mu)\, e^{\frac{K_0 \tau}{\hbar}} \Big(a_{k'}^+ \underbrace{[a_{k'}, a_k]_+}_{\emptyset} - \underbrace{[a_k, a_{k'}^+]_+}_{\delta_{kk'}} a_{k'} \Big) e^{-\frac{K_0 \tau}{\hbar}} =$$

$$= -(\varepsilon_k - \mu)\, a_k(\tau)$$

HF:

ugyanezt nézni meg

$\frac{\hbar \partial}{\partial \tau} a_k^+(\tau)$ -re.

az eredmény: $\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} a_k^+(\tau) = (\varepsilon_k - \mu)\, a_k^+(\tau)$

STAT FIZ

3. gyak (10.11.)

Nagy T-jű sorfejtés

A BE/FD - függvény:
$$F_{\mp}(s,\alpha) = \frac{1}{\Gamma(s)}\int_0^\infty \frac{x^{s-1}\,dx}{e^{x+\alpha}\mp 1}$$

pl gyakran: $\int_0^\infty \frac{p^2}{2m}\frac{1}{e^{\beta(\frac{p^2}{2m}-\mu)}\mp 1}\, d^3p =$ $\qquad x=\frac{\beta p^2}{2m} \qquad \alpha=-\beta\mu$

nagy T-n a μ nagyon negatív, ezért $\alpha \gg 1$

Ekkor:
$$F_{\mp}(s,\alpha\gg 1) \approx \frac{1}{\Gamma(s)}\int_0^\infty \frac{x^{s-1}e^{-(x+\alpha)}}{1\mp e^{-(x+\alpha)}}\,dx = \sum_{n=0}^\infty \frac{(\pm 1)^n}{\Gamma(s)}\int_0^\infty x^{s-1}e^{-(n+1)(x+\alpha)}$$

$n=1$ tag a Boltzmann, de mivel, ha mindenhol a többi

$t := (n+1)x$

$$= \sum_{n=0}^\infty (\pm 1)^n \frac{e^{-(n+1)\alpha}}{\Gamma(s)(n+1)^s}\underbrace{\int_0^\infty t^{s-1}e^{-t}\,dt}_{\Gamma(s)} = \sum_{n=0}^\infty (\pm 1)^n \frac{e^{-(n+1)\alpha}}{(n+1)^s} = \qquad k := n+1$$

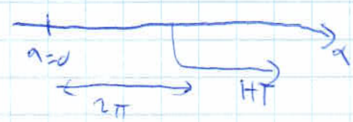
$$\underline{= (\pm 1)\sum_{k=1}^\infty (\pm 1)^k \frac{e^{-k\alpha}}{k^s}}$$

egészen konvergál

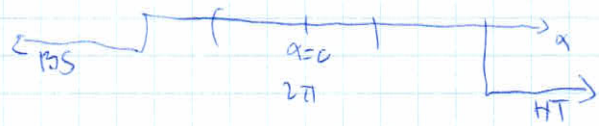
ha $\alpha < 0$, az említett szingularitás távolít α-0-tól egy

A nagy T-jű közelítés nagy alfánál van, és a két Σ-t kell néhány tagig közelíteni

BE:



FD:



Mit jelent, amikor közelítésnél $\alpha = -\infty$

Ha $T=0$ akkor μ egy pozitív véges érték (Fermi-energia).
Ekkor $-\beta\cdot\mu \to -\infty$, tehát ez az alacsony hőmérsékletű sorfejtés
(Bethe - Sommerfeld - sorfejtés)

Néhány tulajdonság:

$$F_-(s, \alpha = 0) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s} = \zeta(s)$$

$$F_+(s, \alpha = 0) = 1 - \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} - \frac{1}{4^s} + \dots = \left(1 + \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} + \dots\right) - 2\left(\frac{1}{2^s} + \frac{1}{4^s} + \frac{1}{6^s} + \dots\right) =$$

$$= \zeta(s) - 2\frac{1}{2^s}\left(\frac{1}{1^s} + \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} + \dots\right) = \zeta(s)\left(1 - 2^{1-s}\right)$$

$$\frac{\partial F_\mp}{\partial \alpha} = (\pm 1) \sum_{k=1}^{\infty} (\pm 1)^k \frac{(-k)\, e^{-k\alpha}}{k^s} = (\mp 1) \sum_{k=1}^{\infty} (\pm 1)^k \frac{e^{-k\alpha}}{k^{s-1}} = -F_\mp (s-1, \alpha)$$

J. Robinson, Phys Rev 678, 83 (1951):

ha s nem egész:

$$F(s, \alpha) = \Gamma(1-s)\alpha^{s-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \zeta(s-n)\alpha^n$$

STAT FIZ

6. előadás (10.15.)

$\hat{a}$ és $\hat{a}^+$ időfejlődését véve:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{a}_k(\tau) = [\hat{K}_0, \hat{a}_k(\tau)] = -(e_k - \mu)\, a_k(\tau)$$

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} a_k^+(\tau) = \dots = (e_k - \mu)\, a_k^+(\tau)$$

Mivel $a_k(\tau)$ def-je: $\quad a_k(\tau) = e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}\, a_k\, e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}}$

$$\Rightarrow \quad a_k(\tau=0) = a_k \quad \text{és} \quad a_k^+(\tau=0) = a_k^+$$

A diffegyenlet megoldásai:

$$\boxed{\begin{aligned} a_k(\tau) &= e^{-\frac{(e_k-\mu)\tau}{\hbar}}\, a_k \\ a_k^+(\tau) &= e^{\frac{(e_k-\mu)\tau}{\hbar}}\, a_k^+ \end{aligned}}$$

Ez visszatükrözi a nem kH rendszert, és ezt fogjuk majd használni.

A betöltöttségi számot nemkH esetben:

$$n_k^{(0)} = \langle a_k^+ a_k \rangle_{\underset{k=k_0}{\uparrow}} = \frac{1}{e^{\beta(e_k-\mu)} \mp 1}$$

$$1 = \frac{1}{Z_0} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0} \underbrace{(a_k a_k^+ \mp a_k^+ a_k)}_{}\right)$$

a kommrelációk miatt ez 1. $\Rightarrow$ ennek termodinamikai átlag 1.

$$\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0} a_k a_k^+\right) = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0} \underbrace{e^{\beta K_0} a_k^+ e^{-\beta K_0}}_{a_k^+(\tau=\beta\hbar) = e^{\beta(e_k-\mu)} a_k^+} a_k\right) = e^{\beta(e_k-\mu)} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0} a_k^+ a_k\right)$$

ezt felhasználva az előző egyenletben:

$$1 = \left(e^{\beta(e_k-\mu)} \mp 1\right) \frac{1}{Z_0} \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0} a_k^+ a_k\right) = \left(e^{\beta(e_k-\mu)} \mp 1\right) n_k^{(0)}$$

$$\Rightarrow \quad \underline{n_k^{(0)} = \frac{1}{e^{\beta(e_k-\mu)} \mp 1}} \qquad \text{Tehát így lehet ezt levezetni.}$$

További összefüggés: $\quad \langle a_k^+ a_{k'} \rangle = \delta_{kk'}\, n_k^{(0)}$

és: $\quad \sum_{k_1} \dots \sum_{k} \langle n_1 \dots n_k | \frac{e^{-\beta K_0} a_k^+ a_{k'}}{Z_0} | n_1 \dots n_k \rangle =$ Az egyik ide, a másikat oda hattatva látszik, hogy az eredmény $\delta_{kk'}$

$$\langle a_k a_{k'}^+ \mp a_{k'}^+ a_k \rangle_0 = \delta_{kk'}$$

$$\langle a_k a_{k'}^+ \rangle_0 = (1 \pm n_k^{(0)})\, \delta_{kk'}$$

Számoljuk ki a nemkH Green-fv-t! Ez lesz az alapja mindennek (megint)

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

$$G_0(\underline{r}, s, \tau, \underline{r}', s', \tau') = -\langle T_\tau (\psi(\underline{r}, s, \tau)\, \psi^\dagger(\underline{r}', s', \tau'))\rangle_0$$

def alapján:

$$\psi(\underline{r}, s, \tau) = e^{\frac{K\tau}{\hbar}} \underbrace{\psi(\underline{r}, s)}_{\sum_k \varphi_k(\underline{r}, s)\, a_k} e^{-\frac{K\tau}{\hbar}} = \sum_k \varphi_k(\underline{r}, s)\, a_k(\tau) = \sum_k \varphi_k(\underline{r}, s)\, e^{-\frac{(\varepsilon_k - \mu)\tau}{\hbar}} a_k$$

$$\psi^\dagger(\underline{r}, s, \tau) = \text{u.a.} = \sum_k \varphi_k^*(\underline{r}, s)\, e^{\frac{(\varepsilon_k - \mu)\tau}{\hbar}} a_k^\dagger$$

$$\boxed{G_0(x, \tau, x', \tau')} = -\sum_{kk'} \varphi_k(x)\, \varphi_{k'}^*(x')\, e^{-\frac{(\varepsilon_k - \mu)\tau}{\hbar}}\, e^{\frac{(\varepsilon_{k'} - \mu)\tau'}{\hbar}} \overbrace{\langle a_k a_{k'}^\dagger \rangle_0}^{(1 \pm n_k^{(0)})\delta_{kk'}} =$$

$$\boxed{= -\sum_k \varphi_k(x)\, \varphi_k^*(x')\, e^{-\frac{(\varepsilon_k - \mu)(\tau - \tau')}{\hbar}} (1 \pm n_k^{(0)}) \qquad (\text{ha } \tau > \tau')}$$

Mi van, ha $\tau < \tau'$? Hasonló számítás csak az elején ki kell cserélni a dolgokat.

$$\boxed{G_0(x, \tau, x', \tau') = \mp \sum_k \varphi_k(x)\, \varphi_k^*(x')\, e^{-\frac{(\varepsilon_k - \mu)(\tau - \tau')}{\hbar}}\, n_k^{(0)} \qquad (\text{ha } \tau < \tau')}$$

Összevonva:

$$G_0(x, \tau, x', \tau') = -\sum_k \varphi_k(x)\, \varphi_k^*(x')\, e^{-\frac{(\varepsilon_k - \mu)(\tau - \tau')}{\hbar}} \begin{cases} (1 \pm n_k^{(0)}) & \tau > \tau' \\ \pm n_k^{(0)} & \tau < \tau' \end{cases}$$

$\Rightarrow$ G_0 nem folytonos, ha $\tau' \to \tau$

Hogy számoljuk ki a várható mennyiségeket?

Az általános Green-fv,

nagykan. K

$$G(x,\tau,x',\tau') = \langle T_\tau\, \psi(\cdot\cdot)\psi^+(\cdot)\rangle = \frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K}\cdots\right)$$

Tudjuk, hogy

$$N = \sum_s \int \langle \psi^+(\underline{r},s)\psi(\underline{r},s)\rangle\, d^3\underline{r} = \sum_s \int \langle \psi^+(\underline{r},s,\tau)\psi(\underline{r},s,\tau)\rangle\, d^3\underline{r} =$$

ez független τ-tól, de ha mi konkrét értéket választunk, az jó lesz.

$$= \mp \sum_s \int \lim_{r'\to r}\lim_{s'\to s}\lim_{\tau'\to\tau+\eta} G(\underline{r},s,\tau,\underline{r}',s',\tau')\, d^3\underline{r}$$

ez már egy várható mennyiség.

A kinetikus energia:

$$\langle \hat{T}\rangle = \left\langle \sum_s \int \psi^+(\underline{r},s)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)\psi(\underline{r},s)\, d^3\underline{r}\right\rangle = \mp\sum_s \int \lim_{r'\to r}\lim_{s'\to s}\lim_{\tau'\to\tau+\eta}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\right) G(\underline{r},s,\tau,\underline{r}',s',\tau')\, d^3\underline{r}$$

miért így? A Δ r-re hat ezért ψ-t differenciálja, nem ψ^+-t. Miután ez hat, a limeszek elvégzése, hogy a kívánt integrált kapjuk.

ugyanígy a potenciál:

$$\langle \hat{V}\rangle = \left\langle \sum_s \int \psi^+(\underline{r},s)\, V(\underline{r})\, \psi(\underline{r},s)\, d^3\underline{r}\right\rangle = \mp\sum_s \int \lim_{r'\to r}\lim_{s'\to s}\lim_{\tau'\to\tau+\eta} V(\underline{r})\, G(\underline{r},s,\tau,\underline{r}',s',\tau')\, d^3\underline{r}$$

A kH energiára limit bonyolultabb, de lehetséges:

$$\langle I\rangle = \left\langle \sum_{ss'} \iint \psi^+(\underline{r},s)\psi^+(\underline{r}',s')\, v(\underline{r},\underline{r}')\, \psi(\underline{r}',s')\psi(\underline{r},s)\, d^3\underline{r}'\, d^3\underline{r}\right\rangle$$

ez nagyon égi, de számít az alábbit:

$$\hbar\frac{\partial\psi(\underline{r},s,\tau)}{\partial\tau} = [\hat{K},\psi(\underline{r},s,\tau)] = [\hat{K}_0,\psi(\underline{r},s,\tau)] + [\hat{K}_1,\psi(\underline{r},s,\tau)]$$

Állítás:
$$[\hat{K}_0,\psi(\underline{r},s,\tau)] = -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\underline{r}) - \mu\right)\psi(\underline{r},s,\tau)$$

$$[\hat{K}_1,\psi(\underline{r},s,\tau)] = -\sum_{s'}\int \psi^+(\underline{r}',s',\tau)\, v(\underline{r},\underline{r}')\, \psi(\underline{r}',s',\tau)\psi(\underline{r},s,\tau)\, d^3\underline{r}'$$

Bizonyítás: (feltesszük, hogy $v(\underline{r},\underline{r}') = v(\underline{r}',\underline{r})$)

$$[K_0,\psi(\underline{r},s,\tau)] = \left[\sum_{s'}\int \psi^+(\underline{r}',s',\tau)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r'} + V(\underline{r}') - \mu\right)\psi(\underline{r}',s',\tau),\ \psi(\underline{r},s,\tau)\right] =$$

$$\left[\,[O_1O_2,O_3]_- = O_1[O_2,O_3]_\mp - [O_3,O_1]_\mp O_2\,\right]$$

a miért $[\psi,\psi]$ kommutál, elég csak a tagot, ahol $[\psi^+,\psi]$ szerepel.
mert $\tau=\tau'$

$$= -\sum_s \int \underbrace{\left[\psi(\underline{r},s,\tau), \psi^+(\underline{r}',s',\tau)\right]_\mp}_{\delta_{\underline{r}\underline{r}'}\delta_{ss'}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r'} + V(\underline{r}') - \mu\right)\psi(\underline{r}',s',\tau)\, d^3\underline{r}' =$$

$$= -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + V(\underline{r}) - \mu\right)\psi(\underline{r},s,\tau)$$ ezt akartuk.

$$\left[2\hat{K}_1, \psi(\underline{r},s,\tau)\right] = \left[\sum_{ss'}\iint \psi^+(\underline{r}',s',\tau)\psi^+(\underline{r}'',s'',\tau)\, v(\underline{r}',\underline{r}'')\,\psi(\underline{r}'',s'',\tau)\,\psi(\underline{r}',s',\tau)\, d^3r'\, d^3r'', \psi(\underline{r},s,\tau)\right] =$$

$$\left[\left[O_1, O_2O_3\right]_\mp = \left[O_1, O_2\right]_\mp O_3 - O_2\left[O_3, O_1\right]_\mp\right]$$

$$= -\sum_{s's''}\iint \left[\psi(\underline{r},s,\tau), \psi^+(\underline{r}',s',\tau)\psi^+(\underline{r}'',s'',\tau)\right] v(\underline{r}',\underline{r}'')\,\psi(\underline{r}'',s'',\tau)\,\psi(\underline{r}',s',\tau)\, d^3\underline{r}''\, d^3\underline{r}' = *$$

$$\left[\psi(\underline{r},s,\tau), \psi^+(\underline{r}',s',\tau)\psi^+(\underline{r}'',s'',\tau)\right] = \left[\psi(\underline{r},s,\tau)\psi^+(\underline{r}',s',\tau)\right]\psi^+(\underline{r}'',s'',\tau) -$$
$$- \psi^+(\underline{r}',s',\tau)\left[\psi^+(\underline{r}'',s'',\tau)\psi(\underline{r},s,\tau)\right] =$$

$$= \delta(\underline{r}-\underline{r}')\delta_{ss'}\,\psi^+(\underline{r}'',s'',\tau) \pm \delta(\underline{r}-\underline{r}'')\delta_{ss''}\,\psi^+(\underline{r}',s',\tau)$$

$$* = -\sum_{s''}\int \psi^+(\underline{r}'',s'',\tau)\, v(\underline{r},\underline{r}'')\,\psi(\underline{r}'',s'',\tau)\,\psi(\underline{r},s,\tau)\, d^3\underline{r}''$$
$$-\sum_{s'}\int \psi^+(\underline{r}',s',\tau)\, v(\underline{r}',\underline{r})\,\psi(\underline{r},s,\tau)\,\psi(\underline{r}',s',\tau)\, d^3\underline{r}' =$$

A két tag u.a. ha
$v(\underline{r},\underline{r}') = v(\underline{r}',\underline{r})$ és
mivel ψ és ψ kommutál azonos τ-ra.

$$= -2\sum_{s'}\int \psi^+(\underline{r}',s',\tau)\, v(\underline{r},\underline{r}')\,\psi(\underline{r}',s',\tau)\,\psi(\underline{r},s,\tau)\, d^3\underline{r}'$$

itt is ezt akartuk

$\square$

A múlt óráról

$$0 \leq \alpha \leq 2\pi$$

$$F_-(s,\alpha) = \Gamma(1-s)\,\alpha^{s-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \zeta(s-n)\,\alpha^n$$

Hasznos azonosságok a gamma fv-re és a zetára:

1) $\Gamma(s)\Gamma(1-s) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)}$

2) $\zeta(s) = 2^s \pi^{s-1} \sin\left(\frac{\pi s}{2}\right) \Gamma(1-s)\,\zeta(1-s)$

Ebből: $\zeta(-2n) = \sqcup \sin(n\pi)\,(2n)!\, \cup = 0$

3) $\zeta(s) \cong \frac{1}{s-1}$ $\quad s \approx 1$-re $\quad$ Ez a pólus az egyetlen szingularitás a komplex síkon, és a reziduum

$$\operatorname*{Res}_{s=1} \zeta(s) = 1$$

Mi van, ha $F_-(s=m,\alpha)$-t akarjuk, ahol m egész?

