YOĞUN MADDE FİZİĞİ
DERS NOTLARI

June 23, 2004

İçindekiler

Bölüm 1

1

1.1 Standart Quantum Mechanics

Parçacık kuantalaşması; Biz belli bir konumu, spini olan sistemlere Parçacık diyoruz ve aşağıdaki şekilde gösterebiliriz,

$$|(\overrightarrow{k}, \overrightarrow{s}, ...)\rangle \tag{1.1}$$

1.2 Second quantization

1.3 Quantization methods

1.4 Standart Quantum Mechanics

Kanonikil momentum

$$P = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \tag{1.2}$$

1.5 Standart Quantum Field Theory

$$P = \frac{\partial L}{\partial \dot{\Psi}} \tag{1.3}$$

ve

$$H = H(\Psi, P_\Psi) \tag{1.4}$$

Ayrıca Ψ ve P_Ψ aşağıdakı komutasyon ilişgisini sağlar,

$$\left[\widehat{\Psi}, \widehat{P}_\Psi\right] = \frac{-i\hbar}{Volume} \tag{1.5}$$

Eşit zamanlı komutasyon ilişkisinde momentum ve alan aynı anda aynı yerde düşünülüyor yani,

$$\left[\widehat{\Psi}(\overrightarrow{x'},t),\widehat{P_\Psi}(\overrightarrow{x},t)\right]=\frac{-i\hbar\delta(\overrightarrow{x}-\overrightarrow{x'})}{Volume} \tag{1.6}$$

1.6 Bir Kuantalaşma örneği

Zaman bağımlı Schrödinger denklemini yazalım

$$i\hbar\partial_t\Psi=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\overrightarrow{r}))\Psi \tag{1.7}$$

Şimdi Schrödinger denklemini verecek Lagrangiana bakalım. Ilk önce Euler-Lagragian denklemini yazalim.

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}})-\frac{\partial L}{\partial q}=0 \tag{1.8}$$

Alan theorisinde $q\to\Psi$ ve $P\to\frac{\partial L}{\partial\dot{\Psi}}$.
Euler-Lagragian denklemini tekrar yazarsak

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial\dot{\Psi}})-\frac{\partial L}{\partial\Psi}=0 \tag{1.9}$$

Şimdi lagranginin $\dot{\Psi}$,Ψ_x ve Ψ nin fonksiyonu oldugunu düşünelim yani $L=L(\dot{\Psi},\Psi_x,\Psi)$. Burada $\Psi_x=\frac{\partial\Psi}{\partial x}$

Bu lagranginin sağladığı Euler-Lagragian denklemini yazalim,

$$\frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial\dot{\Psi}})+\frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial L}{\partial\Psi_x})-\frac{\partial L}{\partial\Psi}=0 \tag{1.10}$$

Aşağıdaki lagrangian Schrödinger denklemini verip vermediğine bakalim,

$$L=i\hbar\Psi^*(\partial_t\Psi))-\frac{\hbar^2}{2m}(\overrightarrow{\nabla}\Psi^*)\cdot(\overrightarrow{\nabla}\Psi^*)-V(\overrightarrow{r})\Psi^*\Psi \tag{1.11}$$

Burada $\Psi=\Psi(\overrightarrow{x},t)$.

L langrangian yoğlığudur. Toplam langrangian ise L'in hacim integralidir, yani

$$L=\int Ld\overrightarrow{x} \tag{1.12}$$

Şimdi Euler-Lagrangian denklemindeki elemanları tek tek hesaplayalım.

$$\frac{\partial L}{\partial\dot{\Psi}}=i\hbar\Psi^*,\ \frac{\partial L}{\partial\Psi_i}=\frac{-\hbar^2}{2m}\Psi_i^*\ and\ \frac{\partial L}{\partial\Psi}=-V(\overrightarrow{r})\Psi^* \tag{1.13}$$

Bulduğumuz elemanları yerine koyarsak,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*_{ii}+V(\vec{r})\Psi^*=0 \tag{1.14}$$

Ψ^* için elemanlari hesaplarsak eğer,

$$\frac{\partial L}{\partial\dot{\Psi}^*}=0,\ \frac{\partial L}{\partial\Psi^*_i}=\frac{-\hbar^2}{2m}\Psi_i\ and\ \frac{\partial L}{\partial\Psi^*}=i\hbar\partial_t-V(\vec{r})\Psi \tag{1.15}$$

Buradan,

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_{ii}+V(\vec{r})\Psi=0 \tag{1.16}$$

If we write the

$$\widehat{\Psi}(\vec{x},t)=\sum_\lambda\widehat{a}_\lambda(t)\phi_\lambda(\vec{x}) \tag{1.17}$$

Buradan

$$\widehat{P}(\vec{x},t)=i\hbar\widehat{\Psi}^\dagger \tag{1.18}$$

Ayrıca

$$\widehat{\Psi}^\dagger(\vec{x},t)=\sum_\lambda\widehat{a}^\dagger_\lambda(t)\phi^*_\lambda(\vec{x}) \tag{1.19}$$

ve

$$\widehat{P}(\vec{x},t)=i\hbar\sum_\lambda\widehat{a}^\dagger_\lambda(t)\phi^*_\lambda(\vec{x}) \tag{1.20}$$

Let's write the commutaion relation satisfied by $\widehat{\Psi}$ and $\widehat{P}$

$$\left[\widehat{\Psi}(\vec{x},t),\widehat{P}(\vec{x'},t)\right]=i\hbar\sum_\lambda\left[\widehat{a}_\lambda(t),\widehat{a}^\dagger_{\lambda'}(t)\right]\phi_\lambda(\vec{x})\phi^*_{\lambda'}(\vec{x'})=i\hbar\delta(\vec{x}-\vec{x'}) \tag{1.21}$$

Equ. 1.21 da $\left[\widehat{a}_\lambda(t),\widehat{a}^\dagger_{\lambda'}(t)\right]=\delta_{\lambda\lambda'}$

Ayrıca diğer komutasyon ilişkileri aşağıdaki gibidir.

$$\left[\widehat{\Psi}(\vec{x},t),\widehat{\Psi}(\vec{x},t)\right]=0 \tag{1.22}$$

ve

$$\left[\widehat{P}(\vec{x},t),\widehat{P}(\vec{x},t)\right]=0 \tag{1.23}$$

Fermionlar ve bozonlar için genel komutasyon ve anti-komutasyon kuralları aşağıdakı gibidir.

$$\left[\left\{\widehat{a}_\lambda, \widehat{a}^\dagger_{\lambda'}\right\}\right] = \delta_{\lambda\lambda'} \tag{1.24}$$

ve

$$[\{\widehat{a}_\lambda, \widehat{a}_{\lambda'}\}] = 0 \tag{1.25}$$

$$\left[\left\{\widehat{a}^\dagger_\lambda, \widehat{a}^\dagger_{\lambda'}\right\}\right] = 0 \tag{1.26}$$

Burada anti komutasyon {...} fermiyonlar için ve komutasyon [...] bozonlar için kullanılır

$a_\lambda(t)$ ϕ_λ, modunda bir parçaçık yok etme operatörüdür.
$a^\dagger_\lambda(t)$ ϕ_λ, modunda bir parçaçık yaratma operatörüdür. ϕ_λ $\overrightarrow{x}$ uzayında orthonormal bazdır. Yani,

$$\int d\overrightarrow{x}\phi^*_{\lambda'}\phi_\lambda = \delta_{\lambda\lambda'} \tag{1.27}$$

ϕ_λ Schrödinger denklemini sağlar.

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\overrightarrow{r})\right]\phi_\lambda(\overrightarrow{x}) = E_\lambda\phi_\lambda(\overrightarrow{x}) \tag{1.28}$$

$\widehat{H}$ toplam Hamiltonian dır ve

$$\widehat{H} = \int d\overrightarrow{x}\Psi^\dagger(\overrightarrow{x},t)(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\overrightarrow{r}))\Psi(\overrightarrow{x},t) \tag{1.29}$$

If $\widehat{\Psi}(\overrightarrow{x},t) = \sum_\lambda \widehat{a}_\lambda(t)\phi_\lambda(\overrightarrow{x})$ ve $\widehat{\Psi}^\dagger(\overrightarrow{x},t) = \sum_\lambda \widehat{a}^\dagger_\lambda(t)\phi^*_\lambda(\overrightarrow{x})$ buradan

$$\widehat{H} = \sum E_\lambda \widehat{a}^\dagger_\lambda \widehat{a}_\lambda \tag{1.30}$$

$$n_\lambda = \widehat{a}^\dagger_\lambda \widehat{a}_\lambda \tag{1.31}$$

ve

$$[n_\lambda, \widehat{a}_{\lambda'}] = -\widehat{a}_{\lambda'}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{1.32}$$

$$\left[n_\lambda, \widehat{a}^\dagger_{\lambda'}\right] = \widehat{a}^\dagger_{\lambda'}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{1.33}$$

$$\widehat{a}_\lambda(t) = e^{i\widehat{H}t}\widehat{a}e^{-i\widehat{H}t} = e^{-iE_\lambda t}\widehat{a}_\lambda \tag{1.34}$$

$$\widehat{a}^\dagger_\lambda(t) = e^{iE_\lambda t}\widehat{a}^\dagger_\lambda \tag{1.35}$$

İspat:

$$\hat{a}_\lambda(t) = \hat{a}_\lambda(0) + it\left[\hat{H}, \hat{a}_\lambda\right] + \frac{(it)^2}{2}\left[\hat{H}, \left[\hat{H}, \hat{a}_\lambda\right]\right] + ... + \frac{(it)^n}{n}\left[\hat{H} ... \left[\hat{H}, \hat{a}_\lambda\right] ...\right] + ... \tag{1.36}$$

$$\left[\hat{H}, \hat{a}_\lambda\right] = \sum_{\lambda'} E_{\lambda'}\left[\hat{a}^\dagger_{\lambda'}\hat{a}_{\lambda'}, \hat{a}_\lambda\right] = \sum_{\lambda'} E_{\lambda'}\delta_{\lambda\lambda'}\hat{a}_{\lambda'} = -E_\lambda \hat{a}_\lambda \tag{1.37}$$

$$\left[\hat{H}, \left[\hat{H}, \hat{a}_\lambda\right]\right] = -E_\lambda\left[\hat{H}, \hat{a}_\lambda\right] = (-E_\lambda)^2\hat{a}_\lambda \tag{1.38}$$

$$\hat{a}_\lambda(t) = \hat{a}_\lambda(0) - iE_\lambda t\hat{a}_\lambda + \frac{(it)^2}{2}(-E_\lambda)^2\hat{a}_\lambda ... \tag{1.39}$$

Buradan

$$\hat{a}_\lambda(t) = e^{-iE_\lambda t}\hat{a}_\lambda \tag{1.40}$$

If

$$\hat{H} = \hat{\Psi}^\dagger\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}) + \epsilon V\right]\hat{\Psi} \tag{1.41}$$

where ϵV is small perturbation. Then

$$\|\epsilon V\| = \langle\phi|\hat{V}|\phi\rangle|\epsilon| \ll \|\widehat{H_0}\| = \langle\phi_0|\hat{H}_0|\phi_0\rangle \tag{1.42}$$

If

$$\hat{\Psi} = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda(t)\phi_\lambda(\vec{x}) \tag{1.43}$$

buradan

$$\hat{H} = \sum_\lambda E_\lambda \hat{a}^\dagger_\lambda\hat{a}_\lambda + \epsilon\sum_{\lambda\lambda'}\hat{a}^\dagger_\lambda\hat{a}_{\lambda'}\int d\vec{x}\,\phi^*_\lambda(\vec{x})V\phi_{\lambda'}(\vec{x'}) \tag{1.44}$$

$$\hat{H} = \sum_\lambda E_\lambda \hat{a}^\dagger_\lambda\hat{a}_\lambda + \epsilon\sum_{\lambda\lambda'}\hat{a}^\dagger_\lambda\hat{V}_{\lambda\lambda'}\hat{a}_{\lambda'} \tag{1.45}$$

where $\hat{V}_{\lambda\lambda'} = \int d\vec{x}\,\phi^*_\lambda(\vec{x})V\phi_{\lambda'}(\vec{x'})$.

Şimdi lineer olmayan Schrödinger denklemini yazalım,

$$i\hbar\partial_t\Psi = (\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U)\Psi + g|\Psi|^2\Psi \tag{1.46}$$

Bu denklem için Lagrangian aşağıdaki gibidir,

$$L = i\hbar\widehat{\Psi}^\dagger(\partial_t\widehat{\Psi}) - \frac{\hbar^2}{2m}(\overrightarrow{\nabla}\widehat{\Psi}^\dagger)(\overrightarrow{\nabla}\widehat{\Psi}) - \widehat{\Psi}^\dagger U(\overrightarrow{r})\widehat{\Psi} - \frac{g}{2}|\widehat{\Psi}|^4 \tag{1.47}$$

$$\widehat{H} = \widehat{\Psi}^\dagger\left[\widehat{H_0} + \epsilon V\right]\widehat{\Psi} + \frac{g}{2}|\widehat{\Psi}|^4 \tag{1.48}$$

$$\widehat{H} = \sum_\lambda\left\{E_\lambda\widehat{a}_\lambda^\dagger\widehat{a}_\lambda + \epsilon\sum_{\lambda'}V_{\lambda\lambda'}\widehat{a}_\lambda^\dagger\widehat{a}_{\lambda'}\right\}\frac{g}{2}\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}\widehat{a}_{\lambda_1}^\dagger\widehat{a}_{\lambda_2}\widehat{a}_{\lambda_3}^\dagger\widehat{a}_{\lambda_4}\widehat{V}_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} \tag{1.49}$$

where $\widehat{V}_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}$ is equal to

$$\widehat{V}_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} = \int d\overrightarrow{x}\,\phi_{\lambda_1}^*(\overrightarrow{x})\phi_{\lambda_2}(\overrightarrow{x})\phi_{\lambda_3}^*(\overrightarrow{x})\phi_{\lambda_4}(\overrightarrow{x}) \tag{1.50}$$

If we think the columd like interaction of two non-localized particle, we must take the charge density.

$$\widehat{\rho}(\overrightarrow{r_1}) = \widehat{\Psi}^\dagger(\overrightarrow{r_1})\widehat{\Psi}(\overrightarrow{r_1})\ and\ \widehat{\rho}(\overrightarrow{r_2}) = \widehat{\Psi}^\dagger(\overrightarrow{r_2})\widehat{\Psi}(\overrightarrow{r_2}) \tag{1.51}$$

$$\int\widehat{\rho}(\overrightarrow{r_1})\frac{e^2}{|\overrightarrow{r_1} - \overrightarrow{r_2}|}\widehat{\rho}(\overrightarrow{r_2})d\overrightarrow{r_1}d\overrightarrow{r_2} \tag{1.52}$$

Potential

$$\widehat{V}_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} = \int d\overrightarrow{r_1}\int d\overrightarrow{r_2}\,\phi_{\lambda_1}^*(\overrightarrow{r_1})\phi_{\lambda_2}(\overrightarrow{r_1})\frac{e^2}{|\overrightarrow{r_1} - \overrightarrow{r_2}|}\phi_{\lambda_3}^*(\overrightarrow{r_2})\phi_{\lambda_4}(\overrightarrow{r_2}) \tag{1.53}$$

Field Lagrangian for the the sch. field

$$L = i\hbar\widehat{\Psi}^\dagger\partial_t\widehat{\Psi} - \frac{\hbar^2}{2m}\overrightarrow{\nabla}\widehat{\Psi}^\dagger\overrightarrow{\nabla}\widehat{\Psi} - U(\overrightarrow{r})\widehat{\Psi}^\dagger\widehat{\Psi} - \frac{1}{2}\int V(\overrightarrow{r_1} - \overrightarrow{r_2})\widehat{\rho}(\overrightarrow{r_1})\widehat{\rho}(\overrightarrow{r_2}) \tag{1.54}$$

and

$$\widehat{H} = \sum_\lambda E_\lambda\widehat{a}_\lambda^\dagger\widehat{a}_\lambda + \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4}\widehat{a}_{\lambda_1}^\dagger\widehat{a}_{\lambda_2}\widehat{a}_{\lambda_3}^\dagger\widehat{a}_{\lambda_4}\widehat{V}_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} \tag{1.55}$$

and

$$\widehat{V}_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} = \frac{1}{2}\int d\overrightarrow{r_1}d\overrightarrow{r_2}V(\overrightarrow{r_1} - \overrightarrow{r_2})\phi_{\lambda_1}^*(\overrightarrow{r_1})\phi_{\lambda_2}(\overrightarrow{r_1})\phi_{\lambda_3}^*(\overrightarrow{r_2})\phi_{\lambda_4}(\overrightarrow{r_2}) \tag{1.56}$$

If free particle $V(\overrightarrow{r}) = 0$ and $V(\overrightarrow{r}) = 0$ So $\lambda \to k$ are the particle momentum ve good quantum numberdir. Serbest parçaçık için dalga fonksiyonu şöyle yazılabilir,

$$\Psi(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}.\vec{x}}}{\sqrt{vol}} \tag{1.57}$$

Bu dalga fonksiyonun kullanarak aşağıdakı ilişki gösterilebilir

$$\int \langle \Psi^{\dagger}(\vec{x})\Psi(\vec{x})\rangle d\vec{x} = \sum_{\vec{k}} a^{\dagger}_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \tag{1.58}$$

Yine Bu dalga fonksiyonu kullanarak $\widehat{V}_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}}$ yazılabilir,

$$\widehat{V}_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{2}\int d\vec{r_1}d\vec{r_2}V(\vec{r_1}-\vec{r_2})\frac{1}{\sqrt{v}}e^{i\vec{k_1}.\vec{r_1}}\frac{1}{\sqrt{v}}e^{i\vec{k_2}.\vec{r_2}}\frac{1}{\sqrt{v}}e^{i\vec{k_3}.\vec{r_3}}\frac{1}{\sqrt{v}}e^{i\vec{k_4}.\vec{r_4}} \tag{1.59}$$

Eğer $\vec{r_1} = \frac{\vec{r_1}+\vec{r_2}}{2} + \frac{\vec{r_1}-\vec{r_2}}{2} = \vec{r_{cm}} + \frac{1}{2}\vec{r}$ ve $\vec{r_2} = \frac{\vec{r_1}+\vec{r_2}}{2} - \frac{\vec{r_1}-\vec{r_2}}{2} = \vec{r_{cm}} - \frac{1}{2}\vec{r}$ alırsak

$$\widehat{V}_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{2v^2}\int d(\vec{r_1}-\vec{r_1})d(\frac{\vec{r_1}+\vec{r_2}}{2})e^{-i(\vec{k_1}-\vec{k_2}).\vec{r_1}}e^{-i(\vec{k_3}-\vec{k_4}).\vec{r_2}}V(\vec{r_1}-\vec{r_2}) \tag{1.60}$$

Buradan

$$\widehat{V}_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{2v^2}\int d(\vec{r})d(\vec{r_{cm}})e^{-i(\vec{k_1}-\vec{k_2}).(\vec{r_{cm}}+\frac{\vec{r}}{2})}e^{-i(\vec{k_3}-\vec{k_4}).(\vec{r_{cm}}-\frac{\vec{r}}{2}))}V(\vec{r_1}-\vec{r_2}) \tag{1.61}$$

For cm integral

$$\int d\vec{r_{cm}}e^{-i(\vec{k_1}-\vec{k_2}+\vec{k_3}-\vec{k_4}).\vec{r_{cm}}} = v\delta_{\vec{k_1}-\vec{k_2}+\vec{k_3}-\vec{k_4},0} \tag{1.62}$$

$$\widehat{V}_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{2v}\delta_{\vec{k_1}-\vec{k_2}+\vec{k_3}-\vec{k_4},0}\int d\vec{r}e^{-1(\vec{k_1}-\vec{k_2}-\vec{k_3}+\vec{k_4}).\vec{r}}V(\vec{r}) \tag{1.63}$$

Equ. 1.62 deki dirac deltayı $\vec{k_1}-\vec{k_2} = -\vec{k_3}+\vec{k_4}$ kullanırsak eğer,

$$\widehat{V}_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{2v}\delta_{\vec{k_1}-\vec{k_2}+\vec{k_3}-\vec{k_4},0}\int d\vec{r}e^{-1(\vec{k_1}-\vec{k_2}}V(\vec{r}) \tag{1.64}$$

Equ. 2.6 deki $\int d\vec{r}e^{-1(\vec{k_1}-\vec{k_2}}V(\vec{r})$ potensiyelinin Fourier dönüşümünden başka birşey değildir.Bu eşitliği kullanırsak,

$$\widehat{V}_{\vec{k_1}\vec{k_2}\vec{k_3}\vec{k_4}} = \frac{1}{2v}\delta_{\vec{k_1}-\vec{k_2}+\vec{k_3}-\vec{k_4},0}V(\vec{k_1}-\vec{k_2}) \tag{1.65}$$

Sonuçta the coulomd term then becomes

$$\frac{1}{2v}\sum_{\overrightarrow{k}}\widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k_1}}\widehat{a}_{\overrightarrow{k_2}}\widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k_3}}\widehat{a}_{\overrightarrow{k_1}-\overrightarrow{k_2}+\overrightarrow{k_3}}V(\overrightarrow{k_1}-\overrightarrow{k_2}) \tag{1.66}$$

Burada toplam parçaçık sayısı ve toplam enerji korunmaktadır.

