BÖLÜM 1

GİRİŞ

1.1. Harmonik Osilatör ve Fononlar

1. kuantumlama $\rightarrow \begin{cases} [x, p_x] = i\hbar \\ E \rightarrow i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} \end{cases}$

$$p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$E = \frac{1}{2m} \vec{p}^{\,2}$$

$$\rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 \right) \psi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi$$

ψ tarafından sağlanan dalga denk.i

fiziksel anlam kazandırmak için

$$\rho = \psi^* \psi$$

nin t anında parçacığı x, y, z noktasında bulmam olasılığı olduğunu ifade edecek barları

BS K

ve $$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$ ile olasılık korunumu isteriz

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \nabla \psi^* \right)$$

bunları relativistik olarak $E^2 = p^2 c^2 + M^2 c^4$ ile bağlayarak yaparız → KG

→ Dirac theory

bunların tamamı tek parçacık teorisi

QFT'nin başarısı
- (1927, P.A.M. Dirac, QM + ışımanın klasik teorisini birleştirmede yeter)
- 1928 P.A.M. Dirac, electronun rel. teorisi + klasik ışımanın teo.)
- 1932 antimadde'nin keşfi Dirac'ı doğruladı

ince yapı

$\alpha_{EM} \sim 1/137.0359895(61)$ ← $\underline{\underline{\gamma}}$

$\alpha_{strong} \sim 14$ p n $\underline{\underline{gluon}}$ bunun 100 katı QCD

$G_{Newton} \sim 5,9 \times 10^{-39} / M_p^2$ bunun 10^{38} katı

$\underline{\underline{gravıton}}$ bunun 10^{13} katı

$G_{weak} \sim 1.02 \times 10^{-5} / M_p^2$; $\underline{\underline{W^0, Z^{\pm}}}$

non abelian ayar (lokal) teorisi SU(3)

$n \to p + e + \bar{\nu}_e$ (β-bozunumu)

$\gamma + p \to n + e + \nu_e$

BS K

Kafesteki atomların kuantumlanmış vibrasyonel kipleri fonon olarak adlandırılır. Bunlar harmonik osilatörler ile tarif edilirler. (Anharmonisite de hesaba katılabilir)

1D'de harmonik salınım

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

boyutsuz koordinatları ortaya koyalım $\xi = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$

$$\omega^2 = \frac{k}{m}$$

$$p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{\partial}{\partial x}$$

$$= \sqrt{m\omega\hbar}\,\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial \xi} \Rightarrow H = \frac{1}{2\cancel{m}}\left(-\cancel{m}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\right) + \cancel{m\omega}\omega\frac{1}{2}\frac{\hbar}{\cancel{m\omega}}\xi^2$$

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2\right)$$

Bu Hamiltonien'in Hermite pol. cinsinden çözümü olduğunu biliyoruz

$$H\psi_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\psi_n$$

BS K

Bu noktada yaratıcı (yok edici) operatörleri ortaya koymak uygundur.

$$\begin{cases} a = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \dfrac{\partial}{\partial \xi}\right) = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \dfrac{ip}{m\omega}\right) \\ a^{\dagger} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \dfrac{\partial}{\partial \xi}\right) = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \dfrac{ip}{m\omega}\right) \end{cases}$$

birbirlerinin Hermitsel eşlenikleri

$$a a^{\dagger} = \frac{m\omega}{2\hbar}\left[x^2 + \frac{p^2}{m\omega} + \frac{i}{m\omega}(-xp + px)\right]$$

$$a^{\dagger} a = \frac{m\omega}{2\hbar}\left[x^2 + \frac{p^2}{m\omega} + \frac{i}{m\omega}(+xp - px)\right]$$

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(a a^{\dagger} + a^{\dagger} a\right)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2\right)$$

aralarındaki komütasyon bağıntıları

$$[a, a^{\dagger}] = 1$$

$$[a, a] = [a^{\dagger}, a^{\dagger}] = 0 \Rightarrow \mathcal{H} = \hbar\omega\left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2}\right)$$

BS K

taban durumda işlem son bulmalı.

$$a|0\rangle = 0 \qquad \langle\xi|a|0\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$|1\rangle \propto a^{\dagger}|0\rangle \qquad \langle\xi|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi}\right)|0\rangle = 0$$

$$\vdots$$

$$\langle\xi|\partial_\xi|0\rangle = -\xi\langle\xi|0\rangle$$

$$|n\rangle = \frac{a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

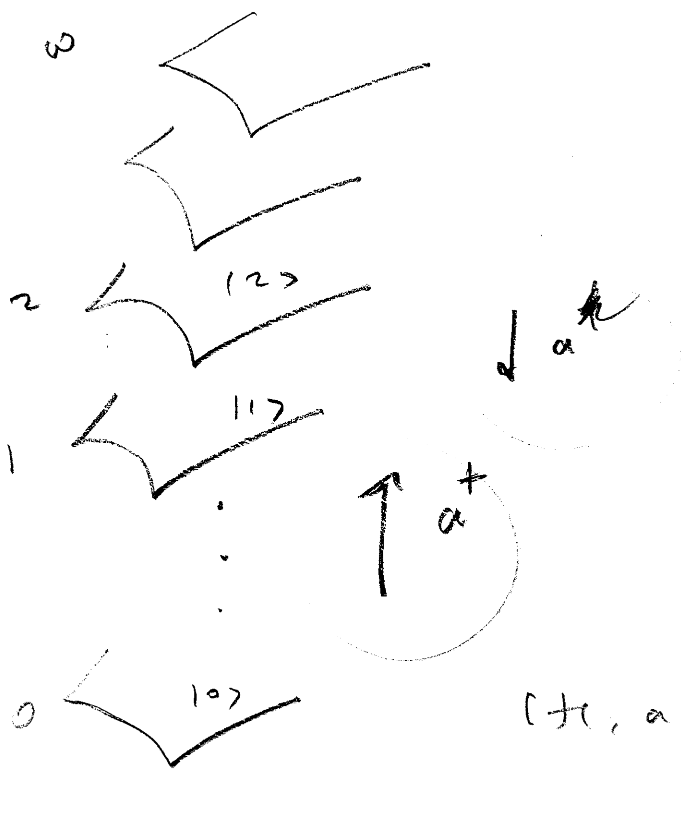
$$\downarrow$$

özvektörler

$$\frac{d\langle\xi|0\rangle}{d\xi} = -\xi\langle\xi|0\rangle$$

$$\frac{d\langle\xi|0\rangle}{\langle\xi|0\rangle} = -\xi\,d\xi$$

$$\langle\xi|0\rangle = C\,e^{-\xi^2/2}$$



$$[H,a] = \hbar\omega\, a^{\dagger}\cancel{[a,a]} + \hbar\omega[a^{\dagger},a]a$$

$$= -\hbar\omega a$$

$$[H,a]|n\rangle = -\hbar\omega\, a|n\rangle$$

$$H a|n\rangle - a\underbrace{H|n\rangle}_{E_n} = -\hbar\omega\, a|n\rangle$$

$$H(a|n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(a|n\rangle)$$

o zaman $a|n\rangle$ H'nin $E_n - \hbar\omega$ özdeğerli bir özdurumu.

BSK

~~bu kadar yani boyutsuz birimlerde (bu) ağıltmıştı.~~

$$\cancel{a|n\rangle = C_n |n-1\rangle}$$

$$\cancel{|n+1\rangle = \frac{a^{\dagger\, n+1}}{\sqrt{n+1}}|0\rangle \rightarrow a|n+1\rangle = \frac{aa^{\dagger\, n+1}}{\sqrt{n+1}}|0\rangle}$$

$$\cancel{= \frac{aa^{\dagger}}{\sqrt{n+1}}|n\rangle}$$

$$\cancel{a|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}(a^{\dagger}a + 1)|n\rangle}$$

$$[a, a^{\dagger\, n}] = n\hbar a^{\dagger\, n-1}$$

$$aa^{\dagger\, n}|0\rangle - a^{\dagger}\cancel{a|0\rangle} = n\hbar a^{\dagger\, n-1}|0\rangle$$

$$a\sqrt{n!}\,|n\rangle = n\hbar\sqrt{(n-1)!}\,\hbar\,|n-1\rangle$$

$$\boxed{a|n\rangle = \sqrt{n}\,\hbar\,|n-1\rangle}$$

Bu operatörlerin zaman bağımlılığını olarak [illegible] için Heisenberg formalini kullanırız. burada:

$$O(t) = e^{iHt}\, O\, e^{-iHt} \qquad (\hbar = 1)$$

$$\frac{\partial O(t)}{\partial t} = \underbrace{iH}_{[illegible]} e^{iHt}\, O\, e^{-iHt} + e^{iHt}\, O(-iH)\, e^{-iHt} = i[H, O(t)]$$

denklemine yol[illegible]

BS K

Örn:

$$\frac{\partial a^\dagger}{\partial t} = i[H, a^\dagger] = i\omega a^\dagger \Rightarrow \begin{cases} a^\dagger(t) = a^\dagger e^{i\omega t} \\ a(t) = a\, e^{-i\omega t} \end{cases}$$

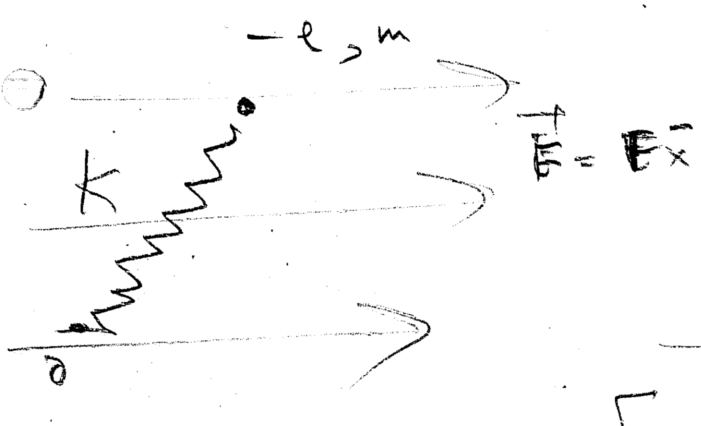
x ve p yi aynı zamanda bunlar cinsinden çözebiliriz

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a + a^\dagger) \qquad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\,(a^\dagger - a)$$

&

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a e^{-i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t})$$

Sabit bir E elektrik alanında yüklü HO problemi



$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx^2 + eFx$$

$$\Downarrow$$

$$H = \omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) + \lambda(a + a^\dagger)$$

$$\lambda = eF\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}$$

tam olarak çözülebilir

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -i(\omega a + \lambda)$$

$$A = a + \frac{\lambda}{\omega}, \qquad A^\dagger = a^\dagger + \frac{\lambda}{\omega}$$

(yeni op.'ları tanımlayalım)

BS K

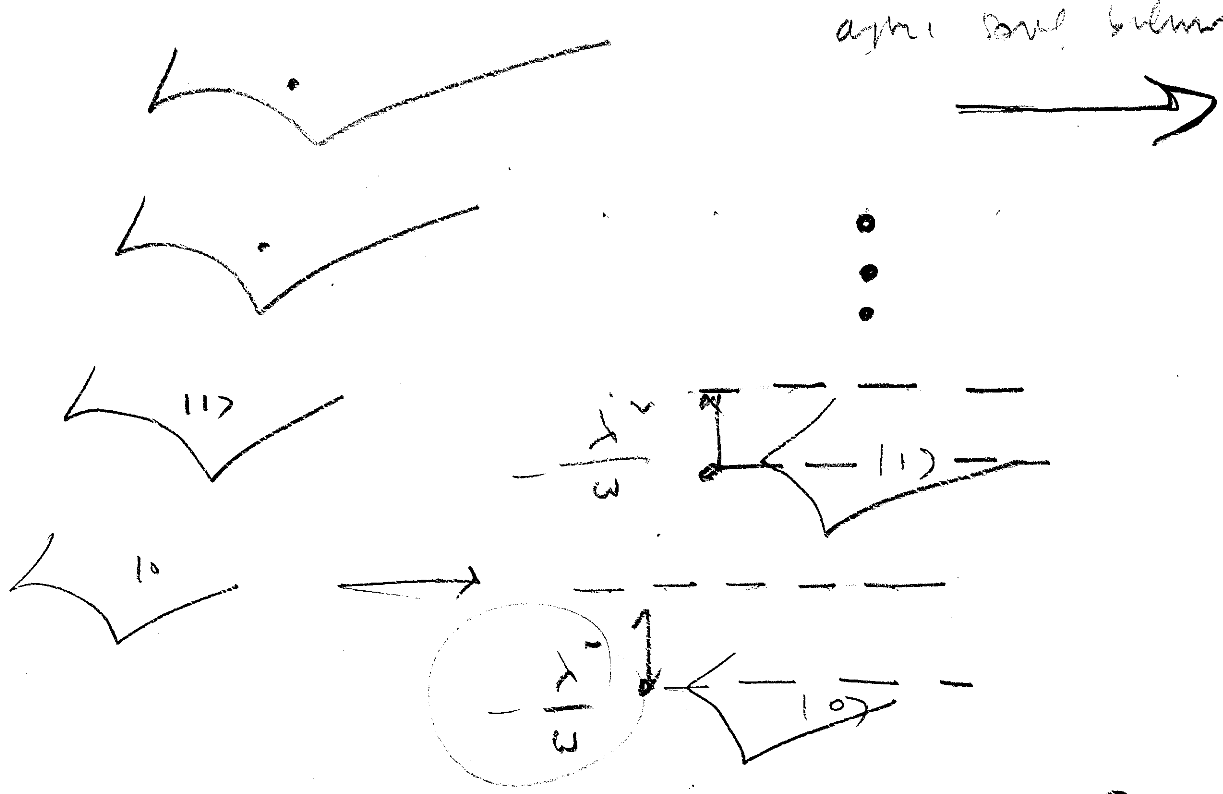
$$\frac{\partial A}{\partial t} = -i\omega A \quad \Bigg\} \quad \begin{aligned} A(t) &= e^{-i\omega t} A \\ A^\dagger(t) &= e^{i\omega t} A^\dagger \end{aligned}$$

$$[A, A^\dagger] = 1 \qquad [A, A] = [A^\dagger, A^\dagger] = 0$$

$$\mathcal{H} = \omega\left(A^\dagger A + \frac{1}{2}\right) - \frac{\lambda^2}{\omega}$$

$$\mathcal{H}|n\rangle = \left[\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\lambda^2}{\omega}\right]|n\rangle$$

Koord. uzayında da aynı sonuç bulunur.

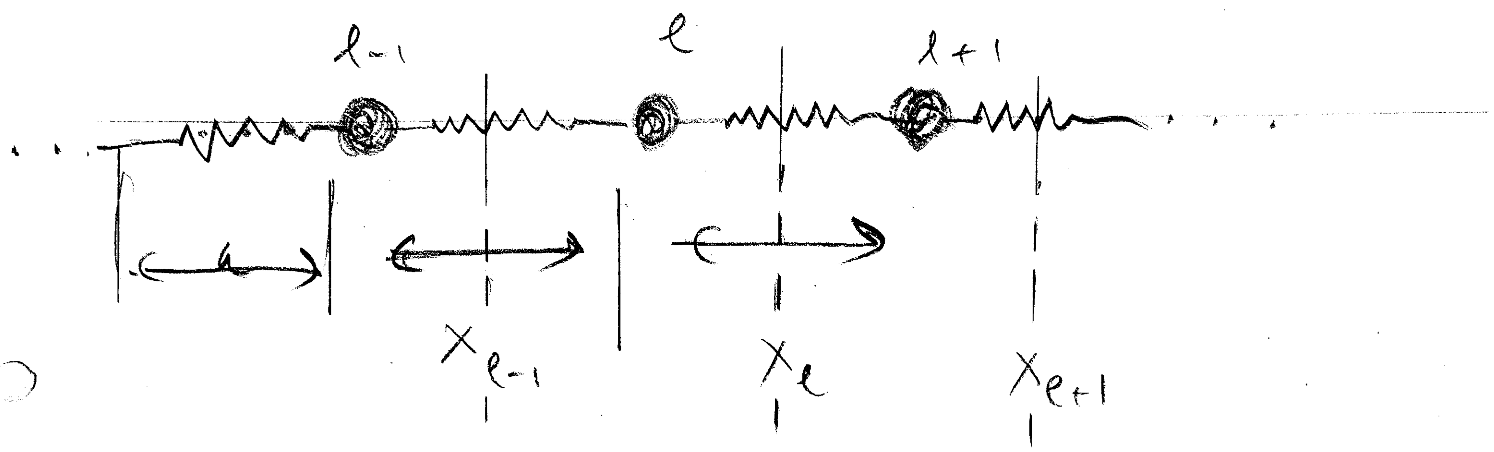


Aslında K sbt'li yayın denge durumu artık 0 noktası değil

$$X_0 = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\frac{2\lambda}{\omega} = -\frac{eF}{K} \quad \text{dadır.}$$

BS K Elektriksel alandan dolayı kaydırılan enerji

Şimdi bu bir boyutlu tek HO problemi idi, N adet'ini düşünelim (1D'lu Harmonik zincir)



$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2M} + \frac{1}{2} k \sum_i (x_i - x_{i+1})^2$$

$$L = T - V = \sum_i \left\{ \frac{1}{2} M \dot{x}_i^2 - \frac{1}{2} M \omega^2 (x_i - x_{i+1})^2 \right\}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0 \qquad x_i^2 + x_{i+1}^2 - 2x_i x_{i+1}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_l} = M \dot{x}_i \delta_{il} \quad \Bigg| \quad \frac{\partial L}{\partial x_l} = -\frac{M\omega^2}{2}\Big(2x_i \delta_{il} + 2x_{i+1} \delta_{i+1,l} - 2x_{i+1} \delta_{il} - 2x_i \delta_{i+1,l} \Big)$$

$$\exists^1 \quad x_l + x_l - x_{l+1} - x_{l-1}$$

BS K

$$\cancel{M}\ddot{x}_l + \cancel{M}\omega^2\left(2x_l - x_{l+1} - x_{l-1}\right) = 0$$

$$\ddot{x}_l = -\omega^2\left(2x_l - x_{l+1} - x_{l-1}\right)$$

$$M\ddot{x}_l = M\omega^2\left(\quad\right) = K\left(2x_l - x_{l+1} - x_{l-1}\right)$$

olarak bulunur. Bunlar ilerleyen dalga çözümlerine sahiptirler.

$$x_l = e^{ikla - i\omega t} \qquad x_l = x_0 \cos(kal)$$

$$\dot{x}_l = -i\omega x_l \qquad \ddot{x}_l = -\omega^2 x_l$$

$$-M\omega^2 \cancel{x_l} = -K\left(2\cancel{x_l} - e^{ika}\cancel{x_l} - e^{-ika}\cancel{x_l}\right)$$

$$= K\left(2 - 2\cos ka\right)$$

$$\omega^2 = \frac{2K}{M}\left(1 - \cos ka\right) = \frac{4K}{M}\sin^2\frac{ka}{2}$$

uzun dalga boyu limiti $ka \ll 1$ $\qquad \omega^2 \simeq \frac{4K}{M}\frac{a^2}{4}k^2$

LW

$$\omega^2 \propto k^2$$

$$\omega^2 = \frac{Ka^2}{M}k^2$$

Ses dalgaları $\sqrt{\frac{Ka^2}{M}}$ ses hızına sahip. Şimdi bu klasik

BS.K

QM sel çözüm normal koordinatları tanımlamak ve periyodik sınır şartlarını empoze etmek ile başlar

$$x_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikal} x_k \quad ; \quad x_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{-ikal} x_l$$

$$p_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikal} p_k \quad ; \quad p_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{ikal} p_l$$

komütasyon bağıntıları hem gerçel ve hem de k-uzayında geçerlidir.

$$[x_l, p_m] = i\,\delta_{ml}$$

$$[X_k, P_{k'}] = i\,\delta_{kk'} = \frac{1}{N} \sum_{lm} e^{-ikal} e^{ik'am} [x_l, p_m]$$

$$= \underbrace{\frac{i}{N} \sum_l e^{ial(k'-k)}}_{\delta_{kk'}}$$

Böylece H'deki terimler

$$\sum_l x_l x_{l+m} = \frac{1}{N} \sum_k \sum_{k'} x_k x_{k'} \underbrace{\sum_l e^{ila(k+k')}}_{N\,\delta_{k',-k}} e^{imak'}$$

$$= \sum_k x_k x_{-k} e^{-imak'}$$

BS K

keza $\sum_\ell p_\ell^2 = \sum_k p_k p_{-k}$

$$\frac{K}{2}\sum_\ell (x_\ell - x_{\ell+1})^2 = \frac{K}{2}\sum_k x_k x_{-k}\left(2 - e^{ika} - e^{-ika}\right)$$

$$= \frac{1}{2} M \sum_k \omega_k^2 x_k x_{-k}$$

$\Downarrow$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M}\sum_k p_k p_{-k} + \frac{1}{2} M \sum_k \omega_k^2 x_k x_{-k}$$ k-uzayında

şimdi $a, a^\dagger$'ları tanımlayalım.

$$a_k = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}}\left(x_k + \frac{i}{m\omega_k} p_{-k}\right)$$

$$a_k^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}}\left(x_{-k} - \frac{i}{m\omega_k} p_k\right)$$

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

$\Downarrow$

$$\mathcal{H} = \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^\dagger a_k + 1/2\right)$$

BS K Bu kollektif titreşim tipleri "fononlar" olarak adlandırılır.