A szumma az $n = m-1$ tagnál problémát okoz.

TSITF (The statement is the following):

$$F_-(m,\alpha) = \frac{(-1)^{m-1}\,\alpha^{m-1}}{(m-1)!}\left[-\log\alpha + \begin{Bmatrix} 0 & \text{ha } m=1 \\ \sum_{k=1}^{m-1}\frac{1}{k} & m>1 \end{Bmatrix}\right] + \sum_{\substack{n=0\\ n\neq m}}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!}\zeta(m-n)\,\alpha^n$$

Szintén múltkorról:

$$F_+(s,\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)}{n!}\left(1-2^{n+1-s}\right)\zeta(s-n)\,\alpha^n \qquad |\alpha| < 2\pi$$

Itt a pólust egyszerre szorozzuk 0-val, így a kettő együtt véges.

Termodinamikai potenciálok

$$E = TS - pV + \mu N$$
$$dE = TdS - pdV + \mu dN$$

Legendre-trafó: $F = E - TS$

$G = E - TS + pV$

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

$$d\Omega = dE - TdS - SdT - \mu dN - Nd\mu = -SdT - pdV - Nd\mu$$

$$\Rightarrow \quad S = -\left.\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right|_{\mu,V} \qquad p = -\left.\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right|_{T,\mu} \qquad N = -\left.\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right|_{T,V}$$

Nem KH rendszerekre: (Ω_0-ban a 0 a nem KH.-ra utal)

$$e^{-\beta\Omega_0} = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{K}_0}\right) \qquad \text{ahol} \quad \hat{K}_0 = \sum_{\underline{k},s} (\varepsilon_k - \mu)\, a^+_{ks} a_{ks}$$

Spintelen bozonok esetén (a spines hasonlóan HF ez):

$$\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}\right) = \sum_{n_1 \dots n_i \dots} \langle n_1 \dots n_i \dots | e^{-\beta(\varepsilon_1-\mu)a_1^+a_1} e^{-\beta(\varepsilon_2-\mu)a_2^+a_2} \dots | n_1 \dots n_i \dots \rangle =$$

mivel az egy részecskés: $|n_1 \dots n_i \dots\rangle = |n_1\rangle|n_2\rangle \dots |n_i\rangle \dots$

-szétcsatolható

$$= \underbrace{\left(\sum_{n_1=0}^{\infty} \langle n_1 | e^{-\beta(\varepsilon_1-\mu)a_1^+a_1} | n_1\rangle\right)}_{\text{mivel az operátor diagonális}} \left(\sum_{n_2=0}^{\infty} \langle n_2 | e^{-\beta(\varepsilon_2-\mu)a_2^+a_2} | n_2\rangle\right) \dots =$$

$$e^{-n_1\beta(\varepsilon_1-\mu_1)} \underbrace{\langle n_1 | n\rangle}_{=1}$$

$$= \prod_{i=1}^{\infty}\left(\sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-n_i\beta(\varepsilon_i-\mu)}\right) = \prod_{i=1}^{\infty} \frac{1}{1-e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}}$$

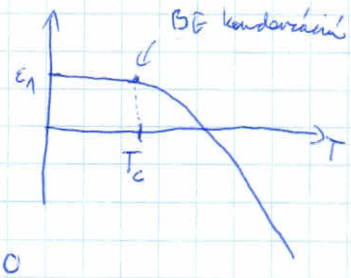
$$\boxed{\Omega_0 = \frac{-1}{\beta}\ln\left(\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{K}_0}\right)\right) = k_BT\sum_{i=1}^{\infty}\ln\left(1-e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}\right)}$$

[$\sum_i$ jelentése: $\sum_i = \sum_{\underline{k}} = \left(\frac{V}{2\pi}\right)^3\int d\underline{k}$]

$$\Rightarrow N = -\left.\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu}\right|_{T,V} = k_BT\sum_i \frac{e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}}{1-e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)}}\cdot\beta = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1}$$

ez már a jól ismert formula.

Adott N esetén a $\mu(T)$ viszony:



szabad bozongáz rendszer esetén $\varepsilon_1 = 0$

DE pl. 3D HO esetén: $\varepsilon_1 = \frac{\hbar(\omega_1+\omega_2+\omega_3)}{2}$

STATFIZ

7. előadás (10.22.)

$$\hbar \frac{\partial \psi(r,s,\tau)}{\partial \tau} = [K_0 + K_1, \psi(r,s,\tau)] =$$

$$= -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) - \mu\right)\psi(r,s,\tau) - \sum_{s''}\int \psi^+(r'',s'',\tau)\, v(r,r'')\, \psi(r'',s'',\tau)\, \psi(r,s,\tau)\, d^3r''$$

Ebből:

$$\hbar \left\langle \psi^+(r',s',\tau)\frac{\partial \psi(r,s,\tau)}{\partial \tau}\right\rangle = -\left\langle \psi^+(r',s',\tau)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) - \mu\right)\psi(r,s,\tau)\right\rangle -$$

$$-\left\langle \sum_{s''}\int \psi^+(r',s',\tau)\psi^+(r'',s'',\tau)\, v(r,r'')\, \psi(r'',s'',\tau)\psi(r,s,\tau)\, d^3r''\right\rangle$$

A K_1:
$$\sum_{s s''}\frac{1}{2}\int \psi^+(r,s,\tau)\psi^+(r'',s'',\tau)\, v(r,r'')\, \psi(r'',s'',\tau)\, \psi(r,s,\tau)\, d^3r''\, d^3r$$

ebből ehhez egy $r' \to r$ átmenet kéne, meg $\int d^3r$-re.

Így kapjuk:

$$\langle K_1\rangle = \mp\frac{1}{2}\sum_s \int \lim_{r'\to r}\lim_{s'\to s}\lim_{\tau'\to\tau+\eta}\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - V(r) + \mu\right] G(r,s,\tau, r',s',\tau')\, d^3r$$

Tehát a rendszer alapállapota:

$$E = \langle T + V + \underbrace{H_1}_{K_1}\rangle = \mp\frac{1}{2}\sum_s\int \lim_{r'\to r}\lim_{s'\to s}\lim_{\tau'\to\tau+\eta}\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) + \mu\right] G(r',s',\tau', r,s,\tau)\, d^3r$$

A Ω számolható úgy ezért számoljuk, hogy $H(\lambda) = H_0 + \lambda H_1$

és $d\lambda$ esetén $d\Omega$ lesz, és ezt adogatjuk össze.

$$Z_G^{(\lambda)} = e^{-\beta\Omega_\lambda} = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K(\lambda)}\right) \Rightarrow \Omega_\lambda = -k_B T \ln \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K(\lambda)}\right)$$

$$\frac{d\Omega_\lambda}{d\lambda} = -k_B T \frac{1}{Z_G^{(\lambda)}}\cdot\frac{dZ_G^{(\lambda)}}{d\lambda}$$ ezt kell majd integrálni

$$Z_G^\lambda = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}\mathrm{Tr}\left((K_0 + \lambda K_1)^n\right)$$

Általánosan $\frac{d}{d\lambda}(A(\lambda)A(\lambda)\cdots A(\lambda)) = A'AA\cdots A + AA'A\cdots A + \ldots$
$\ldots AAA\cdots A'A + AA\cdots AA'$.

de mivel itt minden a Trace-en van, ezért felcserélhetőek a sorrendek:

$$\frac{dZ_G^\lambda}{d\lambda} = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}\cdot n\, \mathrm{Tr}\left(K_1 (K(\lambda))^{n-1}\right) = (-\beta)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\beta)^{n-1}}{(n-1)!}\mathrm{Tr}\left((K(\lambda))^{n-1}\cdot K_1\right) =$$

$$= (-\beta)\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K(\lambda)}\cdot K_1\right)$$

$$\Rightarrow \frac{d\Omega_\lambda}{d\lambda} = \frac{1}{Z_G^{(\lambda)}}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K(\lambda)}K_1\right) = \frac{1}{\lambda}\langle \lambda K_1\rangle_\lambda$$

Tehát: $$\frac{d\Omega_\lambda}{d\lambda} = \frac{1}{\lambda}(\mp 1)\frac{1}{2}\sum_s\int \lim_{r'\to r}\lim_{s'\to s}\lim_{\tau'\to\tau+\eta}\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - V(r) + \mu\right] G^\lambda(r',s',\tau', r,s,\tau)\, d^3r$$

Így a nagy kanonikus potenciál alakja:

$$\Omega(T,V,\mu) = \Omega_0(T,V,\mu) \mp \int_0^1 \frac{1}{\lambda}\frac{1}{2}\sum_s \int \lim_{r'\to r}\lim_{s'\to s}\lim_{\tau'\to\tau+\eta}\left[-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - V(\underline{r})+\mu\right] G^{\lambda}(\underline{r}',s',\tau',\underline{r},s,\tau)\, d^3\underline{r}\, d\lambda$$

Perturbáció kezelése a Green-fv-nel:

$$K = K_0 + K_1 \qquad (\text{általában } [K_0, K_1] \neq 0)$$

Heisenberg-kép: $O_H(\tau) = e^{\frac{K\tau}{\hbar}} O_S e^{-\frac{K\tau}{\hbar}}$

kölcs.-kép: $O_I(\tau) = e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}} O_S e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}}$

$$\frac{dO_I(\tau)}{d\tau} = e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}} \underbrace{\frac{K_0}{\hbar}}_{e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}}e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}} O_S e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}} - e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}} O_S \underbrace{\frac{K_0}{\hbar}}_{e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}}e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}} e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}} \to \frac{K_0(\tau)O_I(\tau)}{\hbar} - \frac{O_I(\tau)K_0(\tau)}{\hbar} =$$

$$\Rightarrow \hbar\frac{\partial O_I(\tau)}{\partial\tau} = [K_{0I}(\tau), O_I(\tau)]$$

$$O_H(\tau) = e^{\frac{K\tau}{\hbar}} O_S e^{-\frac{K\tau}{\hbar}} = e^{\frac{K\tau}{\hbar}} e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}} O_I e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}} e^{-\frac{K\tau}{\hbar}} = U(0,\tau)\, O_I(\tau)\, U(\tau,0)$$

ahol $U(\tau_1,\tau_2) = e^{\frac{K_0\tau_1}{\hbar}} e^{-\frac{K(\tau_1-\tau_2)}{\hbar}} e^{-\frac{K_0\tau_2}{\hbar}}$:

U tulajdonságai:

- $U(\tau_1,\tau_2)\,U(\tau_2,\tau_3) = U(\tau_1,\tau_3)$ (lásd [illegible])
- $U(\tau_1,\tau_1) = 1$
- $U(\tau_1,\tau_2)\,U(\tau_2,\tau_1) = 1 \Rightarrow U(\tau_1,\tau_2)^{-1} = U(\tau_2,\tau_1)$

$\Rightarrow$ U-k csoportot alkotnak.

$$\hbar\frac{\partial U(\tau,\tau')}{\partial\tau} = \hbar\frac{\partial}{\partial\tau}\left(e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}} e^{-\frac{K(\tau-\tau')}{\hbar}} e^{-\frac{K_0\tau'}{\hbar}}\right) = \hbar\left(e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}\frac{K_0}{\hbar} e^{-\frac{K(\tau-\tau')}{\hbar}} e^{-\frac{K_0\tau'}{\hbar}} - e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}\frac{K}{\hbar} e^{-\frac{K(\tau-\tau')}{\hbar}} e^{-\frac{K_0\tau'}{\hbar}}\right) =$$

$$= -e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}} \underbrace{K_1}_{e^{-\frac{K_0\tau}{\hbar}}e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}} e^{-\frac{K(\tau-\tau')}{\hbar}} e^{-\frac{K_0\tau'}{\hbar}} = -K_{1I}(\tau)\, U(\tau,\tau')$$

az időfüggés megoldása:

$$U(\tau,\tau') = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-1}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_{\tau_i=\tau'}^{\tau} T_\tau\left(K_{1I}(\tau_1)K_{1I}(\tau_2)\cdots K_{1I}(\tau_n)\right) d\tau_1\, d\tau_2\cdots d\tau_n$$

$\forall i$-re.

Ellenőrzés!

$$\frac{dU(\tau,\tau')}{d\tau} = \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\left(\int_{\tau'}^{\tau} T_\tau\left(K_{1I}(\tau)\cdot K_{1I}(\tau_2)\cdots K_{1I}(\tau_n)\right) d\tau_2\cdots d\tau_n + \cdots\right.$$

$$\left.\cdots\int_{\tau'}^{\tau} T_\tau\left(K_{1I}(\tau_1)\cdots K_{1I}(\tau_{n-1})K_{1I}(\tau)\right) d\tau_1\cdots d\tau_{n-1}\right) =$$

Mivel τ a felső határ, nagyobb az összes τ_i-nél, mint T_τ azt mindig előre így előhozható ki lehet venni az integrál elé. Így n db $n-1$ változós álló integrál marad. Ezeket átnevezve:

$$= K_{1_I}(\tau)\left(-\frac{1}{\hbar}\right)\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^{n-1}\frac{1}{n!}\cdot n\int_{\substack{\tau_i=\tau'\\ \forall i}}^{\tau} T_\tau\left(K_{1_I}(\tau_1)\,K_{1_I}(\tau_2)\ldots K_{1_I}(\tau_{n-1})\right)d\tau_1\ldots d\tau_{n-1} =$$

$$= -\frac{K_{1_I}(\tau)}{\hbar}\,U(\tau,\tau')$$

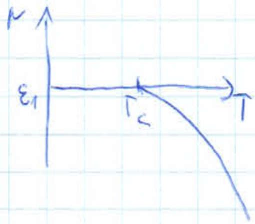
STAT FIZ

5. gyak (10.25.)

Bozon Ω-ja:

$$\Omega_0 = k_B T \sum_i \ln\left(1 - e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}\right) \qquad i = (\underline{k}, s)$$

$$N = \left(\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu}\right)_{T,V} = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1} \qquad \text{ha } T > T_c$$



T_c alatt:

$$N = N_0 + \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1} \qquad \text{ahol } \mu = \varepsilon_1$$

Spec: nem KH bozonok homogén dobozban:

$$\sum \to \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3\underline{k} \qquad \varepsilon_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Omega_0 = k_B T\, V \int \ln\left(1-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)}\right)\frac{d^3k}{(2\pi)^3} \qquad T>T_c$$

$$= k_BT\frac{V}{(2\pi)^3}4\pi\int_0^\infty \ln\left(1-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)}\right)k^2\,dk =$$

$$= k_BT\frac{V}{2\pi^2}\left(\left[\frac{k^3}{3}\underbrace{\ln\left(1-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)}\right)}_{\approx -e^{-\beta(\dots)} \Rightarrow [\,]_0^\infty = 0}\right]_0^\infty - \int_0^\infty \frac{-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)}}{1-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)}}\left(\beta\frac{\hbar^2}{2m}2k\right)\frac{k^3}{3}\,dk\right)$$

$$= \frac{V}{6\pi}\frac{\hbar^2}{m}\int_0^\infty\frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)}-1}k^4\,dk = \qquad \alpha = -\frac{\mu}{k_BT}, \quad x = \frac{\hbar^2k^2}{2mk_BT}$$

$$= \sim T^{5/2}$$

Ezt már lehet elemezgetni...