Şekil 1.1:

Bozonik durum:

$$\widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k}-\overrightarrow{q}}\widehat{a}_{\overrightarrow{k}}\widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q}}\widehat{a}_{\overrightarrow{k'}} = \widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k}-\overrightarrow{q}}\widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q}}\widehat{a}_{\overrightarrow{k}}\widehat{a}_{\overrightarrow{k'}} + \widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k}-\overrightarrow{q}}\left[\widehat{a}_{\overrightarrow{k}},\widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q}}\right]\widehat{a}_{\overrightarrow{k'}} \tag{1.67}$$

buradan

$$= \widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k}-\overrightarrow{q}}\widehat{a}^{\dagger}_{\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q}}\widehat{a}_{\overrightarrow{k}}\widehat{a}_{\overrightarrow{k'}}\delta_{\overrightarrow{k},\overrightarrow{k'}-\overrightarrow{q}}\widehat{a}_{\overrightarrow{k'}} \tag{1.68}$$

Fermiyonik durum:

Bölüm 2

DENEME

2.1 Green fonksiyonları

Green fonksiyonları aşağıdaki diferansiyel denklemi sağlayan fonksiyonlardır.

$$L_x G(x, x') = \delta(x - x') \tag{2.1}$$

Burada L_x herhangi bir operatörü göstermektedir örneğin,

$$L_x = aD_x^2 + bD_x + c \tag{2.2}$$

şeklinde olabilir. Operatörün içindeki türev $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ şeklinde tanımlanmıştır.

Schrödinger Green fonksiyonunu bulmaya çalışalım. Aşağıda verilen Lagrangiani ele alalım.

$$L = \Psi^*(i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2)\Psi \tag{2.3}$$

Hamiltonianumuz şu şekildedir,

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \tag{2.4}$$

Zaman bağımlı Schrödinger denklemini yazalım,

$$\underbrace{(i\hbar\partial_t + \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2)}_{L}\Psi = V\Psi \tag{2.5}$$

Green fonksiyonunun sağladığı diferansiyel denklemi yazalım,

$$(i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2)G_0(x, x'; t, t') = \delta(x - x')\delta(t - t') \tag{2.6}$$

Bu diferansiyel denklemin çözümünü bulmak için Fourier analiz yapmamız gerekmektedir, yani

$$G_0(x,x';t,t') = \sum_{k,w} e^{-iw(t-t')} e^{ik(x-x')} G_0(k,w) \tag{2.7}$$

$$G_0(x,x';t,t') = \int \frac{dw}{2\pi} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-iw(t-t')} e^{ik(x-x')} G_0(k,w) \tag{2.8}$$

Delta fonksiyonunu orthanormal bir bazda açalım,

$$\delta(x-x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{(2\pi)^3} e^{iu(x-x')} \tag{2.9}$$

Bu eşitliği kullanarak,

$$i\hbar G_0(x,x';t,t') = -iw \int \frac{dw}{2\pi} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-iw(t-t')} e^{ik(x-x')} G_0(k,w) \tag{2.10}$$

ve

$$\nabla^2 G_0(x,x';t,t') = -k^2 \int \frac{dw}{2\pi} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-iw(t-t')} e^{ik(x-x')} G_0(k,w) \tag{2.11}$$

buradan diferansiyel denklem aşağıdakı gibi olur,

$$(-i\hbar(-iw) \frac{-\hbar^2 k^2}{2m}) G_0(k,w) = 1 \tag{2.12}$$

sonuç olarak,

$$G_0(k,w) = \frac{1}{\hbar w - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \tag{2.13}$$

Green fonksiyonunu (x,t) uzayında yazacak olursak,

$$G_0(x,t) = \int \frac{dw}{2\pi} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i(wt-kx)} \frac{1}{\hbar w - \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{E_k^0}} \tag{2.14}$$

- Eğer $t > t'$ ise böyle Green fonksiyonlarına zamanda ileri giden Green fonksiyonları diyoruz.

- Eğer $t > t'$ ise böyle Green fonksiyonlarına zamanda geri giden Green fonksiyonları diyoruz.

Şekil 2.1:

$$(i\hbar\partial_t - H)\Psi = V\Psi \tag{2.15}$$

$$\Psi(\overrightarrow{x},t) = \int d\overrightarrow{x'} \int dt' G(x-x';t-t')V(x')\Psi(x',t) \tag{2.16}$$

V potansiyelinin çok küçük olduğunu düşünelim,

$$\Psi(\overrightarrow{x},t) = \Psi_0(x,t) + \int d\overrightarrow{x'} \int dt' G(x-x';t-t')V(x')\Psi(x',t) \tag{2.17}$$

Buradan,

$$\begin{aligned}
\Psi(\overrightarrow{x},t) &= \Psi_0(x,t) + \int G_0 V(\overrightarrow{x'}) \left\{ \Psi_0(\overrightarrow{x'},t) + \int G_0(\overrightarrow{x'},\overrightarrow{x''},t',t'')V(\overrightarrow{x''})\Psi(\overrightarrow{x''},t'') \right\} \\
&= \Psi_0(x,t) + \int G_0 V \Psi_0 + \int G_0 V G_0 V \Psi_0 + \int G_0 V G_0 V G_0 V \Psi_0 + \ldots
\end{aligned} \tag{2.18}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_k(w) &= \Psi_0 + G_0 V \Psi_0 + G_0 V G_0 V \Psi_0 + G_0 V G_0 V G_0 V \Psi_0 + \ldots \\
&= (1 + G_0 V + G_0 V G_0 V + G_0 V G_0 V G_0 V + \ldots)\Psi_0 \\
&= \frac{1}{1 - G_0 V}\Psi_0
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Green fonksiyonunu aşağıdaki gibi tanımlarsak,

$$G(\overrightarrow{x},\overrightarrow{x'};t-t') = \theta(t-t')\langle\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle \tag{2.20}$$

Bu Green fonksiyonunu equ. 2.6 içine koyarsak eğer,

$$(i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2)\theta(t-t')\langle\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle =$$
$$i\hbar\partial_t\theta(t-t')\langle\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle + \underbrace{\theta(t-t')\langle(i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2)\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle}_{0}$$
$$= i\hbar\delta(t-t')\underbrace{\langle\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle}_{\delta(x-x')} \quad (2.21)$$

Şimdi equ. 2.20 de verilen green fonksiyonunu equ. 2.6 sağladığını serbest parçacık için gösterelim. Serbest parçacığın Hamiltoniani yazalım.

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (2.22)$$

Bu Hamiltoniani kullanarak,

$$(i\hbar\partial_t + H_0)\theta(t-t')\langle\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle =$$
$$\delta(t-t')\langle\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle + \theta(t-t')\langle(i\hbar\partial_t + H_0)\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle \quad (2.23)$$

Eşitliğin sağındaki son terim sıfırdır.

$$\begin{aligned}(i\hbar\partial_t + H_0)\theta(t-t')\langle\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle &= \delta(t-t')\langle\Psi(\overrightarrow{x},t)\Psi^*(\overrightarrow{x'},t')\rangle \\ &= \delta(t-t')\int\frac{dk}{2\pi}e^{ik(x-x')}\underbrace{\langle\phi_k(t)\phi_k^*(t)\rangle}_{1} \\ &= \delta(t-t')\delta(x-x') \quad (2.24)\end{aligned}$$

2.2 interaction representation

Ilk önce zaman bağımlı Schrödinger denklemini yazalım.

$$i\hbar\partial_t|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle \quad (2.25)$$

Hamiltonianumuz şu formda olsun,

$$\widehat{H} = \widehat{H_0} + \widehat{V}(t) \quad (2.26)$$

Dalga fonksiyonunun zaman bağımlılığı aşağıdaki gibidir,

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle &= Te^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \widehat{H}(t')dt'}|\Psi_0\rangle \\ &= T\left\{1 - \frac{i}{\hbar}\int\widehat{H}(t')dt' + (\frac{i}{\hbar})^2\frac{1}{2!}\int_0^t\widehat{H}(t')\int_0^{t'}\widehat{H}(t'')dt'dt'' + ..\right\} \quad (2.27)\end{aligned}$$

$$\widehat{T}H(t')H(t'') = \theta(t'-t'')H(t')H(t'') + \theta(t''-t') \tag{2.28}$$

$$\Psi_t = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H\Psi(t')dt' + \Psi_0 \tag{2.29}$$

$$\Psi_t = \Psi_0 + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H\Psi(t')dt' + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t H\Psi(t')dt'\int_0^{t'} H\Psi(t'')dt'' \tag{2.30}$$

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t) \tag{2.31}$$

V nin çok küçük olduğunu düşünelim.

$$i\hbar\partial_t\Psi_t = (H_0+V)\Psi_t \tag{2.32}$$

$$\Psi_t = e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}}\tilde{\Psi}_t \tag{2.33}$$

$$i\hbar\partial_t(e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}}\tilde{\Psi}_t) = (H_0+V)e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}}\tilde{\Psi}_t \tag{2.34}$$

$$i\hbar\tilde{\Psi}_t = \underbrace{e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}Ve^{\frac{-iH_0t}{\hbar}}}_{\tilde{V}(t)}\tilde{\Psi}_t \tag{2.35}$$

$$i\hbar\tilde{\Psi}_t = \tilde{V}(t)\tilde{\Psi}_t \tag{2.36}$$

$$\tilde{\Psi}_t = Te^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \tilde{V}(t')dt'}\tilde{\Psi}_0 \tag{2.37}$$

$\tilde{U}(t,0)$ propagator in interaction picture.

$$\tilde{U}(t_1,t_2)\tilde{\Psi}(t_2,t_3) = \tilde{U}(t_1,t_3) \tag{2.38}$$

Eğer $t_1 = t_3$,

$$\tilde{U}(t_1,t_2) = \tilde{U}(t_2,t_1) = \tilde{U}(t_1,t_1) = 1 \tag{2.39}$$

$$\tilde{U}(t_1,t_2) = \tilde{U}^{-1}(t_2,t_1) \tag{2.40}$$

$$\tilde{\Psi}_t = e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}T\left\{\frac{-i}{\hbar}\int_0^t V(t')dt'\right\}\tilde{\Psi}_0 \tag{2.41}$$

$$\tilde{\Psi}_t = e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\tilde{\Psi}_0 \tag{2.42}$$

Green fonksiyonu,

$$G_k(t-t') = -i\theta(t-t')\langle \widehat{c}_k(t)\widehat{c}_k^{\dagger}(t)\rangle + i\theta(t'-t)\langle \widehat{c}_k^{\dagger}(t)\widehat{c}_k(t)\rangle \tag{2.43}$$

$$\begin{aligned}
\langle \widehat{O}_t \rangle &= \langle \Psi_t|\widehat{O}|\Psi_t\rangle = \langle \Psi_t| \underbrace{e^{\frac{iHt}{\hbar}}\widehat{O}e^{\frac{-iHt'}{\hbar}}}_{Heisenbergpicture} |\Psi_t\rangle \\
&= \underbrace{\langle \Psi_\infty|Te^{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} V dt'}}_{\langle\ \tilde{\Psi}_t|} e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}\widehat{O}e^{\frac{-iH_0t'}{\hbar}} \underbrace{Te^{\frac{-i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t'} V dt''}|\Psi_{-\infty}\rangle}_{|\tilde{\Psi}_t\rangle} \qquad (2.44)
\end{aligned}$$

Bölüm 3

Sonlu Sıcaklık Green Fonksiyonları

3.1 Etkileşimsiz Green Fonksiyonları

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}}(t-t') &= -i\langle T C_{\mathbf{k}}(t) C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(t')\rangle \qquad (3.1) \\ &= -i\langle T \tilde{C}_{\mathbf{k}}(t) \tilde{C}^{\dagger}_{\mathbf{k}}(t') S(\infty,-\infty)\rangle \qquad (3.2) \end{aligned}$$

$T \neq 0$ olduğu zaman uyarılmış enerji seviyeleri termal olarak doludur. Termal averaj şöyle yazılabilir

$$\hat{\rho} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta \hat{H}}}{\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta \hat{H}}\}} \qquad (3.3)$$

$$Z = \mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta \hat{H}}\} \qquad (3.4)$$

Öyleyse $T \neq 0$ olduğu zaman Green fonksiyonu şöyle yazılabilir

$$G_{\mathbf{k}}(t-t') = -\frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\{T\mathrm{e}^{-\beta \hat{H}_0} \tilde{C}_{\mathbf{k}}(t) \tilde{C}^{\dagger}_{\mathbf{k}}(t') S(\infty,-\infty)\} \qquad (3.5)$$

$$\tilde{C}_{\mathbf{k}}(t) = \mathrm{e}^{iH_0 t} C_{\mathbf{k}}(0) \mathrm{e}^{-iH_0 t} \qquad (3.6)$$

Eğer $\tau = it$ ise

(Fig:Wick rotation çizimi buraya girecek)

$$\tilde{C}_{\mathbf{k}}(\tau) = \mathrm{e}^{H_0 \tau} C_{\mathbf{k}}(0) \mathrm{e}^{-H_0 \tau} \qquad (3.7)$$

Böylece Green fonksiyonu

$$\begin{aligned} G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau-\tau') &= -\frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0} T \mathrm{e}^{H_0\tau} C_{\mathbf{k}}(0) \mathrm{e}^{-H_0\tau} \mathrm{e}^{H_0\tau'} C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0) \mathrm{e}^{-H_0\tau'}\} \qquad (3.8) \\ &= -\frac{1}{Z}\Theta(\tau-\tau')\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0} \mathrm{e}^{H_0\tau} C_{\mathbf{k}}(0) \mathrm{e}^{-H_0\tau} \mathrm{e}^{H_0\tau'} C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0) \mathrm{e}^{-H_0\tau'}\} \\ &\quad + \frac{1}{Z}\Theta(\tau'-\tau)\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0} \mathrm{e}^{H_0\tau'} C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0) \mathrm{e}^{-H_0\tau'} \mathrm{e}^{H_0\tau} C_{\mathbf{k}}(0) \mathrm{e}^{-H_0\tau}\} \end{aligned}$$

Trace'in rotasyon özelliğini kullanırsak

$$\mathrm{Tr}[\hat{A}\hat{B}\hat{C}] = \mathrm{Tr}[\hat{C}\hat{A}\hat{B}] \tag{3.9}$$

Green fonksiyonundaki ifadeyi şu hale getirebiliriz

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\{e^{-H_0\tau'}e^{-\beta H_0}e^{H_0\tau}C_{\mathbf{k}}(0)e^{-H_0(\tau-\tau')}C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)\} &= \mathrm{Tr}\{e^{-\beta H_0}e^{H_0(\tau-\tau')}C_{\mathbf{k}}(0)e^{-H_0(\tau-\tau')}C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)\} \\ &= \mathrm{Tr}\{e^{-\beta H_0}\hat{C}_{\mathbf{k}}(\tau-\tau')C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)\}\end{aligned} \tag{3.10}$$

$\tau = 0$ alırsak

$$G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau) = \frac{-1}{Z}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta H_0}Te^{H_0\tau}C_{\mathbf{k}}(0)e^{-H_0\tau}C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)\} \tag{3.11}$$

$$\begin{aligned}G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau) = &- \Theta(\tau)\mathrm{Tr}\{e^{-\beta H_0}e^{H_0\tau}C_{\mathbf{k}}(0)e^{-H_0\tau}C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)\} \\ &+ \Theta(-\tau)\mathrm{Tr}\{e^{-\beta H_0}C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)e^{H_0\tau}C_{\mathbf{k}}(0)e^{-H_0\tau}\}\end{aligned} \tag{3.12}$$