Her bir dalga vektörü durumu bağımsız bir osilatör gibi davranır. $\{ |n_k\rangle \mid n_k = 0, 1, 2, \dots \}$ herhangi bir anda sist.'in durumu,

$$\psi = |n_{k_1}, n_{k_2}, \dots n_{k_n}\rangle = \prod_k |n_k\rangle = \prod_k \frac{[a_k^\dagger]^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} |0\rangle$$

$$\mathcal{H} = \sum_k \omega_k (n_k + 1/2)$$

termal dengede, durumlar

$$\langle n_k \rangle \equiv N_k = \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1} \equiv n_B(\omega_k)$$

ortalama değerine sahiptir. sist. bu değer etrafında dalgalanır. Reel uzayda konum op.'u

$$x_l(t) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_k}}\, e^{ikal} \left(a_k e^{-i\omega_k t} + a_{-k}^\dagger e^{i\omega_k t} \right)$$

Not: 1.)

$mN = \rho V$ — hacim $\quad \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \sum_k f(k)$

kütle yoğ.

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(k)$$

BS K

2°) kesikli Kronecker δ'lar

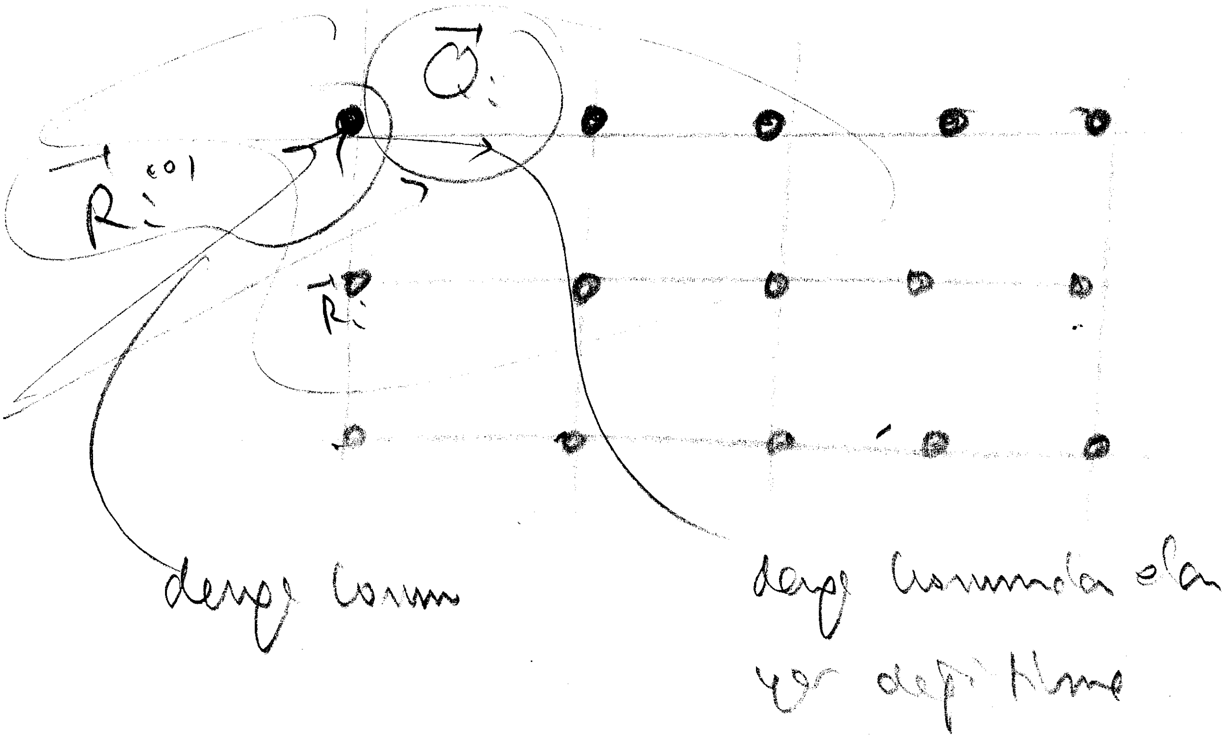
$$\frac{1}{V} f(\underline{k}') = \sum_{k} f(\underline{k})\, \delta_{\underline{k}\underline{k}'} = \int \frac{d^3\underline{k}}{(2\pi)^3} f(\underline{k})$$

$$= \frac{(2\pi)^3}{V} \int \frac{d^3\underline{k}}{(2\pi)^3} f(\underline{k})\, \delta^3(\underline{k}-\underline{k}')$$

$$\Longleftrightarrow \quad \delta^3(\underline{k}-\underline{k}')\, \frac{(2\pi)^3}{V} = \lim_{V\to\infty} \delta_{kk'}$$

3D da durum:

$$\sum_{ij} V(\underline{R}_i - \underline{R}_j) \Bigg\{ \begin{array}{l} \text{atomlar ya da iyonlar} \\ \text{arasındaki pot fonk.} \end{array}$$



pot. fonk. nun denge konumu etrafında Taylor serisine açalım

$$\sum_i \sum_j V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \sum_{ij} V(\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)})$$

$$+ \sum_{ij} (\vec{Q}_i - \vec{Q}_j) \cdot \vec{\nabla} V(\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)})$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ij} (\bar{Q}_i - \bar{Q}_j)_\mu (\bar{Q}_i - \bar{Q}_j)_\nu \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial R_\mu \partial R_\nu} V(\bar{R}_i^{(0)} - \bar{R}_j^{(0)})}_{\Phi_{\mu\nu}}$$

$$+ O(Q^3)$$

bileşenler

$= 0$ çünkü $\vec{F}_j = \sum_i \vec{\nabla} V(\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)}) = 0$

(1)

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{P_i^2}{2m} + \sum_{ij} V(\bar{R}_i^{(0)} - \bar{R}_j^{(0)})$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ij} (\bar{Q}_i - \bar{Q}_j)_\mu (\bar{Q}_i - \bar{Q}_j)_\nu \Phi_{\mu\nu}$$

BS K

tekrar normal koordinatları tanımlayarak

$$Q_i^{\mu} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{k\lambda} Q_{k\lambda}\, \xi_{k\lambda}^{\mu}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i^{(0)}}$$

$\vec{Q}_i$'yi $\quad \vec{Q}_i^{\dagger} = Q_i$ Hermitsel yapmak için

$$\vec{\xi}_{-k\lambda} = \vec{\xi}_{k\lambda}^{\,*} \quad \text{ve} \quad Q_{-k\lambda} = Q_{k\lambda}^{*}$$

olmasına ihtiyaç duyarız. Böylelikle,

$$\hat{H} =$$

$$\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{1}{2N}\sum_{\substack{kk'\\ \lambda\lambda'}} Q_{k\lambda} Q_{k'\lambda'}\, \Phi_{\mu\nu}(\vec{R}_{ij}^{(0)})\, \xi_{k\lambda}^{\mu}\, \xi_{k'\lambda'}^{\nu}}$$

$$\times \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i^{(0)}} - e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j^{(0)}}\right]\left[e^{i\vec{k}'\cdot\vec{R}_i^{(0)}} - e^{i\vec{k}'\cdot\vec{R}_j^{(0)}}\right]$$

$$= \underbrace{\cdots}\times \underbrace{e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{R}_i^{(0)}}}\Big\{\left[1 - e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_j^{(0)}-\vec{R}_i^{(0)})}\right]$$

$$+ \left[1 - e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{R}_j^{0}-\vec{R}_i^{0})}\right]$$

$$- \left[1 - e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot(\vec{R}_j^{0}-\vec{R}_i^{0})}\right]\Big\}$$

$$\sum_i e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{R}_i^{0}} = N\,\delta_{k',-k}$$

BS K

$$\#^{1} = \frac{1}{2}\,\frac{1}{2N}\sum_{i}\sum_{\substack{kk'\\ \lambda\lambda'}} Q_{k\lambda}\,Q_{k'\lambda'}\,\xi^{\mu}_{k\lambda}\,\xi^{\nu}_{k'\lambda'}$$

$$\times\, e^{i(\underline{k}+\underline{k}')\cdot \bar{R}_i^{(0)}}\left[D_{\mu\nu}(\underline{k}) + D_{\mu\nu}(\underline{k}') - D_{\mu\nu}(\underline{k}+\underline{k}')\right]$$

$$D_{\mu\nu}(\underline{k}) = \sum_j \Phi_{\mu\nu}(\bar{R}_{ij}^{(0)})\left[1 - e^{i\underline{k}\cdot(\bar{R}_i - \bar{R}_j)}\right]$$

dinamik matris.

Not:

$$Q_i^{\mu}(t) = \frac{1}{\sqrt{2N}}\sum_k Q_k^{\mu}\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_i^{0} - i\omega t}$$

$$\ddot{Q}_i^{\mu}(t) = \frac{1}{\sqrt{2N}}\sum_k (-\omega^2)\, Q_k^{\mu}\, e^{i\underline{k}\cdot\bar{R}_i - i\omega t}$$

$$M\ddot{Q}_i^{\mu} = \cancel{\frac{1}{\sqrt{2N}}}\sum_k (-M\omega^2)\, Q_k^{\mu}\, e^{i\underline{k}\cdot R_i - i\omega t}$$

$$= -\sum_{j\nu}\Phi_{\mu\nu}(\bar{R}_{ij}^{0})\,\cancel{\frac{1}{\sqrt{2N}}}\sum_k Q_k^{\nu}\left[e^{i\underline{k}\cdot\bar{R}_i^{0}} - e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_j}\right]$$

$$M\omega^2\sum_k Q_k^{\mu}\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_i} = \sum_j\sum_{k\nu} Q_k^{\nu}\,\Phi_{\mu\nu}(\bar{R}_{ij})\, e^{i\underline{k}\cdot R_i}\left[1 - e^{i\underline{k}\cdot(R_j - R_i)}\right]$$

BS K

genelde 6 'ya sept.

$$M\omega^2 \sum_k e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_i} Q_k^\mu = \sum_k e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_i} \sum_\nu D_{\mu\nu}(\underline{k})\, Q_k^\nu$$

$$\det \left| M\omega_k^2 \delta_{\mu\nu} - D_{\mu\nu}(\underline{k}) \right| = 0$$

$3L$ değerinde L birim hücredeki atom sayısı.

$$Q_k^\nu = \sum_\lambda Q_{k\lambda}\, \xi_{k\lambda}^\nu$$

Hareket denklemleri

$$M\omega^2 \sum_{k\lambda} e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_i} Q_{k\lambda}\, \xi_{k\lambda}^\mu = \sum_{k\lambda} e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_i} \sum_\nu D_{\mu\nu}(\underline{k})\, Q_{k\lambda}\, \xi_{k\lambda}^\nu$$

$\lambda = 3L$ değer alır.

$$M\omega^2 \xi_{k\lambda}^\mu = 2 \sum_\nu D_{\mu\nu}(\underline{k})\, \xi_{k\lambda}^\nu$$

BS K

$\omega = \omega_{k\lambda}$ özdeğerine karşılık gelen

özvektöre $\rightarrow \xi^{\mu}_{k\lambda}$

ortonormallik

$$\sum_{\mu} \xi^{*\mu}_{k\lambda}\, \xi^{\mu}_{k\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} \qquad \sum_{\lambda} \xi^{*\mu}_{k\lambda}\, \xi^{\nu}_{k\lambda} = \delta_{\mu\nu}$$

dinamik matris elemanları Hermitsel olmalı

$$D^{*}_{\mu\nu}(k) = D_{\mu\nu}(-k) \longrightarrow D^{\dagger}_{\mu\nu} = D_{\mu\nu}$$

$$\xi^{*}_{k\lambda} = \xi_{-k\lambda} \qquad \omega^{2}_{k\lambda} = \omega^{2}_{-k\lambda}$$

$$H' = \frac{1}{2}\frac{1}{2}\sum_{k\lambda\lambda'} Q_{k\lambda} Q_{-k\lambda'} \Big\{ \sum_{\mu} \omega^{2}_{k\lambda}\, \xi^{\mu}_{k\lambda}\, \xi^{\mu}_{-k\lambda'}$$

$$+ \sum_{\nu} \omega^{2}_{-k\lambda'}\, \xi^{\nu}_{k\lambda}\, \xi^{\nu}_{-k\lambda'} \Big\} M$$

$$= \frac{1}{2}\cancel{\frac{1}{2}} \sum_{k\lambda} M\, Q_{k\lambda}\, Q_{-k\lambda}\, \cancel{2}\, \omega^{2}_{k\lambda} = \frac{1}{2} M \sum_{k\lambda} \omega^{2}_{k\lambda}\, Q_{k\lambda}\, Q_{-k\lambda}$$

BS K

özdeş alarak

$$\sum_i \frac{P_i^2}{2M} = \frac{1}{2M} \sum_{k\lambda} P_{k\lambda} P_{-k\lambda}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2M} \sum_{k\lambda} P_{k\lambda} P_{-k\lambda} + \frac{1}{2} M \sum_{k\lambda} \omega_{k\lambda}^2 Q_{k\lambda} Q_{-k\lambda}$$

k-uzayında yerdeğiştirme operatörü, $Q_{k\lambda}$:

$$Q_{k\lambda}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{k\lambda}}} \left[a_{k\lambda} e^{-i\omega_{k\lambda} t} + a_{-k\lambda}^{\dagger} e^{i\omega_{k\lambda} t} \right]$$

$$P_{k\lambda}(t) = i \sqrt{\frac{\hbar M \omega_{k\lambda}}{2}} \left[a_{k\lambda}^{\dagger} e^{i\omega_{k\lambda} t} - hc \right]$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\mathcal{H} = \sum_{k\lambda} \hbar\omega_{k\lambda} \left(a_{k\lambda}^{\dagger} a_{k\lambda} + 1/2 \right)}$$

BS K

1.2. Parçacıklar için ikinci kuantumlama

– L. Schiff (1968)

Bozonlar:

$U(\underline{r})$ potansiyelindeki bir parçacık için Schrödinger denklemi

$$i\hbar \dot{\psi}(\underline{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + U(\underline{r})\right]\psi(\underline{r}) = H\psi(\underline{r})$$

Bu $$L = i\hbar\, \psi^\dagger \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}\psi^\dagger \cdot \nabla\psi - U(\underline{r},t)\,\psi^\dagger\psi$$

Lagranjiyen yoğunluğundan da elde edilebilir. Şöyleki;

$\psi^\dagger, \psi$ bağımsız değişkenler $\quad L = L(\psi, \dot{\psi} \,|\, \psi^\dagger, \dot{\psi}^\dagger; t)$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \psi} &= -U\psi^\dagger \\ \frac{\partial L}{\partial \psi_x} &= -\frac{\hbar^2}{2M}\psi^\dagger_x \\ \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} &= i\hbar\,\psi^\dagger \end{aligned}\right\} \Rightarrow \cancel{\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}}\right) - \frac{\partial}{\partial x_\mu}\left(\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_\mu}\right)}\right) = \frac{\partial L}{\partial \psi}}$$

$$\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial \psi}{\partial x_\mu}\right)}$$

BS K

Hatırlatma:

$$\delta I = \delta \int_1^2 d^3r \int dt\, \mathcal{L}(\phi, \vec{\nabla}\phi, \dot{\phi}; t)$$

$$\phi = \phi(x,t;\alpha)$$

$$\phi(x,t;\alpha) = \phi(x,t;0) + \alpha\, \phi'(x,t)$$

$$\frac{dI}{d\alpha} = \iint d^3r\, dt \left[\frac{\partial L}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \frac{d\phi}{dt}} \frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{d\phi}{dt}\right) + \frac{\partial L}{\partial \frac{d\phi}{dx}} \frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right) \right]$$

1

$$\int_{t_1}^{t_2} \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \frac{d\phi}{dt}}}_{u} \underbrace{\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{d\phi}{dt}\right) dt}_{dv} = -\int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \frac{d\phi}{dt}}\right) \frac{\partial \phi}{\partial \alpha}\, dt$$

uç noktalarda "0"

2

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\, \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \frac{d\phi}{dx}}}_{u} \underbrace{\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{d\phi}{dx}\right)}_{dv} = -\int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial L}{\partial \frac{d\phi}{dx}}\right) \frac{\partial \phi}{\partial \alpha}\, dx$$

1), 2)

$$\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} dx\, dt \underbrace{\left[\frac{\partial L}{\partial \phi} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \frac{d\phi}{dt}}\right) - \frac{d}{dx}\left(\frac{\partial L}{\partial \frac{d\phi}{dx}}\right) \right]} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \alpha}\right)_0 = 0$$

BS K

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \frac{d\psi}{dt}}\right)+\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial L}{\partial \frac{d\psi}{dx}}\right)-\frac{\partial L}{\partial \psi}=0$$

$$0=\frac{\partial L}{\partial \psi}-\frac{\partial}{\partial x_\mu}\left(\frac{\partial L}{\partial \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu}}\right)-\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}}\right)$$

$$0=-U\psi^\dagger+\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}^2\psi^\dagger-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^\dagger$$

ψ 'ye konjuge momentum $\pi=\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}}=i\hbar\psi^\dagger$

$\Rightarrow$ Hamiltonien yoğunluğu,

$$\mathcal{H}=\pi\dot{\psi}-L=\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}\psi^\dagger\cdot\vec{\nabla}\psi+U\psi^\dagger\psi$$

$$H=\int d^3\underline{r}\,\mathcal{H}=\int d^3\underline{r}\,\psi^\dagger\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}^2+U\right)\psi$$

$$\# \int \underbrace{d^3\underline{r}\,\vec{\nabla}\psi^\dagger}_{dv}\cdot\underbrace{\vec{\nabla}\psi}_{u}=\cancel{\psi^\dagger\vec{\nabla}\psi}-\int d^3\underline{r}\,\psi^\dagger\vec{\nabla}^2\psi$$

π,ψ konjuge değişkenlerdir

$$[\psi(\underline{r},t),\pi(\underline{r}',t)]=i\hbar\delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

BS K

ya da $\Pi = i\hbar\psi^{\dagger}$ kullanılarak

$$[\psi(\underline{r},t), \psi^{\dagger}(\underline{r}',t)] = \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

2nd Quantization

Bu kom. bağıntıları standart yaratıcı (yokedici) op. leri ortaya koyarak da elde edilebilirdi.

$$\mathcal{H}\phi_\lambda = \mathcal{E}_\lambda \phi_\lambda \qquad \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\underline{r})$$

$$\begin{cases} \psi(\underline{r},t) = \sum_\lambda a_\lambda(t)\phi_\lambda(\underline{r}) \\ \psi^{\dagger}(\underline{r},t) = \sum_\lambda a_\lambda^{\dagger}(t)\phi_\lambda^{*}(\underline{r}) \end{cases}$$ bazında açalım

$$[a_\lambda(t), a_{\lambda'}^{\dagger}(t)] = \delta_{\lambda\lambda'}$$ diğerleri 0.