A HF plusz feladatban ugyanúgy kell majd csinálni, csak más lesz minden érték és T_c-t ott kell venni, ahol $\mu = \varepsilon_1$, csak ε_1 is más lesz.

A 3D-s oszcillátor $\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega_x\left(n_x+\frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y\left(n_y+\frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z\left(n_z+\frac{1}{2}\right)$

itt a $\sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1}$-ben az i az összes (n_1,n_2,n_3)-n végigmegy: $\sum_{n_x n_y n_z}\frac{1}{e^{\beta(\hbar\underline{\omega}\,\underline{n}+\varepsilon_1-\mu)}-1}$

elvileg ez is visszavezethető $F_\mp(\alpha,s)$-re. Itt is lehet a $\sum_{\underline{n}} \to \int d\underline{n}$-nel helyettesíteni.

Legyenek a, b, c, d fermionikus v. bozonikus operátorok.

Kérdés: hogy lehet az $abcd$ szorzatot $bcda$-vá?

$$abcd = abcd \mp bacd \pm bacd = [a,b]_{\mp} cd \pm bacd - bcad + bcad =$$

$$= [a,b]_{\mp} cd \pm b[a,c]_{\mp} d + bcad = [a,b]_{\mp} cd \pm b[a,c]_{\mp} d + bc[a,d]_{\mp} \pm bcda$$

Vezessük be:

$$\alpha_j = \begin{cases} a_j \\ a_j^+ \end{cases} \quad , \quad \hat{\rho}_{G0} = \frac{e^{-\beta K_0}}{Z_{G0}} \quad , \quad K_0 = \sum_i (\varepsilon_i - \mu) a_i^+ a_i$$

$$\mathrm{Tr}\Big(\rho_{G0} \underbrace{\alpha_a \alpha_b \cdots \alpha_f}_{\text{páros}}\Big) = \mathrm{Tr}\big(\rho_{G0} [\alpha_a, \alpha_b] \alpha_c \cdots \alpha_f\big) \pm \mathrm{Tr}\big(\rho_{G0} \alpha_b [\alpha_a, \alpha_c] \cdots \alpha_f\big) + \cdots$$

$$\cdots \pm \mathrm{Tr}\big(\rho_{G0} \alpha_b \alpha_c \cdots \alpha_f \alpha_a\big)$$

STATFIZ

8. előadás (11.05.)

Bevezettük U-t:

$$U(\tau_1,\tau_2) = e^{\frac{K_0\tau_1}{\hbar}}\, e^{-\frac{K(\tau_1-\tau_2)}{\hbar}}\, e^{-\frac{K_0\tau_2}{\hbar}}$$

$$\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} U(\tau,\tau') = -K_{1I}(\tau)\, U(\tau,\tau')$$

$$U(\tau,\tau') = \sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\int_{\tau'}^{\tau}\!\!\cdots\!\int_{\tau'}^{\tau} \hat{T}_\tau\left(K_{1I}(\tau_1)K_{2I}(\tau_2)\cdots K(\tau_n)\right)d\tau_1\cdots d\tau_n$$

$$\hat{O}_H(\tau) = \hat{U}(0,\tau)\,\hat{O}_I(\tau)\,\hat{U}(\tau,0) \qquad \text{ahol } \hat{U}(\tau) = e^{\frac{K_0\tau}{\hbar}}\, e^{-\frac{K\tau}{\hbar}}$$

jelölés: $x = (\underline{r}, s)$

A Green-fv, ha $\tau > \tau'$

$$G(x,\tau,x',\tau') = -\frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K}\psi_H(x,\tau)\psi_H^+(x',\tau')\right)}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K}\right)} =$$

$$= -\frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}e^{\beta K_0}e^{-\beta K}\,U(0,\tau)\psi_I(x,\tau)\overbrace{U(\tau,0)}^{U(0,\tau')}\psi_I^+(x',\tau')U(\tau',0)\right)}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}\underbrace{e^{\beta K_0}e^{-\beta K}}_{U(\beta\hbar,0)}\right)} =$$

$$= -\frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}U(\beta\hbar,\tau)\psi_I(x,\tau)U(\tau,\tau')\psi_I^+(x',\tau')U(\tau',0)\right)}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}U(\beta\hbar,0)\right)}$$

ha $\tau < \tau'$:

Akkor ugyanez csak ψ^+ van ψ előtt:

$$G(x,\tau,x',\tau') = \mp\frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}U(\beta\hbar,\tau')\psi_I^+(x',\tau')U(\tau',\tau)\psi_I(x,\tau)U(\tau,0)\right)}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}U(\beta\hbar,0)\right)}$$

Az U-k úgy viselkednek mint valódi bozonikus operátorok:

$$G(x,\tau,x',\tau') = -\frac{\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K_0}T_\tau\begin{Bmatrix} U(\beta\hbar,\tau)U(\tau,\tau')U(\tau',0) & \tau>\tau' \\ U(\beta\hbar,\tau')U(\tau',\tau)U(\tau,0) & \tau'>\tau\end{Bmatrix}\psi_I(x,\tau)\psi_I^+(x',\tau')\right]}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}U(\beta\hbar,0)\right)}$$

Alapvetően így, a {}-ben lévő rész az U csoporttul. miatt $U(\beta\hbar,0)$-val egyenlő, de a T_τ miatt a megfelelő előjellel

$$\Rightarrow$$

$$G(x,\tau,x',\tau') = -\frac{\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K_0}T_\tau\left(U(\beta\hbar,0)\psi_I(x,\tau)\psi_I^+(x',\tau')\right)\right]}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}U(\beta\hbar,0)\right)}$$

Írjuk be U-t

$$G(x,\tau,x',\tau') = \frac{-\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K}\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_0^{\beta\hbar}\cdots\int_0^{\beta\hbar}T_\tau\left(K_{1I}(\tau_1)\cdots K_{1I}(\tau_n)\,\psi_I(x,\tau)\,\psi_I^+(x',\tau')\right)d\tau_1\cdots d\tau_n\right]}{\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K}\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_0^{\beta\hbar}\cdots\int_0^{\beta\hbar}T_\tau\left(K_{1I}(\tau_1)\cdots K_{1I}(\tau_n)\right)d\tau_1\cdots d\tau_n\right]}$$

<u>Wick-tétel:</u>

jelölés:
$$\alpha_j = \begin{cases} a_j \\ a_j^+ \end{cases}, \quad \rho_{G0} = \frac{e^{-\beta K_0}}{Z_{G0}}, \quad K_0 = \sum_i (e_i-\mu)\,a_i^+ a_i$$

$$\mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}\,\alpha_n\right] = \sum_{n_1}\cdots\sum_{n_j}\cdots\frac{\langle n_1 n_2\cdots|\,e^{-\sum_i(e_i-\mu)b_i^+ a_i}\,\alpha_n\,|n_1 n_2\cdots\rangle}{Z_{G0}} =$$

mivel α_n megváltoztatja a jobb oldali állapotot, az OG lesz a bázis.

$$= 0$$

Ugyanezen logika alapján ez minden ptl. számú α-ra igaz:

$$\mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}\,\underbrace{\alpha_{k_1}\cdots\alpha_{k_n}}_{\text{páratlan}}\right] = 0$$

$$\mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}\,\underbrace{\alpha_{k_1}\cdots\alpha_{k_n}}_{\text{páros}}\right]$$ is csak akkor nem 0, ha ugyanannyi a^+ van, mint a.

Előző gyakorlat alapján:

$$\mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}\,\alpha_a\cdots\alpha_f\right] = \mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}[\alpha_a,\alpha_b]\alpha_c\cdots\alpha_f\right] \pm \mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}\alpha_b[\alpha_a,\alpha_c]\alpha_d\cdots\alpha_f\right] + \cdots$$
$$\cdots + \mathrm{Tr}\left(\rho_{G0}\alpha_b\alpha_c\cdots[\alpha_a,\alpha_f]\right) \pm \mathrm{Tr}\left(\rho_{G0}\alpha_b\alpha_c\cdots\alpha_f\alpha_a\right)$$

itt a kommutátorok mindenhol lehetnek antikommutátorok $\qquad \mathrm{Tr}\left(\alpha_a\rho_{G0}\alpha_b\cdots\alpha_f\right)$

Mivel $\alpha_a(\beta t) = e^{\beta K_0}\alpha_a e^{-\beta K_0} = e^{\lambda_a\beta(e_a-\mu)}\alpha_a$ ahol $\lambda_a = \begin{cases} +1 & \alpha_a = a_a^+ \\ -1 & \alpha_a = a_a \end{cases}$

Ezt nem tudom honnan szedtük, de most megoldjuk:

$$e^{\beta K_0}\alpha_a e^{-\beta K_0} = e^{\lambda_a(e_a-\mu)}\alpha_a \qquad \alpha_a e^{-\beta K_0} = e^{\lambda_a(e_a-\mu)}e^{-\beta K_0}\alpha_a$$

WTF volt ez ???

$$\mathrm{Tr}\left(\rho_{G0}\alpha_a\cdots\alpha_f\right) = \frac{[\alpha_a,\alpha_b]_\mp}{1\mp e^{\lambda_a(e_a-\mu)\beta}}\mathrm{Tr}\left(\rho_{G0}\alpha_c\cdots\alpha_f\right) \pm \frac{[\alpha_a,\alpha_c]}{1\mp e^{\lambda_a(e_a-\mu)\beta}}\mathrm{Tr}\left(\rho_{G0}\alpha_b\alpha_d\cdots\right)\cdots$$

$$\cdots + \frac{[\alpha_a,\alpha_f]_\mp}{1\mp e^{\lambda_a(e_a-\mu)\beta}}\mathrm{Tr}\left(\rho_{G0}\alpha_b\alpha_c\cdots\right]$$

(számértékű mennyiség)

egy új műveletet: kontrakció: $\overline{\alpha_a\alpha_b} = \langle \alpha_a \alpha_b \rangle_0$

Elvileg $\overline{a_j a_j^+} = \dfrac{1}{1 \mp e^{-\beta(e_j-\mu)}} = \dfrac{e^{\beta(e_j-\mu)}}{e^{\beta(e_j-\mu)} \mp 1} = 1 \pm \dfrac{1}{e^{\beta(e_j-\mu)} \mp 1} = 1 \pm n_j^{(0)} = \langle a_j a_j^+ \rangle_0$

ugyanígy: $\overline{a_j^+ a_j} = \dfrac{\mp 1}{1 \mp e^{\beta(e_j-\mu)}} = \dfrac{1}{e^{\beta(\ldots)} \mp 1} = n_j^{(0)} = \langle a_j^+ a_j \rangle$

Tehát $\overline{\alpha_a \alpha_b} = \dfrac{[\alpha_a, \alpha_b]}{1 \mp e^{\beta(e_a-\mu)}} = \langle \alpha_a \alpha_b \rangle_0$

Folytatva az előzőt:

$$\mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \alpha_a \cdots \alpha_f) = \ldots = \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \overline{\alpha_a \alpha_b} \ldots) \pm \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \alpha_b \overline{\alpha_a \alpha_c} \ldots) + \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \alpha_b \alpha_c \overline{\alpha_a \alpha_d} \ldots) \ldots$$

bevezetve az alábbi jelölést:

$$\mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \overline{\alpha_a \alpha_b \alpha_c} \ldots) := \pm \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \alpha_b \overline{\alpha_a \alpha_c} \ldots)$$

$$\mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \alpha_a \cdots \alpha_f) = \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \overline{\alpha_a \alpha_b} \ldots) + \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \overline{\alpha_a \alpha_b \alpha_c} \ldots) + \ldots \pm \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \overline{\alpha_a \ldots \alpha_f})$$

Mivel a kontrakció ~~típusa~~ eredménye egy szám, az kiemelhető és a képlet rekurzívan kifejezhető.

$$\mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \alpha_a \alpha_b \ldots \alpha_f) = \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \overline{\alpha_a \alpha_b}\, \overline{\alpha_c \alpha_d} \ldots \overline{\alpha_e \alpha_f}) + \text{az összes teljes párosítás}$$

pl. 4 esetén:

$$\mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \alpha_a \alpha_b \alpha_c \alpha_d) = \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \overline{\alpha_a \alpha_b}\, \overline{\alpha_c \alpha_d}) + \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \overline{\alpha_a \alpha_b \alpha_c \alpha_d}) + \mathrm{Tr}(\rho_{G0}\, \overline{\alpha_a \alpha_b \alpha_c \alpha_d})$$

$$= \overline{\alpha_a \alpha_b}\, \overline{\alpha_c \alpha_d}\, \underset{1}{\mathrm{Tr}(\rho_{G0})} \mp \overline{\alpha_a \alpha_c}\, \overline{\alpha_b \alpha_d} \cdot 1 + \overline{\alpha_b \alpha_c}\, \overline{\alpha_a \alpha_d} \cdot 1$$

itt előtte kellett egy csere, ezért a $\mp$

további cucc ami kell még a Wick tételhez:

$$\alpha_a(\tau) \qquad\qquad a_i(\tau) = e^{-(\varepsilon_i-\mu)\tau/\hbar}\, a_i$$

$$a_i^+(\tau) = e^{(\varepsilon_i-\mu)\tau/\hbar}\, a_i^+$$

ekkor u.a. mint τ - függő operátor.

$$\mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}\, \alpha_a(\tau_a) \cdots \alpha_f(\tau_f)\right] = \overbrace{\alpha_a(\tau_a)\,\alpha_b(\tau_b)}\cdots \quad + \text{ összes teljesen párosított}$$

$$\mathrm{Tr}\left(\rho_{G0}\, T_\tau\left(\alpha_a(\tau_a)\,\alpha_b(\tau_b)\cdots\alpha_f(\tau_f)\right)\right) = ?$$

Ha $\tau_a > \tau_b > \dots > \tau_f$ akkor u.a. mint előtte.

Ha nem, akkor definiáljuk újra mint:

$$\overbrace{\alpha_a(\tau_a)\,\alpha_b(\tau_b)} = \langle T_\tau(\alpha_a(\tau_a)\,\alpha_b(\tau_b))\rangle_0$$

így már:

$$\mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}\, T_\tau\left(\alpha_a(\tau_a)\,\alpha_b(\tau_b)\cdots\alpha_f(\tau_f)\right)\right] = \overbrace{\alpha_a(\tau_a)\,\alpha_b(\tau_b)}\cdots \quad + \text{ összes teljesen párosított}$$

általános is, mert T_τ miatt úgy cserélgetünk, ahogy amúgy is tennénk

$$\mathrm{Tr}\left(\rho_{G0}\, T_\tau(AB\cdots F)\right) = ? \qquad \text{ahol} \qquad A = \begin{cases}\psi(x,\tau)\\ \psi^+(x,\tau)\end{cases}$$

$$\text{és} \quad \psi(x,\tau) = \sum_i \varphi_i(x)\, a_i(\tau)$$

Ekkor $\overbrace{AB} = \langle T_\tau(AB)\rangle_0$ deffel:

$$\mathrm{Tr}\left(\rho_{G0}\, T_\tau(AB\cdots F)\right) = \overbrace{AB}\cdots + \text{ az összes teljesen párosított}$$

valamint $\overbrace{\psi(x,\tau)\,\psi^+}(x',\tau') = \langle T_\tau\left(\psi(x,\tau)\,\psi^+(x',\tau')\right)\rangle = -G_0(x,\tau,x',\tau')$

$= 0$, mert $\overbrace{\psi\psi} \sim \overbrace{aa} = 0$

pl.:

$$\langle T_\tau(\psi(1)\psi(2)\psi^+(2')\psi^+(1'))\rangle = \overbrace{\psi(1)\psi(2)}\,\overbrace{\psi^+(2')\psi^+(1')} + \psi(1)\psi(2)\psi^+(2')\psi^+(1') + \psi(1)\psi(2)\psi^+(2')\psi^+(1') =$$

$$= \pm\, G^{(0)}(1,2')\,G^{(0)}(2,1') + G^{(0)}(2,2')\,G^{(0)}(1,1')$$

STATFIZ

6. gyak (11.08.)