Trace'in rotasyon özelliğini kullanarak

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta H_0}e^{H_0\tau}C_{\mathbf{k}}(0)e^{-H_0\tau}C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)\} &= \mathrm{Tr}\{C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)e^{H_0(\tau-\beta)}C_{\mathbf{k}}(0)e^{-H_0\tau}\} \\ &= \mathrm{Tr}\{e^{-\beta H_0}C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)e^{H_0(\tau-\beta)}C_{\mathbf{k}}(0)e^{-H_0(\tau-\beta)}\} \\ &= \mathrm{Tr}\{e^{-\beta H_0}C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)C_{\mathbf{k}}(\tau-\beta)\} \\ &= \mathrm{Tr}\{e^{-\beta H_0}C_{\mathbf{k}}(\tau)C^\dagger_{\mathbf{k}}(0)\}\end{aligned} \tag{3.13}$$

Denklem (1.16) $-\beta \leq \tau - \beta \leq 0$ aralığını (1.17) ise $0 \leq \tau \leq \beta$ aralığını ifade etmektedir. Böylece Green fonksiyonu retarded ve advanced kısımları arasında gidip gelir. Biliyoruz ki

$$G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau) = -G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau-\beta) \tag{3.14}$$

(Fig:τ ve β aralığı çizimi buraya girecek) Şekildeki aralığı seçerek τ'tu reel bir değişken gibi düşünüyoruz.

$$f(\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n\tau}\tilde{f}(\omega_n) \tag{3.15}$$

$$\tilde{f}(\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}f(\tau) \tag{3.16}$$

$f(\tau) = f(\tau+\beta)$ ise $e^{-i\omega_n\beta} = 1$ böylece $\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}$ olur. Bu ifade bozonlar için geçerlidir. $f(\tau) = -f(\tau+\beta)$ olduğu zamansa $e^{-i\omega_n\beta} = -1$'dir. $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ olur ve bu da fermiyonlar için geçerlidir.Biliyoruz ki fermiyonlar antisimetrik, bozonlarsa simetriktir.

$$G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau) = -G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau-\beta) \tag{3.17}$$

$$D^{(0)}_{\mathbf{k}} = D^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau+\beta) \tag{3.18}$$

3.1.1 Fermiyonlar

Daha önce elde ettiğimiz gibi

$$G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau) = \frac{-\Theta(\tau)}{Z}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0} C_{\mathbf{k}}(\tau) C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0)\} + \frac{\Theta(\tau)}{Z}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0} C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0) C_{\mathbf{k}}(\tau)\} \quad (3.19)$$

Denlem 3.6'yı ve Hamiltonian icin $H_0 = \sum_k (E_k - \mu) C^{\dagger}_k C_k = \sum_k \xi_k C^{\dagger}_k C_k$ ifadesini kullanarak

$$C_{\mathbf{k}}(\tau) = \mathrm{e}^{-\xi_k \tau} C_k(0) \quad (3.20)$$

ve

$$C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(\tau) = \mathrm{e}^{\xi_k \tau} C^{\dagger}_k(0) \quad (3.21)$$

buluruz. Bu ifadeleri Green fonksiyonununda yerine yazınca

$$\begin{aligned} G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\tau) &= \frac{-\Theta(\tau)}{Z}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0}\mathrm{e}^{-\xi_k \tau} C_{\mathbf{k}}(0) C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0)\} + \frac{\Theta(\tau)}{Z}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0}\mathrm{e}^{-\xi_k \tau} C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0) C_{\mathbf{k}}(0)\} \\ &= \frac{-\Theta(\tau)\mathrm{e}^{-\xi_k \tau}}{Z}\langle C_{\mathbf{k}}(0) C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0)\rangle_T + \frac{\Theta(\tau)\mathrm{e}^{-\xi_k \tau}}{Z}\langle C^{\dagger}_{\mathbf{k}}(0) C_{\mathbf{k}}(0)\rangle_T \\ &= -\mathrm{e}^{\xi_k \tau}\{\Theta(\tau)[1 - n^{(F)}(\xi_k)] - \Theta(-\tau) n^{(F)}(\xi_k)\} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Buradaki $n^{(F)}(\xi_k) = 1/(1 + \mathrm{e}^{\beta \xi_k})$ Fermi-Dirac dağılım fonksiyonudur. $\Theta(-\tau) = 1 - \Theta(\tau)$ özelliğini kullanırsak Green fonksiyonu şu hale gelir

$$G_{\mathbf{k}}(\tau) = -\mathrm{e}^{-\xi_k \tau}\{\Theta(\tau) - n^{(F)}(\xi_k)\} \quad (3.23)$$

Frekans uzayına geçersek

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}}(\omega_n) &= \int_0^{\beta} d\tau \mathrm{e}^{i\omega_n \tau} G_{\mathbf{k}}(\tau) \\ &= -\int_0^{\beta} d\tau \mathrm{e}^{i\omega_n \tau}\mathrm{e}^{-\xi_k \tau}\{\Theta(\tau) - n^{(F)}(\xi_k)\} \\ &= \frac{\mathrm{e}^{(i\omega_n - \xi_k)\beta} - 1}{i\omega_n - \xi_k}[1 - n^{(F)}(\xi_k)] \\ &= \frac{1 + \mathrm{e}^{-\xi_k \beta}}{i\omega_n - \xi_k}\left(1 - \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta \xi_k} + 1}\right) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Burada fermiyonların antisimetrik oluşundan dolayı $\mathrm{e}^{i\omega_n \beta} = -1$ ifadesini kullandık. Sonuç olarak Green fonksiyonu

$$G^{(0)}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_k} \quad (3.25)$$

olur.

3.1.2 Fononlar

Benzer şekilde Bozonik Green fonksiyonu

$$D_{\mathbf{k}}^{(0)}(\tau) = \frac{-1}{Z}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0} T A_{\mathbf{k}}(\tau) A_{-\mathbf{k}}(0)\} \tag{3.26}$$

$A_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}$ ve $H_0 = \sum_q \hbar\omega_q(a_q^\dagger a_q + 1/2)$ ifadelerini kullanarak

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}}(\tau) &= \mathrm{e}^{-\omega_k} a_{\mathbf{k}}(0) \\ a_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) &= \mathrm{e}^{\omega_k \tau} a_{\mathbf{k}}^\dagger(0) \end{aligned} \tag{3.27}$$

ise

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{k}}^{(0)}(\tau) = &- \frac{-\Theta(\tau)}{Z}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0}(\mathrm{e}^{-\omega_k \tau} a_{\mathbf{k}} + \mathrm{e}^{\omega_{-k}\tau} a_{-\mathbf{k}}^\dagger)(a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger)\} \\ &- \frac{\Theta(-\tau)}{Z}\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0}(a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger)(\mathrm{e}^{-\omega_k \tau} a_{\mathbf{k}} + \mathrm{e}^{\omega_{-k}\tau} a_{-\mathbf{k}}^\dagger)\} \end{aligned} \tag{3.28}$$

Bildiğimiz gibi $\mathrm{Tr}\{a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}\} = 0$ ve $\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger\}/Z = 1 + n^{(B)}(\omega_k)$ ve $\mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H_0} a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}\}/Z = n^{(B)}(\omega_{-k})$ böylece

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{k}}^{(0)}(\tau) = &- \Theta(\tau)[\mathrm{e}^{-\omega_k \tau}(1 + n^{(B)}(\omega_k)) + \mathrm{e}^{\omega_{-k}\tau} n^{(B)}(\omega_{-k})] \\ &- \Theta(-\tau)[\mathrm{e}^{-\omega_k \tau} n^{(B)}(\omega_k) + \mathrm{e}^{\omega_{-k}\tau}(1 + n^{(B)}(\omega_{-k}))] \end{aligned} \tag{3.29}$$

Daha önceden gösterdiğimiz gibi Fonon Green fonksiyonu çift bir fonksiyondur $D_{\mathbf{k}}^{(0)}(\tau) = D_{\mathbf{k}}^{(0)}(\tau + \beta)$. $0 \le \tau \le \beta$ aralığında Fourier transformasyonu yaparsak ve $\omega_n = 2n\pi/\beta$ ve $\mathrm{e}^{i\omega_n \beta} = 1$ eşitliklerini kullanırsak,

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{k}}^{(0)}(\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau \mathrm{e}^{i\omega_n \tau} D_{\mathbf{k}}(\tau) \\ &= -\int_0^\beta d\tau \mathrm{e}^{i\omega_n \tau}[\mathrm{e}^{-\omega_k \tau}(1 + n^{(B)}(\omega_k)) + \mathrm{e}^{\omega_{-k}\tau} n^{(B)}(\omega_{-k})] \\ &= -\frac{\mathrm{e}^{(i\omega_n - \omega_k)\beta} - 1}{i\omega_n - \omega_k}(1 + n^{(B)}(\omega_k)) - \frac{\mathrm{e}^{(i\omega_n - \omega_{-k})\beta} - 1}{i\omega_n + \omega_{-k}} n^{(B)}(\omega_{-k}) \\ &= -\frac{\mathrm{e}^{(-\omega_k)\beta} - 1}{i\omega_n - \omega_k}\left(1 + \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\omega_k} - 1}\right) - \frac{\mathrm{e}^{(-\omega_{-k})\beta} - 1}{i\omega_n + \omega_{-k}}\left(\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\omega_{-k}} - 1}\right) \\ &= \frac{1}{i\omega_n - \omega_k} - \frac{1}{i\omega_n + \omega_{-k}} \end{aligned} \tag{3.30}$$

$\omega_k = \omega_{-k}$ alırsak

$$D_{\mathbf{k}}^{(0)}(\omega_n) = \frac{i\omega_n + \omega_k - (i\omega_n - \omega_k)}{(i\omega_n)^2 - \omega_k{}^2} = -\frac{2\omega_k}{\omega_n{}^2 + \omega_k{}^2} \tag{3.31}$$

3.2 Spektral Gösterim

Yük yoğunluğu Green fonksiyonu $\langle T\rho_{\mathbf{q}}(t)\rho_{-\mathbf{q}}(t)\rangle$ şeklinde yazılır. Burada

$$\begin{aligned}\rho_{\mathbf{q}}(t) &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} C^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(t)C_{\mathbf{k},\sigma}(t) \\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \mathrm{e}^{-i(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\xi_{\mathbf{k}})}C^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}C_{\mathbf{k},\sigma} \qquad (3.32)\end{aligned}$$

Frekans uzayında yazarsak

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{\mathbf{q}}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt\rho_{\mathbf{q}}(t)\mathrm{e}^{i\omega t} \\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} C^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}C_{\mathbf{k},\sigma}\delta(\omega-(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\xi_{\mathbf{k}})) \qquad (3.33)\end{aligned}$$

Burdan görüldüğü gibi

$$\rho_{\mathbf{q}}(\omega) \sim \sum_{\mathbf{k}} C^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}C_{\mathbf{k},\sigma}\delta(\omega-(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\xi_{\mathbf{k}})) \qquad (3.34)$$

(Fig:Spektral rep'deki $\rho_{\mathbf{q}}$ çizimi buraya girecek)

Genel bir Fermiyon operatörü için Green fonksiyonunu yazarsak

$$\begin{aligned}G_{\mathbf{k}}(t-t') &= -\frac{i\Theta(t-t')}{Z}\langle\{F(t),F^{\dagger}(t')\}\rangle \\ &= -\frac{i\Theta(t-t')}{Z}\mathrm{Tr}\{F(t)F^{\dagger}(t')+F^{\dagger}(t')F(t)\} \qquad (3.35)\end{aligned}$$

Hamiltonyenin çözümlerini bildiğimizi varsayıp bu Hamiltonyenin tanımlı olduğu Hilbert uzayında bir birim operatör yazıyoruz.

$$\hat{I} = \sum_{m}|m\rangle\langle m| \qquad (3.36)$$

Böylece Green fonksiyonunu şöyle yazabiliriz,

$$G(t-t') = -\frac{i\Theta(t-t')}{Z}\sum_{m}\langle m|\mathrm{e}^{-\beta H}\{F(t),F^{\dagger}(t')\}|m\rangle \qquad (3.37)$$

$Z = \mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta H}\} = \sum_m \mathrm{e}^{-\beta E_m}$ ifadesini kullanarak

$$\begin{aligned}G(t-t') &= -\frac{i\Theta(t-t')}{Z}\sum_{m}\mathrm{e}^{-\beta E_m}\langle m|F(t)F^{\dagger}(t')+F^{\dagger}(t')F(t)|m\rangle \qquad (3.38) \\ &= -\frac{i\Theta(t-t')}{Z}\sum_{m}\mathrm{e}^{-\beta E_m}\{\langle m|F(t)|n\rangle\langle n|F^{\dagger}(t')|m\rangle+\langle m|F^{\dagger}(t')|n\rangle\langle n|F(t)|m\rangle\}\end{aligned}$$

ve

$$\langle m|F(t)|n\rangle = \langle m|\mathrm{e}^{iHt}F(0)\mathrm{e}^{-iHt}|n\rangle = \mathrm{e}^{i(E_m-E_n)t}\langle m|F(0)|n\rangle \tag{3.39}$$

$\langle m|F(0)|n\rangle = (\hat{F})_{mn}$ olarak gösterirsek

$$\begin{aligned} G(t-t') &= -\frac{i\Theta(t-t')}{Z}\sum_{m,n}\mathrm{e}^{-\beta E_m}\{\mathrm{e}^{i(E_m-E_n)(t-t')}(\hat{F})_{mn}(\hat{F^\dagger})_{nm} \\ &+ \mathrm{e}^{-i(E_m-E_n)(t-t')}(\hat{F^\dagger})_{mn}(\hat{F})_{nm}\} \\ &= -\frac{i\Theta(t-t')}{Z}\sum_{m,n}\mathrm{e}^{-\beta E_m}\mathrm{e}^{i(E_m-E_n)(t-t')}(\hat{F})_{mn}(\hat{F^\dagger})_{nm} \\ &+ \mathrm{e}^{-\beta E_n}\mathrm{e}^{-i(E_m-E_n)(t-t')}(\hat{F^\dagger})_{nm}(\hat{F})_{mn} \end{aligned} \tag{3.40}$$

ikinci toplamda m, n indekslerinin yerini değiştirdikten sonra,

$$G(t-t') = -\frac{i\Theta(t-t')}{Z}\sum_{m,n}\mathrm{e}^{i(E_m-E_n)(t-t')}(\hat{F^\dagger})_{nm}(\hat{F})_{mn}[\mathrm{e}^{-\beta E_n}+\mathrm{e}^{-\beta E_m}] \tag{3.41}$$

$\hat{F^\dagger} = (\hat{F^T})^* = (\hat{F^*})^T$ özelliğini kullanarak,

$$(\hat{F^\dagger})_{nm} = [(\hat{F^*})^T]_{nm} = (\hat{F^*})_{mn} \tag{3.42}$$

Bu sonucu kullanarak şu sonuca ulaşırız

$$(\hat{F^\dagger})_{nm}(\hat{F})_{mn} = (\hat{F^*})_{mn}(\hat{F})_{mn} = |(\hat{F})_{mn}|^2 \tag{3.43}$$

ve en genel durum için şu ifadeyi elde ederiz

$$G(t-t') = -\frac{i\Theta(t-t')}{Z}\sum_{m,n}\mathrm{e}^{i(E_m-E_n)(t-t')}|(\hat{F})_{mn}|^2[\mathrm{e}^{-\beta E_n}+\mathrm{e}^{-\beta E_m}] \tag{3.44}$$

Frekans uzayına geçersek

$$\begin{aligned} G(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t')\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}G(t-t') \qquad (3.45) \\ &= -\frac{i}{2}\int_0^\infty \sum_{m,n}\mathrm{e}^{i(\omega+E_m-E_n)(t-t')}|(\hat{F})_{mn}|^2[\mathrm{e}^{-\beta E_n}+\mathrm{e}^{-\beta E_m}]d(t-t') \end{aligned}$$

Böylece 'real time retarded' Green fonksiyonunu elde ederiz,

$$\tilde{G}^{(R)}(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{m,n}|(\hat{F})_{mn}|^2\frac{(\mathrm{e}^{-\beta E_m}+\mathrm{e}^{-\beta E_n})}{\omega+E_m-E_n+i\delta} \tag{3.46}$$

Aynı şekilde bozonik Green fonksiyonunu da yazabiliriz,

$$\tilde{D}^{(R)}(\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{m,n}|(\hat{F})_{mn}|^2\frac{(\mathrm{e}^{-\beta E_m}-\mathrm{e}^{-\beta E_n})}{\omega+E_m-E_n+i\delta} \tag{3.47}$$

Matsubara formunda ise şöyle buluruz

$$\begin{aligned} G(\tau) &= \frac{-1}{Z}\langle TF(\tau)F^\dagger(0)\rangle \\ &= -\frac{\Theta(\tau)}{Z}\langle F(\tau)F^\dagger(0)\rangle + \frac{\Theta(-\tau)}{Z}\langle F^\dagger(0)F(\tau)\rangle \end{aligned} \tag{3.48}$$

Frekans uzayında

$$\begin{aligned} G(i\omega_n) &= \frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\tau \mathrm{e}^{i\omega_n\tau}G(\tau) \\ &= \frac{1}{Z}\sum_{m,n}|(\hat{F})_{mn}|^2\frac{(\mathrm{e}^{-\beta E_m}+\mathrm{e}^{-\beta E_n})}{i\omega_n+E_m-E_n} \end{aligned} \tag{3.49}$$

Görüyoruz ki Matsubara'dan retarded forma geçmek için $i\omega_n \to \omega + i\delta$ ve advanced forma geçmek için de $i\omega_n \to \omega - i\delta$ transformasyonlarını yapmalıyız.