(1)

$$[\psi(\underline{r},t), \psi^{\dagger}(\underline{r}',t)] = \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

$$[a_\lambda(t), a_\lambda^{\dagger}(t')] = ?$$

Green fonk.'un için B.?

Özellemiş

$$H = \int d^3\underline{r}\, \psi^\dagger(\underline{r})\, \mathcal{H}\, \psi(\underline{r}) = \sum_{\lambda}\sum_{\lambda'} a_\lambda^\dagger a_{\lambda'} \int d^3\underline{r}$$

$$\times\, \phi_\lambda^\dagger(\underline{r})\, H\, \phi_{\lambda'}(\underline{r}) = \sum_{\lambda}\sum_{\lambda'} a_\lambda^\dagger a_{\lambda'}\, \varepsilon_{\lambda'}\, \delta_{\lambda\lambda'}$$

$$= \sum_\lambda \varepsilon_\lambda\, a_\lambda^\dagger a_\lambda$$

Bu Hamiltoniyene ve kom. bağıntılarına sahip sistem, her bir $\underline{\lambda}$ için $\mathcal{H}O$ gibi davranır

Her bir λ değeri $\longrightarrow$ $n_\lambda = 0, 1, 2, 3, \ldots$

Çok parçacık dalga fonk.u

$$\prod_\lambda \frac{(a_\lambda^\dagger)^{n_\lambda}}{\sqrt{n_\lambda!}}\, |0\rangle$$

$$E = \sum_\lambda \varepsilon_\lambda n_\lambda$$

BS K

termal dengede, bozon işgal çarpanı

$$\langle n_\lambda \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)} - 1} \equiv N_\lambda = n_B(\varepsilon_\lambda - \mu)$$

kimyasal pot. T ile değişir. foton ve fonon da yok

çünkü bu tür uyarımlar parçacık sayımı korumaz

$$\rho(\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \sum_\lambda \sum_{\lambda'} a_\lambda^\dagger a_{\lambda'} \phi_\lambda^*(\mathbf{r}) \phi_{\lambda'}(\mathbf{r})$$

$$N = \int d^3r\, \rho(\mathbf{r}) = \sum_\lambda a_\lambda^\dagger a_\lambda = \sum_\lambda n_\lambda$$

$$\langle N \rangle = \sum_\lambda \langle n_\lambda \rangle = \sum_\lambda N_\lambda$$

termal ort.

kimyasal pot tayini.

H yaratıcı ve yokedici op. larda bilinear. Bunlar en azından prensipte köşegenleştirilebilirler

tam.

BS K

Şimdi $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + U(\underline{r})$ Hamiltonyenini alalım, ve

çözümünü başka bir ϕ_n durumlarının tam kümesi üzerinden

seriye açalım

$$\psi(\underline{r}) = \sum_n b_n \phi_n(\underline{r}) \qquad \begin{cases} [b_n, b_m^+] = \delta_{nm} \\ [b_n, b_m] = 0 \end{cases}$$

$$\mathcal{H} = \int d^3\underline{r}\, \psi^+(\underline{r})\, \mathcal{H}\, \psi(\underline{r}) = \sum_{nm} b_n^+ b_m \underbrace{\phi_n^+(\underline{r})\, \mathcal{H}\, \phi_m(\underline{r})}$$

$$= \sum_{nm} b_n^+ b_m \mathcal{H}_{nm} \qquad \mathcal{H}_{nm} = \int d^3\underline{r}\, \phi_n^+(\underline{r})\, \mathcal{H}\, \phi_m(\underline{r})$$

$$N = \sum_n b_n^+ b_n \quad \text{sayı op.'ü.}$$

Bu Hamiltoniyen şu şekilde çözülebilir.

$$-i\frac{\partial b_n}{\partial t} = [\mathcal{H}, b_n] = \Big[\sum_{n'm} b_{n'}^+ b_m \mathcal{H}_{n'm}, b_n\Big]$$

$$= \sum_{n'm} [b_{n'}^+, b_n]\, b_m \mathcal{H}_{n'm} = -\sum_m \mathcal{H}_{nm} b_m$$

zaman bağımlılığının $b_n(t) = b_n(0)\, e^{-iEt}$ şeklinde olduğunu

varsayarsak,

$$\cancel{-}i(-iE)b_n = \cancel{-}\sum_m \mathcal{H}_{nm} b_m \Rightarrow \sum_m \big(\underbrace{\mathcal{H}_{nm} - E\,\delta_{nm}}\big) b_m = 0$$

BS K

$$\det |\mathcal{H}_{nm} - E\,\delta_{nm}| = 0$$

bu matrisin özdeğerlerini bulmak yeterlidir. (genellikle ∞ boyutlu)

(Çok cisim teorisinde, $\mathcal{H}$'nın içerisinde ($\mathcal{H}_0$'ın yanında) genellikle çeşitli etkileşmeler vardır (bozonların birbirleri ile, parçacıklar ile, spin etkileri parçacık-parçacık (PP) etkileri gibi...)

PP incelemesi :

$$\mathcal{H} = \sum_i H_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$$

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + U(\underline{r})$$

$\mathcal{H}$ her bir i için çözülür — burada bozonlar toplanır, top. sist. için bulunan $\mathcal{H}$, iyi çözmeyi zorlaştıran V terimidir.

$$\mathcal{H} = \sum_i \int d^3\underline{r}_i\, \psi^\dagger(\underline{r}_i)\, H_i\, \psi(\underline{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum \int\int d^3\underline{r}_i\, d^3\underline{r}_j$$

$$\times\, \psi^\dagger(\underline{r}_i)\, \psi^\dagger(\underline{r}_j)\, V(|\underline{r}_i - \underline{r}_j|)\, \psi(\underline{r}_i)\, \psi(\underline{r}_j)$$

BS K

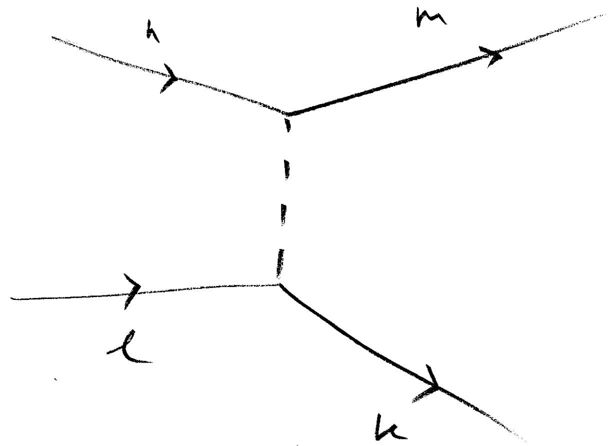
$$H = \sum_k \sum_l b_k^\dagger b_l H_{kl} + \frac{1}{2} \sum_{kl} \sum_{mn} V_{klmn} b_k^\dagger b_m^\dagger b_n b_l$$

$$\begin{cases} H_{kl} = \sum_i \int d^3\underline{r}_i \, \phi_k^*(\underline{r}_i) H \phi_l(\underline{r}_i) \\ V_{klmn} = \sum_{i \neq j} \sum \int d^3\underline{r}_i \int d^3\underline{r}_j \, \phi_k^*(\underline{r}_i) \phi_l(\underline{r}_i) \end{cases}$$

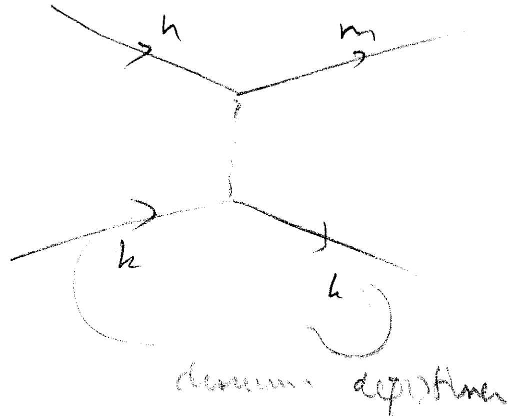
$$\times V(|\underline{r}_i - \underline{r}_j|) \phi_m^*(\underline{r}_j) \phi_n(\underline{r}_j)$$

Etkileşme terimi 2 yaratıcı 2 yokedici op. içerir. (iki parçacık

<u>saçılma olayı</u>;



$k = l$



durumu değiştirmez
(iki saçılır)

$\Big|$ Yaratıcılar / Yokediciler $\Big\rangle$
Sol / Sağ

$b_k^\dagger b_l b_m^\dagger b_n$

$m = l$ ise $\Rightarrow$ parçacığı kendisi ile etkile.

BS K

$\left\{ \begin{array}{l} |0\rangle \text{ vakum olsun }, n_m = 0 \text{ olsun}, \\ b_k|0\rangle = 0 \quad \text{ama} \quad b_\alpha^+|0\rangle = |\alpha\rangle \end{array} \right.$ α. durumda tek bir parçacık.

$$\sum_{klmn} V_{klmn}\, b_k^+ b_m^+ \underbrace{b_n b_l}_{2\ \text{adet}}\, b_\alpha^+|0\rangle = 0$$

iki parçacık, sistemde tek parçacık var ⇒ etkileşemez demek. Ama doğru yazılmamış olsun

$$\sum_{klm} V_{klmn}\, b_k^+ b_l b_n^+ \underbrace{b_n b_\alpha^+|0\rangle}_{\neq 0} = \sum_{km} V_{kmm\alpha}\, b_k^+|0\rangle \neq 0$$

$$|0\rangle$$

$$\delta_{n\alpha}|0\rangle$$

$$\delta_{n\alpha}|m\rangle$$

$$\delta_{n\alpha}\delta_{lm}|0\rangle$$

$\left.\begin{array}{l}\alpha = n \\ l = m\end{array}\right) \Rightarrow$ parçacığın kendisi ile etk. demek bundan toplamda kaçınılır!.

Hemen hemen serbest 4He parçacıklarının bir gazını düşünelim

$$\phi(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i k\cdot r} a_k$$

DD

BS K

$$\mathcal{H} = \Psi^\dagger(\underline{r}_1)\,\Psi^\dagger(\underline{r}_2)\,V(r_1-r_2)\,\Psi(\underline{r}_1)\,\Psi(\underline{r}_2)$$

$$+\ \Psi^\dagger(\underline{r})\,H(\underline{r})\,\Psi(\underline{r})$$

$$H(\underline{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \cancel{U(\underline{r})} \qquad \Psi(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\underline{k}} e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} a_k$$

$$H = \int d^3\underline{r} \ldots \mathcal{H}$$

$$I = \frac{1}{V}\sum_{\underline{k}}\sum_{\underline{k}'} a_k^\dagger a_{k'} \underbrace{\int d^3\underline{r}\, e^{-i(\underline{k}-\underline{k}')\cdot\underline{r}}}_{\sim\,\delta(\underline{k}-\underline{k}')} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$= \sum_k \epsilon_k\, a_k^\dagger a_k$$

$$II \quad \int d^3\underline{r}_1 \int d^3\underline{r}_2\ \Psi^\dagger(\underline{r}_1)\,\Psi^\dagger(\underline{r}_2)\,V(\underline{r}_1-r_2)\,\Psi(\underline{r}_1)\,\Psi(r_2)$$

$$= \frac{1}{2V^2}\sum_{\underline{k}}\sum_{\underline{k}_1}\sum_{\underline{k}_2}\sum_{\underline{k}_3} a_{\underline{k}}^\dagger a_{\underline{k}_1}^\dagger a_{\underline{k}_2} a_{\underline{k}_3}$$

$$\times \left[\iint d^3\underline{r}_1\, d^3\underline{r}_2\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}_1 + i\underline{k}_2\cdot r_1}\, V(r_1-r_2)\, e^{-i\underline{k}_1\cdot r_2 + i\underline{k}_3\cdot r_2}\right]$$

$$\bar{r}_1 - \bar{r}_2 = \underline{R} \qquad d\underline{r} = d\underline{r}_1$$

$$\to \frac{1}{V}\int d^3\underline{r}_2 \int d^3\underline{R}\ e^{-i\underline{k}\cdot\underline{R} + i\underline{k}_2\cdot\underline{R}}\, V(\underline{R})\, e^{i(-\underline{k}+\underline{k}_2-\underline{k}_1+\underline{k}_3)\cdot r_2}$$

BS K

$$= \frac{1}{V^2} \underbrace{\int d^3 r_2 \, e^{i(-\underline{k}+\underline{k}_2-\underline{k}_1+k_3)\cdot \underline{r}_2}}_{V\,\delta(\underline{k}_2-\underline{k}-\underline{k}_1+\underline{k}_3)} \int d^3\underline{R} \; e^{i(\underline{k}_2-\underline{k})\cdot \underline{R}} \, V(\underline{R})$$

$$\mathbb{I} = \frac{1}{2V} \sum_{\underline{k}} \sum_{\underline{k}_1} \sum_{\underline{k}_2} \sum_{\underline{k}_3} a^{+}_{\underline{k}} a^{+}_{\underline{k}_1} a_{\underline{k}_2} a_{\underline{k}_3} \, \delta(\overbrace{\underline{k}_2-\underline{k}}^{q}-\underline{k}_1+\underline{k}_3) \qquad q-k_1+k_3$$

$$V(\underbrace{\underline{k}_2-\underline{k}}_{\underline{q}})$$

$$\frac{1}{2V} \sum_{k} \sum_{k_1} \sum_{q} \sum_{k_3} a^{+}_{k} a^{+}_{k_1} a_{q+k} a_{k_3} V(q) \times \delta(q-k_1+k_3)$$

$$\underline{k}_3 \to \underline{k}_1 - \underline{q}$$

$$= \frac{1}{2V} \sum_{\underline{k}} \sum_{\underline{k}_1} \sum_{q} a^{+}_{\underline{k}} a^{+}_{\underline{k}_1} a_{\underline{k}+\underline{q}} a_{\underline{k}_1-\underline{q}} V(q)$$

Dummy index:
$$\begin{cases} \underline{k}_1 \to \underline{k}' \\ \underline{k}+\underline{q} \to k \\ k_1 - q \to k_1 \end{cases}$$

$$H = \sum_{k} \epsilon_k a^{+}_k a_k + \frac{1}{2V} \sum_{k} \sum_{k'} \sum_{q} a^{+}_{k+q} a^{+}_{k'-q} a_k a_{k'} V(q)$$

Etkileşim hamiltonyeni düzlem dalga temelinde parçacık yoğunluk op.'ü cinsinden

$$\rho_{\underline{q}} = \sum_{\underline{k}} a^{+}_{\underline{k}+\underline{q}} a_{\underline{k}} \qquad \rho_{-\underline{q}} = \sum_{\underline{k}'} a^{+}_{\underline{k}'-\underline{q}} a_{\underline{k}'}$$

BS K

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2V} \sum_q V(\underline{q}) \rho_q \rho_{-q}$$

$$[a_k, a^\dagger_{k'-q}] = \delta_{k,k'-q} = a_k a^\dagger_{k'-q} - \underline{\underline{a^\dagger_{k'-q} a_k}}$$

$$a^\dagger_{k+q} a_{k'} \delta_{k,k'-q} \to \underbrace{a^\dagger_{k'}}\, a_{k'}$$

The term having a particle interacting with itself.