AKH-képben:

$$K_1(\tau_1) = \frac{1}{2}\sum_{s_1 s_2} \iint \psi^+(\underline{r}_1,s_1,\tau_1)\,\psi^+(\underline{r}_2,s_2,\tau_1)\, v(\underline{r}_1,\underline{r}_2)\,\psi(\underline{r}_2,s_2,\tau_1)\,\psi(\underline{r}_1,s_1,\tau_1)\, d^3\underline{r}_1\, d^3\underline{r}_2$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{s_1 s_2} \iiint_{\tau_2=0}^{\hbar\beta} \psi^+(\underline{r}_1,s_1,\tau_1)\,\psi^+(\underline{r}_2,s_2,\tau_2)\, v(\underline{r}_1,\tau_1,\underline{r}_2,\tau_2)\,\psi(\underline{r}_2,s_2,\tau_2)\,\psi(\underline{r}_1,s_1,\tau_1)\, d^3\underline{r}_1\, d^3\underline{r}_2\, d\tau$$

$$v(r_1,\tau_1,r_2,\tau_2) = v(r_1,r_2)\,\delta(\tau_2-\tau_1)$$

$x_i := (r_i, s_i)$ $\qquad X_i := (r_i, s_i, \tau_i)$

$$G(X,X') = \frac{-\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_0^{\hbar\beta} T_\tau\left[K_1(\tau_1)K_1(\tau_2)\cdots K_1(\tau_n)\,\psi(x,\tau)\psi^+(x',\tau')\right]d\tau_1\, d\tau_2\cdots d\tau_n\right)}{\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta K_0}\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_0^{\hbar\beta} T_\tau(\cdots)\,d\tau_1\, d\tau_2\cdots d\tau_n\right]} =$$

$$= -\frac{\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_{G0}\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{2\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int\prod_{i=1}^{n}dx_i\, d\tau_i\, dx_i'\, d\tau_i'\; T_\tau\left\{\prod_{j=1}^{n}\psi^+(\cdot)\,\psi^+(\cdot)\,v(x_j\tau_j x_j'\tau_j')\,\psi(\cdot)\,\psi(\cdot)\;\psi(x,\tau)\psi^+(x',\tau')\right\}\right]}{\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_{G0}\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{2\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int\prod_{i=1}^{n}dx_i\, d\tau_i\, dx_i'\, d\tau_i'\; T_\tau\left\{\text{u.a. csak az utolsó 2 tag nélkül}\right\}\right]}$$

És általában $G_0(x_1\tau_1, x_2\tau_2) = -\overline{\psi(x_1,\tau_1)\,\psi^+(x_2,\tau_2)}$

A kölcsönhatási esetben nagy képletek vannak, ezért inkább gráfokkal dolgozunk, vagy ígyeni

Meg van a, b, c, d jelölés, de arról sem tudom mi

~~Nem~~ neurálhatni van:

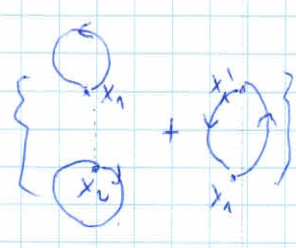
TFH a 0-d rend = 1

$$\left(\frac{-1}{2\hbar}\right)\int dx_1\, d\tau_1 \int dx_1'\, d\tau_1' \langle T_\tau\left(\psi^+(X_1)\,\psi^+(X_1')\,v(X_1,X_1')\,\psi(X_1')\,\psi(X_1)\right)\rangle =$$

összekötési lehetőségei: ① ②

$$= \left(-\frac{1}{2\hbar}\right)\int dX_1 \int dX_1'\, v(X_1,X_1')\begin{cases} (-1)^n\, \overline{\psi(X_1)\,\psi^+(X_1)}\;\overline{\psi(X_1')\,\psi^+(X_1')} \\ (\pm)\;\overline{\psi(X_1')\,\psi^+(X_1)}\;\overline{\psi(X_1)\,\psi^+(X_1')} \end{cases}$$

$$\begin{cases} G_0(X_1,X_1)\,G_0(X_1',X_1') \\ \pm\, G_0(X_1',X_1)\,G_0(X_1,X_1') \end{cases}$$

Gráfokban $\frac{1}{2}\Bigg\{$  $\Bigg\}$

a számlálóban mi van:

$$= -\mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}\, T_C\left(\psi(x)\,\psi^+(x')\right)\right] = g\,(x, x') \qquad x \longleftarrow x'$$

ez a 0. rend

Az 1. rend:

$$-\mathrm{Tr}\left[\rho_{G0}\left(-\frac{1}{2\hbar}\right)\int dx_1\, dx_1'\, v(x_1\, x_1') \cdot T_C\left(\psi^+(x_1)\,\psi^+(x_1')\,\psi(x_1')\,\psi(x_1)\,\psi(x)\,\psi^+(x')\right)\right] =$$

$$= -\mathrm{Tr}\Big[\quad '' \quad \mathrm{Tr}\left(\psi(x)\,\psi^+(x_1)\,\psi(x_1)\,\psi^+(x_1')\,\psi(x_1')\,\psi^+(x')\right)$$

[illegible]

STATFIZ

9. előadás (11.12.)

$= -\overbrace{\psi(x_i)\,\psi^+(x_j)} = G^0(x_i, x_j)$

← ez a mi kH-i vonal: $-\frac{1}{\hbar}\, v(x_i, x_i')$

csomópont: $\int dx_i = \sum_i \int d^3\underline{r}_i \int_0^{\beta\hbar} d\tau_i$

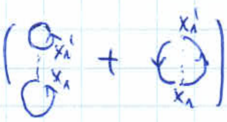
egy újabb konvenció:

itt az van, hogy a τ argumentumra vonatkozóan „azonos idejű integrálás":

$$G^0(x_i,\tau_i, x_j,\tau_j) := \lim_{\tau_j=\tau_i+\eta} G^0_*(x_i,\tau_i,x_j,\tau_j)$$

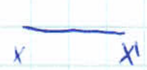
$(-1)^F$: fermionhurkok számával kell szorozni

A változtatás a nevező:

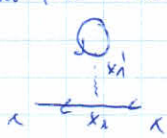
$1 + \frac{1}{2}\Big($  $\Big)$

A számláló:

0. rend:



külső pontokon nem integrálunk, csak belsőn:



itt van csak x_1-ekre, x-re nem.

1. rend:

$$-\left(-\frac{1}{2\hbar}\right)\int dx_1\, dx_1'\, v(x_1,x_1')\,\langle T_\tau\big(\psi^+(x_1)\,\psi^+(x_1')\,\psi(x_1')\,\psi(x_1)\,\psi(x)\,\psi^+(x')\big)\rangle =$$

$$= \frac{1}{2\hbar}\int dx_1\, dx_1'\, v(x_1,x_1')\,\langle T_\tau\big(\psi(x)\,\psi^+(x_1)\,\psi(x_1)\,\psi^+(x_1')\,\psi(x_1')\,\psi^+(x')\big)\rangle$$

a párosítások:

①

②

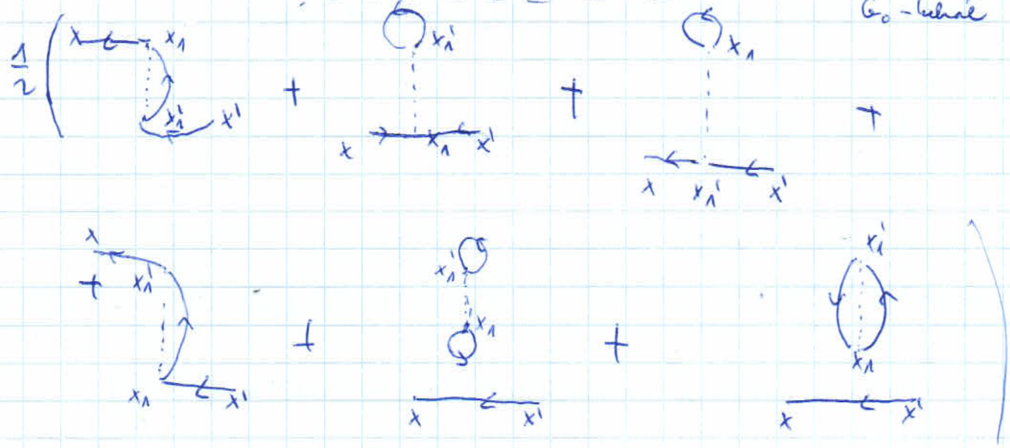
③

összesen: $3\cdot 2 = 6$ elhelyezés.

$$= -\frac{1}{2\hbar}\int dx_1\, dx_1'\, v(x_1,x_1')\Big\{G_0(x,x_1)G_0(x_1,x_1')G_0(x_1',x') \pm G_0(x,x_1)G_0(x_1,x')G_0(x_1',x_1')$$
$$\pm G_0(x,x_1')G_0(x_1',x')G_0(x_1,x_1) + G_0(x,x_1')G_0(x_1',x_1)G_0(x_1,x')$$
$$+ G_0(x,x')G_0(x_1,x_1)G_0(x_1',x_1') \pm G_0(x,x')G_0(x_1',x_1)G_0(x_1,x_1')\Big\}$$

Ugyanez gráfokkal:

A $-v(x_1,x_1')$ legyen ... egy ... vonalat végein x_1, x_1'-vel a többi vonal a G_0-knak adódik.



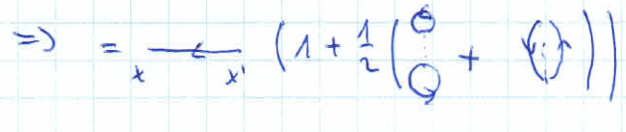
megjegyzések:

1. ① = ④ és ② = ③

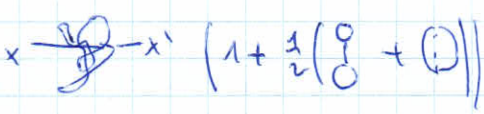
ezek struktúrálisan u.a., csak a belső pontok cserélődnek, de azok integrálási változók, úgyhogy mindegy.

2. Ha eltekintünk a külső vonalaktól az u.a. mint első rendben a vákuum (széteső gráf)

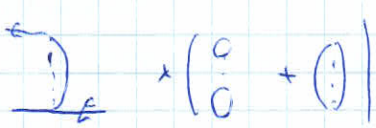
Ebben is szerepel a 0. rendet, x—x' kiemelhető ⇒



És magasabb rendben is így:



tehát mindig tudunk vagy egyszerűsíteni a vákuum-beli faktorral.



3.

$$G(x,x') = -i\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\Big[\int\prod_{i=1}^{n} dx_i\, dx_i'\; T_\tau\Big(\prod_{j=1}^{n} \underbrace{W(x_j,x_j')}_{\psi^+\psi^+ v\, \psi\psi}\, \psi(x')\psi^+(x)\Big)\Big]_{\text{connected}}$$

ha odaírjuk, hogy connected, akkor csak az összefüggő gráfok kellenek, úgyhogy nincs nevező.

4.

A $\frac{1}{2}$-des tagból pont ugyanannyi van, ahány KH-n $\Rightarrow$ $\frac{1}{2^n}$ faktor.

Az $x_i \leftrightarrow x_i'$ megfelelő gráfokkal.

5.

Állítás, hogy a tagonként rendben a $\frac{1}{n!}$ is elmegy, ha olyan diagramokat csak egyszer számolunk, amelyeket a KH vonalak átpermutálásával kapunk.

Gráf szabályok valós térben (Feynman-szabályok)

1) Rajzoljuk le $\forall$ n KH-vonalat tartalmazó, topologikusan különböző két külső pontot tartalmazó csatolt gráfot ($\Rightarrow$ nincs $\frac{1}{2^n n!}$ faktor, se keverés?)

2) Osszuk ki $2n$ belső pontra a koordinátákat! (például $x_1, x_1', x_2, x_2', \dots$)

3) $x_j \longleftarrow x_i$ járuléka $-G_0(x_j, x_i)$

4) $x_i \cdots\cdots x_i'$ járuléka $-\frac{1}{\hbar} v(x_i, x_i') = -\frac{1}{\hbar} v(\underline{r}_i, \underline{r}_i')$

5) Integráljuk ki a belső pontokat:

$$\int dx_i = \sum_s \int d^3\underline{r}_i \int d\tau_i$$

6) Gráf járuléka szorzandó $(-1)^F$ ahol F a fermion hurkok száma.

(ez a T_τ operátor szerkezetéből vezethető le, ha úgy írjuk fel az
$T_\tau\left(\psi^+()\psi()\psi^+()\psi()\cdots\right)$. Ahogy 1. rendben láttuk is)

Matsubara frekvenciák

- időfüggetlen K esetén G csak $\tau-\tau'$-től függ: $G(x,\tau,x',\tau') = G(x,\tau-\tau',x',0) =$
  $= G(x,x',\tau-\tau')$
- ha $0 \le \tau,\tau' \le \beta\hbar \Rightarrow -\beta\hbar \le \tau-\tau' \le \beta\hbar$. Itt sorfejthetjük a G-t:

$$G(x,x',\tilde{\tau}) = \frac{1}{\beta\hbar}\sum_{n=-\infty}^{\infty} G(x,x',\hbar\omega_n)\, e^{-i\omega_n\tau} \qquad \text{ahol } \omega_n = \frac{2\pi}{\beta\hbar}\cdot n$$

a időkben a különbség

$\Rightarrow$ periodikussá tettem a G-t

STATFIZ

7. gyak (11.15.)

$-\beta\hbar < \tau < \beta\hbar$ intervallumon kell a Green-fv, mint itt vonatkoztatjuk

$$G(x,x',\tau) = \frac{1}{\beta\hbar}\sum_{n=-\infty}^{\infty} G(x,x',i\omega_n)\, e^{-i\omega_n \tau} \qquad \text{ahol } \omega_n = \frac{2\pi}{2\beta\hbar} n$$

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

Emlékeztető: ha $-\beta\hbar < \tau \leq 0$

akkor $G(x,x',\tau) = \pm G(x,x',\tau+\beta\hbar)$

emiatt bozonok és fermionok esetén csak páros vagy páratlan

n-es tagok maradnak

$$G(x,x',i\omega_n) = \frac{1}{2}\int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar} G(x,x',\tau)\, e^{i\omega_n \tau}\, d\tau = \frac{1}{2}\left[\left(\int_{-\beta\hbar}^{0} + \int_{0}^{\beta\hbar}\right) G(x,x',\tau)\, e^{i\omega_n\tau}\, d\tau\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\left[\pm\int_{-\beta\hbar}^{0} G(x,x',\tau+\beta\hbar)\, e^{i\omega_n\tau}\, d\tau + \int_{0}^{\beta\hbar} G(x,x',\tau)\, e^{i\omega_n\tau}\, d\tau\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\left[\pm \underbrace{e^{-i\beta\hbar\omega_n}}_{e^{-i\pi n} = (-1)^n}\int_{0}^{\beta\hbar} G(x,x',t)\, e^{i\omega_n t}\, dt + \int_{0}^{\beta\hbar} G(x,x',\tau)\, e^{i\omega_n\tau}\, d\tau\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\left[1 \pm (-1)^n\right]\int_{0}^{\beta\hbar} G(x,x',\tau)\, e^{i\omega_n\tau}\, d\tau$$

bozonokra a páratlanok, fermionokra a párosak hiányoznak

amikor viszont nem tűnik el: akkor a prefaktor eltűnik.

Tehát:

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

$$G(x,x',i\omega_n) = \int_{0}^{\beta\hbar} G(x,x',\tau)\, e^{i\omega_n\tau}\, d\tau \qquad \text{ahol} \quad \omega_n = \begin{cases} \dfrac{2n\pi}{\beta\hbar} & \text{bozonokra} \\[2ex] \dfrac{(2n+1)\pi}{\beta\hbar} & \text{fermionokra} \end{cases}$$

Matsubara-frekvenciák

Szabad rendszer Green-fve az alábbi volt:

$$G(x,\tau,x',\tau') = G(x,x',\tau-\tau') = \sum_k \varphi_k^*(x)\varphi_k(x')\, e^{-\frac{(e_k-\mu)(\tau-\tau')}{\hbar}} \begin{cases} 1 \pm n_k^{(0)} & \tau-\tau'>0 \\ \pm n_k^{(0)} & \tau-\tau'<0 \end{cases}$$

bozonokra:

$$G(x,x',i\omega_n) = -\sum_k \varphi_k^*(x)\varphi_k(x')\left(1+n_k^{(0)}\right)\int_0^{\beta\hbar} e^{-\frac{(e_k-\mu)}{\hbar}\tau}\, e^{i\omega_n\tau}\, d\tau =$$

$$= -\frac{\sum_k \varphi_k^*(x)\varphi_k(x')}{i\omega_n - \frac{(e_k-\mu)}{\hbar}}\left(1+n_k^{(0)}\right)\underbrace{\left[e^{i\omega_n\tau - \frac{e_k-\mu}{\hbar}\tau}\right]_0^{\beta\hbar}}_{\left(\underbrace{e^{i2n\pi}}_{1} e^{-(e_k-\mu)\beta} - 1\right)} = *$$

$$\left(1+n_k^{(0)}\right)\left(e^{-\beta(e_k-\mu)}-1\right) = \left(1+\frac{1}{e^{\beta(e_k-\mu)}-1}\right)\left(e^{-\beta(e_k-\mu)}-1\right) =$$

$$= \frac{e^{\beta(e_k-\mu)}}{e^{\beta(e_k-\mu)}-1}\left(e^{-\beta(e_k-\mu)}-1\right) = -1$$

$$* = \sum_k \frac{\varphi_k^*(x)\varphi_k(x')}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu)}$$

fermionokra:

$$G(x,x',i\omega_n) = -\sum_k \varphi_k^*(x)\varphi_k(x')\left(1-n_k^{(0)}\right)\int_0^{\beta\hbar} e^{-\frac{(e_k-\mu)}{\hbar}\tau}\, e^{i\omega_n\tau}\, d\tau =$$

$$= -\frac{\sum_k \varphi_k^*(x)\varphi_k(x')}{i\omega_n - \frac{(e_k-\mu)}{\hbar}}\left(1-n_k^{(0)}\right)\underbrace{\left[e^{i\omega_n\tau - \frac{e_k-\mu}{\hbar}\tau}\right]_0^{\beta\hbar}}_{\left(\underbrace{e^{i(2n+1)\pi}}_{-1} e^{-\beta(e_k-\mu)} - 1\right)} = *$$

$$\left(1-n_k^{(0)}\right)\left(-e^{-\beta(e_k-\mu)}-1\right) = -\left(1-\frac{1}{e^{\beta(e_k-\mu)}+1}\right)\left(e^{-\beta(e_k-\mu)}+1\right)$$

$$= \frac{e^{\beta(e_k-\mu)}}{e^{\beta(e_k-\mu)}+1}\left(e^{-\beta(e_k-\mu)}+1\right) = -1$$

$$* = \sum_k \frac{\varphi_k^*(x)\varphi_k(x')}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu)}$$

Tehát a két esetre a eredmény u.a. csak az ω_n-ek mások.