Eğer $\hat{F}$ yerine $C_{\mathbf{k}}$ operatörünü koyarsak, Green fonksiyonu şu hale gelir.

$$\begin{aligned} G(i\omega_n) &= \frac{1}{Z}\sum_{m,n}\frac{(C_{\mathbf{k}})_{mn}(C_{\mathbf{k}})^*_{mn}(\mathrm{e}^{-\beta E_m}+\mathrm{e}^{-\beta E_n})}{i\omega_n+E_m-E_n} \qquad (3.50) \\ &= \frac{1}{Z}\sum_{m,n}\left[\frac{(C_{\mathbf{k}})_{mn}(C_{\mathbf{k}})^*_{mn}\mathrm{e}^{-\beta E_m}}{i\omega_n+E_m-E_n}+\frac{(C_{\mathbf{k}})_{nm}(C_{\mathbf{k}})^*_{mn}\mathrm{e}^{-\beta E_m}}{i\omega_n+E_n-E_m}\right] \\ &= \frac{1}{Z}\sum_m \mathrm{e}^{-\beta E_m}\left[\sum_n\frac{\langle n|C_{\mathbf{k}}|m\rangle\langle m|C^\dagger_{\mathbf{k}}|n\rangle}{i\omega_n+(E_m-E_n)}+\frac{\langle m|C_{\mathbf{k}}|n\rangle\langle n|C^\dagger_{\mathbf{k}}|m\rangle}{i\omega_n+(E_n-E_m)}\right] \end{aligned}$$

$E_m - E_n = \xi_{\mathbf{k}}$ eşitliğini kullanarak

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{Z}\sum_m \mathrm{e}^{-\beta E_m}\sum_n\frac{1}{(i\omega_p-\xi_{\mathbf{k}})}[\langle m|C^\dagger_{\mathbf{k}}|n\rangle\langle n|C_{\mathbf{k}}|m\rangle+\langle m|C_{\mathbf{k}}|n\rangle\langle n|C^\dagger_{\mathbf{k}}|m\rangle] \\ &= \frac{1}{Z}\sum_m \mathrm{e}^{-\beta E_m}\frac{1}{(i\omega_p-\xi_{\mathbf{k}})}[\langle m|C^\dagger_{\mathbf{k}}C_{\mathbf{k}}|m\rangle+\langle m|C_{\mathbf{k}}C^\dagger_{\mathbf{k}}|m\rangle] \\ &= \frac{1}{Z}\sum_m \mathrm{e}^{-\beta E_m}\frac{1}{(i\omega_p-\xi_{\mathbf{k}})} \end{aligned} \tag{3.51}$$

$\sum_m \mathrm{e}^{-\beta E_m} = Z$ eşitliğiyle

$$G^{(0)}_{\mathbf{k}}(i\omega_p) = \frac{1}{i\omega_p-\xi_{\mathbf{k}}} \tag{3.52}$$

ifadesini elde ederiz. Retarded Green fonksiyonunu ise şu şekilde yazabiliriz,

$$G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\omega)|_R = \frac{1}{\omega-\xi_{\mathbf{k}}+i\delta} \tag{3.53}$$

$\mathcal{L}G^{(A-R)}_x = \delta(x)$ özelliğini kullanırsak görürüz ki

$$\mathrm{Im}\, G^{(0)}_{\mathbf{k}}(\omega) \propto \delta(\omega-\xi_{\mathbf{k}}) \tag{3.54}$$

(Fig:Spektral rep'deki Im G çizimi buraya girecek)

Aynı şekilde bozonik Green fonksiyonu için de

$$\mathrm{Im}\, D_q^{(0)}(\omega) \propto [\delta(\omega - \omega_q) + \delta(\omega + \omega_q)] \tag{3.55}$$

yazabiliriz. (Fig:Spektral rep'deki Im D çizimi buraya girecek)

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{x + i\epsilon} = \mathrm{P}\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x) \tag{3.56}$$

Bu ifadeyi kullanarak

$$G_{\mathbf{k}}^{(0)}(\omega)|_R = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} + i\delta} = \mathrm{P}\left(\frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}}\right) - i\pi\delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) \tag{3.57}$$

yazabiliriz.Fermiyonik spektral fonksiyonu

$$A_{\mathbf{k}}^{(0)}(\omega) = -2\mathrm{Im}\, G_{\mathbf{k}}^{(0)}(\omega) \tag{3.58}$$

bu ifadeye eşitse

$$A_{\mathbf{k}}^{(0)}(\omega) = 2\pi\delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) \tag{3.59}$$

şeklinde bulunur.Bozonik spektral fonksiyonu ise

$$B_{\mathbf{q}}^{(0)}(\omega) = -2\mathrm{Im}\, D_{\mathbf{q}}^{(0)}(\omega) = 2\pi[\delta(\omega - \omega_q) + \delta(\omega + \omega_q)] \tag{3.60}$$

ifadesine eşittir.

?? ifadesini kullanırsak

$$\mathrm{Im}\, G_{\mathbf{k}}^R = \frac{1}{Z}\sum_{m,n} |(\hat{F})_{mn}|^2 (\mathrm{e}^{-\beta E_m} + \mathrm{e}^{-\beta E_n})(-\pi)\delta(\omega + E_m - E_n) \tag{3.61}$$

buluruz ve $\omega = E_n - E_m$

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}}(\omega) &= \frac{2\pi}{Z}\sum_{m,n} |(\hat{F})_{mn}|^2 \mathrm{e}^{-\beta E_m}(1 + \mathrm{e}^{-\beta\omega})\delta(\omega + E_m - E_n) \\ &= \frac{2\pi}{Z}(1 + \mathrm{e}^{-\beta\omega})\sum_{m,n} \mathrm{e}^{-\beta E_m} |(\hat{F})_{mn}|^2 \delta(\omega + E_m - E_n) \end{aligned} \tag{3.62}$$

buluruz. $F = C_{\mathbf{k}}$ için

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_{\mathbf{k}}(\omega) = 1 \tag{3.63}$$

olduğunu gösterebiliriz.

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |C_{mn}|^2 \frac{d\omega}{2\pi}\frac{2\pi}{Z}(1 + \mathrm{e}^{-\beta\omega})\sum_{mn} \mathrm{e}^{-\beta E_m}|C_{mn}|^2\delta(\omega + E_m - E_n)$$

$$
\begin{aligned}
1 &= \frac{1}{Z}\sum_{mn}(1+\mathrm{e}^{-\beta(E_n-E_m)}\mathrm{e}^{-\beta E_m}|C_{mn}|^2 \\
1 &= \frac{1}{Z}\sum_{mn}(\mathrm{e}^{-\beta E_m}\langle m|C_{\mathbf{k}}|n\rangle\langle n|C^{\dagger}_{\mathbf{k}}|m\rangle+\mathrm{e}^{-\beta E_m}\langle n|C_{\mathbf{k}}|m\rangle\langle m|C^{\dagger}_{\mathbf{k}}|n\rangle) \\
1 &= \frac{1}{Z}\sum_{m}\mathrm{e}^{-\beta E_m}\langle m|C_{\mathbf{k}}C^{\dagger}_{\mathbf{k}}+C^{\dagger}_{\mathbf{k}}C_{\mathbf{k}}|m\rangle \qquad (3.64)
\end{aligned}
$$

Yukarıda da görüldüğü gibi eşitlik sağlanıyor. Ayrıca $A_{\mathbf{k}}(\omega)\geq 0$ olduğu doğrudur. Bozonik spektral fonksiyon içinse $\omega>0$ için $B_{\mathbf{q}}>0$ ve $\omega<0$ için $B_{\mathbf{q}}<0$ olur. (Fig:Spektral rep'deki $B_{\mathbf{q}}$ çizimi buraya girecek)

Ayni şekilde aşağıdaki eşitlikler de egzersiz olarak ispatlanabilir.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}B_{\mathbf{q}}(\omega)=1 \qquad (3.65)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}n_F(\omega)A_{\mathbf{k}}(\omega)=n_{\mathbf{k}}=\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\xi_{\mathbf{k}}}+1} \qquad (3.66)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}n_B(\omega)B_{\mathbf{q}}(\omega)=1+2n_{\mathbf{q}} \qquad (3.67)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}n_F(\omega)\omega^2A_{\mathbf{k}}(\omega)=-\langle[H,C^{\dagger}_{\mathbf{k}}][H,C_{\mathbf{k}}]\rangle \qquad (3.68)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}n_B(\omega)\omega B_{\mathbf{q}}(\omega)=\langle A_{\mathbf{q}}[H,A_{-\mathbf{q}}]\rangle \qquad (3.69)$$

3.3 Frekans Toplamı

$S=\sum\limits_{n=-\infty}^{\infty}f(i\omega_n)$ eşitliğinde $i\omega_n=z$ dersek kompleks analizdeki Cauchy integral formülünü

$$\oint\frac{f(z)}{z-z_0}dz=2\pi i f(z_0) \qquad (3.70)$$

kullanarak

$$\oint\sum_m\frac{f(z)}{z-z_m}dz=2\pi i\sum_m f(z_m) \qquad (3.71)$$

yazabiliriz. Burada $z_m=i\omega_m=2m\pi i/\beta$'yı ve $n(z)=\sum\limits_m 1/(z-z_m)$ eşitliğini kullanırsak

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}f(z_m)=\oint\frac{dz}{2\pi i}n(z)f(z) \qquad (3.72)$$

yazabiliriz. Burada $n(z)$ yerine bozonik ise n_B, fermiyonik ise n_F kullanılır.

$$n_B(z) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta z} - 1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{R_m}{z - z_m} + \sum_{n>0} \frac{R_m^{(n)}}{z - z_m^{(n)}} \tag{3.73}$$

şeklinde yazılabilir. Birinci terim tek kutupları gösterir,ikinci terim sıfıra gider. $n_B(z)$'nin kutuplarına bakarsak $\mathrm{e}^{\beta z} - 1 = 0$ ve $z = 2\pi m i/\beta = i\omega_m$ buluruz.Bu durumda R_m'in neye eşit olduğuna bakalım.

$$2\pi i R_m = \oint_{z_m} \frac{dz}{\mathrm{e}^{\beta z} - 1} \tag{3.74}$$

$\omega = z - z_m$ dersek

$$2\pi i R_m = \oint_{\omega=0} \frac{d\omega}{\mathrm{e}^{\beta(\omega + z_m)} - 1} \tag{3.75}$$

$\omega = \rho \mathrm{e}^{i\theta}$ ve $\mathrm{e}^{\beta z_m} = 1$'i kullanarak

$$\begin{aligned} 2\pi i R_m &= \int_0^{2\pi} \frac{i\rho \mathrm{e}^{i\theta} d\theta}{\mathrm{e}^{\beta\rho \mathrm{e}^{i\theta}} \mathrm{e}^{\beta z_m} - 1} \\ &= \lim_{\rho \to 0} \int_0^{2\pi} \frac{i\rho \mathrm{e}^{i\theta} d\theta}{\mathrm{e}^{\beta\rho \mathrm{e}^{i\theta}} - 1} \\ &= \lim_{\rho \to 0} \int_0^{2\pi} \frac{i\rho \mathrm{e}^{i\theta} d\theta}{1 + \beta\rho \mathrm{e}^{i\theta} + \frac{(\beta\rho \mathrm{e}^{i\theta})^2}{2!} \ldots - 1} \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{i}\mathrm{e}^{i\theta} d\theta}{\beta \mathrm{e}^{i\theta}} \\ &= \frac{2\pi i}{\beta} \end{aligned} \tag{3.76}$$

buradan

$$R_m^{(B)} = \frac{1}{\beta} \tag{3.77}$$

buluruz. Aynı şekilde fermiyonlar içinse

$$R_m^{(F)} = -\frac{1}{\beta} \tag{3.78}$$

bulunur.Bu durumda

$$n_B(z) = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z - z_m} \tag{3.79}$$

olur.Denklem 3.72'de bu sonucu kullanırsak

$$\begin{aligned}\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(z_m) &= \oint \frac{dz}{2\pi i}\left[\frac{1}{\beta}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\frac{1}{z-\frac{2m\pi i}{\beta}}\right] f(z) \\ \frac{1}{\beta}\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(z_m) &= \oint \frac{dz}{2\pi i} n_B(z) f(z) \end{aligned} \tag{3.80}$$

sonucuna ulaşırız. (Fig:Frekans toplamındaki pole çizimi konulacak.) Eğer bütün kutuplar kontur içindeyse sonuç sıfır çıkar.

$$\oint_{C_B+C_f} \frac{dz}{2\pi i} n_B(z) f(z) dz = 0 \tag{3.81}$$

$$\oint_{C_B} \frac{dz}{2\pi i} n_B(z) f(z) = \oint_{C_f} \frac{dz}{2\pi i} n_B(z) f(z) = -\frac{1}{\beta}\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(z_m) \tag{3.82}$$

Fermiyonlar içinse

$$-\frac{1}{\beta}\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(z_m) = \oint_{C_F} \frac{dz}{2\pi i} n_F(z) f(z) \tag{3.83}$$

ise

$$\frac{1}{\beta}\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(z_m) = -\oint_{C_F} \frac{dz}{2\pi i} n_F(z) f(z) = \oint_{C_f} \frac{dz}{2\pi i} n_F(z) f(z) \tag{3.84}$$

olur.

3.3.1 Alıştırmalar

1. (Fig:Frekans toplamındaki ilk alıştırmanın çizimi konulacak.)

$$-\frac{1}{\beta}\sum_m D^0(\mathbf{q}, i\omega_n) G^0(\mathbf{p}, i\mathbf{p}_n + i\omega_m) = \frac{N_q + n_F(\xi_p)}{i\mathbf{p}_n - \xi_p + \omega_q} + \frac{N_q + 1 - n_F(\xi_p)}{i\mathbf{p}_n - \xi_p - \omega_q} \tag{3.85}$$

olduğunu gösterelim. $f(z) = D^0(\mathbf{q}, z) G^0(\mathbf{p}, i\mathbf{p}_n + z)$ dersek,
(Fig:Frekans toplamındaki ilk alıştırmanın 2. çizimi konulacak.)

$$-\frac{1}{\beta}\sum_m f(z_m) = \oint_{C_f} \frac{dz}{2\pi i}\frac{1}{e^{\beta z}-1}\frac{2\omega_q}{z^2-{\omega_q}^2}\frac{1}{i\mathbf{p}_n + z - \xi_p} \tag{3.86}$$

Kısmi kesirler (partial fractions) yöntemini uygulayınca görürüz ki

$$\frac{2\omega_q}{z^2-{\omega_q}^2}\frac{1}{i\mathbf{p}_n + z - \xi_p} = \frac{\frac{1}{i\mathbf{p}_n+\omega_q-\xi_p}}{z-\omega_q} - \frac{\frac{1}{i\mathbf{p}_n-\omega_q-\xi_p}}{z+\omega_q} + \frac{\frac{2\omega_q}{(\xi_p - i\mathbf{p}_n)^2-{\omega_q}^2}}{z-\xi_p+i\mathbf{p}_n} \tag{3.87}$$

kontur integrali kolayca alırız ve şu sonuca ulaşırız

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\beta}\sum_m f(z_m) &= \frac{1}{i\mathbf{p}_n+\omega_q-\xi_p}\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\omega_q}-1} - \frac{1}{i\mathbf{p}_n-\omega_q-\xi_p}\frac{1}{\mathrm{e}^{-\beta\omega_q}-1} \\ &+ \frac{2\omega_q}{(\xi_p-i\mathbf{p}_n)^2-\omega_q{}^2}\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\xi_p-i\mathbf{p}_n)}-1} \end{aligned} \tag{3.88}$$

$1/(\mathrm{e}^{\beta\omega_q}-1) = N_q$ ve $1/(\mathrm{e}^{-\beta\omega_q}-1) = -(N_q+1)$ eşitliklerini ve $\mathrm{e}^{i\mathbf{p}_n} = -1$ sonucunu kullanarak

$$-\frac{1}{\beta}\sum_m f(z_m) = \frac{N_q}{i\mathbf{p}_n+\omega_q-\xi_p} + \frac{N_q+1}{i\mathbf{p}_n-\omega_q-\xi_p} - \frac{2\omega_q n_F(\xi_p)}{(\xi_p-i\mathbf{p}_n)^2-\omega_q{}^2} \tag{3.89}$$

buluruz. Son terime tekrar kısmi kesir yöntemini uygularsak

$$\frac{2\omega_q n_F(\xi_p)}{(\xi_p-i\mathbf{p}_n)^2-\omega_q{}^2} = \frac{n_F(\xi_p)}{\xi_p-i\mathbf{p}_n-\omega_q} - \frac{n_F(\xi_p)}{\xi_p-i\mathbf{p}_n+\omega_q} \tag{3.90}$$

buluruz ve sonuca ulaşırız.

$$-\frac{1}{\beta}\sum_m f(z_m) = \frac{N_q+n_F(\xi_p)}{i\mathbf{p}_n-\xi_p+\omega_q} + \frac{N_q+1-n_F(\xi_p)}{i\mathbf{p}_n-\xi_p-\omega_q} \tag{3.91}$$

Eğer $T = 0$ için hesap yapsaydık, $N_q = 0$, $n_F = \Theta(\xi_p)$ olacaktı ve toplam frekans üzerinden integrale dönüşecekti $\frac{1}{\beta}\sum_m \to \int \frac{d\omega}{2\pi}$.

2.

$$\frac{1}{\beta}\sum_n G^0(\mathbf{p}, ip_n)G^0(\mathbf{k}, ip_n+i\omega_m) = \frac{n_F(\xi_p)-n_F(\xi_k)}{i\omega_m+\xi_p-\xi_k} \tag{3.92}$$

olduğunu gösterelim.

$$\begin{aligned} f(z) &= G^0(\mathbf{p}, z)G^0(\mathbf{k}, z+i\omega_m) \\ &= \frac{1}{z-\xi_p}\frac{1}{z+i\omega_m-\xi_k} \end{aligned} \tag{3.93}$$

Böylece

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta}\sum_n f(z_m) &= \oint_{C_f}\frac{dz}{2\pi i}n_F(z)\left[\frac{\frac{1}{\xi_p-\xi_k+i\omega_n}}{z-z_p} + \frac{\frac{-1}{\xi_p-\xi_k+i\omega_n}}{z-i\omega_n-\xi_k}\right] \\ &= \frac{1}{i\omega_n+\xi_p-\xi_k}\left[\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\xi_p}+1} - \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\xi_k-i\omega_n)}+1}\right] \\ &= \frac{n_F(\xi_p)-n_f(\xi_k)}{i\omega_n+\xi_p-\xi_k} \end{aligned} \tag{3.94}$$

eşitliği ispatlamış oluruz.

3.4 Tek Polaron Problemi

Polaron:Elektron-fonon quasiparticle

Hamiltonyen

$$H = \sum_k \xi_k C^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_q (n_{\mathbf{q}} + 1/2) + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} g_q C^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}(a_{\mathbf{q}} + a^\dagger_{-\mathbf{q}}) \quad (3.95)$$

eşittir. Burada ilk terim elektron için, ikincisi phonon için ve son terimde elektron-phonon etkileşimi içindir. Frochlick elektron-phonon etkileşimini kullanıyoruz.

(Fig:Polaron'daki Frochlick çizimleri girecek)

(Fig:Polaron self enerji çizimi konacak.)