BS K

FERMİYONLAR

Bunlar, Pauli dışarlama ilkesi gereğince her durumda sıfır ya da bir parçacık bulundurabilecek sistemlerdir.

$$\psi(\underline{r})\psi^+(\underline{r}') + \psi^+(\underline{r}')\psi(\underline{r}) \equiv \{\psi(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')\} = \delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

$$\{\psi(\underline{r}), \psi(\underline{r}')\} = \{\psi^+(\underline{r}'), \psi^+(\underline{r})\} = 0$$

Bu alanları, $\phi_\lambda(\underline{r})$ ortonormal kümesi cinsinden

açar isek,

$$\psi(\underline{r}) = \sum_\lambda c_\lambda \phi_\lambda(\underline{r}) \qquad \psi^+(\underline{r}) = \sum_\lambda c_\lambda^+ \phi_\lambda^*(\underline{r})$$

$$\{c_\lambda, c_{\lambda'}^+\} = \delta_{\lambda\lambda'} \qquad \{c_\lambda^+, c_{\lambda'}^+\} = \{c_\lambda, c_{\lambda'}\} = 0$$

$\{c_\lambda, c_\lambda\} = +2c_\lambda c_\lambda = 0$ nasıl oluyor?

$$c_\lambda |1\rangle_\lambda = |0\rangle_\lambda \qquad c_\lambda^+ |0\rangle_\lambda = |1\rangle_\lambda$$

$$c_\lambda |0\rangle_\lambda = 0$$

$$c_\lambda^+ |1\rangle_\lambda = 0 \qquad c_\lambda c_\lambda |0\rangle_\lambda = 0 \qquad c_\lambda^+ c_\lambda^+ |0\rangle_\lambda = 0$$

BSK

Bunu görmenin bir diğer yolu da $N_\lambda = c_\lambda^\dagger c_\lambda$ sayı operatörünü karesini almaktır.

$$N_\lambda^2 = c_\lambda^\dagger c_\lambda c_\lambda^\dagger c_\lambda = c_\lambda^\dagger (1 - c_\lambda^\dagger c_\lambda) c_\lambda$$

$$= c_\lambda^\dagger c_\lambda - \overset{0}{\cancel{c_\lambda^\dagger c_\lambda^\dagger}} c_\lambda c_\lambda = N_\lambda$$

$$N_\lambda^2 = N_\lambda$$

$$\Rightarrow N_\lambda = 0, +1$$ sadece bunların karesi kendisine eşit.

Bozonlarınki gibi Fermiyonlar için Hamiltonien,

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} H_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{ijlm} c_j^\dagger c_m^\dagger c_l c_i V_{ijlm}$$

$$H_{ij} = \int d^3r \; \phi_i(\underline{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\underline{r}) \right] \phi_j(\underline{r})$$

$$V_{ijlm} = \int d^3\underline{r}_1 \int d^3\underline{r}_2 \; \phi_j^*(\underline{r}_1) \phi_i(\underline{r}_1) V(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) \phi_l^*(\underline{r}_2) \phi_m(\underline{r}_2)$$

Not: burada yaratma-yoketme op.'larının sıran değiştirirken de

$c_i c_l = - c_l c_i$ olduğuna dikkat edilmeli.

BS K

Katıda elektronlar ile çalışır iken kullanılan bir diğer baz kümesi de düzlem dalgalardır.

$$\psi(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}\sigma} e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\, C_{\underline{k}\sigma}\, \chi_{\sigma}$$

spin dalga fonk.u.

spin indisi ± 1

$$\chi_{+,-} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Fermiyon Ham.

$$\mathcal{H} = \sum_{\underline{p}\sigma} \varepsilon_{\underline{p}}\, C^{\dagger}_{\underline{p}\sigma} C_{\underline{p}\sigma} + \sum_{\underline{q}} u(\underline{q})\, \rho_{\underline{q}}$$

$$+ \frac{1}{2V} \sum_{q} \sum_{\substack{k k' \\ \sigma \sigma'}} v_q\, C^{\dagger}_{\underline{k}+\underline{q},\sigma}\, C^{\dagger}_{\underline{k}'-\underline{q}\,\sigma}\, C_{\underline{k}'\sigma}\, C_{\underline{k}\sigma}$$

$$= \sum_{\underline{k}\sigma} C^{\dagger}_{\underline{k}+\underline{q}\,\sigma}\, C_{\underline{k}\sigma}$$ elektron yoğunluk op.'u

Katıdaki elektronların atomlar ya da iyonlar ile etkileşimi

$$V_q = \int d^3\underline{r}\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}\, V(\underline{r})$$

$$= e^2 \int \frac{d^3\underline{r}}{r}\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} = 2\pi e^2 \int_0^\infty r\,dr \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta)\, e^{iqr\cos\theta}$$

$$= \frac{2\pi e^2}{iq} \int_0^\infty dr \left(e^{iqr} - e^{-iqr}\right) = \frac{4\pi e^2}{q} \int_0^\infty dr \sin qr$$

$$= \frac{4\pi e^2}{q^2}\left(1 - \lim_{r\to\infty} \cos qr\right)$$

osilasyonlar sonsuzda sönsüzler.

Fermiyon Ham. (elektron gaz Ham.) için bazı model Hamiltonyenleri tartışalım.

Homojen elektron gazı, korelasyon etkilerini öğrenmek için sıklıkla incelenen bir modeldir. Hamiltonyen

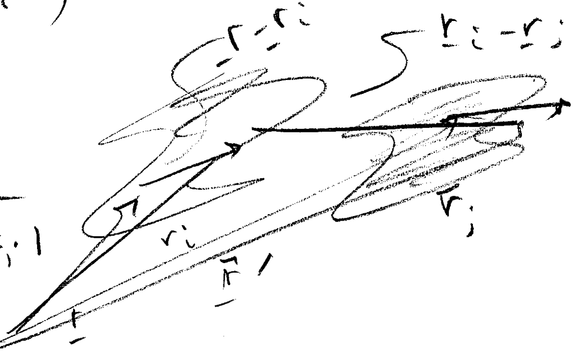
$$H = \sum_{\underline{p}\sigma} \varepsilon_{\underline{p}}\, c^\dagger_{\underline{p}\sigma} c_{\underline{p}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{q\neq 0} \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} V_q\, c^\dagger_{\underline{k}+\underline{q}\sigma}\, c^\dagger_{\underline{k}'-\underline{q}\sigma'}\, c_{\underline{k}'\sigma'}\, c_{\underline{k}\sigma}$$

Temel yaklaşım atomları ortadan kaldırmak ve bunları n_0 yoğunluklu uniform bir taban yükü ile yerdeğiştirmektir. Tabii ki homojen elektron gazı bir kristal yapıya sahip değildir.

BS K

$$H = H_{el} + H_b + H_{el-b}$$

(yoğunluğu $n(r)$ olan pozitif taban yüklerin H.'i)



$$H_{el} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i \neq j} \frac{1}{|r_i - r_j|}$$

$$H_b = \frac{e^2}{2} \iint d^3r \, d^3r' \, \frac{n(r)\, n(r')}{|r - r'|}$$

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{i=1}^{N} \int d^3r \, \frac{n(r)}{|r - r'|}$$

2. kuantizasyon;

$$H_{el} = \int d^3r \, \psi^\dagger(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi(r) + \frac{e^2}{2} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \, \frac{\psi^\dagger(r_1)\psi^\dagger(r_2)\psi(r_2)\psi(r_1)}{|r_1 - r_2|} \quad (1)$$

$$H_b = \frac{e^2 n_0^2}{2} \iint d^3r \, d^3r' \, \frac{1}{|r - r'|} \quad (2)$$

$$H_{el-b} = -e^2 n_0 \iint d^3r \, d^3r' \, \frac{\psi^\dagger(r')\psi(r)}{|r - r'|} \quad (3)$$

BS K

(2) deki integral ıraksayacağından bir yakınsama çarpanı koyalım.

$$\lim_{\mu\to 0}\int d^3\underline{r}'\,\frac{e^{-\mu|\underline{r}-\underline{r}'|}}{|\underline{r}-\underline{r}'|}=\lim_{\mu\to 0}\int d^3\underline{R}\,\frac{e^{-\mu R}}{R}$$

$$=4\pi\lim_{\mu\to 0}\int R\,dR\,e^{-\mu R}=4\pi\lim_{\mu\to 0}\left[\frac{e^{-\mu R}}{\mu^2}(-\mu R-1)\right]_0^L$$

$$=\lim_{\mu\to 0}\frac{4\pi}{\mu^2}\qquad \left(L\gg\frac{1}{\mu}\right)$$

$$\mathcal{H}_b=\frac{e^2 n_0^2}{2}\,\frac{4\pi V}{\mu^2}\qquad \mu\to 0$$

uzay integral

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k\sigma}e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\,C_{k\sigma}\,\eta_\sigma$$

$$\psi^+=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k\sigma}e^{-i\underline{k}'\cdot\underline{r}'}\,C^+_{k'\sigma'}\,\eta^+_{\sigma'}$$

$$\mathcal{H}_{el-b}=-e^2 n_0\sum_{\substack{k\\ \sigma}}\sum_{\substack{k'\\ \sigma'}}C^+_{k'\sigma'}C_{k\sigma}\frac{1}{V}\int d^3\underline{r}\int d^3\underline{r}'\,\frac{e^{i(\underline{k}-\underline{k}')\cdot\underline{r}'}}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\eta^+_{\sigma'}\eta_\sigma$$

$$=-\frac{e^2 n_0}{V}\sum_{\substack{k\\ \sigma}}\sum_{\substack{k'\\ \sigma'}}C^+_{k'\sigma'}C_{k\sigma}V\,\delta_{\underline{k},\underline{k}'}\int d^3\underline{R}\,\frac{e^{-\mu R}}{R}\eta^+_{\sigma'}\eta_\sigma$$

BS K

$$= -e^2 n_0 \sum_{k}\sum_{k'}\sum_{\sigma\sigma'} C^+_{k'\sigma'} C_{k\sigma}\, \delta_{\sigma\sigma'} \frac{4\pi}{\mu^2}$$

$$= -e^2 n_0 N \frac{4\pi}{\mu^2} \checkmark$$

$q=0$ durumunda

$$\lim_{q\to 0} \frac{1}{2V} \sum_{k\sigma}\sum_{k'\sigma'} V_q\, C^+_{k+q\sigma} C^+_{k'-q\sigma'} C_{k'\sigma'} C_{k\sigma}$$

$$= -\lim_{q\to 0} \frac{1}{2V} \sum_{k\sigma}\sum_{k'\sigma'} V_q\, C^+_{k\sigma} \underbrace{C^+_{k'\sigma} C_{k\sigma'}}_{\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} - C_{k\sigma} C^+_{k'\sigma'}} C_{k'\sigma'}$$

$$= \lim_{q\to 0} \frac{-1}{2V} V_q \sum_{k\sigma}\sum_{k'\sigma'} [\underbrace{C^+_{k\sigma} C_{k\sigma}}_{N} - \underbrace{C^+_{k\sigma} C_{k\sigma} C^+_{k\sigma'} C_{k'\sigma'}}_{N^2}]$$

$$= \lim_{q\to 0} \frac{-1}{2V} V_q (N - N^2) = \lim_{q\to 0} V_q (N^2 - N)/2V$$

$$= \lim_{q\to 0} \frac{4\pi e^2}{q^2+\mu^2} (N^2 - N) \frac{1}{2V} = \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \frac{1}{2V} (N^2 - N)$$

← çıkar

$$\langle H_{ee}(q=0) \rangle = \frac{1}{2} e^2 n_0^2 V \frac{4\pi}{\mu^2} - \frac{1}{2} e^2 n_0 \frac{4\pi}{\mu^2}$$

$$\langle H_b \rangle = \frac{1}{2} e^2 n_0^2 V \frac{4\pi}{\mu^2}$$

$$\langle H_{el-b} \rangle = -e^2 n_0^2 V \frac{4\pi}{\mu^2}$$

$q\neq 0$ elektronların kendileri olan etkileşmelerinden dolayı meydana gelen dalgalanmaları temsil eder.

BS K

Sıkı bağ modeli :

$$W_\delta = \int d^3\underline{r}\, \phi^*(\underline{r}-\underline{R}_i)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\underline{r})\right]\phi(\underline{r}-\underline{R}_{i+\delta})$$

$$\mathcal{H} = \sum_{i\delta\sigma} W_\delta\, C^+_{i\sigma}\, C_{i+\delta\sigma}$$

spini temsil eder.

en yakın komşular

$\underline{R}_i$ noktasındaki siteyi

$$\mathcal{H} = \int d^3r\, \mathcal{H} = \int d^3\underline{r}\, f^+(\underline{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\underline{r})\right] f(\underline{r})$$

$$f(\underline{r}) = \sum_j C_{j\sigma}\eta_\sigma \underbrace{\phi(\underline{r}-\underline{R}_j)}_{\text{atomik dalga fonk.}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{jk} e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_j} C_{\underline{k}\sigma}\phi(\underline{r}-\underline{R}_j)$$

alınarak

Fourier trans.

$$C_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_j} C_{k\sigma}$$

$$\mathcal{H} = \sum_{ij}\sum_{\sigma\sigma'} C^+_{j\sigma} C_{i\sigma'}\, \eta^+_\sigma \eta_{\sigma'} \int d^3\underline{r}\, \phi^*(\underline{r}-\underline{R}_j)$$

$$\times\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\phi(\underline{r}-\underline{R}_i)$$

$$= \sum_j\sum_{\sigma\sigma} C^+_{j\sigma} C_{j+\delta\sigma} \underbrace{\int d^3\underline{r}\, \phi^*(\underline{r}-\underline{R}_i)\,(\;)\,\phi(\underline{r}-\underline{R}_i)}_{W_\delta}$$

mom. uzayında,

$$\mathcal{H} = \sum_{j\delta\sigma}\sum_{\underline{k}\underline{k}'} \frac{1}{N}\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{R}_j + i\underline{k}'\cdot\underline{R}_{j+\delta}}\, C^{\dagger}_{k\sigma} C_{k'\sigma} W_\delta$$

$\mathcal{H}(r) = \mathcal{H}(\underline{r}+\underline{R}_j)$ olduğundan, $\underline{r}-\underline{R}_j=\underline{r}'$ der isek

$$W_\delta = \int d^3\underline{r}'\, \phi^{*}(\underline{r}')\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\underline{r})\right)\phi\left(\underline{r}'-(\underline{R}_{j+\delta}-\underline{R}_j)\right)$$

$$= \sum_{j\sigma\delta}\sum_{kk'} \frac{1}{N}\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{R}_j}\, e^{i\underline{k}'\cdot\underline{R}_j}\, e^{i\underline{k}'\cdot(\underline{R}_{j+\delta}-\underline{R}_j)}\, W_\delta\, C^{\dagger}_{k\sigma} C_{k'\sigma}$$

$$= \sum_{kk',j\sigma\ell} \underbrace{\frac{1}{N}\, e^{-i(\underline{k}'-\underline{k})\cdot\underline{R}_j}}_{\delta(\underline{k}'-\underline{k})}\, e^{i\underline{k}'\cdot\underline{R}_\ell}\, W_\ell\, C^{\dagger}_{k\sigma} C_{k'\sigma}$$

$$= \sum_{k\sigma} C^{\dagger}_{k\sigma} C_{k\sigma} \underbrace{\sum_\ell e^{i\underline{k}\cdot\underline{R}_\ell}\, W_\ell}_{W(\underline{k})}$$

$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} W(\underline{k})\, C^{\dagger}_{k\sigma} C_{k\sigma}$$

"En yakın komşu modelinde" site enerjisi W_0 alınabilir ve hopping terimi en yakın komşular için $W_\ell = W$ ya sınırlandırılabilir.

BS K

$$w(\underline{k}) = Z\, w\, \gamma_k = \cancel{Z} w \frac{1}{\cancel{Z}} \sum_{\ell} e^{i \underline{k}\cdot \underline{R}_\ell}$$

en yakın komşu sayısı.

$$Z_\beta = e^{-\beta \Omega} = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu N)}$$

$$= \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \left[\sum_{k\sigma} w(\underline{k}) N_{k\sigma} - \sum_{k\sigma} \mu N_{k\sigma} \right]}$$

$$= \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \sum_{k\sigma} \left(w(\underline{k}) N_{k\sigma} - \mu N_{k\sigma} \right)}$$

fermiyonlar için bölüşüm fonk.

$$= \sum_{n_1\sigma_1 n_2\sigma_2 \ldots n_\infty \sigma_\infty} \langle n_1\sigma_1 \ldots n_\infty\sigma_\infty | e^{-\beta \sum_{k\sigma} (w(\underline{k}) - \mu) N_{k\sigma}} \times | n_1\sigma_1 \ldots n_\infty \sigma_\infty \rangle$$

$$= \prod_{k\sigma} \sum_{n_{k\sigma}} \langle n_{k\sigma} | e^{-\beta (w(\underline{k}) - \mu) N_{k\sigma}} | n_{k\sigma} \rangle$$

$$n_{k\sigma} = 0, +1$$

$$= \prod_{k\sigma} \left\{ \langle 0 | e^{-\beta(\;)0} | 0 \rangle + e^{-\beta (w(\underline{k}) - \mu)} \right\}$$

BS K

$$Z_p = \prod_{\underline{k}\sigma} \left\{ 1 + e^{-\beta[W(\underline{k})-\mu]} \right\}$$

Sıkı-bağ modelinde Coulomb etk.

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{ijlm \\ \sigma\sigma'}} V_{ij,ml}\, C_j^{+} C_m^{+} C_l C_i$$

şeklinde hesaba katılır.

$$V_{ij,ml} = \int\int d^3\underline{r}_1 d^3\underline{r}_2\, \phi^*(\underline{r}_1-\underline{R}_j)\, \phi(\underline{r}_1-R_i) \frac{e^2}{|\underline{r}_1-\underline{r}_2|}\, \phi^*(\underline{r}_2-\underline{R}_m)\, \phi(\underline{r}_2-\underline{R}_l)$$

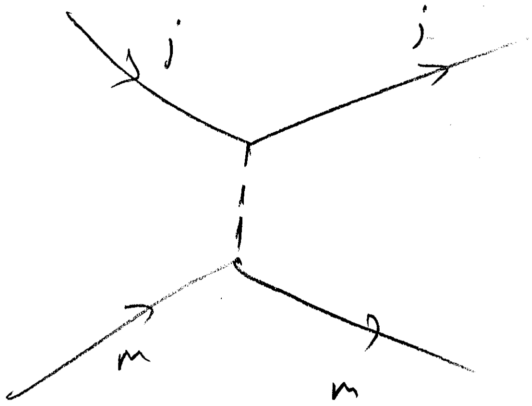
ϕ orbital 4-farklı sitede merkezlenebilir. <u>4-merkez integrali</u> içeren terimler en büyüğü Coulomb terimleridir örneğin

$m=l$, $i=j$

$$V_{jm} = \int\int d^3\underline{r}_1 d^3\underline{r}_2\, |\phi(\underline{r}_1-\underline{R}_j)|^2 \frac{e^2}{|\underline{r}_1-\underline{r}_2|}\, |\phi(\underline{r}_2-\underline{R}_m)|^2$$

BS K

Bu durum farklı atomik sitelerdeki iki parçacık arasındaki direkt etkileşim adını alır.



$$c_j^\dagger c_j c_m^\dagger c_m = n_j n_m$$

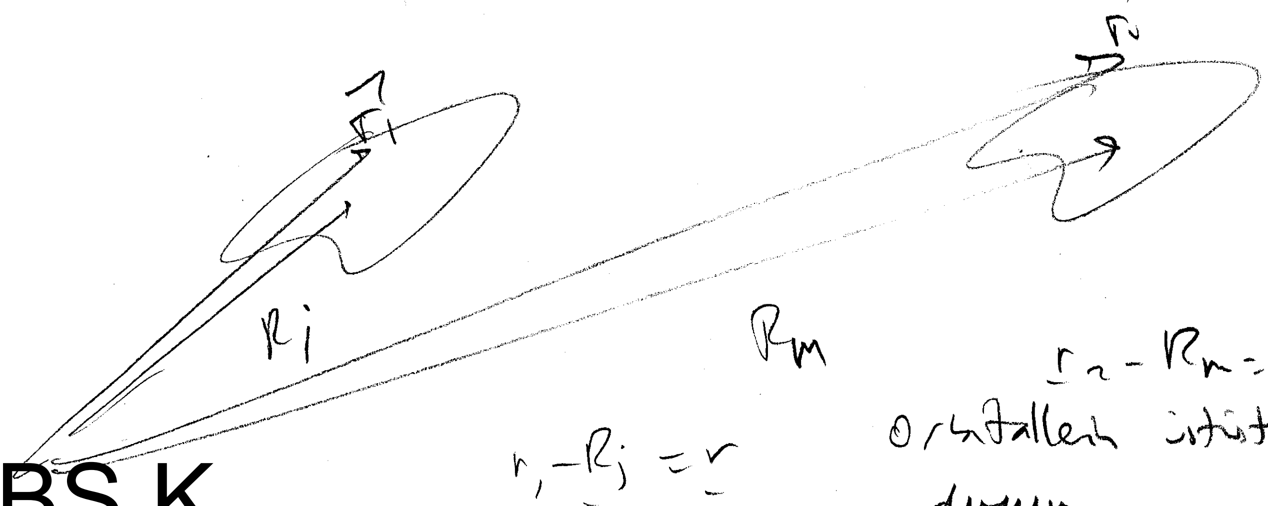
$$\Rightarrow \frac{1}{2} \sum_{j \neq m} n_j n_m V_{jm}$$

$|\underline{R}_j - \underline{R}_m| \to \infty$

$$\Rightarrow V_{jm} = \iint d^3\underline{r}\, d^3\underline{r}' \, |\phi(\underline{r})|^2 \frac{e^2}{|\underline{r}-\underline{r}'+\underline{R}_j-\underline{R}_m|} |\phi(\underline{r}')|^2$$

$$\underset{|\underline{R}_j - \underline{R}_m| \to \infty}{V_{jm}} = \frac{e^2}{|\underline{R}_j - \underline{R}_m|} \underbrace{\int d^3r \, |\phi(\underline{r})|^2}\ \underbrace{\int d^3\underline{r}' \, |\phi(\underline{r}')|^2}$$

$$= \frac{e^2}{|R_j - R_m|}$$ normalize edb.