Egy triviális integrálás kedvéért:

$$\frac{1}{\beta\hbar}\int_0^{\beta\hbar} e^{-i\omega_n\tau}\,d\tau = \delta_{n0} \qquad \} \text{ (ez elég triviális, ezért le se írom)}$$

periodikus Dirac-delta sorbafejtése:

$$\delta(\tau) = -\sum_n A_n e^{i\omega_n t}$$

Mivel $\delta(\tau+\beta\hbar) = \delta(\tau)$ ezért $e^{i\omega_n(\tau+\beta\hbar)} = e^{i\omega_n\tau}$

$$\Rightarrow e^{i\omega_n\beta\hbar} = 1$$

$$\Rightarrow \omega_n = \frac{2\pi n}{\beta\hbar}$$

Az együtthatók

$$A_n = \frac{1}{\beta\hbar}\int_{-\frac{\beta\hbar}{2}}^{\frac{\beta\hbar}{2}} \delta(t)\, e^{-i\omega_n\tau}\,d\tau = \frac{1}{\beta\hbar}$$

Tehát $\delta(t) = \frac{1}{\beta\hbar}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n\tau}$ ahol $\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta\hbar}$

STAT FIZ

10. előadás (11.19.)

$$G(x,\tau,x',0) = G(x,x',\tau) = \frac{1}{\beta\hbar}\sum_{n=-\infty}^{\infty} G(x,x',i\omega_n)\, e^{i\omega_n\tau}$$

$$G(x,x',i\omega_n) = \int_0^{\beta\hbar} G(x,x',\tau)\, e^{i\omega_n t}\, d\tau$$

ahol $\omega_n = \begin{cases} \frac{2n\pi}{\beta\hbar} & \text{bozonokra} \\ \frac{(2n+1)\pi}{\beta\hbar} & \text{fermionokra} \end{cases}$

$$G_0(x,x',i\omega_n) = \sum_k \frac{\varphi_k(x)\varphi_k^*(x')}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}(\varepsilon_k - \mu)}$$

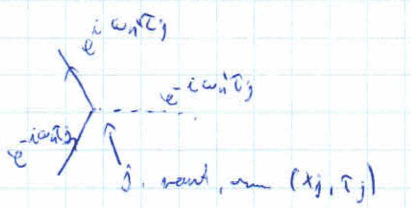
Múltkorról:

$\delta(\tau)$

$$\delta(\tau) = \frac{1}{\beta\hbar}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n\tau} \qquad \text{itt } \omega_n = \frac{2\pi n}{\beta\hbar}$$

$$v(x,\tau,x',\tau') = \underset{\substack{\uparrow \\ v(\underline{x},\underline{x}')}}{v(x,x')}\,\delta(\tau-\tau') = \frac{1}{\beta\hbar}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\, v(\underline{x},\underline{x}',i\omega_n)$$

TFH $v(\underline{x},\underline{x}',i\omega_n) = v(\underline{x},\underline{x}')$ (tehát n-független)



$$\int_0^{\beta\hbar} e^{-i(\omega_n+\omega_{n'}-\omega_{n''})\tau_j}\, d\tau_j$$

2 a KH-ból jön, tehát bozonikus.

$\Rightarrow$ $2n$-nel a számlálóban

Tavaly ω_n és $\omega_{n''}$ u.olyan típusú, így a különbségük mindig páros.

Tudjuk, hogy $\frac{1}{\beta\hbar}\int_0^{\beta\hbar} e^{-i\omega_n\tau}\, d\tau = \delta_{n0}$ ha $\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta\hbar}$.

Most ez van, hiszen a $\omega_n - \omega_{n''} + \omega_{n'}$ páros.

$$\Rightarrow \int_0^{\beta\hbar} e^{-i(\omega_n+\omega_{n'}-\omega_{n''})\tau_j}\, d\tau_j = \beta\hbar\, \delta_{\omega_n+\omega_{n'};\,\omega_{n''}}$$

$\Rightarrow$ Minden csúcsban a frekvencia megmarad!

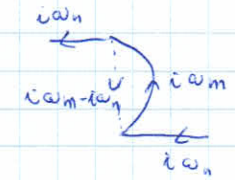
Feynman-szabályok a Matsubara-formalizmusban. (n-rendben)

1) Rajzoljuk fel az összes gráfot, amelyek összekötöttek, topologikusan függetlenek, 2 külső pontjuk van, n kH-éle.

2) Irányítsuk v-ket! (Nem számít az irány, csak egyszer rögzítsük!)

osszuk szét a bejövő frekvenciát (n új frekvencia lesz)

új, írjuk fel a megmaradást pl.:



(Minden kH-vonalnál megjelenik egy új, független frekvencia)

3) $x_j \xleftarrow{i\omega_n} x_i$ $\quad G_0(x_j, x_i, i\omega_n) = \sum_k \frac{\varphi_k(x_j)\,\varphi_k^*(x_i)}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}(\varepsilon_k - \mu)}$

4) $x_i' \cdots\cdots x_i$ $\quad$ A járuléka: $-\frac{1}{\hbar}\, v(x_i, x_i')$ $\quad \forall\, \omega_n$-re

5) "Equal time diagrams must be multiplicated with $e^{i\eta\omega_n}$"

6)
a) $\underset{r\sigma}{x} \xleftarrow{i\omega_n} \underset{r'\sigma'}{x'}$ $\quad$ Integráljunk az összes belső változóra

$$\int dx_i \equiv \int dr_i \sum_{s_i}$$

b) Összegzünk a független frekvenciákkal

7) $(-1)^F$-szabály: F fermion hurok esetén $(-1)^F$-fel kell szorozni

Matsubara-összegek

$$\sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - x} = \mp \frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar x} \mp 1}$$

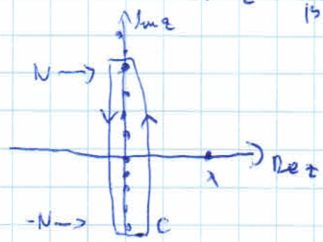
bizonyítás:

$$x>0$$

$$\sum_{n=-N}^{N} \frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - x} = \qquad = \frac{\beta\hbar}{2\pi i}\int_C \frac{dz}{e^{\beta\hbar z}-1}\,\frac{e^{\eta z}}{z-x}$$

hol vannak a pólusok? $e^{\beta\hbar z}-1=0$

$$\Rightarrow z = \frac{2\pi n}{\beta\hbar}\, i = i\omega_n$$



Nézzük az integrandus Laurent-sorát:

$$\frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar z}-1} = \frac{\beta\hbar}{e^{i2\pi n}\,e^{\beta\hbar\omega_n}-1} = \frac{\beta\hbar}{1+\beta z\hbar+\dots-1} \sim \frac{1}{h}$$

Tehát $\operatorname{Res}\left(\frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar z}-1}\right)_{z=i\omega_n} = 1$

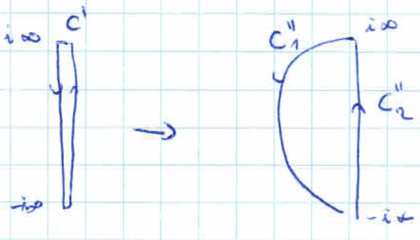
$$\Rightarrow \operatorname{Res}\left(\frac{e^{\eta z}\,\beta\hbar}{(e^{\beta\hbar z}-1)(z-x)}\right) = \frac{e^{i\eta\omega_n}}{i\omega_n - x}$$

Ha lépjük az $N\to\infty$ határátmenetet:

$$\sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - x} = \lim_{N\to\infty}\sum_{n=-N}^{N}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - x} = \frac{\beta\hbar}{2\pi i}\int_{C'}\frac{dz}{e^{\beta\hbar z}-1}\,\frac{e^{\eta z}}{z-x}$$

ahol C' a végtelen nagy.

Deformáljuk C'-t:



A félsíkon $\operatorname{Re} z<0 \Rightarrow e^{\beta\hbar z}\to 0 \Rightarrow \frac{1}{e^{\beta\hbar z}-1}\to -1$

$$\Rightarrow \int_{C''}\frac{dz}{e^{\beta\hbar z}-1}\,\frac{e^{\eta z}}{z-x} = \frac{1}{(-1)}\,\frac{e^{-\eta|z|}}{|z|} \to 0$$

A másik oldal nem deformálható úgy, mert x-ben szingularitás van:

A két vízszintes kiejti egymást.

C_2'': a nagy félkör

C_3'': A kis kör x körül

Itt $\mathrm{Re}\, z > 0 \Rightarrow$

$$\sim \frac{e^{-\beta\hbar|z|}\, e^{\eta \mathrm{Re}|z|}}{|z|} \sim \frac{e^{-\beta\hbar|z|}}{|z|} \to 0 \quad \Rightarrow \text{ A félkör járuléka } C.$$

A körbejárás miatt − előjel kell:

$$\frac{\beta\hbar}{2\pi i}\int_C \frac{dz}{e^{\beta\hbar z}-1}\,\frac{e^{\eta z}}{z-x} = -2\pi i \,\mathrm{Res}\left(\frac{\hbar\beta}{2\pi i}\,\frac{e^{\eta z}}{(e^{\beta\hbar z}-1)}\right)\Bigg|_x = -\frac{e^{\eta x}\,\beta\hbar}{e^{\beta\hbar x}-1}$$

Fermionokra:

$$\sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - x} = -\frac{\beta\hbar}{(2\pi i)}\int_C \frac{1}{e^{\beta\hbar z}+1}\,\frac{e^{\eta z}}{z-x}\,dz = \text{ ugyanez elvégezhető}$$

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta\hbar} \qquad\qquad = \frac{\beta\hbar}{e^{-\beta\hbar x}+1}$$

Miért kellett ez? Azért mert ennek alapján, hogy

$$\sum_n \frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}(\varepsilon_k-\mu)} = \mp\frac{\beta\hbar}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}\mp 1}$$

STAT FIZ

8. gyak. (11.22.)

Beadandó:

1.1

a) $|1,0,1,1 \ldots\rangle$

Sértetlenül levezető állapot.

b)

bonyolult

$|2,0,2,0 \ldots\rangle$

akkor időben van irány, a ~~kezdet~~ beadandót lapokon megvan így

STATFIZ

11. előadás (11.26.)

Amit eddig tudunk:

$$G_0(x,x',i\omega_k)=\sum_k \frac{\varphi_k(x)\varphi_k^*(x')}{i\omega_k-\frac{1}{\hbar}(\epsilon_k-\mu)}$$

Térjünk át síkhullám repr-be

$$\varphi_k \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}\underline{x}}\chi_n(s) \qquad k=(\underline{k}, n)$$

ahol $\sum_n \chi_n(s)\chi_n(s')=\delta_{ss'}$

Mivel φ-k indexe u.a. mint ez $e^{ik(x-x')}$ mint $\delta_{ss'}$

kapunk: $$G_0(\underline{x},s,\underline{x}',s',i\omega_n)=\frac{1}{V}\delta_{ss'}\sum_k \frac{e^{ik(\underline{x}-\underline{x}')}}{i\omega_n-\frac{1}{\hbar}(e_k-\mu)}$$

$$\Rightarrow \quad \underline{G_0(\underline{k},i\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-\frac{1}{\hbar}(e_k-\mu)}}$$ (Véle levesszük a $\delta_{ss'}$ függést.)

homogén rendszerben: $G(x,x',i\omega_n)=G(\underline{x}-\underline{x}',s,s',i\omega_n)$

de csak homogén rendszerben.

mert a imp repr-ra csak homogén rendszerben lehet áttérni.

inhomogénnél: $G(\underline{x}-\underline{x}', \frac{\underline{x}+\underline{x}'}{2},\dots)$ van.

illetve $\underline{x}-\underline{x}'$-re Fourier-trf. is van egy

$G(\underline{k},\underline{R}, s,s',i\omega_n)$ van, de

ez csak egy nyalánkság.

Emlékeztető:

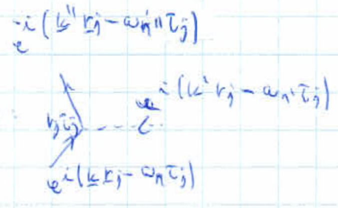
$K=K_0+K_1$ ahol $K_0=\sum_{\underline{k},s}(e_{\underline{k}}-\mu)\,a^+_{\underline{k}s}a_{\underline{k}s}$ $\qquad e_{\underline{k}}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

$$K_1=\frac{1}{2V}\sum_{ss'} v(q)\,a^+_{k-q,s}\,a^+_{k'+q,s'}\,a_{k',s'}\,a_{k,s} \qquad v(q)=\int e^{i\underline{q}\underline{r}}\,v(\underline{r})\,d^3\underline{r}$$

pl. ha $v(r)\sim\frac{1}{r}$

akkor $v(q)\sim\frac{1}{q^2}$

Egy ilyen esetén:



hely repr-ben ez mult. egy $$\int d^3\underline{r}_j\int_0^{\beta\hbar}d\tau_j\, e^{i\left[(\underline{k}+\underline{k}'-\underline{k}'')\underline{r}_j-(\omega_n+\omega_{n'}-\omega_{n''})\tau_j\right]}$$

$$\sim\delta_{k+k',k''}\,\delta_{\omega_n+\omega_{n'},\omega_{n''}}$$

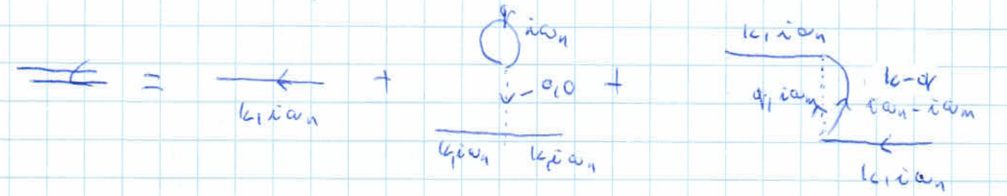
⟹ Minden vertex-ben van egy imp és frekv megmaradást

Gráfszabályok impulzus reprezentációban (n-rendben)

általános invariancia esetén. $G(\mathbf{r},s,\tau,\mathbf{r}',s',\tau') = \delta_{ss'} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} G(\mathbf{k},i\omega_n) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-i\omega_n(\tau-\tau')}$

$\delta_{ss'}$ igaz, ha $v_{ss'}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ határozottan s-független.

$G(k,i\omega)$-t egyszerű kiszámolni, és ebből számolják $G(r,s\dots)$-t ha szükség volt.