Elektronun öz enerjisini $T = 0$ için şöyle yazabiliriz

$$\sum(\mathbf{p},\omega) = \sum_{\mathbf{q}} g_q^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} D^{(0)}(\mathbf{q},\omega') G^{(0)}(\mathbf{p}+\mathbf{q},\omega+\omega') \quad (3.96)$$

Eğer $T \neq 0$

$$\sum(\mathbf{p}, ip_m) = \sum_{\mathbf{q}} g_q^2 \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} D^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n) G^{(0)}(\mathbf{p}+\mathbf{q}, ip_m + i\omega_n) \quad (3.97)$$

Frekans toplamında elde ettiğimiz denklem 3.85'i kullanarak şu sonuca ulaşırız.

$$\sum(\mathbf{p}, ip_m) = \sum_{\mathbf{q}} g_q^2 \left[\frac{N_q + n_F(\xi_{p+q})}{ip_m + \omega_q - \xi_{p+q}} + \frac{N_q + 1 - n_F(\xi_{p+q})}{ip_m - \omega_q - \xi_{p+q}} \right] \quad (3.98)$$

Retarded öz enerjiyi yazmak için $ip_m \to \omega + i\delta$ dönüşümünü yapmamız gerekir.Bildiğimiz gibi $\xi_{\mathbf{k}} = \frac{p^2}{2m} - \mu$ ve $n_F = 0$ tek elektrona denk gelir. $T = 0$sıcaklığında $N_q = 0$'dır. Bu durumda tek bir polaron için Hamiltonyen

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_q (n_q + 1/2) + \sum_{\mathbf{q}} g_q^2 (a_{\mathbf{q}} + a^\dagger_{-\mathbf{q}}) \quad (3.99)$$

olur.Ve

$$\sum^R(\mathbf{p}, ip_m) = \sum_{\mathbf{q}} g_q^2 \frac{1}{ip_m - \omega_q - \xi_{p+q} + i\delta} \quad (3.100)$$

ise buradan efektif kütleyi bulabiliriz.Hatırlarsak bulduğumuz gibi serbest elektron Green fonksiyonu ve spektral fonksiyonu şöyleydi

$$G^{(0)R} = \frac{1}{\omega - \xi_p + i\delta} \quad (3.101)$$

$$A_p(\omega) = -2\mathrm{Im}\, G = 2\pi\delta(\omega - \xi_p) \quad (3.102)$$

Polaron içinse Green fonksiyonunu

$$G^R = \frac{1}{\omega - \xi_p + \sum^R(\mathbf{p},\omega)} \tag{3.103}$$

eşittir.

(Fig:Polaron G çizimleri konacak.)
RPA uygularsak

$$G(\mathbf{p},\omega) = G^0(\mathbf{p},\omega) + G^0(\mathbf{p},\omega)\sum(\mathbf{p},\omega)G(\mathbf{p},\omega) \tag{3.104}$$

yazabiliriz. Buradan Green fonksiyonunu elde edbiliriz.

$$G(\mathbf{p},\omega) = \frac{G^0(\mathbf{p},\omega)}{1 - G^0(\mathbf{p},\omega)\sum(\mathbf{p},\omega)} \tag{3.105}$$

Serbest Green fonksiyonu için bulduğumuz sonucu burada kullanırsak

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p},\omega) &= \frac{\frac{1}{\omega-\xi_{\mathbf{p}}}}{1 - \frac{1}{\omega-\xi_{\mathbf{p}}}\sum(\mathbf{p},\omega)} \\ &= \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \sum(\mathbf{p},\omega)} \\ &= \frac{1}{\omega - E_{\mathbf{p}}} \end{aligned} \tag{3.106}$$

burada

$$E_{\mathbf{p}} = \xi_{\mathbf{p}} + \sum(\mathbf{p},\omega) \tag{3.107}$$

Brilliouin-Wigner eşitliğidir.

Retarded Green fonksiyonu ise

$$G^R = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \sum^R(\mathbf{p},\omega + i\delta) + i\delta} \tag{3.108}$$

şeklinde yazılır.

$\sum^R(\mathbf{p},\omega + i\delta) = \sum^R(\mathbf{p},\omega - i\delta) \Rightarrow \sum^R(\mathbf{p},\omega)$
Im $\sum = 0$ ise

$$\begin{aligned} A(\mathbf{p},\omega) &= -2\mathrm{Im}\,\frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \sum^R(\mathbf{p},\omega) + i\delta} \\ &= 2\pi\delta(\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \sum^R(\mathbf{p},\omega)) \end{aligned} \tag{3.109}$$

$\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \sum^R(\mathbf{p},\omega) = 0$ ise $\xi_{\mathbf{p}}$ Fermi yüzeyindedir ve $\epsilon_{\mathbf{p}} \to -\mu$ olur. Bu durumda

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{p}} &= \xi_{\mathbf{p}} + \sum(\mathbf{p},E_{\mathbf{p}}) \\ E_{\mathbf{p}} - \mu &= \epsilon_{\mathbf{p}} - \mu + \sum(\mathbf{p},E_{\mathbf{p}} - \mu) \\ E_{\mathbf{p}} &= \epsilon_{\mathbf{p}} + \sum(\mathbf{p},E_{\mathbf{p}} - \mu) \end{aligned} \tag{3.110}$$

böylece quasiparticle picture elde edilir. Efektif kütleyi bulmak için

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{p}} &= \xi_{\mathbf{p}} + \Delta E_{\mathbf{p}} \\ &= \frac{p^2}{2m^*} + O(p^4) + ... \\ &= \epsilon_{\mathbf{p}} \frac{m}{m^*} + O(p^4) \end{aligned} \tag{3.111}$$

buradan efektif kütle

$$\frac{m}{m^*} = \left. \frac{\partial E_{\mathbf{p}}}{\partial \epsilon_{\mathbf{p}}} \right|_{\mathbf{p}\to 0} \tag{3.112}$$

sonuçta

$$\frac{m}{m^*} = \left. \frac{1 + \partial \sum^R / \partial \epsilon_{\mathbf{p}}}{1 - \partial \sum^R / \partial \epsilon_{\mathbf{p}}} \right|_{\mathbf{p}\to 0} \tag{3.113}$$

buluruz.

Im $\sum \neq 0$ ise

$$\begin{aligned} A(\mathbf{p}, \omega) &= -2\mathrm{Im} \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \sum^R(\mathbf{p}, \omega) + i\delta} \\ &= -2\mathrm{Im} \frac{(\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \mathrm{Re} \sum^R) + i\mathrm{Im} \sum^R}{(\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \mathrm{Re} \sum^R)^2 + (i\mathrm{Im} \sum^R)^2} \\ &= \frac{-2\mathrm{Im} \sum^R}{(\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \mathrm{Re} \sum^R)^2 + (i\mathrm{Im} \sum^R)^2} \end{aligned} \tag{3.114}$$

görüldüğü gibi Lorentzyen çıkar.

$a(\mathbf{p}, \omega) \geq 0$ ise Im $\sum^R < 0$ olur.

$$\begin{aligned} \lim_{\mathrm{Im} \sum \to 0} A(\mathbf{p}, \omega) &= 2 \lim_{\epsilon \to 0} \frac{|\epsilon|}{(\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \mathrm{Re} \sum^R)^2 + |\epsilon|^2} \\ &= 2\pi\delta(\omega - \xi_{\mathbf{p}} - \mathrm{Re} \sum^R) \end{aligned} \tag{3.115}$$

(Fig:Polaron grafik çizimi konacak.)

$E_{\mathbf{p}}$ her zaman aynı momentumda değildir $E_{\mathbf{p}} \to E_{\mathbf{p}_1}$ ve bundan yarızaman(lifetime) bulunabilir.

Optik fononlar için efektif kütle hesabı yapalım. Bu durumda $\omega_{\mathbf{q}} \sim \omega_0$ ve $g_q \sim \frac{1}{|q|}$ kullanırız.

$$\begin{aligned} \sum^R(\mathbf{p}, \omega) &= \sum_{\mathbf{q}} g_q^2 \frac{1}{\omega - \omega_q - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + i\delta} \\ &= \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{|g_0|^2}{q^2} \frac{1}{\omega - \omega_0 - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + i\delta} \end{aligned} \tag{3.116}$$

(Fig:Polaron bölümündeki self-energy diagramı çizimi konacak.)

$$\sum(\mathbf{p},\epsilon_{\mathbf{p}}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{|g_0|^2}{q^2}\frac{1}{\omega-\omega_0-\xi_{\mathbf{p+q}}+i\delta} \tag{3.117}$$

Reel parçayı hesaplamak için $\mathbf{p} \parallel \mathbf{e}_z$ alınır ve $\xi_{\mathbf{p+q}} - \xi_{\mathbf{q}} = \frac{1)}{2m}(q^2+2\mathbf{p}.\mathbf{q})$ eşitliği kullanılır

$$\begin{aligned}
\mathrm{Re}\sum &= -\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{|g_0|^2}{q^2}\frac{1}{\frac{1}{2m}(q^2+2\mathbf{p}.\mathbf{q})+\omega_0} \\
&= -\int_0^\infty \frac{q^2dq}{q^2}\int_{-1}^{1}\frac{d(\cos\theta)}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi} d\phi \frac{|g_0|^2}{\frac{1}{2m}(q^2+2pq\cos\theta)+\omega_0} \\
&= -\frac{g_0^2}{(2\pi)^2}\int_0^\infty dq\int_{-1}^{1} dx \frac{1}{\frac{q^2}{2m}+\frac{pqx}{2m}+\omega_0}
\end{aligned} \tag{3.118}$$

burada $x = \cos\theta$ dönüşümü yapıldı. İntegralin içindeki fonksiyon çift olduğu için q integralinin limitlerini değiştirebiliriz.

$$\mathrm{Re}\sum = -\frac{g_0^2}{2(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty} dq\int_{-1}^{1} dx \frac{1}{\frac{q^2}{2m}+\frac{pqx}{2m}+\omega_0} \tag{3.119}$$

Burada $y = \frac{q+px}{\sqrt{2m}}$ dönüşümünü yaparsak görürüz ki $\frac{q^2}{2m}+\frac{pqx}{2m} = y^2 - \epsilon_p x^2$ ve $dq = \sqrt{2m}\,dy$ olur.

$$\mathrm{Re}\sum = -\frac{g_0^2}{8\pi^2}\int_{-1}^{1} dx\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{2m}\,dy\frac{1}{y^2-\epsilon_p x^2+\omega_0} \tag{3.120}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dy}{y+A} = \frac{\pi\Theta(A)}{\sqrt{A}} \tag{3.121}$$

integral eşitliğinde $A = \omega_0 - \epsilon_p x^2$ denilirse Re $\sum$ için sonuca ulaşılır. $x^2 \leq 1$ ise $A > \omega_0 - \epsilon_p$ olur ve $\omega_0 - \epsilon_p > 0$ durumunda

$$\mathrm{Re}\sum = -\frac{\alpha\omega^{3/2}}{\sqrt{\epsilon_p}}\sin^{-1}\left(\sqrt{\frac{\epsilon_p}{\omega_0}}\right)\Theta(\omega_0-\epsilon_p) \tag{3.122}$$

burada $\alpha = \frac{g_0^2\sqrt{2m}}{4\pi(\hbar\omega_0)^{3/2}}$ boyutsuz elektron-fonon coupling sabitidir.

Im $\sum \to 0$ ise

$$E_{\mathbf{p}} = \epsilon_{\mathbf{p}} + \mathrm{Re}\sum^{R}(\mathbf{p},E_{\mathbf{p}}) \tag{3.123}$$

$\left.\frac{\partial \sum^R}{\partial \epsilon_p}\right|_{\mathbf{p}\to 0, \epsilon_p \to 0}$ buradan $\frac{m}{m^*}$'a ulaşabiliriz.

$$\sin^{-1} x = x - \frac{x^3}{3} + ... \tag{3.124}$$

açılımını kullanırsak

$$\begin{aligned} \mathrm{Re} \sum^R &= -\alpha\omega_0^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_p}} \left[\sqrt{\frac{\epsilon_p}{\omega_0}} \frac{1}{3} \left(\frac{\epsilon_p}{\omega_0}\right)^{3/2} + O(\epsilon_p^{5/2}) \right] \\ &= -\alpha\omega_0 + \frac{\alpha\epsilon_p}{3} + O(\epsilon_p^2) \end{aligned} \tag{3.125}$$

buradan

$$\left.\frac{\partial \sum^R}{\partial \epsilon_p}\right|_{\mathbf{p}\to 0} = -\frac{\alpha}{6} \tag{3.126}$$

elde ederiz. Efektif kütle

$$\frac{m}{m^*} = \frac{1 - \frac{\alpha}{6}}{1 + \frac{\alpha}{6}} \tag{3.127}$$

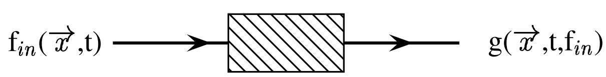
eşittir. Küçük *alpha* değerleri için

$$\frac{m}{m^*} \simeq 1 - \frac{\alpha}{6} \tag{3.128}$$

bulunur. $\alpha > 0$ için $m^* > m$ olur. Bu durum polaron lokalizasyonuna denk gelir.

Bölüm 4

Kubo (Doğrusal Tepki) Teorisi



Transfer foksiyonu,

$$\left.\frac{\partial g}{\partial f_{in}}\right|_{f_{in}\to 0} \tag{4.1}$$

şeklinde tanımlanır. Burada g ve f_{in} yerine sırasıyla

- Akım (**J**) ve elektriksel alan (**E**) konulduğunda elektriksel iletkenlik, ⟨akım-akım korelasyon fonksiyonu⟩

$$\sigma_{\alpha,\beta}(\mathbf{q},\omega) = \left.\frac{\partial J_\alpha}{\partial E_\beta}\right|_{E\to 0} \tag{4.2}$$

- Manyetizasyon (**M**) ve manyetik alan (**B**) konulduğunda manyetik duygunluk,
⟨yük-yük korelasyon fonksiyonu⟩

$$\chi_{\alpha,\beta}(\mathbf{q},\omega) = \left.\frac{\partial_\alpha M}{\partial_\beta B_{ex}}\right|_{B_{ex}\to 0} \tag{4.3}$$

elde edilir.

4.1 Elektriksel İletkenlik Tanımı

Monokromatik elektriksel alan için

$$\mathbf{E}_T = \mathbf{E}_0\, e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} \tag{4.4}$$

$$\mathbf{A} = -i\frac{c}{\omega}\mathbf{E}_T \tag{4.5}$$

olup, etkileşim Hamiltonyeni

$$H_{int} = -\frac{1}{c}\int \mathbf{A}(\mathbf{r},t)\,\mathbf{J}(\mathbf{r},t)\,d\mathbf{r} \tag{4.6}$$

$$= \frac{i}{\omega}\int \mathbf{E}(\mathbf{r},t)\,\mathbf{J}(\mathbf{r},t)\,d\mathbf{r} \tag{4.7}$$

olarak tanımlanır.

$$\langle\psi|J_\alpha(\mathbf{r},t)|\psi\rangle = \langle\tilde{\psi}|\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t)|\tilde{\psi}\rangle \tag{4.8}$$

$$= \langle\phi_0|S(-\infty,t)\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t)S(t,-\infty)|\phi_0\rangle \tag{4.9}$$

$$= \langle\phi_0|S(\infty,t)\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t)S(t,\infty)|\phi_0\rangle \tag{4.10}$$

Burada $|\phi_0\rangle$, sistemin $t \to \pm\infty$ daki taban seviyesi, $S(-\infty,t)$ ise S Matrisi'dir:

$$S(-\infty,t) = T\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\tilde{H}_{int}(t')\,dt'\right\} \tag{4.11}$$

$$\approx 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\tilde{H}_{int}(t')\,dt' \tag{4.12}$$

Dolayısıyla,

$$\langle J_\alpha(\mathbf{r},t)\rangle = \langle\phi_0|\left[1+\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\tilde{H}_{int}(t')dt'\right]\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t) \tag{4.13}$$

$$\times \left[1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\tilde{H}_{int}(t'')dt''\right]|\phi_0\rangle \tag{4.14}$$

$$= \langle\phi_0|\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t)|\phi_0\rangle+\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\langle[\tilde{H}_{int}(t'),\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t)]\rangle_0 \tag{4.15}$$

ilk terim sıfır vereceğinden,

$$\langle J_\alpha(\mathbf{r},t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\frac{i}{\omega}\int d\mathbf{r}' E_\beta(\mathbf{r}',t')_0\langle[\tilde{J}_\beta(\mathbf{r}',t'),\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t)]\rangle_0 \tag{4.16}$$

$$= -\frac{1}{\hbar\omega}(E_o)_\beta\int_{-\infty}^{t}dt'\int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'-\omega t')}\langle[\tilde{J}_\beta(\mathbf{r}',t'),\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t)]\rangle_0 \tag{4.17}$$

$$= -\frac{E_\beta(\mathbf{r},t)}{\hbar\omega}\int_{-\infty}^{\infty}dt' e^{i\omega(t'-t)} \tag{4.18}$$

$$\int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}\Theta(t-t')\langle[\tilde{J}_\beta(\mathbf{r}',t'),\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t)]\rangle_0 \tag{4.19}$$

İntegral içindeki $\langle[\tilde{J}_\beta(\mathbf{r}',t'),\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t)]\rangle_0$ ifadesi $(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$nin fonksiyonu olmalıdır. Fourier tarnsformasyonu uygulayarak,

$$J_\alpha(\mathbf{q},t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} J_\alpha(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} \tag{4.20}$$

ve

$$\begin{aligned}
\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) &= -\frac{1}{\hbar\omega}\int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\Theta(t-t')\langle\Big[\tilde{J}_\beta(-\mathbf{q},t'),\tilde{J}_\alpha(\mathbf{q},t)\Big]\rangle & (4.21)\\
&= -\frac{1}{\hbar\omega}\int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\Theta(t-t')\langle\Big[\tilde{J}_\beta^\dagger(\mathbf{q},t'),\tilde{J}_\alpha(\mathbf{q},t)\Big]\rangle & (4.22)
\end{aligned}$$

yazılabilir.

$$\begin{aligned}
\tilde{J}_\alpha(\mathbf{r},t) &\sim \frac{i\hbar}{2m}\left[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\frac{\partial}{\partial r_\alpha}\hat{\psi}(\mathbf{r},t), \frac{\partial\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)}{\partial r_\alpha}\hat{\psi}(\mathbf{r},t)\right] & (4.23)\\
\tilde{J}_\alpha(\mathbf{q},t) &\sim \sum_{\mathbf{p},\sigma}\left(\mathbf{p}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right) c^\dagger_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}c_{\mathbf{p},\sigma} & (4.24)
\end{aligned}$$

Retarded Bozonik Green Fonksiyonu

$$-i\Theta(t-t')\langle\Big[\tilde{U}^\dagger(t'),\tilde{U}(t)\Big]\rangle \tag{4.25}$$

şeklinde tanımlandığına göre $U \to J_\beta(\mathbf{q})$

$$\Pi^{Ret}_{\alpha,\beta}(\mathbf{q},t-t') = -i\Theta(t-t')\langle\Big[\tilde{J}^\dagger_\beta(\mathbf{q},t'),\tilde{J}_\alpha(\mathbf{q},t)\Big]\rangle, \tag{4.26}$$

dolayısıyla

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) = \frac{i}{\hbar\omega}\int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\Pi^{Ret}_{\alpha\beta}(\mathbf{q},t-t') \tag{4.27}$$

$t-t'=u$ değişken değişimyle

$$\begin{aligned}
\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) &= -\frac{i}{\hbar\omega}\int_{-\infty}^{\infty} du \mathrm{e}^{i\omega u}\Pi^{Ret}_{\alpha\beta}(\mathbf{q},u) & (4.28)\\
&= -\frac{i}{\hbar\omega}\Pi^{Ret}_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) & (4.29)
\end{aligned}$$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{i}{\hbar\omega}\Pi^{Ret}_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega+i\delta) \tag{4.30}$$

AC elektriksel iletkenlik ifadesini elde etmiş oluruz.