$\underline{r}_2 - \underline{R}_m = \underline{r}'$

$\underline{r}_1 - \underline{R}_j = \underline{r}$

Orbitallerin üst üste gelmediği durum.

Hubbard Modeli: (1963) en büyük olan Coulomb integralini alıyor. Tüm $\phi(r)$ orbitali aynı m sitesinde merkezlenmiş. Bu ise, aynı atomdaki iki elektron arasındaki etkileşmeyi tarif eder. İki elektron aynı durumda olamayacağından, aynı atomdaki iki elektron farklı atomik durumlarda olmalılar. En basit modelde, ki bu her bir atomda tek bir orbital durumunu gözönüne alır, iki elektron farklı spin konfigürasyonlarına sahip olmalı.

$$\boxed{H = w\sum_{i\delta\sigma} c^{+}_{i\sigma} c_{i+\delta\sigma} + W_0 \sum_{i\sigma} c^{+}_{i\sigma} c_{i\sigma} + U \sum_{j} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}}$$

Gutzwiller (1963) ferromagnetlerin d-bandları.

$$U = \frac{1}{2}\int d^3\underline{r}_1 \int d^3\underline{r}_2 \, |\phi(\underline{r}_1-\underline{R}_i)|^2 \frac{e^2}{|\underline{r}_1-\underline{r}_2|} |\phi(\underline{r}_2-\underline{R}_i)|^2$$

aynı atomdaki farklı iki elektron arasındaki Coulomb. U büyük, 10eV

$$= \frac{1}{2}\int\int d^3\underline{r}' \, d^3\underline{r} \, |\phi(r)|^2 \frac{e^2}{|\underline{r}-\underline{r}'|} |\phi(r')|^2$$

$U \sim w$ için

"Dar band materyaller için elektron iletkenliği için iyi bir model".

$$W_0 = W_{\delta=0}$$

2. $W=0 \Rightarrow$ bu atomik limit olarak adlandırılır. Çünkü her bir atom tek olarak gözönüne alınır. Bu limitte enerji

$$E = W_0 N + \tilde{n} U$$

elektron sayısı

site sayısı.

1. Diğer bir limit durum $U=0$ olduğu durumdur ki bu sıkı bağlanma] sıkı bağ modelidir.

BS K

yaratma yok etme op. leri Hamiltonyenlerin yanısıra

diğer op.'leri ifade etmek için de kullanılırlar:

1. Yoğunluk operatörü:

$$\rho(\underline{r}) = \psi^{\dagger}(\underline{r})\psi(\underline{r}) = \sum_{\lambda\nu} c_{\lambda}^{\dagger} c_{\nu} \phi_{\lambda}^{*}(\underline{r})\phi_{\nu}(\underline{r})$$

$$= \sum_{i} \delta(\underline{r} - \underline{r}_i)$$

daha çok onun Fourier temsiline ihtiyaç duyulur:

$$\rho(\underline{q}) = \int d^3\underline{r}\, e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}} \rho(\underline{r})$$

$$= \sum_{\lambda\nu} c_{\lambda}^{\dagger} c_{\nu} \int d^3\underline{r}\, e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}} \phi_{\lambda}^{*}(\underline{r})\phi_{\nu}(\underline{r})$$

en popüler iki temsili.

$$\rho(\underline{q}) = \begin{cases} \sum_{k\sigma} c^{\dagger}_{\underline{k}+\underline{q}\,\sigma} c_{k\sigma} & \text{serbest parçacık} \\ \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}_i} & \text{sıkı bağ modeli} \end{cases}$$

komşular arasındaki üstüsteliği ihmal.

BS K

2.) Elektrik Akım Op.'ü :

tüm parçacıklar ve hızlar üzerinden,

$$\mathbf{j}_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\sum_i e_i \left[\mathbf{v}_i\, \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)\, \mathbf{v}_i \right]$$

$$\mathbf{j}_e(\mathbf{r}) = \sum_e e_e\, \mathbf{j}_e(\mathbf{r})$$

herbir tür parçacık grubu için.

QM'sel temsil;

$$\mathbf{j}_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{2im}\left\{ \psi^\dagger(\mathbf{r})\, \nabla\psi(\mathbf{r}) - \left(\nabla\psi^\dagger(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) \right\}$$

$$C_\lambda = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, C_k$$

Fourier dönüşüm;

$$\mathbf{j}_e(\mathbf{q}) = \frac{1}{2im}\sum_{\lambda\eta} C_\lambda^\dagger C_\eta \int d^3r\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left(\phi_\lambda^* \nabla\phi_\eta - \phi_\eta \nabla\phi_\lambda^* \right)$$

serbest parçacıklar için,

$$\mathbf{j}_e(\mathbf{q}) = \frac{1}{2im}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} C_{k'}^\dagger C_k \int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\times \left[e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}\, \cancel{i}\mathbf{k}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (-\cancel{i}\mathbf{k}')\, e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \right]$$

$$(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\, e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}$$

BS K

$$= \frac{1}{m}\sum_{k\sigma} \left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}\right) C_{k+q\,\sigma}^\dagger C_{k\sigma}$$

sıkı bağ modeli için türetim polarizasyon op.'ünün

tanımından başlar.

$$\underline{P} = \int d^3\underline{r}\ \underline{r}\ \rho(\underline{r})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\underline{P} = \int d^3\underline{r}\ \underline{r}\ \frac{\partial \rho(\underline{r})}{\partial t} \qquad -\underline{\nabla}\cdot \underline{j}(\underline{r},t)$$

kullanarak ve kısmi integrasyon yaparak

$$= -\int d^3\underline{r}\ \underline{r}\left(\underline{\nabla}\cdot\underline{j}(\underline{r},t)\right)$$

$$= \int d^3\underline{r}\ \underline{j}\cdot\underline{\nabla}(\underline{r}) = \int d^3\underline{r}\ \underline{j}(\underline{r})$$

sıkı bağ modelinde $\underline{P} = \sum_i \underline{R}_i n_i$

$$\underline{\dot{J}} = \int d^3\underline{r}\ \underbrace{\underline{j}(\underline{r})} = \frac{\partial}{\partial t}\underline{P} = i\left[H, \underline{P}\right]$$

akım op.   akım yoğ. op.'u

Sıkı bağ modelinde Hamiltonyen

$$H = W\sum_{i\delta\sigma} C^{\dagger}_{i+\delta\,\sigma} C_{i\sigma} + \sum_{\substack{ij\\ \sigma\sigma'}} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} V_{ij}$$

yalnızca ilk terim akım op.'una katkıda bulunur

$$i[H,\underline{P}] = iW\sum_{\substack{i\delta\sigma\\ \alpha}} \underline{R}_\alpha\left\{C^{\dagger}_{i+\delta\,\sigma} C_{i\sigma} C^{\dagger}_{\alpha} C_{\alpha} - C^{\dagger}_{\alpha} C_{\alpha} C^{\dagger}_{i+\delta,\sigma} C_{i\sigma}\right\}$$

BS K

$$= i w \sum_{\substack{i\delta\sigma \\ \alpha}} \underline{R}_\alpha \Big\{ c^\dagger_{i+\delta\sigma} \left(\delta_{i\alpha} - c_\alpha c_i \right) c_\alpha$$

$$- c^\dagger_\alpha \left(\delta_{\alpha, i+\delta} - c^\dagger_{i+\delta} c_\alpha \right) c_i \Big\}$$

$$= i w \Big\{ \sum_{i\delta\sigma} c^\dagger_{i+\delta\sigma} c_{i\sigma} \big(\underbrace{\underline{R}_i - \underline{R}_{i+\delta}}_{\underline{\delta}} \big)$$

$$= - i w \sum_{i\delta\sigma} \underline{\delta}\, c^\dagger_{i+\delta\sigma} c_{i\sigma}$$

$$\boxed{\underline{J} = - i w \sum_{i\delta\sigma} \delta\, c^\dagger_{i+\delta\sigma} c_{i\sigma}}$$

B.) <u>Energy akım op.-ı</u> termal iletkenlik, termoelektrik etkilerin incelenmesinde kullanılır.

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{H}(\underline{r}) = - \nabla \cdot \underline{J}_E(\underline{r})$$ En. korunumu

serbest parçacıklar için Hamiltonyen yoğunluğu

$$\mathcal{H}(\underline{r}) = \psi^\dagger(\underline{r})\, H(\underline{r})\, \psi(\underline{r})$$

$$\psi(\underline{r}) \equiv \psi(\underline{r}, t)$$

$$H(\underline{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2$$

BS K

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = \dot{\psi}^{+}\left[H(\underline{r})\psi(\underline{r},t)\right] + \psi^{+}(\underline{r},t)\,H(\underline{r})\,\dot{\psi}$$

$$\left.\begin{aligned} \dot{\psi} &= \frac{-i}{\hbar} H\psi \\ \dot{\psi}^{+} &= \frac{i}{\hbar} H\psi^{+} \end{aligned}\right] \text{Schrödinger Rel.:}$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left[H\psi^{+}(H\psi) - \psi^{+}H(H\psi)\right]$$

$$= \frac{-i}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left[(\nabla^2\psi^{+})H\psi - \psi^{+}\nabla^2(H\psi)\right]$$

$$\underline{\nabla}\cdot\left[(\underline{\nabla}\psi^{+})H\psi\right] = (\nabla^2\psi^{+})H\psi + \underline{\nabla}\psi^{+}\cdot\underline{\nabla}(H\psi)$$

$$\underline{\nabla}\cdot\left[\psi^{+}\underline{\nabla}(H\psi)\right] = \psi^{+}\underline{\nabla}^2(H\psi) + \nabla\psi^{+}\cdot\nabla(H\psi)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi}\underline{\nabla}\cdot\left[(\nabla\psi^{+})H\psi - \psi^{+}\nabla(H\psi)\right]$$

$$= -\underline{\nabla}\cdot \underline{J}_E$$

$$\underline{J}_E = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^{+}\underline{\nabla}(H\psi) - (\underline{\nabla}\psi^{+})H\psi\right)$$

$$\psi(\underline{r},t) = \frac{1}{V^{1/2}}\sum_{k} c_k\, e^{ik\cdot r}$$ [illegible]

[illegible] J_E [illegible]

BS K

$$j_E(\underline{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\Big[\sum_{\substack{\underline{k}\underline{k}'\\ \sigma}} C^\dagger_{k\sigma} C_{k'\sigma}\Big(\mathcal{E}_{k'}(i\underline{k}')\frac{1}{V} e^{i(\underline{k}'-\underline{k})\cdot\underline{r}} + (i\underline{k})\,\mathcal{E}_{k'}\frac{1}{V} e^{i(\underline{k}'-\underline{k})\cdot\underline{r}}\Big)\Big]$$

$$= \frac{\hbar}{2m}\frac{1}{V}\sum_{\substack{kk'\\ \sigma}} C^\dagger_{\underline{k}\sigma} C_{\underline{k}'\sigma}\,\mathcal{E}_{\underline{k}'}\, e^{i(\underline{k}'-\underline{k})\cdot\underline{r}}(\underline{k}'+\underline{k})$$

$$J_E = \int d^3r\, j_E(\underline{r},t) = \frac{\hbar}{2mV}\sum_{\substack{kk'\\ \sigma}} C^\dagger_{k\sigma} C_{k'\sigma}\,\mathcal{E}_{k'}(\underline{k}+\underline{k}') \times \underbrace{\int d^3\underline{r}\, e^{i(\underline{k}'-\underline{k})\cdot\underline{r}}}_{V\delta(\underline{k}'-\underline{k})}$$

$$\boxed{J_E = \sum_{k\sigma}\frac{\hbar \underline{k}}{m}\,\mathcal{E}_{\underline{k}}\, C^\dagger_{\underline{k}\sigma} C_{\underline{k}\sigma}} \qquad \mathcal{E}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

(4.) Enerji akımı için $\underline{R}_E$ nedir

$$\underline{R}_E = \frac{1}{2}\int d^3\underline{r}\,\big[\,\underline{r}\,\mathcal{H}(\underline{r}) + \mathcal{H}(\underline{r})\,\underline{r}\,\big]$$

$$\frac{\partial \underline{R}_E}{\partial t} = \frac{1}{2}\int d^3\underline{r}\Big[\underline{r}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t}\underline{r}\Big] = \int d^3\underline{r}\, j_E(\underline{r}) = \overline{J}_E$$

BS K

1.3. Electron-fonon etkileşmesi

A. Etkileşme Hamiltonyeni (Fröhlich 1950)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ei}$$

$$\mathcal{H}_p = \sum_{\underline{q}\lambda} \omega_{q\lambda} \left(a^{\dagger}_{q\lambda} a_{q\lambda} + \frac{1}{2} \right)$$

$$\mathcal{H}_e = \sum_i \frac{P_i^2}{2m} + \frac{e^2}{2} \sum_{ij} \frac{1}{r_{ij}}$$

$$\mathcal{H}_{ei} = \sum_{\underset{\text{elektronlar}}{i}} \tilde{V}(\underline{r}_i)$$

iyonlar otrudiyn ... ile.

$$\underline{R}_j = \underline{R}_j^{(0)} + \underline{Q}_j$$

$$\tilde{V}(\underline{r}_i) = \sum_j V_{ei}(\underline{r}_i - \underline{R}_j)$$

$$= V_{ei}(\underline{r}_i - \underline{R}_j^{(0)}) + \underbrace{\underline{Q}_j \cdot \underline{\nabla} V_{ei}}_{\text{ETKİ}}(\underline{r}_i - \underline{R}_j^{(0)}) + \ldots$$

Elektron-atom potansiyeli

$$V_{ei}(\underline{r} - \underline{R}_j^{(0)}) = \frac{1}{N} \sum_{\underline{q}} V_{ei}(\underline{q})\, e^{i\underline{q}\cdot(\underline{r} - \underline{R}_j^{(0)})}$$

BS K

EF etkileşmesi, $\nabla V_{ei} \cdot Q_j$

$$\tilde{V}(r) = \frac{i}{N}\sum_{q} e^{iq\cdot r}\, V_{ei}(q)\, q\cdot\left(\sum_j Q_j\, e^{-iq\cdot R_j^{(0)}}\right)$$

$$Q_j = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k} Q_k\, e^{ik\cdot R_j^{(0)}} \qquad \frac{i}{N}\sum_j Q_j\, e^{-iq\cdot R_j^{(0)}} = \sum_G \frac{i}{\sqrt{N}}\, Q_{q+G}$$

$$\frac{i}{N}\sum_j Q_j\, e^{-iq\cdot R_j^{(0)}} = \frac{i}{N}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k Q_k\, e^{i(k-q)\cdot R_j^{(0)}}$$

$$= \frac{i}{\cancel{N}}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k Q_k\, \cancel{N}\, \delta_{k-q=G}$$

$$= \frac{i}{\sqrt{N}}\sum_G Q_{q+G} \qquad Q_{q+G} = \sum_\lambda Q_{q+G,\lambda}\, \xi_{q+G,\lambda}$$

$$\sum \delta_{k-q=G} = \delta_{k_1-q=G_1} + \dots + \delta_{k_n-q=G_n} = \sum_G$$

$$Q_{q+G} = \left(\frac{\hbar}{2M\omega_{q+G,\lambda}}\right)^{1/2}\left(a_{q+G,\lambda} + a^{\dagger}_{-q-G,\lambda}\right)$$

$$\frac{i}{N}\sum_j Q_j\, e^{-iq\cdot R_j^{(0)}} = i\sum_{G,\lambda}\left(\frac{\quad}{N}\right)\xi_{q+G,\lambda}$$

$$\times\left(a_{q+G,\lambda} + a^{\dagger}_{-q-G,\lambda}\right)$$

$\cancel{k} = q+G$ fonon durumlar 1. Brillouin bölgesinde [illegible] ...