1) Rajzoljuk le minden n kh-i vonalat ((2n+1) db) tartalmazó, topológiailag különböző, 2 külső vonallal rendelkező csatolt gráfot!
(vagyis csatolt, egy elvágásra nem esik szét)

2) Csúcsokban osszuk ki az n különböző új frekvencia és impulzus változót!
(Ezekre lesz majd összegzés és integrálás)

3) $\overset{k,i\omega_n}{\longrightarrow}$ $G_0(\mathbf{k},i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu)}$ $\quad e_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$

4) $\cdots\overset{k}{\cdots}\cdots$ $\left(-\frac{1}{\hbar}\right) v(q, i\omega_n) = \left(-\frac{1}{\hbar}\right) v(q)$

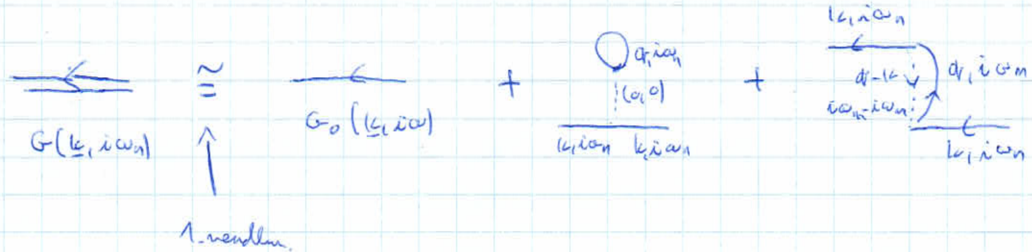
5) Egyidejű vonalakra még kell rakni egy $e^{i\omega\eta}$ faktort

6) összegzés az n független frekvencián: $\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n$

összegzés az n független impulzuson: $\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} = \int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$

7) Gráf járuléka szorzandó

$[\pm(2s+1)]^L$-lel, ahol L a zárt propagátor hurkok száma.



$$= G_0(\underline{k}, i\omega_n) - \frac{1}{\beta\hbar^2}\sum_m \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left(G_0(k, i\omega_n)\right)^2 \left[v(\underline{q}-\underline{k}) \pm (2s+1)v(0)\right] G_0(q, i\omega_m) e^{i\omega_m\eta}$$

két láb járuléka

ugyanazon jelöltük, mert mindkettőnél $(q, i\omega_n)$-nel jelöltem a belső vonalat.

$$= G_0(\underline{k}, i\omega_n) - \frac{1}{\hbar}\left(G_0(\underline{k}, i\omega_n)\right)^2 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[v(\underline{q}-\underline{k}) \pm (2s+1)v(0)\right] \underbrace{\frac{1}{\beta\hbar}\sum_m G_0(q, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta}}_{(\mp)\frac{\beta\hbar}{e^{\beta(\varepsilon_q-\mu)}\mp 1}}$$

- -

Kérdés: hogy lehet a fenti G-vel termodinamikai mennyiségeket felírni?

$$N(T, V, \mu) = \mp \sum_s \int d^3\underline{r} \lim_{\underline{r}'\to\underline{r}} \lim_{s'\to s} \lim_{\tau'\to\tau+\eta} G(r, s, \tau, r', s', \tau')$$

$$E = \frac{1}{2}(\mp)\sum_s \int d^3\underline{r} \lim_{\underline{r}'\to\underline{r}} \lim_{s'\to s} \lim_{\tau'\to\tau+\eta} \left[-\frac{\hbar\partial}{\partial\tau} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) - \mu\right] G(r, s, \tau, r', s', \tau')$$

$$\Omega(T, V, \mu) = \Omega_0(T, V, \mu) \mp \sum_s \int d^3r \lim_{\underline{r}'\to\underline{r}} \lim_{s'\to s} \lim_{\tau'\to\tau+\eta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \frac{1}{2}\left(+\frac{\hbar\partial}{\partial\tau} + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - V(r) + \mu\right) G^{(\lambda)}(r, s, \tau, r', s', \tau')$$

Ezek még végesek.

Tekintsük a Greenek közötti kapcsolatot:

$$G(r, s, \tau, r', s', \tau') = \delta_{ss'} \frac{1}{\beta\hbar}\sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} G(\underline{k}, i\omega_n) e^{ik(\underline{r}-\underline{r}') - i\omega_n(\tau-\tau')}$$

Ezek alapján tehát csak a lineáris elvégezve, a Fourier-ok tűnnek, így:

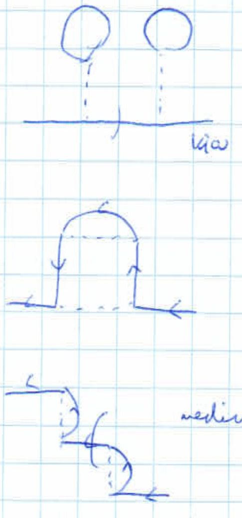
$$N = \mp(2s+1) V \frac{1}{\beta\hbar} \sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} G(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta}$$

$$E = \mp(2s+1)\frac{V}{\beta\hbar}\sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2}\left(i\hbar\omega_n + \frac{\hbar^2k^2}{2m} - \mu\right) G(\underline{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta}$$

($V(r)$ → kihagytam, mert homogén)

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

Dyson-egyenlet



Meg kell vizsgálni, hogy egy kiválasztott vonalat elvágva szét esik-e a függvény!

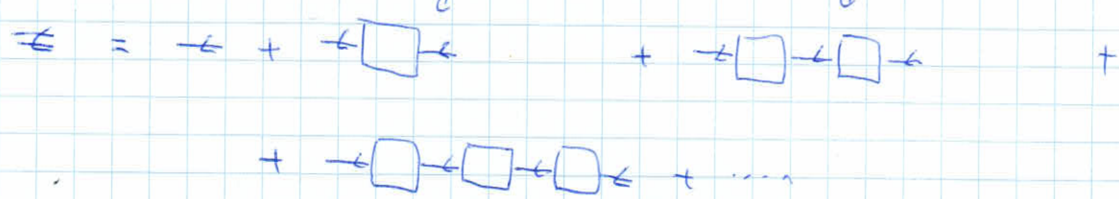
Ha igen, akkor reducibilis.

Ha nem, irreducibilis.

reducibilis

$\square$: Összes olyan diagram járuléka, amely egy belső propagátor elvágásával nem esik szét. (Σ-val jelöljük) (irreducibiliseknek)

az összes irred. — az 1-szer elvágható

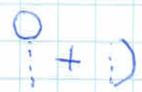


$$G = G_0 + G_0 \Sigma G \qquad \Big/ \cdot \underset{\leftarrow}{G^{-1}} \quad \underset{\rightarrow}{G_0^{-1}}$$

$$G_0^{-1} = G^{-1} + \Sigma \quad \Rightarrow \quad G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma \quad \Rightarrow \quad \text{Mivel } G_0 = \frac{1}{i\omega - \frac{1}{\hbar}(\epsilon_k - \mu)}$$

$$G(k, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}(\epsilon_k - \mu) - \Sigma(k, i\omega_n)}$$

Tehát, ha tudom Σ-t, tudom az egyrészecske Green-t is.

Σ-t nem tudom, de lehet közelíteni. pl.: $\Sigma =$ 

Itt Σ csak elsőrendű, de geometriai sor miatt egy csomó rendet már tartalmaz.

Általában az eredmény jobb így, de a módszerből nem mindig eldönthetőek meg a közelítések.

STATFIZ

9. gyak (11.29.)

Az előző órán mindenkivel egyszerűsített egy - előjellel, ami miért probléma.

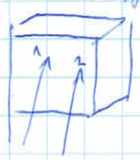
Most fontos most: ha

$$v(r_1, r_2) = \frac{e^2}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|} = v(r_1 - r_2) \;\to\; v(q) \propto \frac{1}{q^2}$$

De itt a $v(0)$ baj van, már az első rendben

Legyen az jó egyszerű, egyszerűen a Zselé modellt használjuk:

Tekintsük egyenletes eloszlást ebben n sűrűséggel



k_i - lesz e^--k

A teljes rendszer elektromosan semleges. $nV = \sum_i e$

A Hamilton: $\sim \sum v(q)\, a^\dagger_{k+q\sigma} a^\dagger_{k'-q\sigma'} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma}$ ← itt valahol divergens

Legyen $v_\alpha(r) = \frac{e_0^2}{r} e^{-\alpha r}$ ez $\alpha \to 0$ esetén a Coulomb, de csak a végén vesszük a határesetet.

$$v_\alpha(\underline{q}) = \int v_\alpha(\underline{r})\, e^{-i\underline{q}\underline{r}}\, d^3r = \int_0^\infty e_0^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r} r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{-iqr\cos\vartheta} \sin\vartheta\, d\vartheta =$$

legyen q z irányú.

$$= 2\pi e_0^2 \int_0^\infty \frac{e^{-\alpha r}}{r} r^2 dr \left[\frac{e^{-iqr\cos\vartheta}}{iqr}\right]_0^\pi = \frac{2\pi e_0^2}{iq} \int_0^\infty \left(e^{(iq-\alpha)r} - e^{(-iq-\alpha)r}\right) dr =$$

$$= \frac{2\pi e_0^2}{iq} \left[\frac{e^{(iq-\alpha)r}}{iq-\alpha} - \frac{e^{(-iq-\alpha)r}}{-iq-\alpha}\right]_0^\infty = -\frac{2\pi e_0^2}{iq}\left(\frac{1}{iq-\alpha} - \frac{1}{-iq-\alpha}\right) =$$

$$= -\frac{2\pi e_0^2}{iq} \frac{2iq}{-q^2-\alpha^2} = \frac{4\pi e^2}{q^2+\alpha^2}$$

A Hamiltonian első közelítése:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j\\ i\neq j}} v_\alpha(|\underline{r}_i - \underline{r}_j|) - n\sum_{i=1}^{N} \int v_\alpha(|\underline{r} - \underline{r}_i|)\, d^3r + \frac{n^2}{2} \int v_\alpha(|\underline{r} - \underline{r}'|)\, d^3\underline{r}'\, d^3\underline{r}$$

ezt majd itt másodkvantáljuk

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} \longleftrightarrow \sum_{ks} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{ks}^+ a_{ks}$$

$$\frac{1}{2}\sum_{i,j} v_\alpha(\underline{r}_i - \underline{r}_j) \longleftrightarrow \frac{1}{2V} \sum_{\substack{k k' q \\ s s'}} v_\alpha(q)\, a_{k+q,s}^+ a_{k'-q,s'}^+ a_{k's'} a_{ks}$$

$$-n \sum_{i=1}^{N} \int v_\alpha(\underline{r} - \underline{r}_i) d^3r \longleftrightarrow -n \sum_s \iint \Psi^+(\underline{r}, s)\, v_\alpha(\underline{r} - \underline{r}')\, \Psi(\underline{r}', s)\, d^3r\, d^3r' =$$

$$= -\frac{n}{V} \sum_{k,m} \sum_{\substack{k' m' \\ s}} \int e^{-ikr} \chi_m(s) a_{km}^+ v_\alpha(\underline{r} - \underline{r}') e^{ik'r'} \chi_{m'}(s) a_{k'm'} =$$

$$= -\frac{n}{V} \sum_{m m'} \sum_{k k'} \delta_{m m'} a_{km}^+ a_{k'm'} \underbrace{\int v_\alpha(\rho) e^{-i(k-k')R} e^{+i(k-k')\frac{\rho}{2}} d^3R\, d^3\rho}$$

$\sim \delta_{kk'} \cdot V$ az R integrálva

$\Rightarrow$ ρ-integrálás $\int v_\alpha(\rho)\, d^3\rho =$

$= v_\alpha(q=0)$

$$= -n \sum_{km} v_\alpha(q=0)\, a_{km}^+ a_{km}$$

$$\frac{1}{2} n^2 \int v_\alpha(\underline{r} - \underline{r}')\, d^3r\, d^3r' = \frac{1}{2} n^2 \int d^3R \int d^3\rho\, v(\rho) = \frac{1}{2} n^2 V v(0).$$ és itt is, ahol is konstans.

Tudjuk, hogy $\sum_{ks} a_{ks}^+ a_{ks} = \hat{N} \underset{\uparrow}{=} N \overset{\swarrow}{=} nV$

N = nV: a töltéssemlegességi feltétel miatt

$\hat{N} = N$: N részecskés fermion rendszer

A 3. és 4. tag:

$$-n v_\alpha(0) nV + \frac{n^2}{2} v_\alpha(0) V = -\frac{1}{2} v_\alpha(0) n^2 V$$

A 2. tagban leválasztjuk a $q=0$ járulékot:

$$\Big(\sum_{\substack{kk' \\ ss' \\ q \neq 0}} + \sum_{\substack{kk' \\ ss' \\ q = 0}}\Big) = (2a) + (2b)$$

(2b) kiírva: $\frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk' \\ ss'}} v_\alpha(0) \big(\underbrace{a_{ks}^+ a_{k's'}^+ a_{k's'} a_{ks}}_{a_{ks}^+ a_{ks} a_{k's'}^+ a_{k's'} - a_{ks}^+ a_{k's}\, \delta_{kk'} \delta_{ss'}}\big)$

$$= \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk' \\ ss'}} v_\alpha(0)\, a_{ks}^+ a_{ks} a_{k's'}^+ a_{k's'} - \frac{1}{2V} \sum_{ks} v_\alpha(0)\, a_{ks}^+ a_{ks} =$$

$$= \frac{1}{2V} v_\alpha(0) \left(N^2 - N\right) = \frac{1}{2} V v_\alpha(0) \left(\frac{N^2 - N}{V^2}\right) =$$ termodinamikai limeszben $N^2 \gg N$ $=$

$$= \frac{1}{2} n^2 V v_\alpha(0)$$ és pont kiejti a 3+4. tagot

Tehát:

$$\hat{H} = \sum_{ks} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{ks}^+ a_{ks} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{kk' \\ ss' \\ q \neq 0}} v_\alpha(q)\, a_{k+q,s}^+ a_{k'-q,s'}^+ a_{k',s'} a_{k,s}$$

Ha most $q \neq 0$, akkor $v_{\alpha \to 0}(q)$ limesz elvégezhető

STATFIZ

12. előadás (12.03.)

Dyson-egyenlet alapján:

$$G(k,i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu) - \Sigma(k,i\omega_n)}$$

$$E = \mp(2s+1)\frac{V}{\beta\hbar}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sum_n \frac{1}{2}(i\hbar\omega_n + e_k+\mu)\, G(k,i\omega_n)\, e^{i\omega_n\eta}$$ Alapállapot energiája

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

Az energiában:

$$\frac12(i\hbar\omega_n+e_k-\mu)G = \frac12\frac{i\hbar\omega_n+e_k+\mu}{i\omega_n-\frac1\hbar(e_k-\mu)-\Sigma} = \frac{\hbar}{2}\,\frac{i\omega_n - \frac1\hbar(e_k-\mu)-\Sigma+\frac{2e_k}{\hbar}+\Sigma}{i\omega_n-\frac1\hbar(e_k-\mu)-\Sigma} =$$

$$= \frac{\hbar}{2} + \frac{e_k+\frac12\hbar\Sigma}{i\omega_n-\frac1\hbar(e_k-\mu)-\Sigma}$$

Az Ω-ban u.a.:

$$\frac12\,\frac{i\hbar\omega_n - e_k+\mu}{i\omega_n-\frac1\hbar(e_k-\mu)-\Sigma^\lambda} = \dots = \frac\hbar2+\frac\hbar2\,\frac{\Sigma^\lambda}{i\omega_n-\frac1\hbar(e_k-\mu)-\Sigma^\lambda}$$

Mivel $\sum_n e^{i\omega_n\eta}=0$, ezért a konstans taggal nem kell foglalkozni.

$$\Rightarrow\quad E = \mp(2s+1)\frac{V}{\beta\hbar}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sum_n \left(e_k+\frac12\hbar\,\Sigma(k,i\omega_n)\right)G(k,i\omega_n)\,e^{i\omega_n\eta}$$

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

ezek kellenek a zselé modellhez.

Bozonokra:

A $\sum_n e^{i\omega_n\eta}$ — $\eta=0$ esetén divergál; $\eta=\beta\hbar$ esetén 2π-t adok össze $\Rightarrow$ divergál.

tehát ez a periodikus Dirac-delta fv. $\Rightarrow$ $0<\eta<\beta\hbar$-ra $\sum_n e^{i\omega_n\eta}=0$

Fermionokra:

itt ugyanez, váltakozó divergálás negatív.

Ezért megszabadultunk egy a konstans tagtól az előbb.

Emlékeztető: $G^\lambda = G_0 + G_0\Sigma^\lambda G_0 + G_0\Sigma^\lambda G_0\Sigma^\lambda G_0 + \dots$

$$\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta K_0}\right) = e^{-\Omega_0\beta} \quad \text{ahol} \quad K_0=\sum_{k,s}(e_k-\mu)\,a^+_{ks}a_{ks}$$

Fermionokra: $\Omega_0 = -\frac{1}{3\pi^2}V\frac{\hbar^2}{m}\int_0^\infty \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)}+1}\,k^4\,dk$

Technikai részei a szabad modellnek (alaposan nem kell, csak a lényeg):

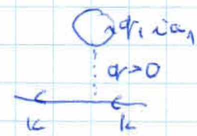
$T \to 0$ esetén
$$n(\underline{k}) = \Theta(k_F - k)$$
$$\Rightarrow \int_0^\infty \frac{1}{e^{\beta(e_k - \mu)}+1} k^4 dk \Rightarrow \int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{k_F^5}{5}$$

tehát
$$\Omega_0 = -\frac{2}{15\pi^2} V \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \mu^{5/2}$$

$T \to \infty$ esetén Fermi $\to$ Boltzmann
$$\int_0^\infty \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right)}+1} k^4 dk \to \int e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu\right)} k^4 dk$$

$$\Omega_0 = -2V e^{\beta\mu} (k_B T) \left(\frac{m k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$
termális de-Broglie-hossz

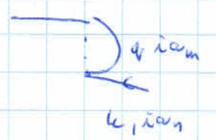
gyakorlati tanulság: $\sum\limits_{\substack{k,k',q\neq 0\\ s,s'}} \underset{\frac{4\pi e^2}{q^2}}{v(q)}\, a^+_{k+q,s} a^+_{k'-q,s'} a_{k',s'} a_{k s}$ kihagytuk $q=0$ miatt, tehát az ilyen gráfot nem kell nézni:



Ez a gráf a szabad modellben nincs, ez semleges közeg.