4.1.1 DC Limiti

Elektriksel iletkenlik fonksiyonun doğru akım değeri, alternatif akım fonksiyonunun $\omega \to 0$ ve $q \to 0$ limiti olarak tanımlanır.

$$\sigma_{\alpha\beta}^{DC}(\mathbf{q},\omega) = \lim_{\omega\to 0}\lim_{\mathbf{q}\to 0}\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) \tag{4.31}$$

şeklinde tanımlanır.

Burada $J_\alpha(\mathbf{q},\omega) = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)E_\beta(\mathbf{q},\omega)$ ve $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) = |\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)|\mathrm{e}^{i\theta(\mathbf{q},\omega)}$ şeklinde yazılır ve

$$\Re\left[\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)\right] = -\frac{i}{\hbar\omega}\Im\left[\Pi_{\alpha\beta}^{Ret}(\mathbf{q},\omega)\right] \tag{4.32}$$

$$\Im\left[\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)\right] = \frac{1}{\hbar\omega}\Re\left[\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)\right] \tag{4.33}$$

bağıntıları kullanılarak

$$\Pi_{\alpha\beta}^{Ret}(\mathbf{q},\tau) = (\Pi_{\alpha\beta}^{Adv}(\mathbf{q},-\tau))^* \tag{4.34}$$

ilişkisi ve $\sigma_{\alpha\beta}$ nın Hermitik olduğu gösterilebilir.

DC iletkenlik fonksiyonunu incelemek için AC fonksiyonunun sırasıyla $\mathbf{q}\to 0$ ve $\omega \to 0$ limitlerini alacağız. Akım-akım korelasyon fonksiyonu

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{n,m}\langle n|J_\alpha^\dagger(\mathbf{q},0)|m\rangle\langle m|J_\beta(\mathbf{q},\omega)|n\rangle\frac{\mathrm{e}^{-\beta E_n}-\mathrm{e}^{-\beta E_m}}{E_n-E_m+\omega} \tag{4.35}$$

olduğuna göre,

$$\Pi_{\alpha\beta}(0,i\omega_n) = \frac{1}{Z}\sum_{n,m}\langle n|J_\alpha^\dagger(0)|m\rangle\langle m|J_\beta(0)|n\rangle\frac{\mathrm{e}^{-\beta E_n}-\mathrm{e}^{-\beta E_m}}{E_n-E_m+i\omega_n} \tag{4.36}$$

Analitik sürekliliği ($i\omega_n \to \omega + i\delta$) kullanarak yukarıdaki ifadenin gerçel ve sanal kısımları

$$\mathrm{Re}\,\Pi_{\alpha\beta}(0,\omega+i\delta) = \frac{1}{Z}\sum_{n,m}\langle n|J_\alpha^\dagger|m\rangle\langle m|J_\beta|n\rangle \tag{4.37}$$

$$\times\ \frac{\mathrm{e}^{-\beta E_n}-\mathrm{e}^{-\beta E_m}}{E_n-E_m+\omega} \tag{4.38}$$

$$\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta}(0,\omega+i\delta) = -\frac{\pi}{Z}\sum_{n,m}\langle n|J_\alpha^\dagger|m\rangle\langle m|J_\beta|n\rangle \tag{4.39}$$

$$\times\ (\mathrm{e}^{-\beta E_n}-\mathrm{e}^{-\beta E_m})\delta(E_n-E_m+\omega) \tag{4.40}$$

olarak elde edilir. Akım operatöründe de $\mathbf{q}$ yerine 0 koyduğumuzda

$$J(\mathbf{q},t) = \sum_{\mathbf{p}}\left(\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p},\sigma} \tag{4.41}$$

olduğundan

$$J(0,t) = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} c^{\dagger}_{\mathbf{p},\sigma} c_{\mathbf{p},\sigma}, \tag{4.42}$$

dolayısıyla

$$\langle m|J_\beta|n\rangle \sim \delta_{nm} = \delta(E_n - E_m) \tag{4.43}$$

ve

$$\mathrm{Re}\,\Pi_{\alpha\beta}(0,\omega) = 0 \tag{4.44}$$

bulunur. Sanal kısım ise şöyle hesaplanır:

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta}(0,\omega+i\delta) = & -\frac{\pi}{Z}\sum_{nm}\langle n|J^{\dagger}_{\alpha}|m\rangle\langle m|J_\beta|n\rangle \mathrm{e}^{-\beta E_n} & (4.45) \\ & \times\ (1-\mathrm{e}^{\beta(E_m-E_n)})\delta(E_n - E_m + \omega) & (4.46) \end{aligned}$$

Parantez içindeki üstel fonksiyonda $E_n - E_m = -\omega$ değişimini yaparak

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta}(0,\omega+i\delta) = -\frac{\pi(1-\mathrm{e}^{-\beta\omega})}{Z} & \sum_{nm} \langle n|J^{\dagger}_{\alpha}|m\rangle\langle m|J_\beta|n\rangle & (4.47) \\ & \times\ \mathrm{e}^{-\beta E_n}\delta(E_n - E_m + \omega) & (4.48) \end{aligned}$$

Şimdi de $\omega \to 0$ limitini alarak, DC iletkenliğini $\left(\lim\limits_{\omega\to 0}\frac{1-\mathrm{e}^{-\beta\omega}}{\omega} = \beta\right.$ kullanarak)

$$\begin{aligned} \sigma^{DC}_{\alpha\beta} &= \lim_{\omega\to 0}\frac{\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta}}{\omega} & (4.49) \\ &= -\frac{\pi\beta}{Z}\sum_{nm}\langle n|J^{\dagger}_{\alpha}|m\rangle\langle m|J_\beta|n\rangle \mathrm{e}^{-\beta E_n}\delta(E_n - E_m) & (4.50) \end{aligned}$$

olarak buluruz.

4.2 Elektriksel İletkenlik Hesabı

AC iletkenliği tanımı

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{i}{\omega}\Pi^{(R)}_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega), \tag{4.51}$$

buna göre iletkenliğin gerçel kısmı

$$\mathrm{Re}\,\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{1}{\omega}\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega), \tag{4.52}$$

şeklindedir. Akım $J \sim env$ ile orantılıdır. $e = 1$ kabul ettiğimizde

$$J_\alpha(\mathbf{q},t) = \frac{1}{m}\sum_{\mathbf{p},\sigma}\left(\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \hat{c}^{+}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}(t)\hat{c}_{\mathbf{p},\sigma}(t) \tag{4.53}$$

Korelasyon fonksiyonunun Fourier dönüştürülmüş halindeki

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt'\, \mathrm{e}^{i\omega(t-t')} \underbrace{-i\Theta(t-t')\langle[J_\alpha^+(\mathbf{q},t), J_\beta(\mathbf{q},t')]\rangle}_{\Pi_{\alpha\beta}^{(R)}(\mathbf{q},t-t')} \tag{4.54}$$

$\Pi_{\alpha\beta}^{(R)}$ fonksiyonunu yaratma-yoketme operatörleri cinsinden açalım.

$$-i\Theta(t-t') \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'} \underbrace{\langle[\hat{c}^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(t)\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}(t)\hat{c}^+_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}(t')\hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}(t')]\rangle} \frac{\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \left(\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2} \tag{4.55}$$

$$P^{(1)}(\mathbf{q},\omega) \sim \underbrace{2}_{\text{spin index}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})-n(\xi_{\mathbf{k}})}{\omega+\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}-\xi_{\mathbf{k}}} \tag{4.56}$$

(4.57)

Dolayısıyla

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(R)}(\mathbf{q},\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2} 2\frac{n^F(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})-n^F(\xi_{\mathbf{k}})}{\omega+\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}-\xi_{\mathbf{k}}+i\delta} \tag{4.58}$$

$$\mathrm{Re}\,\Pi_{\alpha\beta}^{(R)}(\mathbf{q},\omega) = 2\sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2} \frac{n^F(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})-n^F(\xi_{\mathbf{k}})}{\omega+\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}-\xi_{\mathbf{k}}} \tag{4.59}$$

$$\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta}^{(R)}(\mathbf{q},\omega) = -\pi\sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2} \left[n^F(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})-n^F(\xi_{\mathbf{k}})\right] \tag{4.60}$$

$$\times\ \delta(\omega+\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}-\xi_{\mathbf{k}}) \tag{4.61}$$

$T = 0$ sıcaklığında elektronların dağılımı teta fonksiyonuyla değiştirilebilir $n^F(\xi_{\mathbf{k}}) = \Theta(\xi_{\mathbf{k}})$. Gerçel kısımdaki $\mathbf{k}$ toplamına $\mathbf{k} \to \mathbf{k}+\mathbf{q}$ degişimini uygularsak toplam aşağıdaki hale dönüşür.

$$\sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2} \frac{n^F(\xi_{\mathbf{k}})}{\omega+\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} - \frac{\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2} \frac{n^F(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\omega+\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) \tag{4.62}$$

Şimdi de, ikinci terimde $\mathbf{k}+\mathbf{q} \to -\mathbf{k}$ dönüşümünü uygulayalım:

$$\sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2} \frac{n^F(\xi_{\mathbf{k}})}{\omega+\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} - \frac{\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2} \frac{n^F(\xi_{-\mathbf{k}})}{\omega+\xi_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}-\xi_{-\mathbf{k}}} \right) \tag{4.63}$$

Burada $\xi_{\mathbf{k}}$ enerjisinin değeri $\mathbf{k}$ momentumunun işaretinden bağımsız olduğunda ($\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{-\mathbf{k}} = -\mu + \mathbf{k}^2/2m$), iki terimi birleştirerek

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha \left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2} n^F(\xi_{\mathbf{k}}) \left(\frac{1}{\omega+\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} - \frac{1}{\omega+\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\xi_{-\mathbf{k}}} \right) \tag{4.64}$$

yazabilir ve $\sum_{\mathbf{k}}$ toplamını $V/(2\pi)^3 \int d\mathbf{k}$ integraline dönüştürebiliriz. Sonuç olarak,

$$\mathrm{Re}\,\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}\frac{\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta}{m^2}\Theta(-\xi_{\mathbf{k}})\left(\frac{1}{\omega+\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}-\frac{1}{\omega+\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\xi_{-\mathbf{k}}}\right) \tag{4.65}$$

Eğer sistem tam rotasyonel simetriye sahip ise, yani Fermi yüzeyi bir küre ise akım-akım korelasyonu diyagonal olur:

$$\Pi_{xy} = \Pi_{yz} = \Pi_{zx} = 0 \tag{4.66}$$
$$\Pi_{xx} = \Pi_{yy} = \Pi_{zz} \tag{4.67}$$
$$\Pi_{xx} = \frac{1}{3}(\Pi_{xx}+\Pi_{yy}+\Pi_{zz}) \tag{4.68}$$

$$\mathrm{Re}\,\Pi_{xx} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}\frac{\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)\cdot\left(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}\right)}{3m^2}\Theta(-\xi_{\mathbf{k}})\left(\frac{1}{\omega+\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}-\frac{1}{\omega+\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\xi_{-\mathbf{k}}}\right) \tag{4.69}$$

İletkenlik ve korelasyon fonksiyonları arasındaki ilişki ise

$$\mathrm{Im}\,\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar\omega}\mathrm{Re}\,\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) \tag{4.70}$$
$$\mathrm{Re}\,\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{i}{\hbar\omega}\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) \tag{4.71}$$

şeklinde verilmişti.

4.2.1 Sanal Kısım(Dalga Vektörü İntegrali)

Yukarıdaki $\int d\mathbf{k}\Theta(\xi_{\mathbf{k}})$.... tipindeki integraller dalga vektörü integrali olarak anılır. Bu tip integrallerle sıkça karşılaşacağımız için bu hesabı ayrı bir bölümde inceleyelim. Yukarıdaki (4.69) integrali kesin olarak çözülebilir.

Parantez içindeki ξ enerjilerinin argümanlarının vektör olduğunu unutmamak gerekir.

$$\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} = \frac{(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}{2m} - \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \tag{4.72}$$
$$= \frac{q^2}{2m} + \frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}}{2m} \tag{4.73}$$

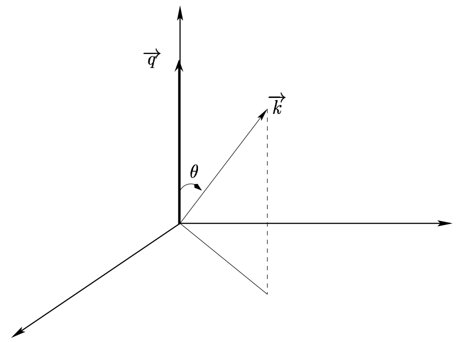
İntegrali hesaplayabilmek için $\mathbf{q}$ vektörünü z-ekseni yönünde seçeceğiz:

$\mathbf{k}$ vektörünün z-ekseniyle arasındaki açı olan θ'yı 0'dan π'ye kadar çevirdiğimizde $\mathbf{k}$ ile $\mathbf{q}$ arasında oluşabilecek bütün açıları süpürmüş olacağız:

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{q} = kq\cos\theta \tag{4.74}$$

Dolayısıyla (4.69) integrali aşağıdaki gibi yazılır:

I II



$$\mathrm{Re}\,\Pi_{xx} = \int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \int\limits_{0}^{k_F} \frac{k^2\,dk}{(2\pi)^2} \int\limits_{-1}^{1} dx \qquad \left(\overbrace{\frac{1}{\omega - \frac{q^2}{2m} - \frac{kqx}{m}}} - \overbrace{\frac{1}{\omega + \frac{q^2}{2m} + \frac{kqx}{m}}} \right)$$
$$\times \quad \frac{k^2 + \frac{q^2}{4} + kqx}{3m^2} \tag{4.75}$$

Artık $\mathrm{Re}\,\Pi$ fonksiyonu $\mathbf{q}$ vektörünün z- ve x-eksenleriyle yaptığı açılardan bağımsızlaşıp sadece vektörün normuna bağlı hale gelmiştir. $\int\limits_{-1}^{1} dx...$ integralini almak için aşağıdaki özelliği kulanacağız.

$$\int\limits_{-1}^{1} dx \frac{A\mathbf{k}\cdot\mathbf{q} + B}{C\mathbf{k}\cdot\mathbf{q} + D} = \int\limits_{-1}^{1} dx \left(\frac{A'}{C\,kqx + D} - B' \right) \tag{4.76}$$

$$A' - B'C\,kqx - B'D = A\,kqx + B \quad \Rightarrow \begin{cases} B' = -A/C \\ A' = \frac{BC - AD}{C} \end{cases} \tag{4.77}$$

Buna göre (4.75) denkleminde,

$$\begin{array}{lllll} I & : & A = 1 \quad B = k^2 + q^2/4 & C = -1/m & D = \omega - q^2/2m \\ II & : & A = 1 \quad B = k^2 + q^2/4 & C = 1/m & D = \omega + q^2/2m \end{array}$$

ve I numaralı dx integrali

$$T_1 = -2m + \left(-\frac{k^2}{2m} - \omega + \frac{q^2}{4m} \right) \frac{m^2}{kq} \ln \left| \frac{\frac{kq}{m} - \omega + \frac{q^2}{2m}}{\frac{kq}{m} + \omega - \frac{q^2}{2m}} \right| \tag{4.78}$$

II integrali

$$T_2 = -2m - \left(\frac{k^2}{2m} - \omega - \frac{q^2}{4m} \right) \frac{m}{kq} \ln \left| \frac{\frac{kq}{m} + \omega + \frac{q^2}{2m}}{\frac{kq}{m} - \omega - \frac{q^2}{2m}} \right| \tag{4.79}$$

halini alır. (4.69) integraline geri döndüğümüzde,

$$\mathrm{Re}\,\Pi = \int_0^{k_F} \frac{k^2\,dk}{(2\pi)^2}(T_1 - T_2)\frac{2}{3m} \tag{4.80}$$

$z = k/k_F$, $u = q/k_F$, $\Omega = \omega/2E_F$ tanımlayıp değişkenleri birimsiz hale getirelim. Şu halde, integrant çift fonksiyon olduğundan integralimiz

$$\mathrm{Re}\,\Pi = k_F^3 \int_0^1 \frac{z^2\,dz}{(2\pi)^2}(T_1 - T_2)\frac{2}{3m} \tag{4.81}$$

$$= \frac{k_F^3}{2} \int_{-1}^1 \frac{z^2\,dz}{(2\pi)^2}(T_1 - T_2)\frac{2}{3m} \tag{4.82}$$

şeklini almış olup T_1 ve T_2 aşağıdaki gibidir.

$$T_1 = -1 - (z^2 + \Omega - u^2/4)\frac{1}{2zu}\ln\left|\frac{zu - \Omega + u^2/2}{zu + \Omega - u^2/2}\right| \tag{4.83}$$

$$T_2 = 1 + (z^2 - \Omega - u^2/4)\frac{1}{2zu}\ln\left|\frac{zu + \Omega + u^2/2}{zu - \Omega - u^2/2}\right| \tag{4.84}$$

T_1 ve T_2'yi yerine koyup integralleri ayrı ayrı alalım.

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\,\Pi(|u|,\Omega) = {} & \frac{k_F^3}{3m(2\pi^2)}\int_{-1}^1 z^2\,dz \\ & \times \left\{-2 + -\left(z^2 - \frac{u^2}{4}\right)\frac{1}{2zu}\overbrace{\left[\ln\left|\frac{zu - \Omega + u^2/2}{zu + \Omega - u^2/2}\right| - \ln\left|\frac{zu + \Omega + u^2/2}{zu - \Omega - u^2/2}\right|\right]}^{A} + \right. \\ & - \left. \frac{\Omega}{2zu}\underbrace{\left[\ln\left|\frac{zu - \Omega + u^2/2}{zu + \Omega - u^2/2}\right| - \ln\left|\frac{zu + \Omega + u^2/2}{zu - \Omega - u^2/2}\right|\right]}_{B}\right\}\end{aligned} \tag{4.85}$$

$$A = \ln\left|\frac{(zu + u^2/2)^2 - \Omega^2}{(zu - u^2/2)^2 - \Omega^2}\right| \tag{4.86}$$

$$B = \ln\left|\frac{(zu - \Omega^2)^2 - u^4/4}{(zu + \Omega^2)^2 - u^4/4}\right| \tag{4.87}$$

Burada $\mathrm{Re}\,\Pi$'nin $\omega \to 0$, $|vq| \to 0$ limiti sıfıra gittiğine göre, ilentenliğin sanal kısmı da sıfıra gider. Yani DC limitinde iletkenlik gerçeldir.