BS K

$$\tilde{V}(\underline{r}) = i \sum_{\underline{q},\underline{G}} e^{i(\underline{q}+\underline{G})\cdot\underline{r}} V_{ei}(\underline{q}+\underline{G})(\underline{q}+\underline{G})\cdot\underline{\xi}_q$$

$$\times \left(\frac{\hbar}{2\rho V \omega_q}\right)^{1/2} (a_q + a_{-q}^{+})$$

$$MN = \rho V$$

FFE

$$H_{ep} = \int d^3\underline{r}\, \rho(\underline{r})\, \tilde{V}(\underline{r})$$

$$= i \sum_{\underline{q},\underline{G}} \underbrace{\rho(\underline{q}+\underline{G})}_{\rho(r)\text{'s Fourier transform}} V_{ei}(\underline{q}+\underline{G})(\underline{q}+\underline{G})\cdot\underline{\xi}_q \left(\frac{\hbar}{2\rho V \omega_q}\right)^{1/2}(a_q + a_{-q}^{+})$$

$$\rho(\underline{q}+\underline{G}) = \int d^3\underline{r}\; e^{i(\underline{q}+\underline{G})\cdot\underline{r}} \rho(r)$$

$$M_{q+\underline{G}} = i V_{ei}(\underline{q}+\underline{G})(\underline{q}+\underline{G})\cdot\underline{\xi}_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\, \omega_q}\right)^{1/2}$$

$$\boxed{H_{ep} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\underline{q}\,G} M_{q+G}\, \rho(\underline{q}+\underline{G})(a_q + a_{-q}^{+})}$$

BS K

B. Lokalize Elektron

Elektronların r_i konumlarında sabit oldukları (derin kor elektronlar ve impurity durumlar) geri tepmenin olmadığı, dolayısıyla KE→0 olduğu durumlarda elektron-fonon Hamiltonyeni kenarcecik şöyledir:

$$\mathcal{H} = H_{PH} + \mathcal{H}_{E-PH}$$

$$= \sum_q \Big\{ \omega_q \left(a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2}\right) + \sum_i \left(a_q + a_{-q}^\dagger\right) \frac{e^{i q\cdot r_i}}{\sqrt{V}} \sum_G M_{q+G}\, \rho_0(q+G)\, e^{i G\cdot r_i} \Big\}$$

$$\rho(q+G) = \int d^3 r\, e^{i(q+G)\cdot r} \sum_i |\phi_0(r-r_i)|^2$$

$$= \sum_i e^{i r_i\cdot(q+G)}\, \rho_0(q+G)$$

$$\rho_0(q+G) = \int d^3 r\, e^{i(q+G)\cdot r}\, |\phi(r)|^2$$

$$= \sum_q \Big\{ \omega_q \left(a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{V}} \left(a_q + a_{-q}^\dagger\right) \sum_i e^{i q\cdot r_i} F_q(r_i) \Big\}$$

$$F_q(r_i) = \sum_G \rho_0(q+G)\, e^{i G\cdot r_i} M_{q+G}$$

Örgüde periyodik

BS K

Bu problem, daha önce çözmüş olduğumuz elektrik alandaki HO problemidir.

$$\left\{ \sum_q (a_q + a_{-q}^\dagger) \sum_i e^{i q \cdot r_i} F_q(r_i) \right\}^\dagger$$

$$= \sum_q (a_q^\dagger + a_{-q}) \sum_i e^{-i q \cdot r_i} F_q^*(r_i)$$

$$q = -q \Rightarrow \quad = \sum_q (a_{-q} + a_q^\dagger) \sum_i e^{i q \cdot r_i} F_{-q}^*(r_i)$$

$$\boxed{F_q^* = F_{-q}}$$

yaratma ve yoketme op.lerini yeniden tanımlayarak,

$$A_q = a_q + \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{F_q^*}{\omega_q} \sum_i e^{-i q \cdot r_i} \quad F_{-q}$$

$$A_{-q}^\dagger = a_{-q}^\dagger + \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{F_q^*}{\omega_q} \sum_i e^{-i q \cdot r_i}$$

$$H = \sum_q \left\{ \omega_q \left[A_q^\dagger A_q + \frac{1}{2} \right] - \frac{1}{V} \frac{|F_q|^2}{\omega_q} \left| \sum_i e^{i q \cdot r_i} \right|^2 \right\}$$

ile

$$\frac{(A_q^\dagger)^{n_q}}{\sqrt{n_q!}} |0\rangle, \quad E = \sum_q \omega_q \left(n_q + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{V} \sum_q \frac{|F_q|^2}{\omega_q} \left| \sum_i e^{i q \cdot r_i} \right|^2$$

özdurum ve özdeğerler

relaksasyon enerjisi

BS K

terim

$$Q_{\underline{q}} = \underbrace{\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\underline{q}} \Omega}}}\left[\underbrace{A_{\underline{q}} + A^{+}_{-\underline{q}}} - \underbrace{2 \frac{\hat{F}_{q}}{\omega_{\underline{q}}} \sum_{i} e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}_i}} \right]$$

$$Q_{\underline{q}}(0) = -2\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\underline{q}}\Omega}} \frac{F_q^{+}}{\omega_{\underline{q}}} \sum_i e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}_i}$$

yeni $Q_{\underline{q}}(0)$ denge konumuna

yerleşmiştir.

<u>Relaksasyon enerjisi</u>: fonon modlarının yeni denge konumlarına yaylan gitmek ile kazanılan pot enerji. Elektron koordinatları cinsinden seriye açılabilir.

$$RE = \frac{1}{N} \sum_{\underline{q}} \frac{|F_q|^2}{\omega_{\underline{q}}} \sum_{ij} e^{i\underline{q}\cdot(\underline{r}_i - \underline{r}_j)}$$

$$= \sum_{ij} \frac{1}{2} V_R (\underline{r}_i - \underline{r}_j)$$

$V_R(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$ — self-enerji pol. effect. self trapping.

$$= \sum_i V_R(0) + \sum_{i \neq j} V_R(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$$

polaron enerji.

conduct particle-phonon

$$V_R(r) = \frac{-2}{N} \sum_{q} \frac{|F_q|^2 e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}}{\omega_{q}}$$

$$= -2 \int \frac{d^3 \underline{q}}{(2\pi)^3} \frac{|F_q|^2}{\omega_{q\lambda}} e^{i\underline{q}\underline{r}}$$

BS K

C. Deformasyon potansiyeli

Yarı iletken ve iyonik katılarda, uyarılmış elektron durumları genellikle dalga vektörü uzayında küçük bir bölgeye sınırlanır. Termal dengede, uyarılmış durumlar, bölge merkezi ya da kuyruğu olan, bir enerji bandı minimumundadırlar. Genellikle, bu elektronlar için polaron etkileri yalnızca uzun dalga boylu fononlar içerir. Bu durumda gelenek, ilk prensiplerden ziyade etkileşimi parametrize etmektir. Yarı-iletkenlerdeki çoğu elekt-phon etkileşimi sadece 3 tip etkileşim kullanır: (i) akustik fononlara bağlanımlı deformasyon pot. (ii) akustik fononlara bağlanımlı piezoelektrik (iii) optik fononlara bağlanımlı polar bağlanım. (iii) optik fononlara deformasyon bağlanımı.

Bu etkileşmeler uzun dalga boyunda geçerlidir. Kısa dalga boyunda elekt-phon matris elemanı ilkeye dayanılarak yapay pot. lerden hesaplanır.

Akustik fononlar ile def. pot. bağlanımı 1.3.1 EF etk. Hamiltonyeninin uzun dalga boyu limitidir. Yalnızca $G=0$ alınılırsa, çünkü $G\neq 0$ lar tamamı kısa dalga boyu, dejenere değilse

boyuna optik fon

V_{ei}^{A} (1.1-1) Def. sbt.i

(1.1.0)

Uzun dalga boyunda $\hat{q} \to \hat{q}$

$$\Downarrow$$

$$H_{EP} = D \sum_{q} \left(\frac{\hbar}{2\rho V \omega_q} \right)^{1/2} |q| \, g(q) \, (a_q^{\dagger} + a_{-q}^{\dagger})$$

yarı iletkenlerde valans bandı dejenere'dir. (band indislerinde)
Bu durumda elektron yada hol uyarımları emisyon fononları deformasyon çiftlenimi gibi çok daha karmaşık çiftlenim verir.

B. Piezoelektrik Etkileşme :

Çoğu yarı-iletken piezoelektrik'tir. Mikroskopik etki bir kristal sıkıştırıldığı yada esnetildiği zaman ortaya çıkan elektrik alandır. Akustik fononlar, periyodik yerel modülasyonlardır, periyodik elektrik alan üretirler.

$$E_k = \sum_{ij} M_{ijk} S_{ij}$$ stres

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\partial_j Q_i + \partial_i Q_j \right)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{q} \left(\frac{\hbar}{2\rho \omega_q V} \right)^{1/2} (\xi_i q_j + \xi_j q_i) (a_q + a_{-q}^{\dagger}) e^{i q \cdot r}$$

$$E_k = -\partial_k \phi(r) = -\partial_k \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q e^{i q \cdot r} \phi_q$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q i q_k \phi_q e^{i q \cdot r}$$

BS K

E_k boyuna olduğunda,

$$E_k = M_k S_k \qquad S_k = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_q}\right)^{1/2} q_k \left(a_q + a_{-q}^\dagger\right) e^{iq\cdot r}$$

$$\phi(r) \propto Q(r)$$

çünkü, $E_k = M_k \sum_q \left(\ \right)^{1/2} q_k \underbrace{\left(a_q + a_{-q}^\dagger\right)}_{Q(r)} e^{iq\cdot r} = -\partial_k \phi(r)$

piezoelektrik etkileşme için,

$$H_{ep} = i \sum_{q\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{q\lambda}}}\, \underbrace{M_\lambda(\hat{q})}\, \rho(q) \left(a_{q\lambda} + a_{-q\lambda}^\dagger\right)$$

q'nun bileşenlerinde sadece yönüne bağlı

$$M(-\hat{q}) = -M_\lambda(\hat{q})$$

LA , TA

iki ort. elektron arasındaki relaksasyon enerjisini hesaplayalım.

$$V_R(r) = -2 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \sum_\lambda M_\lambda^2 \frac{1}{\rho\, \omega_{q\lambda}^2} e^{iq\cdot r}$$

$\omega_{q\lambda} = c_\lambda q$ Debye modeli

$$\Rightarrow V_R(r) = -2 \sum_\lambda \frac{M_\lambda^2}{\rho c_\lambda^2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3 q^2} e^{iq\cdot r} = \frac{-1}{r} \underbrace{\frac{1}{4\pi\rho} \sum_\lambda \frac{M_\lambda^2}{c_\lambda^2}}_{\gamma} = -\frac{e^2}{r}\gamma$$

BS K

Dielektrik perdeleme yasanın tarifi

bu materyallerde iki obt. yük arasındaki pot.'ın

$$V_{tot}(r) = \frac{e^{-}}{r\,\epsilon_{Tot}}$$

olduğunu biliyoruz

$$\epsilon_{tot} = \epsilon_{\infty} + \varepsilon_{piezo} + \varepsilon_{polar} + \varepsilon_{e-e}$$

$$= \varepsilon_{o} + \varepsilon_{piezo}$$

hepsi ω ve q'nun fonk.'ıdır. $q \to 0$, $\omega \to 0$ limitine bakalım.

$$\frac{e^{-}}{r\,\epsilon_{tot}} = \frac{e^{-}}{r\,\varepsilon_{o}} - \frac{e^{-}}{r}\gamma = \frac{e^{-}}{r}\left(\frac{1}{\epsilon_{o}} - \gamma\right)$$

$$\frac{1}{\epsilon_{o} + \varepsilon_{piezo}} = \frac{1}{\epsilon_{o}} - \gamma \qquad \varepsilon_{piezo} = \frac{\varepsilon_{o}^{-}\gamma}{1 - \varepsilon_{o}\gamma}$$

$$H_{el} = \sum_{q} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega\,\omega_{q}}}\ \bar{M}(q)\ \rho(q)\,(a_{q}^{\dagger} + a_{q})$$

$$\underbrace{D|q|}_{\text{reel}} + i\,\underbrace{M_{\lambda}(\hat{q})}_{\text{imag.}}$$

hem deformasyon
+
piezoelektrik

BS K

E. Polar Bağlaşım :

İyonik kristallerde, pozitif ve negatif iyonlar zıt doğrultuda salınmalarında, bir polarizasyon alanı kurulur. Bu alan polar kuplajın kaynağı olan bir elektrik alan doğurur. Sadece LO fononları titreştikleri zaman güçlü alan kurarlar. Uzun dalga boyunda, bu alanlar q fonon dalga vektörü doğrultusundadır. Katıda serbest yük yok ve,

$$\underline{\nabla}\cdot\underline{D} = \underline{\nabla}\cdot(\underline{E}+4\pi\underline{P}) = 0$$

$$\left\{\begin{array}{l} \underline{\nabla}\times\underline{H} = \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\underline{E}+4\pi\underline{P}) \\ \underline{\nabla}\times\underline{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \underline{B}}{\partial t} \\ \underline{\nabla}\cdot\underline{D} = 0 \end{array}\right.$$

q cinsinden yazılabilir;

$$\underline{\nabla}\cdot\underline{D} = \sum_{q} \underline{q}\cdot(E_q + 4\pi P_q)\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} = 0$$

$$\Rightarrow E_q = -4\pi P_q \qquad \underline{P}_q, \underline{E}_q \parallel \underline{q}$$

$$\underline{P}_q = Ze\,Q_q \Rightarrow \underline{E}_q = -4\pi Ze\,\underline{Q}_q$$

$$= -4\pi Ze\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V\omega_{LO}}}\,\underline{\xi}\,(a_q + a_{-q}^{\dagger})$$

$\underline{\xi} \parallel \underline{q}$ ve kompleks $\underline{\xi}$ için $\underline{\xi} = i\hat{\underline{q}}$

$$\underline{E}(\underline{r}) = -\underline{\nabla}\phi(\underline{r}) = -i\sum_q e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}\,\underline{q}\,\phi_q$$

$$\Rightarrow \phi(\underline{r}) = \sum_q e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}\,\frac{4\pi Ze}{iq}\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V\omega_{LO}}}\,(a_q + a_{-q}^{\dagger})$$

BS K

$\mathcal{H}$, $\sum_i V_e(r_i) + \sum_{i>j} V_p(r_i - r_j)$ deki iki electron

arasındaki pot. de belirlenecekti.

$$H_{ep} = \int d^3r\, \rho(\underline{r})\, \phi(\underline{r}) = \sum_{q\lambda} \rho(\underline{q}) \frac{4\pi e u}{q} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{L0}}} \left(a_q + a_{-q}^{\dagger}\right)$$

$$F_{\underline{q}}(\underline{r}_i) = \rho_0(\underline{q}) \frac{4\pi e u}{q} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\, \omega_{L0}}} \qquad \rho_0(\underline{q}) \simeq 1 \;!$$

$$V_p(r) = -2 \sum_{\lambda} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{|F_{q\lambda}|^2}{\omega_{q\lambda}} e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}$$

$$= -2 \sum_{\lambda} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\hbar}{2\rho\omega_{L0}^2} \left(\frac{4\pi e u}{q}\right)^2 e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}$$

$$= \frac{-2}{\hbar\omega_{L0}} (4\pi e u)^2 \left(\frac{\hbar^2}{2\rho\omega_{L0}}\right) \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2} e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}$$

$$= -\Gamma \frac{e^2}{r} \qquad \Gamma = \frac{4\pi e u}{\rho\omega_{L0}^2}$$

$$\epsilon_{tot} = \epsilon_{\infty} + \epsilon_{piezo} + \epsilon_{polar} + \epsilon_{e-e} = \epsilon_0 + \epsilon_{piezo}$$

göz önüne almazsak

$$\simeq \epsilon_0 = \epsilon_{\infty} + \epsilon_{pol}$$

top. perdeleme $\dfrac{e^2}{r\epsilon_{\infty}} = \dfrac{e^2}{r}\left(\dfrac{1}{\epsilon_{\infty}} - \Gamma\right)$

BS K

$$\Gamma = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}$$

$$u^2 = \frac{\rho\, \omega_{LO}^2}{4\pi} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)$$

$$\Rightarrow H_{ep} = \sum_q \frac{M}{q\sqrt{V}} \rho(q) \left(a_q + a_{-q}^\dagger \right)$$

$$M^2 = 2\pi e^2 \hbar \omega_{LO} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega_{LO}}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)$$

(!)

$$M^2 = \frac{4\pi\hbar (\hbar\omega_{LO})^{3/2}}{(2m)^{1/2}} \alpha$$

BS K

1.4. Spin Hamiltoniyenleri

Spin sistemlerinin incelenmesi çok cisim teorisinin gerçek bir kısmını oluşturur. Elektronlar aran magnetik düzenlenme gösteren bir çok hata vardır. Bunları açıklayan serbest elektronlar ile etkileşen lokalize spinli modeller olduğu kadar, kendi aralarında lokalize spinle ile etkileşen modeller de vardır.

○ spin-1/2

$$[S_\ell^{(x)}, S_j^{(y)}] = i S_\ell^{(z)} \delta_{\ell j} \qquad \text{yani } [S_\alpha^{(i)}, S_\beta^{(j)}] = i\epsilon_{ijk}\,\delta_{\alpha\beta}\, S_\alpha^{k}$$

$$S^{(i)} = \frac{1}{2}\sigma_i \qquad S_\ell^{(\pm)} = S_\ell^{(x)} \pm i S_\ell^{(y)}$$

○ $S^{(+)}|-\rangle = |+\rangle \qquad S^{(-)}|+\rangle = |-\rangle \qquad S^{+}S^{-} = S^{x^2} + S^{y^2} + S^{z}$

$S^{(+)}|+\rangle = 0 \qquad S^{(-)}|-\rangle = 0 \qquad S^{-}S^{+} = S^{x^2} + S^{y^2} - S^{z}$

$$[S_\ell^{(+)}, S_j^{(-)}] = 2 S_\ell^{(z)} \delta_{\ell j}$$

$$[S_\ell^{z}, S_j^{(+)}] = S_\ell^{(+)} \delta_{\ell j}$$

$$[S_\ell^{(z)}, S_j^{(-)}] = -S_\ell^{(-)} \delta_{\ell j}$$

BS K

A. Homojen spin sistemleri:

Heisenberg hamiltonianında örgünün her bir sitesinde vektörel olarak etkileşen bir spin vardır. Spinler arası en yakın komşuluk etkileşimini gözönüne alırsak,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{j\delta} \underline{S}_j \cdot \underline{S}_{j+\delta}$$

$$= -J \sum_{j\delta} \left(S_j^{(x)} S_{j+\delta}^{(x)} + S_j^{(y)} S_{j+\delta}^{(y)} + S_j^{(z)} S_{j+\delta}^{(z)} \right)$$

1D'de bile tam çözüm yok. Anizotropik olan,

$$\mathcal{H} = -J_{\parallel} \sum_{j\delta} S_j^{(z)} S_{j+\delta}^{(z)} - J_{\perp} \sum_{j\delta} \left(S_j^{(x)} S_{j+\delta}^{(x)} + S_j^{(y)} S_{j+\delta}^{(y)} \right)$$

$$= -J_{\parallel} \sum_{j\delta} S_j^{(z)} S_{j+\delta}^{(z)} - J_{\perp} \sum_{j\delta} \left(S_j^{(+)} S_{j+\delta}^{(-)} \right)$$

$= 0$

$\neq$ Ising modeli

$$\mathcal{H}_I = -J_{\parallel} \sum_{j\delta} S_j^{(z)} S_{j+\delta}^{(z)} - H_0 \sum_j S_j^{(z)}$$

eklense bile 1D da tam çözülebilir.