Tehát a Hartree-Fock-közelítés:

$$G_{HF}(k, i\omega_n) = G_0(k, i\omega_n) - \frac{1}{\beta\hbar^2} G_0^2(k, i\omega_n) \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v(q-k) \underbrace{\sum_m G_0(q, i\omega_m) e^{i\omega_m\eta}}_{\frac{\beta\hbar}{e^{\beta(e_q-\mu)}+1} = \beta\hbar n_q}$$



Tehát $\Sigma_{HF}(k, i\omega_n) = -\frac{1}{\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v(q-k) n_q^{(0)}$ ← ez a régi HF-energiánk

$$\Omega_{HF} = \frac{V}{\beta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_n \Sigma_{HF}^\lambda(k, i\omega_n) G_0(k, i\omega_n) e^{i\omega_n\eta}$$
def. sz. ezen nem G_{HF} hanem G_0

mivel Σ_{HF} nem függ ω-tól, a $G_0 e^{i\omega_n\eta}$-t rögtön ki lehet számolni

$$\Omega_{HF}(T, N, \mu) = -V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v(\underline{k}-\underline{q})\, n_{\underline{k}}^{(0)} n_{\underline{q}}^{(0)}$$

a $v(k-q)$ integrálás a nehéz, de $T \to 0$ esetén n-ek lépcsők, így el lehet végezni.

Végezzük el mindent!

$$\delta\Sigma_{HF}(k) = -\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3}(2\pi)\int_0^{k_F} dk' \int_0^{\pi} \sin\vartheta \, d\vartheta \, \frac{k'^2}{k^2+k'^2-2kk'\cos\vartheta} =$$ elképzeljük, hogy kiszámolja $=$

$$= -\frac{e_0^2}{(2\pi)}\left[\frac{k_F^2-k^2}{2k} \ln\left[\left(\frac{k+k_F}{k-k_F}\right)^2\right] + 2k_F\right.$$

még ezt kell kiintegrálni k-ra. Mathematica-val elvégezhető

$$\Omega_{HF}(0,N,\mu) = -\frac{Ve^2}{4\pi^3}k_F^4$$

Általában: $\Omega = \Omega_0 + \Omega_{HF} + \Omega_{korr}$ korrelációs
$\sim$ ~~kicserélődési~~ tagok. Ezt nehéz elvégezni

$$N = -\frac{\partial \Omega_0(T,V,N)}{\partial\mu}\Big|_{\mu=\mu_0} = \frac{1}{3\pi^2}Vk_F^3$$ szabad gáz közelítés.

$$\Omega_{HF}(0,V,\mu_0) = -\frac{3}{4\pi}e^2k_F N$$

$$\Omega = \Omega_0 + \Omega_{HF} + \Omega_{korr}$$

Ω_0: e független; Ω_{HF}: e^2; Ω_{korr}: $O(e^2)$ ← kisebb, nagyjából az első elhanyagolt tag 2-edrendű (vagy mi)

$$F = \Omega_0(\mu_0) + \mu_0 N + \Omega_{HF}(\mu_0) + \Omega_{korr}(\mu_0)$$ így kéne számolni

Ha tudom a HF-energiát és Ω_0-t, akkor a karakterisztikus mennyiségek:

Bohr-sugár:
$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

átlagos e^--e^- távolság (egy e^--re jutó térfogat sugara): $\frac{V}{N} = \frac{4}{3}r_0^3\pi \Rightarrow r_0 = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3}$

H alapállapoti energiája: $E_0 = -\frac{e^2}{2a_0}$ (Rydberg-állandó) $\approx 13{,}6\,\mathrm{eV}$

Fermi hullámszám: $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$

definiáljuk $r_s := \frac{r_0}{a_0} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{1}{k_F a_0} \cong \frac{1{,}9192}{k_F a_0}$

Alapállapotban: $\mu_0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = (k_F a)^2 \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{1}{r_s^2}\underbrace{\frac{\hbar^2}{ma_0e^2}}_{1}\frac{e^2}{2a_0} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{1}{r_s^2}\frac{e^2}{2a_0}$

$$\Rightarrow \Omega_0 = -\frac{2}{15\pi^2}V\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\mu_0^{5/2} = -\frac{2}{5}N\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{1}{r_s^2}\frac{e^2}{2a_0}$$

$$\frac{E_{kin}}{N} = \frac{\Omega_0 + \mu_0 N}{N} = \frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{1}{r_s^2}\,\frac{e^2}{2a_0}$$

A HF járulék az alapállapoti energiához:

$$E_{HF} = \frac{\Omega_{HF}}{N} = -\frac{3}{4\pi}e_0^2 k_F = -\frac{3}{2\pi}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{1}{r_s}\,\frac{e_0^2}{2a_0}$$

ha r_s kicsi akkor $E_{HF} > E_{kin}$ lenne, DE!

$$r_s = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{1}{k_F a_0} \qquad \text{de } k_F \; (3\pi n)^{1/3}$$

ha r_s kicsi, k_F nagy $\Rightarrow$ n nagy.

Tehát a HF-közelítés akkor lesz jó, ha a sűrűség nagy!

$$G^\lambda = G_0 + G_0\Sigma^\lambda G_0 \qquad \text{ahol} \quad \Sigma^\lambda = \underset{\Sigma_{HF}}{\underset{\parallel}{\Sigma_1}} + \Sigma_2$$

Σ_1-ben

Σ_2-ben:

$O(e^4)$

$O(e^4)$

ez divergens (tejfejű)
ok: Coulomb-kH

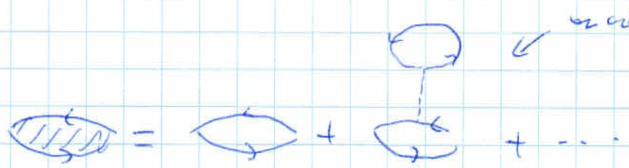
Állítás: ha az egymás utáni egyre divergensebb tagokat összeadjuk, az véges lesz.

(proper diagram)

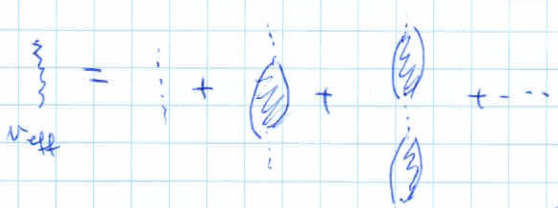
polarizációs diagramok:

$-4\pi\Pi(k, i\omega_n)$

- legyen 2 külső kH-vonallal kapcsolódó, amit $(k, i\omega_n)$-ek
- Egy belső kH vonal átvágásával nem esik szét, úgy hogy a külső élek különböző darabokra tartoznak.



ez azért jó nagyság, mert külön nem esik szét elvágva a két külső vonal egyben marad.
$\Rightarrow$ sokkal több lesz jó.
(renormálás után modellben ilyen nem lesz)



ez már nagyon egysz.

$$v_{eff}(k, i\omega_n) = v + v\Pi v_{eff}$$ (hasonló egyenlet, mint a Dyson.

$$\Rightarrow \quad v_{eff}(k, i\omega_n) = \frac{v(k)}{1 - \Pi(k, i\omega_n)\, v(k)}$$

RPA - közelítés:

v_{eff}-re már ez is végtelen sok összegét jelenti

$$\Sigma^{\lambda}_{corr} \cong \Sigma^{\lambda}_{v} - \Sigma^{\lambda}_{HF}$$

Azonnal:

ez így már szép és jó [illegible]

Tehát $\Sigma^{\lambda}_{corr} = -\frac{1}{\hbar}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{\beta\hbar} \sum_m \left[v^{\lambda}_{eff}(q, i\omega_m) - \lambda v(q) \right] G_0(k+q, i\omega_n + i\omega_m)\, e^{i\omega_m \eta}$

$$v^{\lambda}_{eff}(k, i\omega_n) = \frac{\lambda v(q)}{1 - \lambda v(q) \cdot \Pi_0(k, i\omega_n)}$$

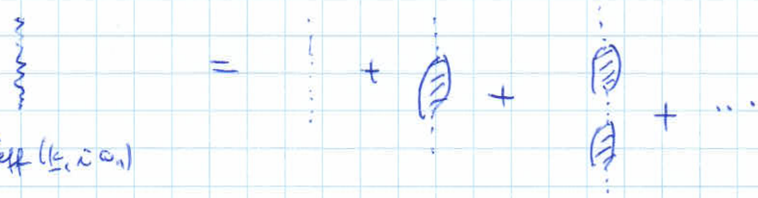
STAT FIZ

10. gyak. (12.06.)

Buborék diagram:

$-\hbar\,\Pi(\underline{k}, i\omega_n)$

RPA közelítésnél megállunk itt

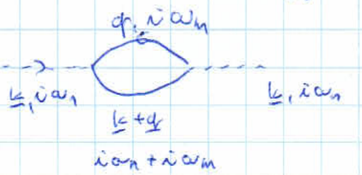


$-\frac{1}{\hbar} v_{eff}(\underline{k}, i\omega_n)$

A Dyson-egyenlethez hasonlóan írható:

$$v_{eff} = \frac{v(\underline{k})}{1 - \Pi(\underline{k}, i\omega_n)\cdot v(\underline{k})}$$

Az RPA közelítés alapján:



$$-\hbar\,\Pi(\underline{k}, i\omega_n) = \frac{-(2s+1)}{\beta\hbar} \sum_m \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, G_0(\underline{q}, i\omega_m)\, G_0(\underline{k}+\underline{q}, i\omega_n + i\omega_m) =$$

$$= -\frac{2s+1}{\beta\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \sum_m \frac{1}{i\omega_m - \frac{1}{\hbar}(e_q - \mu)}\, \frac{1}{i\omega_n + i\omega_m - \frac{1}{\hbar}(e_{\underline{k}+\underline{q}} - \mu)} =$$

parciális törtekre bontás:

$$= -\frac{2s+1}{\beta\hbar} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \sum_m \left(\frac{1}{i\omega_m - \frac{1}{\hbar}(e_q - \mu)} - \frac{1}{i\omega_n + i\omega_m - \frac{1}{\hbar}(e_{\underline{k}+\underline{q}} - \mu)} \right) \cdot \frac{1}{i\omega_n - \frac{1}{\hbar}(e_{\underline{k}+\underline{q}} - e_{\underline{k}})} =$$

A számlálóba konvergencia faktorokat rakva:

$$\left(\frac{e^{i\omega_m \eta}}{i\omega_m - \frac{1}{\hbar}(e_q - \mu)} - \frac{e^{i(\omega_m + \omega_n)\eta}}{i\omega_n + i\omega_m - \frac{1}{\hbar}(e_{\underline{k}} + q - \mu)} \right)$$

Így az összegzés elvégezhető:

$$\Pi(\underline{k}, i\omega_n) = (2s+1) \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{n_q^{(0)} - n_{\underline{k}+\underline{q}}^{(0)}}{i\hbar\omega_n - (e_{\underline{k}+\underline{q}} - e_q)}$$

Termodinamikai potenciál:

$$\Omega = \Omega_0 + \Omega_{HF} + \Omega_{kom}$$

$$\Rightarrow \quad \Omega_{kom}(T,V,\mu) = -\frac{V}{\beta}\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\sum_n e^{i\omega_n\eta}\,\Sigma^{\lambda}_{kom}\,G_0(\underline{k}, i\omega_n)$$

ahol Σ^{λ}_{kom}

járuléka

bevezetve $v^{\lambda}_{eff}(\underline{k}, i\omega_n) = \dfrac{\lambda v(\underline{k})}{1-\lambda v(\underline{k})\,\Pi_0(\underline{k}, i\omega_n)}$ bevezetésével:

$$\Omega_{kom}(T,V,\mu) = -V\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left[v^{\lambda}_{eff} - \lambda v(\underline{q})\right]\frac{1}{\beta\hbar}\sum_m G_0(\underline{k}, i\omega_n)\,G_0(\underline{k}+\underline{q}, i\omega_n + i\omega_m) =$$

$$= \sim \int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\underbrace{\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\left[\frac{\lambda v(q)\,\Pi_0(q, i\omega_n)}{1-\lambda v(q)\,\Pi_0(q, i\omega_n)} - \lambda v(q)\,\Pi_0(q, i\omega_m)\right]}_{\left[\ln\left(1 - v(q)\Pi_0(q, i\omega_n)\right)\right] + v(q)\Pi_0(q, i\omega_n)}$$

Mivel $\omega_n = \dfrac{(2n+1)\pi}{\beta\hbar}$ ezért $T \to 0$ esetén $\Delta\omega_n = \dfrac{2\pi}{\beta\hbar} \to 0$

$$\Rightarrow \frac{1}{\beta\hbar}\sum_n \sim \frac{1}{\beta\hbar\,\Delta\omega_n}\sum_n \Delta\omega \sim \frac{1}{2\pi}\int d\omega$$

Ekkor:

$$\Pi_0(\underline{k}, i\omega) = \frac{-mk_F}{2\pi^2\hbar^2}\left[1 + \frac{m^2}{2\hbar^4 k^3 k_F}\left(4\varepsilon_{k_F}\varepsilon_k - (\varepsilon_k + i\omega\hbar)^2\right)\ln\left(\frac{\varepsilon_k + \frac{\hbar^2 k_F k}{m} + ik\omega}{\varepsilon_k - \frac{\hbar^2 k_F k}{m} + ik\omega}\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{m^2}{2\hbar^4 k^3 k_F}\left(4\varepsilon_{k_F}\varepsilon_k - (\varepsilon_k - i\omega_n\hbar)^2\right)\ln\left(\frac{\varepsilon_k + \frac{\hbar^2 k_F k}{m} - ik\omega}{\varepsilon_k - \frac{\hbar^2 k_F k}{m} - ik\omega}\right)\right]$$

statikus határeset: $\hbar\omega \ll \dfrac{\hbar^2 k_F}{2m}$, $T = 0$

$$\Pi_0(k, 0) = -\frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2}\left[1 + \frac{k_F}{2k}\left(1 - \frac{k^2}{4k_F^2}\right)\ln\left(\frac{k+2k_F}{k-2k_F}\right)\right]$$

hosszúhullámú közelítés: $k \ll k_F$

$$\Pi_0(\underline{k}, i\omega) = -\frac{mk_F}{\pi^2\hbar^2}\,R(z) + \sigma(y) \qquad \text{ahol} \quad z = \frac{\omega m}{\hbar k_F k}$$

$$y = \frac{k}{k_F}$$

STATFIZ

13. előadás (12.10.)