4.2.2 Gerçel Kısım

İletkenlik fonksiyonunun gerçel kısmının (korelasyon fonksiyonunun sanal kısmının) hesabında farklı özellikte integrallerle karşılaşıyoruz. Bu integrallerde ikinci dereceden terimler cinsinden yazılmış teta fonksiyonlarına bağımlılığın incelenmesi dikkat gerektirmektedir.

$$\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta} = -\frac{\pi}{m^2}\sum_{\mathbf{k}}\left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha\left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta\left[n(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})-n(\xi_{\mathbf{k}})\right]\delta(\omega+\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}-\xi_{\mathbf{k}}) \tag{4.88}$$

Burada $\left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\alpha\left(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}\right)_\beta = \frac{1}{3}\left(k-\frac{q}{2}\right)^2\delta_{\alpha\beta}$ yazıp $\mathbf{k}\to\mathbf{k}+\mathbf{q}$ dönüşümünü uygularsak

$$\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta} = \frac{\pi}{3m^2}\delta_{\alpha\beta}\sum_{\mathbf{k}}\left(k+\frac{q}{2}\right)^2 n(\xi_{\mathbf{k}})\left[\delta(\omega+\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\xi_{\mathbf{k}})-\delta(\omega+\xi_{\mathbf{k}}-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\right] \tag{4.89}$$

$$\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta} = \frac{\pi}{3m^2}\frac{\delta_{\alpha\beta}}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F}k^2\,dk\int_{-1}^{1}dx\left(k^2+\frac{q^2}{4}+kqx\right) \tag{4.90}$$

$$\times\left[\delta\left(\omega+\frac{q^2}{2m}+\frac{kqx}{m}\right)-\delta\left(\omega-\frac{q^2}{2m}-\frac{kqx}{m}\right)\right] \tag{4.91}$$

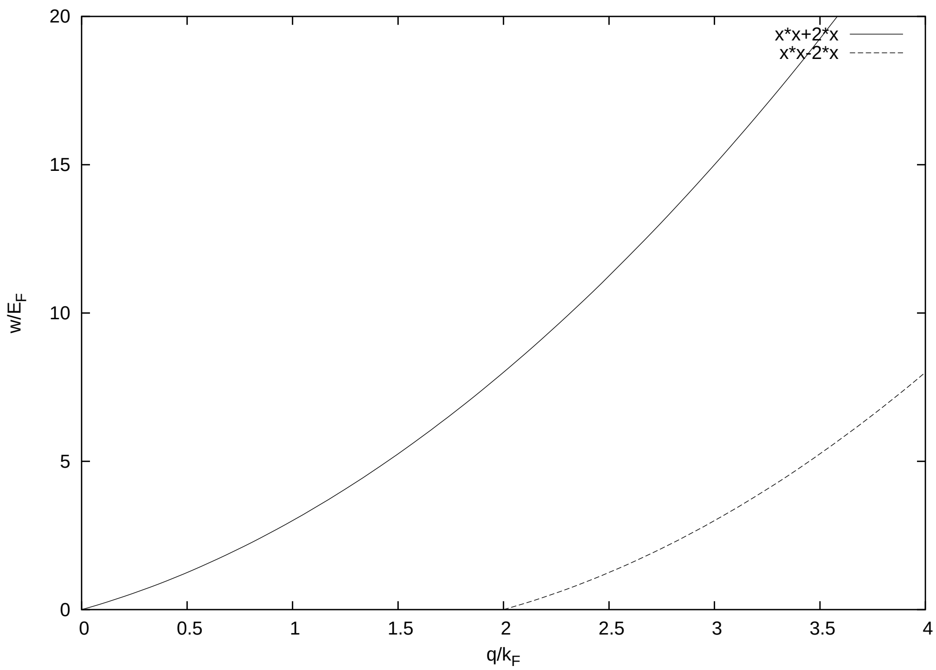
dx integrasyonunun sıfırdan farklı sonuç vermesi için

$$\begin{aligned}
\delta\left(\omega+\frac{q^2}{2m}+\frac{kqx}{m}\right) \quad &\to \quad -1\le -\frac{\omega+q^2/2m}{kq/m}\le 1\\
&\to \quad \left|\frac{\omega+q^2/2m}{kq/m}\right|\le 1\\
&\to \quad |\omega+q^2/2m|-|kq/m|\le 0\\
&\to \quad \Theta_1=\Theta\left(\left|\frac{kq}{m}\right|-\left|\omega+\frac{q^2}{2m}\right|\right)\\
&\to \quad k\ge k_+
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\delta\left(\omega-\frac{q^2}{2m}-\frac{kqx}{m}\right) \quad &\to \quad -1\le \frac{\omega-q^2/2m}{kq/m}\le 1\\
&\to \quad \Theta_2=\Theta\left(\left|\frac{kq}{m}\right|-\left|\omega-\frac{q^2}{2m}\right|\right)\\
&\to \quad k\ge k_-
\end{aligned}$$

olmalıdır. Burada

$$k_\pm = \frac{m}{q}\left|\omega\pm\frac{q^2}{2m}\right|\le k_F \tag{4.92}$$



Eğer $\omega \geq 0$ ise

$$\Theta_1 \quad \rightarrow \quad -\frac{q}{m}k_F - \frac{q^2}{2m} \leq \omega \leq \frac{q}{m}k_F - \frac{q^2}{2m} \tag{4.93}$$

$$\Theta_2 \quad \rightarrow \quad \frac{q^2}{2m} - \frac{q}{m}k_F \leq \omega \leq \frac{q^2}{2m} + \frac{q}{m}k_F \tag{4.94}$$

Birimsiz değişkenlerle yazacak olursak $u = q/k_F$, $\Omega = \omega/E_F$,

$$\begin{aligned} \Theta_1 \quad &\rightarrow \quad -u^2 - 2u \leq \Omega \leq -u^2 + 2u \\ \Theta_2 \quad &\rightarrow \quad u^2 - 2u \leq \Omega \leq u^2 + 2u \end{aligned}$$

Dolayısıyla

$$\begin{aligned} &\int_0^{k_F} k^2\, dk \frac{m}{kq} \left\{ \left[\left(k^2 + \frac{q^2}{4}\right) \Theta_1 - \left(k^2 + \frac{q^2}{4}\right) \Theta_2 \right] \right. \\ &\left. - \frac{\omega + q^2/2m}{1/m} \Theta_1 - \frac{\omega - q^2/2m}{1/m} \Theta_2 \right\} \qquad (4.95) \\ = \quad & \frac{m}{q} \left\{ \int_{k_+}^{k_F} k\, dk \left(k^2 + \frac{q^2}{4}\right) - \int_{k_-}^{k_F} k\, dk \left(k^2 + \frac{q^2}{4}\right) \right. \end{aligned}$$

$$-\int_{k_+}^{k_F} k\,dk\left(m\omega-\frac{q^2}{2}\right)-\int_{k_-}^{k_F} k\,dk\left(m\omega-\frac{q^2}{2}\right)\Bigg\} \tag{4.96}$$

Dolayısıyla

$$\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)=\frac{m}{4q}(k_-^2-k_+^2)\left[(k_-^2+k_+^2)-\frac{2m\omega}{q}\right] \tag{4.97}$$

elde edilir. $(k_-^2-k_+^2)=-2m\omega$ olup DC davranışına bakacak olursak $q\to 0$ limitinde $\mathrm{Im}\,\Pi_{\alpha\beta}|_{q\to 0}\sim\frac{\omega}{q}$ olduğundan ,

$$\mathrm{Re}\,\sigma=\left.\frac{\mathrm{Im}\,\Pi_{xx}}{\omega}\right|_{q\to 0}=\infty \tag{4.98}$$

verir.

Bölüm 5

Üç Boyutlu Elektron Gazı

5.1 Jelyum Modeli

Bu bölümde üç boyutlu nötr plazmayı inceleyecegiz. Bu sistemin belli bir hacim içinde bulunan eşit sayıda pozitif yüklü iyonlar ve negatif yüklü elektronlardan oluştugunu düşünüyoruz. Ayrıca pozitif yüklü iyonların kütlelerinin çok büyük oldugunu $m_+ \to \infty$ kabul ederek bunların elektronlar için pozitif bir arkaplan oluştugunu söyleyip kinetik enerjilerini de ihmal edecegiz.

Serbest elektronlar için daha önceden yazdıgımız Hamiltonyeni hatırlaryalım.

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}, \qquad \xi_{\mathbf{k}} = k^2/2m - \mu \tag{5.1}$$

Sistemdeki yüklü parçacıkların birbirleriyle etkileşim enerjilerini ise elektron-elektron (e-e), elektron-iyon (e-i) ve iyon-iyon (i-i) etkileşimi olarak inceleyecegiz. Sistemdeki toplam Coulomb etkileşim enerjisi

$$V_C = \frac{1}{2}\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \left[\frac{n_e(\mathbf{r}) n_e(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} + \frac{n_i(\mathbf{r}) n_i(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - 2\frac{n_e(\mathbf{r}) n_i(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right] \tag{5.2}$$

şeklinde yazılabilir. Bu denklemde $n(\mathbf{r})$ uzaydaki yük/parçacık yogunlugunu gösteriyor ve baştaki $1/2$ çarpanı aynı yüklü parçacıkların energjisini bulurken çift toplam yapmamak için var.

Eger zayıf etkileşen plazmayı düşünürsek, tedirgenmemiş durum (unperturbed states) olarak düzlemsel dalgaları (plane wave) alabiliriz. Yük yogunlugunun Fourier dönüşümü

$$n_e(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} n_e(\mathbf{q}) \tag{5.3}$$

kullanılarak e-e etkileşimi

$$V_{e-e} = \frac{1}{2}\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{i(\mathbf{q}\mathbf{r}+\mathbf{q}'\mathbf{r}')} n_e(\mathbf{q}) n_e(\mathbf{q}') \tag{5.4}$$

şeklinde yazılabilir. Aşagıdaki degişken dönüşümü ile bu ifadeyi daha basit bir hale getirebiliriz.

$$\mathbf{r}_+ = \frac{\mathbf{r}+\mathbf{r}'}{2} \qquad \text{ve} \qquad \mathbf{r}_- = \mathbf{r}-\mathbf{r}' \tag{5.5}$$

ya da

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_+ + \frac{\mathbf{r}_-}{2} \qquad \text{ve} \qquad \mathbf{r}' = \mathbf{r}_+ - \frac{\mathbf{r}_-}{2} \tag{5.6}$$

Bu degişken degişimi ile

$$V_{e-e} = \frac{1}{2}\int d\mathbf{r}_+ \int d\mathbf{r}_- \frac{1}{\mathbf{r}_-}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{r}_+}\mathrm{e}^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{r}_-/2} n_e(\mathbf{q})n_e(\mathbf{q}') \tag{5.7}$$

Önce $\mathbf{r}_+$ integralini alalım.

$$\int d\mathbf{r}\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = (2\pi)^3\delta(\mathbf{q}) \tag{5.8}$$

sonucunu kullanrak

$$\begin{aligned}
V_{e-e} &= \frac{1}{2}\int \frac{d\mathbf{r}_-}{\mathbf{r}_-}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3}(2\pi)^3\delta(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathrm{e}^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\mathbf{r}_-/2} n_e(\mathbf{q})n_e(\mathbf{q}') && (5.9)\\
&= \frac{1}{2}\int d\mathbf{r}_- \frac{1}{\mathbf{r}_-}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q})\mathbf{r}_-/2} n_e(\mathbf{q})n_e(-\mathbf{q}) && (5.10)\\
&= \frac{1}{2}\int d\mathbf{r}\frac{1}{\mathbf{r}}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} n_e(\mathbf{q})n_e(-\mathbf{q}) && (5.11)\\
V_{e-e} &= -\frac{1}{2}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V_{\mathbf{q}} n_e(\mathbf{q})n_e(-\mathbf{q}) && (5.12)
\end{aligned}$$

Son adımda $1/r$'nin Fourier dönüşümü

$$V_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r}\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\frac{1}{r} = \frac{4\pi}{q^2} \tag{5.13}$$

kullandık. [1] Yukarıdaki i-i ve e-i terimlerini de benzer şekilde dönüştürürsek, toplam Coulomb enerjisi

$$V_C = -\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V_{\mathbf{q}}\left[\frac{1}{2}n_e(\mathbf{q})n_e(-\mathbf{q}) + \frac{1}{2}n_i(\mathbf{q})n_i(-\mathbf{q}) - n_e(\mathbf{q})n_i(-\mathbf{q})\right] \tag{5.14}$$

olur. Bu ifadede $\mathbf{q} = 0$'ı biraz daha ayrıntılı inceleyelim. $\mathbf{q} = 0$ için yük yogunlugunun Fourier dönüşümü

$$n(\mathbf{q}=0) = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) = N \tag{5.15}$$

[1] Bu sonucu elde etmek için $1/r$ yerine $e^{-\mu r}/r, \mu > 0$ nin Fourier dönüşümünü hesaplayıp, sonra $\mu \to 0$ limiti alınabilir. Üç boyutlu Fourier dönüşümü için dogal olarak spherical koordinatları kullanabiliriz.

toplam parçacık sayısını veriyor. $\mathbf{q} = 0$ için V_C integrandı nötr bir sistem için

$$\frac{1}{2}\left(N_e^2 + N_i^2 - 2N_eN_i\right) = 0 \tag{5.16}$$

olur. Dolayısıyla V_C ifadesinde $\mathbf{q} = 0$ durumunu düşünmüyoruz.

Şimdi V_C için buldugumuz denklemde (5.14) sadece electron kinetik enerjisi ve V_{e-e} enerjisini tutarak second quantized formda yazıp elektron gazı için kinetik enerji ve Coulomb etkileşimini içeren Hamiltonyeni second quantized formda elde edelim. V_{e-e} şu şekilde de yazılabilir:

$$-\frac{1}{2}\int\frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}V_{\mathbf{q}}n(\mathbf{q})n(-\mathbf{q}) = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}V_{\mathbf{q}}n(\mathbf{q})n(-\mathbf{q}) \tag{5.17}$$

Sayı (number) operatörleri ise yaratma ve yok etme operatörleri cinsinden yazılırsa

$$-\sum_{\mathbf{q}\neq 0}V_{\mathbf{q}}n(\mathbf{q})n(-\mathbf{q}) = -\sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}\neq 0}V_{\mathbf{q}}c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}c_{\mathbf{k},\sigma}c^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}c_{\mathbf{k}',\sigma'} \tag{5.18}$$

Fermiyonik $c_{\mathbf{k},\sigma}, c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}$ operatörlerinin komütasyon bagıntılarını

$$\left\{c_{\mathbf{k},\sigma}, c^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma'}\right\} = c_{\mathbf{k},\sigma}c^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma'} + c^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma'}c_{\mathbf{k},\sigma} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{5.19}$$

kullanarak

$$-\sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}\neq 0}V_{\mathbf{q}}c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}c_{\mathbf{k},\sigma}c^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}c_{\mathbf{k}',\sigma'} = \tag{5.20}$$

$$= \sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}\neq 0}V_{\mathbf{q}}\left(c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}c^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}c_{\mathbf{k},\sigma}c_{\mathbf{k}',\sigma'} - c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}\underbrace{\left\{c_{\mathbf{k},\sigma}, c^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}\right\}}_{\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'-\mathbf{q}}\delta_{\sigma,\sigma'}}c_{\mathbf{k}',\sigma'}\right) \tag{5.21}$$

$$= \sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}\neq 0}V_{\mathbf{q}}c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}c^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}c_{\mathbf{k},\sigma}c_{\mathbf{k}',\sigma'} - \sum_{\mathbf{k},\sigma}\left(\sum_{\mathbf{q}}V_{\mathbf{q}}\right)c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}c_{\mathbf{k},\sigma} \tag{5.22}$$

Son denklemde ikinci toplamı kinetik enerjinin içine atıp serbest elektron enerjilerini renormalize edersek jelyum modeli için Hamiltoniyeni bulmuş oluyoruz.

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma}\xi_{\mathbf{k}}c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}\neq 0}V_{\mathbf{q}}c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}c^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}c_{\mathbf{k},\sigma}c_{\mathbf{k}',\sigma'} \tag{5.23}$$

5.2 Elektron Gazı Parametreleri

Sıfır derece sıcaklık $T = 0$ için atom çekirdeklerinin bir lattice oluşturdugunu düşünürsek, karakteristik uzunluk olarak Bohr yarıçapını seçebiliriz.

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.54\text{Å} \tag{5.24}$$

Sistemin başka bir özelligi ise elektron yogunlugu.

$$n_0 = \frac{N}{V} \quad \Rightarrow \quad L = 1/(n_0)^{1/3} \tag{5.25}$$

Burada sistemi köşe uzunlugu L olan bir kübün içinde düşündük. Şimdi elektron gazında elektron başına düşen hacmi yarıçapı a_0 olan bir küre cinsinden ifade eden r_s parametresini tanımlayabiliriz

$$\frac{4\pi}{3}(a_0 r_s)^3 = \frac{V}{N} = \frac{1}{n_0} \quad \Rightarrow \quad r_s^3 = (\frac{4\pi}{3}a_0^3 n_0)^{-1} \tag{5.26}$$

r_s parametresi dogal olarak elektronlar arasındaki ortalama uzaklıgı da belirtiyor.

$$r_s \gg 1 \quad \Rightarrow \quad \text{düşük elektron yogunlugu}$$

$$r_s \ll 1 \quad \Rightarrow \quad \text{yüksek elektron yogunlugu}$$

Serbest elektronlar için, Fermi momentumu

$$k_F = (3\pi^2 n_0)^{(1/3)} \quad \Rightarrow \quad k_F a_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \tag{5.27}$$

ve Fermi enerjisi

$$E_F = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}(k_F a_0)^2 = \frac{3.68}{r_s^2}\text{Ryd} \tag{5.28}$$

$1\text{Ryd} = \hbar^2/2ma_0^2 \approx 13.6\text{eV}$ cinsinden yazılabilir.