BS K 2D'de kapalı alanı "Onsager 1944"

XY - modeli ;

$$\mathcal{H}_{XY} = -J_\perp \sum_{\delta j} S_j^{(+)} S_{j+\delta}^{(-)}$$

Sadece 1D'de çözülebilir (tam)

$$\begin{cases} J > 0 & \text{spinler paralel} & \text{ferromagnetik} \\ J < 0 & \text{"} \quad \text{aşağı yukarı} & \text{anti-ferromagnetik.} \end{cases}$$

Mantıklı bir yaklaşım kollektif spin operatörlerini $\underline{k}$-uzayına taşımaktır.

$$\begin{cases} S_{\underline{k}}^{(\mp)} = \dfrac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{\mp i \underline{k}\cdot\underline{r}_j} S_j^{(\mp)} \\ S_j^{(\mp)} = \dfrac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}} e^{\pm i \underline{k}\cdot\underline{r}_j} S_{\underline{k}}^{\mp} \end{cases}$$

$$[\, S_{\underline{k}}^{(+)}, S_{\underline{k}'}^{(-)} \,] = \frac{2}{N} \sum_{\ell} e^{i \underline{r}_\ell \cdot (\underline{k}-\underline{k}')} S_\ell^{(z)}$$

$$= C\, \delta_{\underline{k}\underline{k}'} \text{ olmalı.}$$

$\underline{k} = \underline{k}'$ için $S_{\underline{k}}^{(+)}, S_{\underline{k}'}^{(-)}$ bağımsız op.lerdir ve bozonlar gibi davranırlar.

mantıklı bir yaklaşım

$$= 2\, \delta_{\underline{k}\underline{k}'} \langle S_\ell^{(z)} \rangle$$

bu XY modelinin rolünü anlatır.

BS K

$S_\ell^{(+)}$ ve $S_\ell^{(-)}$ arasındaki antikom. bağıntısı

$$S_\ell^{(+)} S_\ell^{(-)} + S_\ell^{(-)} S_\ell^{(+)} = 2\left(S_\ell^{x\,2} + S_\ell^{y\,2} \right)$$

$$= 2\left(\underline{S} \cdot \underline{S} - S_\ell^{z\,2} \right)$$

$$= 2\left(S^2 - S_\ell^{z\,2} \right)$$

$$= 2\left[s(s+1) - S_\ell^{z\,2} \right] \qquad \frac{1}{4}$$

$$\left\{ S_\ell^{(+)}, S_\ell^{(-)} \right\} = 2\left[\frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{1}{4} \right] = 1 \quad \text{oysa} \quad \left[S_\ell^{(+)}, S_\ell^{(-)} \right] = 0$$

aynı sitedeki $S^{(+)}$, $S^{(-)}$ op. leri antikom. bağ. uyarlar

spin 1/2 op.lar aynı sitedeki fermiyonlar gibi davranırlar.

Fermiyonlar için, her bir orbital ya da spin durumu için her bir sitede "0" ya da "1" parçacık olabilir. Bu iki olasılık, spinler için ↑ ve ↓'a karşılık gelir. Ama bu analoji

çok fazla sürdürülemez çünkü farklı sitelerdeki spin op.'leri komüt ederken, fermiyon op. antikomüt eder.

Bununla birlikte, 1D'de spin 1/2 op. → tam fermiyon op.leri yapılabilirler.

⇓

$$d_\ell = e^{i\phi_\ell} S_\ell^{(-)} \qquad d_\ell^\dagger d_\ell = S_\ell^{(+)} S_\ell^{(-)} = s(s+1) - S_\ell^{(z)2} + S_\ell^{(z)} = \frac{1}{2} + S_\ell^{(z)}$$

$$d_\ell^\dagger = e^{-i\phi_\ell} S_\ell^{(+)}$$

BS K

ϕ_ℓ faz çarpanı π kere X spin ↑ operatörlerin konumun sağına gelenlerinin sayımı ölçen bir operatör (ℓ noktasına)

$$\ell > 1 \qquad \phi_\ell = \pi \sum_{k=1}^{\ell-1} \left(\frac{1}{2} + S_\ell^{(z)} \right) = \pi \sum_{k=1}^{\ell-1} d_k^{+} d_k$$

$$\phi_1 = 0$$

Faz çarpanı $S_\ell^{(-)}$ ile komüt eder

$$d_\ell = e^{i\phi_\ell} S_\ell^{(-)} = S_\ell^{(-)} e^{i\phi_\ell}$$

$$\{ d_\ell , d_\ell^{+} \} = \{ S_\ell^{(-)} , S_\ell^{(+)} \} = 1$$

farklı sitelerdeki antikomüt eder

$$\{ d_\ell , d_m^{+} \} = \underbrace{e^{i\phi_\ell} S_\ell^{(-)} e^{-i\phi_m}}\, S_m^{(+)} + e^{-i\phi_m} S_m^{(+)} e^{i\phi_\ell} S_\ell^{(-)}$$

$$e^{-A} B e^{A} = B + [B, A] + \frac{1}{2}[[B, A], A] + \dots$$

$\ell > m$ olsun

$$\phi_\ell = \pi \left(\frac{1}{2} + S_m^{(z)} \right) + \pi \sum_{\substack{k=1 \\ \neq m}}^{\ell-1} \left(\frac{1}{2} + S_k^{(z)} \right)$$

$$= e^{i(\phi_\ell + \phi_m)} \left[S_\ell^{(-)} , S_m^{(+)} \right] = 0$$

$d_\ell^{+} d_\ell = n_\ell$ her bir sitedeki sayı op.

BS K

1D de XY_modeli d-op. leri cinsinden:

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_j \left(S_j^{(+)} S_{j+1}^{(-)} + S_j \, S_{j-1}^{(-)} \right)$$

$$= -J \sum_j \left(e^{i\phi_j} d_j^{+} e^{-i\phi_{j+1}} d_{j+1} + e^{i\phi_j} d_j^{+} e^{-i\phi_{j-1}} d_{j-1} \right)$$

$$\phi_j = \pi \sum_{k=1}^{j-1} d_k^{+} d_k \quad j \neq k \text{ için} \quad \{ d_k^{+}, d_j \} = 0$$

$$\{ d_j, d_k \} = 0$$ olduğunu biliyorum.

öyle ise $[\phi_j , d_j^{+}] = 0$

$$= -J \sum_j \left(d_j^{+} e^{-i\pi n_j} d_{j+1} + d_{j+1}^{+} e^{i\pi n_{j-1}} d_{j-1} \right.$$

$$d_j^{+} d_j^{+} = d_j d_j = 0$$

$$= -J \sum_j \left[d_j^{+} \left\{ 1 - i\pi n_j + \frac{(i\pi)^2}{2!} n_j^2 + \dots \right\} d_{j+1} \right.$$

$$+ d_{j+1}^{+} \left\{ 1 + i\pi n_{j-1} + \dots \right\} d_{j-1}$$

$n_j = 0$ terimi hatırda bulun

$$= -J \sum_j \left(d_j^{+} d_{j+1} + d_j^{+} d_{j-1} \right)$$ Serbest fermiyon mod.

BS K

kollektif koordinatlara geçersek;

$$d_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}} e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}_i}\, d_{\underline{k}} \qquad d_{\underline{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}_i}\, d_i$$

$$\to \mathcal{H} = -2J \sum_k \gamma_k\, d_{\underline{k}}^\dagger d_{\underline{k}} \qquad \gamma_k = \sum_{\delta} e^{i\underline{k}\cdot\underline{\delta}}$$

siteler arasındaki en yakın vektör

Spin sist. i için $\cancel{\mu} = 0$ KP. yoktur

$$Z = \prod_k \left(1 + e^{2J\gamma_k\beta}\right)$$

yüksek boyutlarda durum farklıdır (bkz. kitap)

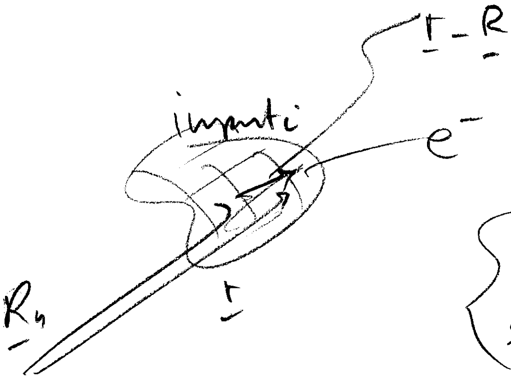
(LG) ve (QLG) modelleri

B. İmpurity spin Modelleri:

Şimdiye değin bahsettiğimiz modeller homojen magnetik sistemler olanlarıydı. Aynı spin her bir sitede idi ve tüm sistemin magnetik özelliklerini inceleme derdik.

modellerde; HEG içinde izole bir impurity.

R_n de lokalize bir impurite ve $\phi_\ell(r - R_n)$ lokalize bir elektron şekilde var.



elektron bu sitede iken

doğru durumlarda elektron
sürekli durumlarda k $\quad \varepsilon(k), \phi_k(r)$

Genelleştirilmiş durum fonk. u ⇒ tüm mümkün durumlardan toplam

$$\psi(r) = \sum_{k\sigma} \phi_k(r)\, \chi_\sigma C_{k\sigma} + \sum_\sigma \phi_\ell(r - R_n)\, \chi_\sigma C_n$$

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + \underbrace{U(r_i)}_{} \right] + \frac{1}{2}\sum_{ij} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

evsahibi örgüde
bilinen pot. i olduğu kadar impurite de var

$$\int \psi^\dagger(r) \left[\frac{p^2}{2m} + U(r) \right] \psi(r)\, d^3r$$

$$= \underbrace{\sum_{k\sigma} \varepsilon_k C^\dagger_{k\sigma} C_{k\sigma} + \sum_\sigma \varepsilon_L C^\dagger_{L\sigma} C_{L\sigma}}_{\text{non pertürbe } H_0} + \underbrace{\sum_{kk'\sigma} U_{kk'} C^\dagger_{k\sigma} C_{k'\sigma}}_{}$$

sürekli fonk. ları impurite durumlarında saçılması

$$+ \underbrace{\sum_{k\sigma} M_k \left(C^\dagger_{k\sigma} C_{L\sigma} + C^\dagger_{L\sigma} C_{k\sigma} \right)}_{}$$

impurite ve sürekli durumlar arasındaki saçılmayı

Böl 4.1

ϕ_k'ler impurity pot. in ilave Hamiltonyenin özdurumları olarak seçilir ise,

$$\mathcal{H} = \sum_{\underline{k}\sigma} \epsilon_{\underline{k}} c^{+}_{\underline{k}\sigma} c_{\underline{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_L c^{+}_{L\sigma} c_{L\sigma}$$

$$+ \sum_{k\sigma} M_k \left(c^{+}_{\underline{k}\sigma} c_{L\sigma} + c^{+}_{L\sigma} c_{\underline{k}\sigma} \right) \quad \text{"FANO-ANDERSON"}$$

BS K

1.5. Fotonlar

e_j yüklerinin birbirleri ve bir radyasyon alan ile etkileşmelerini içeren Hamiltonyen,

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{1}{2m}\left[\underline{p}_i - \frac{e_i}{c}\underline{A}(\underline{r}_i)\right]^2 + \frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{e_i e_j}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|} + \underbrace{\sum_{\underline{k}\lambda}\omega_{k\lambda}\, a^{\dagger}_{\underline{k}\lambda} a_{\underline{k}\lambda}}_{\text{pertürbe olmamış foton H.}}$$

radyasyon alan vektör pot. ile temsil edilir

$$\frac{1}{c}A_\mu(\underline{r},t) = \sum_{\underline{k}\lambda}\left(\frac{2\pi}{V\omega_{\underline{k}}}\right)^{1/2}\varepsilon_\mu(\underline{k},\lambda)\left(a_{\underline{k}\lambda}\, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega_k t)} + h.c.\right)$$

birim pol. vekt.

$$= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}} A_\mu(\underline{k},t)$$

Coulomb etk. zamanda anlıktır, gecikme yoktur. toplam etk de vardır.

A. Ayarlar:

① $\underline{\nabla}\cdot\underline{B} = 0$

② $\underline{\nabla}\times\underline{E} = \frac{-1}{c}\frac{\partial B}{\partial t}$

③ $\underline{\nabla}\times\underline{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}J$, $\underline{\nabla}\cdot\underline{E} = 4\pi\rho$ ④

BS K

teorem: konumun herhangi bir vektör fonk. u iki terimin toplamı olarak yazılabilir

$$\underline{S}(\underline{r}) = \underline{\nabla} g + \underline{\nabla}\times \underline{m}(\underline{r}) = \underbrace{S_\ell}_{\text{Long.}} + \underbrace{S_t}_{\text{Trans.}}$$

$B(\underline{r})$'nin buna uyduğunu varsayarak,

$$\underline{\nabla}\cdot(\underline{\nabla} g + \underline{\nabla}\times\underline{A}) = \nabla^2 g = 0$$

trivial

$$g = 0 \Rightarrow \quad \underline{B} = \underline{\nabla}\times\underline{A} \Rightarrow \text{(2) ye koy!}$$

$$\underline{\nabla}\times\Big\{\underbrace{\underline{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t}}\Big\} = 0$$

$$\underline{\nabla}\phi + \underline{\nabla}\times\underline{M} = 0 = \underline{\nabla}\times(\underline{\nabla}\times\underline{M})$$

$$\underline{M} = \underline{0} \Rightarrow \text{seçilir} \Rightarrow \quad \underline{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \underline{A}}{\partial t} - \underline{\nabla}\phi$$

$$\nabla^2\phi + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\underline{\nabla}\cdot\underline{A} = -4\pi\rho$$

$$\underline{\nabla}\times(\underline{\nabla}\times\underline{A}) + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \underline{A}}{\partial t^2} + \frac{1}{c}\nabla\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}J$$

(A_μ, ϕ) cinsinden 4-bilinmeyen ve lineer bağ. olmayan 4 denk. var.

sadece 3 ü lineer bağ. dır. (J ve ρ süreklilik denklemi ile bağlılar)

BS K

1.) $\underline{\nabla}\cdot\underline{A} = 0$ "Coulomb ayarı", enine ayar, ışıma ayarı

$$\Rightarrow \nabla^2\phi = -4\pi\rho \quad \underline{PD}$$

$$\phi(\underline{r},t) = \int d^3\underline{r}' \, \frac{\rho(\underline{r}',t)}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$$ ani ve gecikmesiz

$$\underline{\nabla}\times(\underline{\nabla}\times\underline{A}) = -\underline{\nabla}^2\underline{A} + \underline{\nabla}(\cancel{\underline{\nabla}\cdot\underline{A}})$$

$$\nabla^2\underline{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\underline{A}}{\partial t^2} = \frac{-4\pi}{c}\underline{J} + \frac{1}{c}\underline{\nabla}\frac{\partial\phi}{\partial t} \qquad \mathrm{I}$$

$\phi(\underline{r},t)$'nin süreklilik denk.-i kullanılır $\Rightarrow$

$$\frac{1}{c}\underline{\nabla}\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{1}{c}\underline{\nabla}\int_V d^3\underline{r}' \, \frac{\partial\rho(\underline{r}',t)/\partial t}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$$

$$= -\frac{1}{c}\underline{\nabla}\int_V d^3\underline{r}' \, \frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \, \underline{\nabla}'\cdot\underline{J}(\underline{r}')$$

$$= -\frac{1}{c}\underline{\nabla}\int d^3\underline{r}' \left\{ \underbrace{\underline{\nabla}'\cdot\left[\frac{\underline{J}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\right]}_{} - \underline{J}(\underline{r}')\cdot\underline{\nabla}'\frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \right\}$$

alan yüzeyde "0" olsun.

$$= \frac{1}{c}\underline{\nabla}\int d^3\underline{r}' \, \underline{J}(\underline{r}')\cdot\underline{\nabla}'\frac{1}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$$

$$= -\frac{1}{c}\underline{\nabla}\,\underline{\nabla}\cdot\int d^3\underline{r}' \, \frac{\underline{J}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \Rightarrow \frac{\partial\phi}{\partial t} = -\underline{\nabla}\cdot\int d^3\underline{r}' \, \frac{\underline{J}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$$

BS K

PD

$$\nabla^2 \phi = -4\pi\rho \Rightarrow \nabla^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} = -4\pi\left(-\underline{\nabla}\cdot\underline{J}\right)$$

$$-\nabla^2\left\{\underline{\nabla}\cdot \int d^3\underline{r}' \frac{\underline{J}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\right\} = 4\pi\, \underline{\nabla}\cdot\underline{J}$$

$$\underline{\nabla}^2 \int d^3 \underline{r}' \frac{\underline{J}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|} = -4\pi\, \underline{J}$$

$$J \Rightarrow \underline{\nabla}^2 \underline{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \underline{A}}{\partial t^2} = -\frac{1}{c}\underline{\nabla}\times\underbrace{\left[\underline{\nabla}\times\int d^3\underline{r}' \frac{\underline{J}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|}\right]}_{\text{enine}}$$

$$= -\frac{4\pi}{c} J_t(\underline{r})$$

$$\underline{J}(\underline{r}) = J_\ell(\underline{r}) + J_t(\underline{r})$$

Coulomb ayarını bozma sebebi yoktu.