Lehmann-reprezentáció ([illegible] előállítás)

$$G(\underline{k}, s, z) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\underline{k}, s, \omega)}{z-\omega} \leftarrow \text{Spektrál fv Fourier-transzformáltja (valós)}$$

Állítás: $z = \omega + i\varepsilon$ -ra $\quad G(\underline{k}, s, z=\omega+i\varepsilon) = G^R(\underline{k}, s, \omega)$ retardált

$z = \omega - i\varepsilon$ -ra $\quad G(\underline{k}, s, z=\omega-i\varepsilon) = G^A(\underline{k}, s, \omega)$ avanzsált

$z = i\omega_\ell \quad G(\underline{k}, s, z=i\omega_\ell) = G(\underline{k}, s, i\omega_\ell)$ ~~[illegible]~~

Az eddigi termodinamikai Green-fv:

$$G(\underline{k}, i\omega_\ell) \xrightarrow[i\omega_\ell \to \omega + i\varepsilon]{} G^R(\underline{k}, s, \omega)$$

Spektrál fv:

$$\rho(\underline{r}, s, t, \underline{r}', s', t') = \langle [\psi(\underline{r}, s, t), \psi^+(\underline{r}', s', t')]_\mp \rangle = \delta_{ss'} \rho(\underline{r}, s, t, \underline{r}', s', t')$$

$$\text{ahol } \psi(\underline{r}, s, t) = e^{\frac{iKt}{\hbar}} \psi(\underline{r}, s) e^{-\frac{iKt}{\hbar}}$$

$$\rho(\underline{r}, s, t, \underline{r}', s', t') = \mathrm{Tr}\left\{ \frac{e^{-\beta K}}{Z} [\psi(\underline{r}, s, t), \psi^+(\underline{r}', s', t')]_\mp \right\}$$

$$\hat{N}|n\rangle = N_n |n\rangle$$

$$\hat{K}|n\rangle = (E_n - \mu N_n)|n\rangle = K_n |n\rangle$$

Ha $\hat{\rho}_G = \frac{e^{-\beta K}}{Z}$ akkor $\hat{\rho}_G |n\rangle = \frac{e^{-\beta K_n}}{Z_G}|n\rangle =: w_n |n\rangle$

$$\rho(\underline{r}, s, t, \underline{r}', s', t') = \sum_{nm} \Big(\langle n | \rho\, e^{\frac{iKt}{\hbar}} \psi(\underline{r}, s) e^{-\frac{iKt}{\hbar}} | m\rangle \langle m | e^{\frac{iKt'}{\hbar}} \psi^+(\underline{r}', s') e^{-\frac{iKt'}{\hbar}} |n\rangle \mp$$

$$\mp \langle n | \rho\, e^{\frac{iKt'}{\hbar}} \psi^+(\underline{r}', s') e^{-\frac{iKt'}{\hbar}} | m\rangle \langle m | e^{\frac{iKt}{\hbar}} \psi(\underline{r}, s) e^{-\frac{iKt}{\hbar}} |n\rangle \Big) =$$

$$= \sum_{nm} w_n \Big[e^{\frac{iK_n t}{\hbar}} e^{-\frac{iK_m t}{\hbar}} e^{\frac{iK_m t'}{\hbar}} e^{-\frac{iK_n t'}{\hbar}} \langle n | \psi(\underline{r}, s) | m\rangle \langle m | \psi^+(\underline{r}', s') | n\rangle \mp$$

$$\mp e^{\frac{iK_n t'}{\hbar}} e^{-i\frac{K_m t'}{\hbar}} e^{i\frac{K_m t}{\hbar}} e^{-\frac{iK_n t}{\hbar}} \langle n | \psi^+(\underline{r}', s') | m\rangle \langle m | \psi(\underline{r}, s) | n\rangle \Big] =$$

kihasználva, hogy $w_m = \frac{e^{-\beta K_m}}{Z} = \frac{e^{-\beta K_n}}{Z} e^{-\beta(K_m - K_n)} = w_n e^{-\beta(K_m - K_n)}$

+ az egyik helyen cseréljük n-m-et:

$$= \sum_{n,m} w_n \left(1 \mp e^{\beta(K_n - K_m)}\right) e^{\frac{i(K_n - K_m)}{\hbar}(t-t')} A_{mn}(\underline{r}, s, \underline{r}', s')$$

$$\text{ahol } A_{mn}(\underline{r}, s, \underline{r}', s') = \langle n | \psi(\underline{r}, s) | m\rangle \langle m | \psi^+(\underline{r}', s') | n\rangle$$

A spektrál fv Lehmann-repr.-ja.

Ez alapján gerjesztési adatok számolhatók, ahol $N_n = N_{m-1}$.

Ennek könnyen áttérhetünk Fourierre:

$$\rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\underline{r},s,t,\underline{r}',s',0)\, e^{i\omega t}\, dt$$

$$\rho(\underline{r},s,t,\underline{r}',s',t') = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega)\, e^{-i\omega(t-t')}\, \frac{d\omega}{2\pi}$$

Mivel $\rho(t)$-ben csak e-ados t-függés van a trafóltja Dirac-δ

$$\rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega) = 2\pi \sum_{mn} w_n \left(1 \mp e^{\beta(K_n-K_m)}\right) A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s')\, \delta\!\left(\omega - \frac{K_m-K_n}{\hbar}\right)$$

Bármely két mátrix-elem, ahol az átmenet nem 0, az energiakülönbségük ex. nincs. [?]

Összegszabályok:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega) = \delta(\underline{r}'-\underline{r})\,\delta_{ss'}$$

miért? mert az u.a. mint a Fourier-trafó a $t=t'$, és $\rho(\underline{r},s,t,\underline{r}',s',t')$ def-jében ψ és ψ^+ egyidejűleg [?] kommutál.

$$\int \frac{\rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega)}{e^{\beta\hbar\omega} \mp 1} \frac{d\omega}{2\pi} = \langle \hat{n}(\underline{r}',s',\underline{r},s) \rangle$$

bizonyítás [?]:

$$\int \frac{\rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega)}{e^{\beta\hbar\omega} \mp 1} \frac{d\omega}{2\pi} = \int \frac{d\omega}{e^{\beta\hbar\omega}\mp 1} \sum_{mn} w_n \left(1 - e^{-\beta(K_m-K_n)}\right) A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s')\, \delta\!\left(\omega - \frac{K_n-K_m}{\hbar}\right) =$$

$$= \sum_{mn} w_n \frac{\left(1 \mp e^{\beta(K_n-K_m)}\right)}{e^{\beta(K_m-K_n)} \mp 1} A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s') = \sum_{mn} \underbrace{w_n\, e^{\beta(K_n-K_m)}}_{w_m} \frac{e^{-\beta(K_n-K_m)} \mp 1}{e^{\beta(K_m-K_n)} \mp 1} A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s')$$

ezzel egyszerűsítünk

$$= \sum_{mn} w_m \langle m | \psi^+(\underline{r}',s') \underbrace{|n\rangle\langle n|}_{I} \psi(\underline{r},s) | m \rangle = \sum_m w_m \langle m | \psi^+(\underline{r}',s')\psi(\underline{r},s) | m \rangle =$$

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

Spec eset: Homogén rendszer.

$$[H,\hat{p}] = 0 \qquad \text{ahol } \hat{p} = \hbar \sum_{\underline{k},s} \underline{k}\, a^+_{\underline{k}s} a_{\underline{k}s} \qquad \begin{matrix} \hat{p}|m\rangle = q_m|m\rangle \\ \hat{S}|m\rangle = S_m|m\rangle \end{matrix}$$

$$\psi(\underline{r},s) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{k}s} e^{i\underline{k}\underline{r}} a_{\underline{k}s}$$

$$A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s') = \langle n | \sum_{\underline{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}\underline{r}} a_{\underline{k}s} | m \rangle \langle m | \sum_{\underline{k}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\underline{k}'\underline{r}'} a^+_{\underline{k}'s'} | n \rangle$$

teljesül [?], csak mivel

$$\left.\begin{matrix} S_n = S_m - \hbar s \\ S_n + \hbar s' = S_m \end{matrix}\right\} \Rightarrow s = s'$$

ugyanígy $\underline{k}' = \underline{k}$

$$A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s') = \delta_{ss'} \frac{1}{V} \sum_{k} e^{ik(\underline{r}-\underline{r}')} \underbrace{\langle n | a_{ks} | m \rangle \langle m | a^{+}_{ks} | n \rangle}_{\text{valós: } |\langle n | a_{ks} | m \rangle|^2 =: A(\underline{k},s)}$$

Mivel csak $\underline{r}-\underline{r}'$-től függ, tudunk Fourierezni

$$= \frac{\delta_{ss'}}{V} \sum_{k} A(\underline{k},s)\, e^{i\underline{k}(\underline{r}-\underline{r}')}$$

Ezt visszaírva a spektrálfv.-be:

$$\rho(\underline{k},s,\omega) = \int \rho(\underline{r},s,0,s,\omega)\, e^{-i\underline{k}\underline{r}}\, d^3\underline{r}$$

$$\rho(\underline{r},s,\underline{r}',s') = \frac{\delta_{ss'}}{V} \sum_{k} \rho(k,s,\omega)\, e^{i\underline{k}(\underline{r}-\underline{r}')}$$

Az összegszabályok:

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \rho(\underline{k},s,\omega) = 1$$

$$\int \frac{d\omega\, \rho(\underline{k},s,\omega)}{(2\pi)\left(e^{\beta\hbar\omega} \mp 1\right)} = \langle n_{ks} \rangle = \langle a^{+}_{ks} a_{ks} \rangle$$

A retardált Green-fv:

$$i G^R(\underline{r},s,t,\underline{r}',s',t') = \Theta(t-t') \langle [\psi(\underline{r},s,t), \psi^{+}(\underline{r}',s',t')]_{\mp} \rangle = \Theta(t-t')\, \rho(\underline{r},s,t,\underline{r}',s',t') =$$

$$= \Theta(t-t') \sum_{m,n} w_n\, e^{i\frac{(E_n - E_m)}{\hbar}(t-t')} \left(1 \mp e^{\beta(E_n - E_m)}\right) A_{mn}$$

Fourierre:

$$G^R(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^R(\underline{r},s,t,\underline{r}',s',0)\, e^{i\omega t}\, dt = \int_{0}^{\infty} G^R(\underline{r},s,t,\underline{r}',s',0)\, e^{i(\omega + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{regularizáció}}}{i\varepsilon})t}\, dt =$$

$$= \sum_{mn} \frac{w_n \left(1 \mp e^{\beta(E_m - E_n)}\right)}{i} A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s') \left[\frac{e^{i\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} + i\omega - \varepsilon\right)t}}{i\omega + i\frac{E_n - E_m}{\hbar} - \varepsilon} \right]_0^{\infty} =$$

$$= \sum_{mn} \frac{w_n \left(1 \mp e^{\beta(E_m - E_n)}\right)}{\omega - \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n) + i\varepsilon} A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s')$$

$$\left[\frac{1}{x + i\varepsilon} = \frac{x - i\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \mathbb{P}\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x) \right]$$ mintha alul menne 

$$\mathrm{Re}\, G^R = \sum_{mn} w_n\, \mathbb{P}\left(\frac{A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s') \left(1 \mp e^{\beta(E_n - E_m)}\right)}{\omega - \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n)} \right)$$

$$\mathrm{Im}\, G^R = -\pi \sum_{mn} w_n \left(1 \mp e^{\beta(E_m - E_n)}\right) A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s')\, \delta\left(\omega - \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n)\right) = -\frac{1}{2} \rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega)$$

Igazolható, hogy

$$G^R(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega) = -\frac{1}{\pi} \int \frac{\mathrm{Im}\, G^R(\underline{r},s,\underline{r}',s')}{\omega - \omega' + i\varepsilon}\, d\omega' = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega')}{\omega - \omega' + i\varepsilon}$$

STAT FIZ

11. gyak (12.13.)

$$\mathcal{G}^t(k,s,z) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(k,s,\omega')}{z-\omega'}$$

ha $z = i\omega_e$ hőmérsékleti Green

$z = \omega + i\varepsilon$ retardált

$z = \omega - i\varepsilon$ avanzsált

Ezzel:
$$G(\underline{r},s,\underline{r}',s',z) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega')}{z-\omega'}$$

hogy mentesen a első valós, a második nem biztos.

Def szerint
$$G(\underline{r},s,\tau,\underline{r}',s',\tau') = -\langle T_\tau (\psi(\underline{r},s,\tau)\psi^+(\underline{r}',s',\tau')\rangle =$$

ahol $\psi(\underline{r},s,\tau) = e^{\frac{K\tau}{\hbar}}\psi(\underline{r},s)e^{-\frac{K\tau}{\hbar}}$

$$= -\sum_{n,m}\Big[w_n \Theta(\tau-\tau')\langle n|\psi(\underline{r},s,\tau)|m\rangle\langle m|\psi^+(\underline{r}',s',\tau')|n\rangle \pm$$
$$\pm w_m \Theta(\tau'-\tau)\langle m|\psi^+(\underline{r}',s',\tau')|n\rangle\langle n|\psi(\underline{r},s,\tau)|m\rangle\Big] =$$
$$= -\sum_{n,m} w_n A_{mn}(\underline{r},\underline{r}',s,s')\, e^{-\left(\frac{K_m-K_n}{\hbar}\right)(\tau-\tau')}\left[\Theta(\tau-\tau') \pm \Theta(\tau'-\tau)e^{-\beta(K_m-K_n)}\right]$$

ebből átmenne frekvenciába:

$$G(\underline{r},s,\underline{r}',s',i\omega_e) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau\, e^{i\omega_e\tau}\, G(\underline{r},s,\tau,\underline{r}',s',0) = \text{csak az első } \Theta \text{ ad járulékot} =$$

$$= -\sum_{n,m} w_n A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s')\left[\frac{e^{i\omega_e\tau - \left(\frac{K_m-K_n}{\hbar}\right)\tau}}{i\omega_e - \left(\frac{K_m-K_n}{\hbar}\right)}\right]_0^{\beta\hbar} =$$

$$= -\sum_{n,m} w_n A_{mn}(\dots)\ \frac{\overbrace{e^{i\omega_e\beta\hbar}}^{\pm 1}e^{-\beta(K_m-K_n)} - 1}{i\omega_e - \left(\frac{K_m-K_n}{\hbar}\right)} =$$

$$= \sum_{n,m} w_n A_{mn}(\underline{r},s,\underline{r}',s')\left[1 \mp e^{\beta(K_m-K_n)}\right)\frac{1}{i\omega_e - \frac{1}{\hbar}(K_m-K_n)}$$

Ez azért jó, mert ha ebből spektrálfv-t akarunk csinálni:

$$\rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega) = 2\pi \sum_{n,m} w_n (1 \mp e^{\beta(K_m-K_n)})A_{nm}\,\delta\left(\omega - \frac{K_m-K_n}{\hbar}\right)$$

Tényleg, hogy $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi}\frac{\rho(\underline{r},s,\underline{r}',s',\omega')}{i\omega_e - \frac{1}{\hbar}(K_m-K_n)}$ ez mivel a δ miatt a $\frac{1}{\hbar}(K_m-K_n)$ helyettesíthető ω-val, amiből kapjuk a hőmérsékleti Green-t kapjuk.

$\Rightarrow$ Analitikus folytatással megkapható a retardált G.

Vitamin :

Szabadgáz esetén :

$$G_0(\underline{k}, i\omega_\ell) = \frac{1}{i\omega_\ell - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu)} \xrightarrow[i\omega_\ell \to \omega + i\varepsilon]{} G^R(\underline{k},\omega) = \frac{1}{\omega - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu) + i\varepsilon}$$

Mivel $\operatorname{Im} G^R = -\frac{1}{2}\rho$ és $\frac{1}{x+i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x)$

ezért $\rho(\underline{k},\omega) = 2\pi\delta\left(\omega - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu)\right)$

erre alkalmazható a kvázirészecske kép.

Kölcsönható rendszer:

$$G(\underline{k}, i\omega_\ell) = \frac{1}{i\omega_\ell - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu) - \Sigma(\underline{k}, i\omega_\ell)} \xrightarrow[i\omega_\ell \to \omega + i\varepsilon]{}$$

ha $\Sigma(\underline{k}, \omega + i\varepsilon) =: \Sigma^R(\underline{k},\omega)$

$$\longrightarrow G^R(\underline{k},\omega) = \frac{1}{\omega + i\varepsilon - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu) - \Sigma^R(\underline{k},\omega)}$$

ha Σ^R-nek van negatív képzetes része akkor $i\varepsilon$ elhagyható

Ekkor $\rho(\underline{k},\omega) = -2\operatorname{Im} G^R(\underline{k},\omega) = -\dfrac{2\operatorname{Im}\Sigma^R(\underline{k},\omega)}{\left(\omega - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu) - \operatorname{Re}\Sigma^R\right)^2 + \left(\operatorname{Im}\Sigma^R\right)^2}$

Ha $\operatorname{Im}\Sigma^R \ll \operatorname{Re}\Sigma^R$ itt is alkalmazható a kvázirészecske.

$$\rho(\underline{k},\omega) \approx 2\pi\,\delta\left(\omega - \frac{1}{\hbar}(e_k-\mu) - \operatorname{Re}\Sigma^R(\underline{k},\omega)\right) =$$

$$\left[\delta(f(x)) = \sum_{f(x_0)=0} \frac{\delta(x-x_0)}{|f'(x_0)|}\right]$$

$$= 2\pi\, Z(k)\,\delta\left(\omega - \frac{1}{\hbar}(E_k-\mu)\right)$$

ahol E_k-ra az alábbit kell megoldani:

$$E_k = e_k + \hbar\operatorname{Re}\Sigma^R\left(k, \frac{E_k-\mu}{\hbar}\right)$$

itt E_k: kvázi energiák

$$\frac{1}{Z_k} = 1 - \left.\frac{\partial\operatorname{Re}\Sigma^R(\underline{k},\omega)}{\partial\omega}\right|_{\omega = \frac{1}{\hbar}(E_k-\mu)}$$

Tehát kvázirészecske kölcsönhatás nem egyrészecske ezért van a rendszerben.

Állítás: G^R-t visszatranszformálva $G^R(\underline{k}, t) \sim e^{-i\frac{(E_k-\mu)t}{\hbar}}\, e^{-\Gamma_k t}$ ahol $\Gamma_k = \operatorname{Im}\Sigma^R$

Van egy lecsengés, amit a sajátenergia képzetes része ~~vastag~~ képzetes része ad meg; ez lesz a kvázirészecske élettartama.