2. Lorentz Ayarı

$$\underline{\nabla}\cdot\underline{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$$

$$\underline{\nabla}^2 \phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -4\pi\rho$$

$$\underline{\nabla}^2 \underline{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \underline{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c}\underline{J}$$

$\nabla\cdot\phi = 0$ olmayabilir

BS K

B. Lagranjiyen :

$\underline{E}$ ve $\underline{B}$'nin sürekli yük ve akım yoğunlukları ile doğrulduğunu gözönüne alarak, Maxwell denk.nin bulunabileceği bir Lagranjiyen yoğunluğu alın :

$$\mathcal{L} = \frac{E^2 - B^2}{8\pi} - \rho\phi + \frac{1}{c}\underline{J}\cdot\underline{A}.$$

yük ve akım yoğunluğu arasındaki ilişki : $\underline{J} = \rho\underline{v}$

$$\rho = \sum_{i=1}^{N} q_i\,\delta(\underline{r} - \underline{r}_i)$$

K.E terimini de ekleyerek,

$$L = \int d^3r\,\mathcal{L} = \frac{1}{2}\sum_i m_i v_i^2 + \frac{1}{8\pi}\int d^3r\,(\underline{E}^2 - \underline{B}^2)$$

$$- \sum_i q_i\phi(\underline{r}_i) + \sum_i \frac{q_i}{c}\,\underline{v}\cdot\underline{A}(\underline{r}_i)$$

EL denklemleri ;

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\dot{\eta}}\right) + \sum_{\alpha=1}^{3}\frac{d}{dr_\alpha}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\left(\frac{\partial\eta}{\partial r_\alpha}\right)} - \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\eta} = 0$$

konjuge mom. $P_\eta = \dfrac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\eta}}$

Değişkenler ϕ, $\underline{A}$, $\underline{r}_i$:

BSK

$\phi(\underline{r})$ değişken olarak alınırsa,

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \phi} = -\rho(\underline{r}) = -\sum_i q_i\, \delta(\underline{r}-r_i)$$

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta(\partial\phi/\partial x)} = \frac{1}{8\pi}\frac{\partial}{\partial E_x}(E_x^2)\, \frac{\partial E_x}{\partial(\partial\phi/\partial x)} = -\frac{E_x}{4\pi}$$

$$P_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial\phi/\partial t)} = 0$$

$$\cancel{\frac{d}{dt}P_\phi} + \sum_{\alpha=1}^{3}\frac{d}{dr_\alpha}\left(\frac{-E_\alpha}{4\pi}\right) - (-\rho(\underline{r})) = 0$$

$$\underline{\nabla}\cdot\underline{E} = 4\pi\rho$$

A_2 değişken olarak recitdiğinde $\underline{\nabla}\times\underline{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\underline{J}$

r_α " " " ;

$$\left.\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{L}}{\partial r_{i\alpha}} &= -q_i\left[\underline{\nabla}_\alpha \phi(\underline{r}_i) - \frac{v_{i\alpha}}{c}\underline{\nabla}_\alpha \cdot \underline{A}_\delta(\underline{r}_i)\right] \\ \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta v_{i\alpha}} &= m v_{i\alpha} + \frac{q_i}{c}A_\alpha(\underline{r}_i) = P_\alpha \end{aligned}\right\}$$

$$\frac{d}{dt}\left(m v_{i\alpha} + \frac{q_i}{c}A_\alpha(\underline{r}_i)\right) + \sum_{\alpha=1}^{3}\frac{d}{dr_\alpha}(0)$$

$$+ q_i\left[\underline{\nabla}_\alpha \phi(\underline{r}_i) - \frac{v_{i\delta}}{c}\underline{\nabla}_\alpha\cdot \underline{A}_\delta\right] = 0$$

BS K

$$\frac{d}{dt} P_{i\alpha} + q_i \left[\nabla_\alpha \varphi(\underline{r}_i) - \frac{v_{i\alpha}}{c} \nabla_\alpha A_\gamma(\underline{r}_i) \right] = 0$$

$$\frac{d}{dt} A(\underline{r}_i) = \frac{\partial}{\partial t} A(\underline{r}_i) + \frac{\partial r_i}{\partial t} \cdot \underbrace{(\underline{\nabla} A)}_{\sum_\alpha \frac{\partial}{\partial r_\alpha} A(\underline{r}_i)}$$ Hydrodinamik dirivdeme

$$m \frac{dv_i}{dt} = q_i \left\{ -\underline{\nabla} \varphi(\underline{r}_i) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \underline{A}(\underline{r}_i) - \frac{1}{c} v_i \cdot \underline{\nabla} A(\underline{r}_i) + \frac{1}{c} \nabla (v \cdot \underline{A}(\underline{r}_i)) \right.$$

$$= q_i \left\{ \underline{E}(\underline{r}_i) + \frac{1}{c} \left[\underline{\nabla}(\underline{v} \cdot \underline{A}) - \underline{v} \cdot \underline{\nabla} \underline{A} \right] \right\}$$

$$= q_i \left[\underline{E}(\underline{r}_i) + \frac{1}{c} \underline{v}_i \times \underline{B} \right]$$

$$\underline{v} \times \underline{B} = \underline{v} \times (\underline{\nabla} \times \underline{A}) = \underline{\nabla}(\underline{v} \cdot \underline{A}) - (\underline{v} \cdot \underline{\nabla}) \underline{A}$$

C. Hamiltonyen

$$\mathcal{H} = \sum_i \dot{q}_i P_q - L$$

i tüm değişkenlerin konjugeleri üzerinden

$(\underline{P}, \underline{A})$

$$\sum_i \underline{v}_i \cdot \underline{P}_i + \int d^3 r \left(\dot{A} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}} \right)$$

$$v_i = P_i - \frac{e_i}{c} A(\underline{r}_i)$$

$$P_A = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}} = -\frac{E}{4\pi c}$$

$$= \frac{1}{m} \sum_i P_i \left[P_i - \frac{e_i}{c} \underline{A}(\underline{r}_i) \right] + \int \frac{d^3 r}{4\pi c} \left[\dot{\underline{A}}(\underline{r}) \cdot \left(\frac{1}{c} \underline{A} + \underline{\nabla} \varphi \right) - \frac{E^2 - B^2}{8\pi} \right]$$

$$+ \sum_i e_i \varphi(\underline{r}_i) - \frac{1}{2m} \sum_i \left[P_i - \frac{e_i}{c} A(\underline{r}_i) \right]$$

BS K

$$= \frac{1}{2m}\sum_i \left[p_i - \frac{e_i}{c} A(r_i)\right]^2 + \sum_i e_i \phi(r_i)$$

$$+ \int \frac{d^3r}{8\pi}\left[E^2 + B^2 - 2\nabla\phi\cdot\left(\frac{1}{c}\dot{A} + \nabla\phi\right)\right]$$

$$\int d^3r\, \nabla\phi\cdot\dot{A} = -\int d^3r\, \phi\,(\nabla\cdot\dot{A}) = -\int d^3r\, \phi \frac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot A) = 0$$

$$\int d^3r\, (\nabla\phi\cdot\nabla\phi) = -\int \frac{d^3r}{4\pi}\,\phi\nabla^2\phi = \int d^3r\, \phi(r)\rho(r)$$

$$= \sum_i e_i\phi(r_i) = \sum_i\sum_j \frac{e_i e_j}{|r_i - r_j|}$$

$$H = \underbrace{\frac{1}{2m}\sum_i \left[p_i - \frac{e_i}{c} A(r_i)\right]^2}_{\text{wkład poruszających ładunk.}} + \underbrace{\int \frac{d^3r}{8\pi}(E^2 + B^2)}_{\text{EM energ. pola}}$$

Zanim zaczniemy kwantyzować rozwiązania. Rozdzielimy elektr. dla energii, potrzebujemy wektor. w skalar pot. Uzyskamy wyraz:

$$\int \frac{d^3r}{8\pi} E^2 = \int \frac{d^3r}{8\pi}\left[\frac{1}{c^2}\dot{A}^2 + (\nabla\phi)^2 + \frac{2}{c}\nabla\phi\cdot\dot{A}\right]$$

$$= \int \frac{d^3r}{8\pi c^2}\dot{A}^2 + \frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{e_i e_j}{r_{ij}}$$

2. kuantumlama formda $\underline{A}, \underline{E}, \underline{B}$ → op. lerdir. Kanonik değişkenler arasında komütasyon bağıntıları ver. ϕ'nin kanonik eşleniği yok (momentum) bu yüzden kan. değ. larını çalmalı.

$\underline{A}$ ve eşleniği $P_{\underline{A}}$ arasındaki bağıntı:

$$[A_\alpha(\underline{r},t),\ cP_{A\beta}(\underline{r}',t)] = i\,\delta_{\alpha\beta}(\underline{r}-\underline{r}')$$

$$= \left[A_\alpha(\underline{r},t),\ \frac{-E_\beta}{4\pi}(\underline{r}',t)\right] = \Big[A_\alpha(\underline{r},t)$$

$$,\ -\frac{1}{4\pi}\left(-\frac{1}{c}\dot{A}_\beta(\underline{r}',t) - \partial_\beta\phi(\underline{r}',t)\right)\Big]$$

$$[A_\alpha(\underline{r},t),\ \dot{A}_\beta(\underline{r}',t)] = 4\pi c i\,\delta_{\alpha\beta}\,\delta(\underline{r}-\underline{r}')$$

kom. bağ. vektör pot. yaratma ve yok etme op. cinsinden tanımla. yazarak sağlanabilir:

$$A_\alpha(\underline{r},t) = \sum_{\underline{k}\lambda}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\underline{k}}}\right)^{1/2}\epsilon_\alpha(\underline{k},\lambda)\,e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$$

$$\times\left(a_{k\lambda}e^{-i\omega_k t} + a^+_{-k\lambda}e^{i\omega_{\underline{k}}t}\right)$$

$$[a_{k\lambda},\ a^+_{k'\lambda'}] = \delta_{kk'}\,\delta_{\lambda\lambda'}$$

$$[A_\alpha(\mathbf{r},t),\ \dot A_\beta(\mathbf{r}',t)] = 4\pi i c\, \delta_{\alpha\beta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

Sylam.

$$\int \frac{d^3 r}{8\pi}\frac{1}{c^2}\dot{\mathbf{A}}^2 = -\sum_{k\lambda\lambda'} \frac{\hbar\omega_k}{4}\,\zeta(\mathbf{k},\lambda)\cdot\zeta(-\mathbf{k},\lambda')$$

$$\times\left[a_{k\lambda}a_{-k\lambda'}e^{2i\omega_k t} + a^\dagger_{-k\lambda}a^\dagger_{k\lambda'}e^{2i\omega_k t} - a_{k\lambda}a^\dagger_{k\lambda'} - a^\dagger_{k\lambda}a_{k\lambda'}\right]$$

$\omega_k = c k$

$$= -\sum_{k\lambda}\frac{\hbar\omega_k}{4}\left[a_{k\lambda}a_{-k\lambda}e^{2i\omega_k t} + e^{2i\omega_k t}a^\dagger_{k\lambda}a^\dagger_{-k\lambda} - a^\dagger_{k\lambda}a_{k\lambda} - a_{k\lambda}a^\dagger_{k\lambda}\right]$$

$\zeta(-\mathbf{k}) = \zeta^*(\mathbf{k})$ $\qquad \sum_\mu \zeta^{*\mu}_{k\lambda}\zeta^{\mu}_{k\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} = \zeta^*(k\lambda)\cdot\zeta(k\lambda')$

$$\int\frac{d^3 r}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2 = \sum_{k\lambda}\frac{\hbar c^2}{4\omega_k}(\mathbf{k}\times\zeta)^2\left[a_{k\lambda}a_{-k\lambda}e^{-2i\omega_k t}\right.$$

$$\left. + a^\dagger_{k\lambda}a^\dagger_{-k\lambda}e^{2i\omega_k t} + a^\dagger_{k\lambda}a_{k\lambda} + a_{k\lambda}a^\dagger_{k\lambda}\right]$$

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{1}{2m}\left[\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_i)\right]^2 + \frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{e_i e_j}{r_{ij}} + \sum_{k\lambda}\frac{\hbar\omega_k}{2}\left(a^\dagger_{k\lambda}a_{k\lambda} + a_{k\lambda}a^\dagger_{k\lambda}\right)$$

$$|n_{k\lambda}\rangle = \frac{(a^\dagger_{k\lambda})^{n_{k\lambda}}}{\sqrt{n_{k\lambda}!}}|0\rangle$$

BS K

1.6. Çift Dağılım Fonksiyonu : kristalli katılarda atomlar
düzenli yerleşik olduğundan,

$\underline{q}$ özel değerler almadıkça

$$\sum_i e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}_i} \to 0$$

Bu değerler $\underline{q}=0$ ve $\underline{q}=\underline{G}$ (katının ters örgü vektörlerinin kümesi);
Her iki durumda da $e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}_i}=1$

$$\Rightarrow \sum_i e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}_i} = N\sum_{\underline{G}}{}' \delta_{\underline{q}+\underline{G}} + N\delta_{\underline{q}=0}$$

Çoğu materyal kristalli değildir (sıvı, gaz, ve düzensiz katı örgüler) Bu nicelikleri tartışırken sık sık parçacık yerleri üzerinden toplamlar ile karşılaşırız. Bu toplamlar $\underline{q}=0$ için N'e eşittir ama $\underline{q}\neq 0$ için neye eşit olduğunu hesaplamadık. Bu hesaplama $S(\underline{q})$ yapı çarpanı ya da statik form çarpanı adıyla hesaplanır.

$$\rho(\underline{q}) = \sum_i e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}_i} \qquad \rho(\underline{r}) = \sum_i \delta(\underline{r}-\underline{r}_i)$$

herbir parçacığın ait yeri

$$\rho(\underline{r}) = \sum_{q} \rho(\underline{q})\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}$$

Fermiyon ya da Bozon istatistiği ile uğraşmamak için parçacıkları klasik objeler alalım.

$$\langle \rho(\underline{q}) \rangle = \langle \textstyle\sum_i e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}_i} \rangle = \sum_i \langle e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}_i} \rangle$$

$$= \frac{N}{V} \int d^3\underline{r}\; e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} = N\, \delta_{\underline{q}=0}$$

2. İlginç ortalama iki yoğ. op.-nın çarpımınındır.

$$\langle \rho(\underline{q})\rho(\underline{q}') \rangle = \sum_{ij} \langle e^{i\underline{q}\cdot\underline{R}_i} \cdot e^{i\underline{q}'\cdot\underline{R}_j} \rangle$$

$$\underline{Q} = \underline{q} + \underline{q}' \qquad \underline{k} = \frac{q - q'}{2}$$

$$\langle \rho(q)\rho(q') \rangle = \sum_{ij} \langle e^{i\underline{Q}\cdot\frac{R_i + R_j}{2} + i\underline{k}\cdot(\underline{R}_i - \underline{R}_j)} \rangle$$

$$= \sum_{ij} \langle e^{iQ\,\frac{R_i + R_j}{2}} \rangle \langle e^{i\underline{k}\cdot(\underline{R}_i - \underline{R}_j)} \rangle$$

$$= \sum_{ij} \delta_{\underline{Q}=0} \langle e^{i\underline{k}\cdot(\underline{R}_i - \underline{R}_j)} \rangle$$

$$= \sum_{ij} \langle e^{i\underline{q}\cdot(\underline{R}_i - \underline{R}_j)} \rangle$$

BS K uzaklıklardaki iki atomun bağıl uzaklıklar cinsinden gösterilir korelasyon var! statik yapı çarpanı,

$$S(\underline{q}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle e^{i\underline{q}\cdot(\underline{R}_i - \underline{R}_j)} \rangle - N\delta_{\underline{q}=0}$$

$$= \frac{1}{N}\left(\sum_{ij} 1 + \sum_{i\neq j} e^{i\underline{q}\cdot\Delta\underline{R}_{ij}} \right) - N\delta_{\underline{q}=0}$$

$$= 1 + \frac{1}{N} \sum_{i\neq j} \langle e^{i\underline{q}\cdot\Delta\underline{R}_{ij}} \rangle - N\delta_{\underline{q}=0}$$

parçacığı $\underline{r}$ de bulma olasılığı $g(\underline{r})$ olsun

çift değişken fonk.!

$$S(\underline{q}) - 1 = \frac{1}{N} \sum_{\Delta\underline{R}} \langle e^{i\underline{q}\cdot\Delta\underline{R}} \rangle - \frac{N}{V} \int d^3\underline{r}\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}$$

$$= \frac{\cancel{N}(N-1)}{\cancel{N}} \frac{1}{V} \int d^3\underline{r}\, g(\underline{r})\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} - \frac{N}{V} \int d^3\underline{r}\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}$$

$$= \frac{1}{V} \int d^3\underline{r}\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} \left[(N-1) g(\underline{r}) - N \right]$$

$$= n \int d^3\underline{r}\, e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}} \left(g(\underline{r}) - 1 \right)$$

$$g(\underline{r}) - 1 = \frac{1}{n} \int \frac{d^3\underline{q}}{(2\pi)^3} e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}} \left[S(\underline{q}) - 1 \right]$$

$q, r \to \infty \Rightarrow g(r), S(q) \to 1$ kısa menzilliler

BS K

Homojen electron gazı modelinde elektronlar dolaşırdılar. Bu durumda $g(\mathbf{r})$ ile parçacık çiftlerinin bağıl davranışı da tarif edilebilir. Bir kuantum sisteminde diyagonal yoğ. matrisi N parçacık dalga fonk.nun karesi ile tanımlanır;

$$\rho_N(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N) = |\Psi(\mathbf{r}_1,\dots \mathbf{r}_N)|^2$$

$$1 = \int d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N\, \rho_N(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N)$$

Ψ iki parçacığın değiştokuşu altında <u>tek</u> veya <u>çift</u> olduğundan yoğ. matrisi bu perm. op. ı altında değişmez. İki parçacığın relatif davranışı,

$$\rho_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \int d^3\mathbf{r}_3 \dots \int d^3\mathbf{r}_N\, \rho_N(\mathbf{r}_1,\dots \mathbf{r}_N)$$

$$1 = \int d^3\mathbf{r}_1\, d^3\mathbf{r}_2\, \rho_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$$

$$\rho_1(\mathbf{r}_1) = \int d^3\mathbf{r}_2 \dots \rho_N(\quad)$$

$$1 = \int d^3\mathbf{r}_1\, \rho_1(\mathbf{r}_1)$$

Homojen sistemlerde ise $\rho_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \to |\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|$'ye bağlı olabilir ve $g(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)$ ile gösterilir.

BS K

$$N(N-1)\,\rho_2(\underline{r}_1,\underline{r}_2) = n^2 g(\underline{r}_1-\underline{r}_2)$$

N parçacık dalga fonk.u Slater det. dır, öyleki N-parçacık yoğunluk matrisi

$$\rho_N(\underline{r}_1,\dots,r_N) = \frac{1}{N!}\begin{vmatrix} \psi_{\lambda_1}(\underline{r}_1) & \psi_{\lambda_2}(\underline{r}_1) & \dots \\ \psi_{\lambda_1}(\underline{r}_2) & \psi_{\lambda_2}(\underline{r}_2) & \dots \\ \vdots & & \end{vmatrix}^2$$

$$\rho_2(\underline{r}_1,r_2) = \frac{1}{N(N-1)}\sum_{\substack{\lambda_1\lambda_2\\ \neq}} \frac{1}{2!}\begin{vmatrix} \psi_{\lambda_1}(\underline{r}_1) & \psi_{\lambda_2}(\underline{r}_1) \\ \psi_{\lambda_1}(\underline{r}_2) & \psi_{\lambda_2}(\underline{r}_2) \end{vmatrix}^2$$

Parr teoremi!

Burada toplam tüm uygulanmış durumlar üzerindendir,

$$\rho_2 = \frac{1}{V^2 N(N-1)}\sum_{\underline{k}\underline{k}'}\left(1 - e^{i(\underline{k}-\underline{k}')\cdot(\underline{r}-\underline{r}')}\right)\alpha_1\alpha_2$$

$$\Downarrow \qquad \psi = \frac{1}{V^{1/2}} e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}\alpha$$

$$g(\underline{r}_1-r_2) = \frac{1}{N^2}\sum_{kk'}\left(1 - e^{i(\underline{k}-\underline{k}')\cdot(\underline{r}_1-\underline{r}_2)}\right)\alpha_1\alpha_2$$

BS K