Ortalama Coulomb etkileşimi için

$$\bar{V}_C \sim \frac{e^2}{n_0^{1/3}} \sim \frac{e^2}{a_0 r_s} \tag{5.29}$$

yazarsak

$$\frac{\bar{V}_C}{E_F} \sim \frac{1/r_s}{1/r_s^2} \propto r_s \tag{5.30}$$

ortalama potansiyel enerjinin Fermi enerjisine oranını r_s ile dogru orantılı buluruz. $r_s \ll 1$ icin kinetik enerji (KE) potansiyel enerjiden (PE) cok buyuk olur, o zaman sistemi Fermi akışkan teorisi ile inceleyebiliriz. $r_s \gg 1$ durumunda ise güçlü etkileşelen elektron sıvısını düşünmemiz gerekiyor (Wigner kristalizasyonu). Vurgulamak istedigimiz bir nokta da, önsezimize ters olarak, $r_s \gg 1$ yani düşük yogunluktaki elektron gazı için e-e etkileşiminin kinetik enerjiye oranla daha baskın olmasıdır.

Birimsiz $k' = kL = k/n_0^{1/3}$ ile Hamiltonyeni aşagıdaki gibi yazabiliriz.

$$H = \frac{e^2}{a_0 r_s^2}\left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2}k'^2 c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{r_s}{2}\sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}} \frac{4\pi}{q^2} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k}',\sigma'}\right) \tag{5.31}$$

ve sistemin ground state enerjisi $r_s \ll 1$ için

$$E_{GS} = \underbrace{\frac{e^2}{a_0 r_s^2} \frac{1}{2} \left\langle k'^2 \right\rangle}_{E_{GS}^{(0)}} \left[1 + r_s E_{GS}^{(1)} + r_s^2 E_{GS}^{(2)} + \ldots\right] \tag{5.32}$$

r_s parametresinin bir serisi olarak yazılabilir.

Ilk olarak $T = 0$'da $E_{GS}^{(0)}$ hesaplayalım.

$$E_{GS}^{(0)} = \frac{e^2}{a_0 r_s^2} \underbrace{2}_{spin} \frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3} k'^2 n(\xi_{\mathbf{k}}) \tag{5.33}$$

$$= \frac{e^2}{a_0 r_s^2} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{k'_F} k'^4 dk' \tag{5.34}$$

$$= \frac{e^2}{a_0 r_s^2} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{k_F'^{\,5}}{5} \tag{5.35}$$

$$E_{GS}^{(0)} = \left(\frac{3}{5} E_F\right) N_e \tag{5.36}$$

Seri açılımında bir sonraki terimi hesaplamak için etkileşimleri bir tedirgenme olarak ele alıp tedirgenme teorisiden bildigimiz birinci derece ekleri kullanalım.

$$E_{GS}^{(1)} = \langle \Psi_0 | H_{INT} | \Psi_0 \rangle \tag{5.37}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \left\langle FS \left| c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} c^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k}',\sigma'} \right| FS \right\rangle \tag{5.38}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \left\{ \underbrace{\left\langle c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle}_{=\delta_{\mathbf{q},0} n(\xi_{\mathbf{k}})=0} \underbrace{\left\langle c^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{k}',\sigma'} \right\rangle}_{=\delta_{\mathbf{q},0} n(\xi_{\mathbf{k}'})=0} - \left\langle c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} c_{\mathbf{k}',\sigma'} \right\rangle \left\langle c^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle \right\} \tag{5.39}$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{k}',\sigma',\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}} n(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) n(\xi'_{\mathbf{k}}) \tag{5.40}$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma,\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} n(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) n(\xi_{\mathbf{k}}) \tag{5.41}$$

$$E_{GS}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Sigma_x(\mathbf{k}) n(\xi_{\mathbf{k}}) \tag{5.42}$$

Yukarıda exchange self enerjisini

$$\Sigma_x(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} n(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \tag{5.43}$$

olarak tanımladık. Böylece

$$E_{GS} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \left\langle c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Sigma_x(\mathbf{k}) \left\langle c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle \tag{5.44}$$

$$E_{GS} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \underbrace{[\xi_{\mathbf{k}} + \Sigma_x(\mathbf{k})]}_{\substack{\text{Renormalized}\\ \text{single}-\text{particle}\\ \text{enegry}}} \left\langle c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle \tag{5.45}$$

Şimdi $T = 0$ da exchange self enerjisini hesaplayalım.

$$\Sigma_x(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} n(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \tag{5.46}$$

$$= -\frac{1}{2}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{4\pi e^2}{q^2} n(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \tag{5.47}$$

$$\mathbf{q} \to \mathbf{q} - \mathbf{k} \quad \text{ve} \quad T = 0 \quad \text{için} \quad n(\xi_{\mathbf{q}}) = \Theta(-\xi_{\mathbf{q}})$$

$$\Sigma_x(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{4\pi e^2}{|\mathbf{q}-\mathbf{k}|^2}\Theta(-\xi_{\mathbf{q}}) \tag{5.48}$$

$$= -\frac{2\pi e^2}{(2\pi)^3}\int_0^{q_F} q^2 dq \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{q^2+k^2-2kq\cos\theta} \tag{5.49}$$

$$= -\frac{2\pi e^2}{(2\pi)^2}\int_0^{q_F} q^2 dq \int_{-1}^{1} dx \frac{1}{q^2+k^2-2kqx} \tag{5.50}$$

$$= -\frac{2\pi e^2}{(2\pi)^2}\int_0^{q_F} q^2 dq \frac{1}{-2kq}\left[\ln\left|q^2+k^2-2kqx\right|\right]_{x=-1}^{x=1} \tag{5.51}$$

$$= \frac{e^2}{2\pi}\int_0^{q_F} q dq \frac{1}{2k}\ln\left|\frac{q^2+k^2-2kq}{q^2+k^2+2kq}\right| \tag{5.52}$$

$$\Sigma_x(\mathbf{k}) = -\frac{e^2}{2\pi k}\int_0^{q_F} q dq \ln\left|\frac{q+k}{q-k}\right| \tag{5.53}$$

$$\text{bir şekilde ...} \tag{5.54}$$

$$\Sigma_x(\mathbf{k}) = -\frac{e^2 k_F}{\pi}\left(1 + \frac{1-(k/k_F)^2}{2k/k_F}\ln\left|\frac{1+k/k_F}{1-k/k_F}\right|\right) \tag{5.55}$$

Buradan $0 \le k \le k_F$ için $\Sigma_x(\mathbf{k}) < 0$ oldugunu görüyoruz. $k \to 0$ limitine bakarsak ve

$$\lim_{x\to 0}\ln(1+x) \approx x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} \tag{5.56}$$

açılımını kullanırsak

$$\lim_{k\to 0}\left(1 + \frac{1}{2k/k_F}\ln\left|\frac{1+k/k_F}{1-k/k_F}\right|\right) = 2 \tag{5.57}$$

ve

$$\lim_{k\to 0}\Sigma_x(\mathbf{k}) = -\frac{2e^2 k_F}{\pi} \tag{5.58}$$

olur. $k = k_F$ durumu için

$$\lim_{x\to 0}\left(1 + x\ln\left|\frac{2}{x}\right|\right) = \lim_{y\to\infty}\left(1 + \frac{\ln(y)}{y}\right) = 1 \tag{5.59}$$

Böylece

$$\lim_{k\to 0}\Sigma_x(\mathbf{k}) = -\frac{e^2 k_F}{\pi} \tag{5.60}$$

bulunur.

Slef energy figurde gosterilmiştir.

5.3 Efektif Kütle

Tek parçacık enerjisini

$$\omega_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} + \Sigma(\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}}) \tag{5.61}$$

şeklinde bulmuştuk. Bu denklem Dyson denklemi olarak bilinir. Eger $\omega_{\mathbf{k}} = k^2/2m^*$ yazarsak ve Dyson denkleminin k'ye göre türevini alirsak

$$\frac{k}{m^*} = \frac{k}{m} + \frac{\partial\Sigma}{\partial\mathbf{k}} + \frac{\partial\Sigma}{\partial\omega}\frac{\partial\omega}{\partial k}, \tag{5.62}$$

Buradan efektif kütle m^* için

$$\frac{m}{m^*} = \frac{1 + \frac{m}{k}\frac{\partial\Sigma}{\partial\mathbf{k}}}{1 - \frac{\partial\Sigma}{\partial\omega}}. \tag{5.63}$$

buluruz. Pratikte m^* is Fermi yüzeyinde hesaplanır, i.e. $k = k_F$ ve $\omega = E_F$. Σ'nın frekanstan bagımsız oldugu durumda

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{\partial\Sigma}{\partial\mathbf{k}} \tag{5.64}$$

Efektif kütlenin bu durum için Fermi yüzeyindeki divergent davranışı figürde.

5.4 Kimyasal Potansiyel

Zayıf Coulomb etkileşimi olan elektron gazını Fermi sıvısı olarak ele alırken güçlü etkileşen sistemler için kollektif excitationları düşünmemiz gerekiyor.

BURADA FOTOKOPI OKUNMUYOR.

k_F'i degişmemiş kabul etmek çok kötü bir yaklaşım sayılmaz. Etkileşmeyen sistemler için kimyasal potansiyel Fermi enerjisine eşit olur.

$$\mu = \frac{k_F^2}{2m} = E_F \tag{5.65}$$

$T = 0$ sıcaklıgında etkileşen bir sisteme bakalım. Bu durumda elektronlar için

$$\Theta(\xi_{\mathbf{k}} + \Sigma_x(\mathbf{k}) - \mu) = 1 \tag{5.66}$$

ya da

$$\mu = \xi_F + \Sigma_x(\mathbf{k}_F) \tag{5.67}$$

$\Sigma_X(\mathbf{k}) < 0$ oldugundan μ etkileşmeyen sisteme göre aşagı iner.

$$\mu = \frac{k_F^2}{2m} - \frac{e^2}{\pi} k_F \tag{5.68}$$

FIGURE

$$E_{GS}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Sigma(\mathbf{k}) n(\xi_{\mathbf{k}}) \tag{5.69}$$

Böylece

$$E_{GS} = \frac{e^2}{2a_0} \left[\frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} - \frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s} + \ldots \right] \tag{5.70}$$

Şimdi $E_{GS}^{(1)}$'i $T = 0$'da hesaplamaya çalışalım.

$$\begin{aligned} E_{GS}^{(1)} &= \sum_{\mathbf{q}\neq 0,\mathbf{k},\sigma} V_{\mathbf{q}} n(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) n(\xi_{\mathbf{k}}) && (5.71) \\ &= \sum_{\mathbf{q}\neq 0,\mathbf{k},\sigma} V_{\mathbf{q}} \Theta(-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \Theta(-\xi_{\mathbf{k}}) && (5.72) \\ & \quad \Theta(-\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\Theta(-\xi_{\mathbf{k}}) = \Theta(k_F - |\mathbf{k}+\mathbf{q}|)\Theta(k_F - k) \quad \text{oldugundan} \\ E_{GS}^{(1)} &= -\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{q^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \Theta(k_F - |\mathbf{k}+\mathbf{q}|)\Theta(k_F - k) && (5.73) \end{aligned}$$

$\mathbf{k}$ integralinde $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}/2$ döüşümü yapalım ve sonra bütün momentumları k_F cinsinden yazalım. O zaman Theta fonksiyonları

$$\Theta(k_F - |\mathbf{k}+\mathbf{q}|)\Theta(k_F - k) \to \Theta(1 - |\mathbf{k}' + \mathbf{q}/2|)\Theta(1 - |\mathbf{k}' - \mathbf{q}/2|) \tag{5.74}$$

Böylece $\mathbf{k}'$ integralinin $\mathbf{k}' + \mathbf{q}/2$ ve $1 - |\mathbf{k}' - \mathbf{q}/2|$ merkezli ve 1 yarıçaplı iki çember arasında kalan hacim oldugunu görüyoruz.

$$E_{GS}^{(1)} = -\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2 k_F^4}{q^2} V(\mathbf{q}) \tag{5.75}$$

$\mathbf{q}$'nun birimsiz oldugunu hatırlatalım. $V(\mathbf{q})$ hacmi sadece $\mathbf{q}$'nun boyuna baglı oldugundan, bu integrali geometrik olarak hesaplayabiliriz. (Bkz. SEKIL)

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}) &= 2 \times \int_{q/2}^{1} dz \pi (1 - z^2) \quad , z^2 = 1 - x^2 + y^2 && (5.76) \\ V(\mathbf{q}) &= \frac{4\pi}{3} \left[1 - \frac{3}{2}\frac{q}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{q}{2} \right)^2 \right] && (5.77) \end{aligned}$$

Bu sonucu $E_{GS}^{(1)}$ ifadesinde yerine koyalım

$$E_{GS}^{(1)} = -\int \frac{4\pi q^2 dq}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2 k_F^4}{q^2} \frac{4\pi}{3} \left[1 - \frac{3}{2}\frac{q}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{q}{2} \right)^2 \right] \tag{5.78}$$

q integralinin sınırlarını 0'dan 1'e alırsak ve

$$k_F = (3\pi^2 n_0)^{(1/3)} \quad \text{ve} \quad k_F a_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \tag{5.79}$$

sonuçlarını kullanırsak

$$E_{GS}^{(1)} = -\frac{3}{2\pi}\left(\frac{e^2}{2a_0}\right)\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{N}{r_s} \tag{5.80}$$

ve

$$E_g = \frac{E_{GS}}{N} = \left(\frac{e^2}{2a_0}\right)\left[\frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{1}{r_s^2} - \frac{3}{2\pi}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{1}{r_s} + \dots\right] \tag{5.81}$$

olur. Bu sonucu

$$E_g = \left(\frac{2.2}{r_s^2} - \frac{0.9}{r_s}\right), \quad r_s \ll 1 \tag{5.82}$$

şeklinde yazabiliriz.

5.5 Seitz Teoremi

Kimyasal potansiyel μ sisteme bir parçacık daha eklemek için gerekli olan enerjidir. Seitz teoremi kimyasel potansiyeli, parçacık yogunlugunun fonksiyonu olan parçacık başına düşen ortalama enerji E_g kullanılarak nasıl hesaplanabilecegini gösterir.

$$\begin{aligned}
\mu &= E(N+1) - E(N) && (5.83)\\
&= (N+1)E_g\left(\frac{N+1}{V}\right) - NE_g\left(\frac{N}{V}\right) && (5.84)\\
\mu &= V\left[\left(n_0 + \frac{1}{V}\right)E_g\left(n_0 + \frac{1}{V}\right) - n_0 E_g(n_0)\right] && (5.85)\\
& && (5.86)
\end{aligned}$$

n_0 ile parçacık sayısı N olan sistemin yogunlugunu gösterdik. Sisteme bir parçacık daha eklendiginde E_g'nin fazla degişmedigini düşünürsek ve E_g için n_0 etrafında Taylor açılımı yaparsak

$$\mu = V\left[\left(n_0 + \frac{1}{V}\right)E_g(n_0) + \left(n_0 + \frac{1}{V}\right)\frac{\partial E_g}{\partial n_0}\frac{1}{V} - n_0 E_g(n_0)\right] \tag{5.87}$$

ve

$$\mu = E_g(n_0) + n_0 \frac{\partial E_g}{\partial n_0} \qquad \text{Seitz Teoremi} \tag{5.88}$$

Ilk olarak etkileşmeyen elektron gazının kimyasal potansiyelini hesaplayalım.

$$E_g = \frac{3}{5}E_F = Cn_0^{2/3} \Rightarrow \frac{\partial E_g}{\partial n_0} = \frac{2}{3}Cn_0^{-1/3} \tag{5.89}$$

Buradan

$$\mu = E_g(n_0) + n_0 \frac{\partial E_g}{\partial n_0} = C\left[n_0^{2/3} + \frac{2}{3}Cn_0^{2/3}\right] = \frac{5}{3}\underbrace{Cn_0^{2/3}}_{\frac{3}{5}E_F} = E_F \tag{5.90}$$

beklenilen sonucu elde ediyoruz. Bir sonraki dereceden gelen katkıları bulmak için bir önceki kısımda buldugumuz E_g ifadesini kullanalım.

$$\mu^{(1)} = E_g^{(1)}(n_0) + n_0 \frac{\partial E_g^{(1)}}{\partial n_0} = -1Ryd \times 0.9\left[\frac{1}{r_s} + n_0 \frac{\partial}{\partial n_0}\left(\frac{1}{r_s}\right)\right] \tag{5.91}$$

Yine $1/r_s = (4\pi a_0^3 n_0/3)^{1/3}$ kullanırsak

$$\mu^{(1)} = -1Ryd \times \frac{4}{3}\frac{0.9}{r_s} \tag{5.92}$$

ve

$$\mu = \mu^{(0)} + \mu^{(1)} = E_F - \frac{4}{3}\frac{0.9}{r_s}Ryd \tag{5.93}$$

buluruz.

5.6 Self Enerji RPA

Self enerji

$$\Sigma_x(\mathbf{k}) = \sum_{bq} V_{\mathbf{q}} n(\xi_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}) \tag{5.94}$$

Bakiniz DIAGRAMLAR!!!

$$G = G^{(0)} + G^{(0)}\mathrm{PB}G \Rightarrow G = \frac{G^{(0)}}{1 - G^{(0)}\mathrm{PB}} \tag{5.95}$$

$$\mathrm{PB} = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^2 \sum_{\mathbf{k}} G^{(0)}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega)P^{(1)}(\mathbf{k},\omega) \tag{5.96}$$

$$\begin{aligned} RPASE &= P^{(1)}(\mathbf{k},\omega) + V_{\mathbf{q}}(P^{(1)}(\mathbf{k},\omega))^2 + V_{\mathbf{q}}^2(P^{(1)}(\mathbf{k},\omega))^3 + \ldots && (5.97) \\ &= \frac{1}{V_{\mathbf{q}}}\left(V_{\mathbf{q}}P^{(1)} + (V_{\mathbf{q}}P^{(1)})^2 + (V_{\mathbf{q}}P^{(1)})^3 + \ldots + 1 - 1\right) && (5.98) \\ &= \frac{1}{V_{\mathbf{q}}}\left(\frac{1}{1 - V_{\mathbf{q}}P^{(1)}(\mathbf{q},\omega)} - 1\right) && (5.99) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} DIAGRAM &= G^{(0)}(\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega)(V_{\mathbf{q}})^2 RPASE && (5.100) \\ &= G^{(0)}(V_{\mathbf{q}})^2 \frac{1}{V_{\mathbf{q}}}\left(\frac{1}{1 - V_{\mathbf{q}}P^{(1)}(\mathbf{q},\omega)} - 1\right) && (5.101) \\ &\Rightarrow G^{(0)}V_{\mathbf{q}}\left(\frac{1}{1 - V_{\mathbf{q}}P^{(1)}(\mathbf{q},\omega)} - 1\right) = \Sigma_x^{\mathrm{RPA}}(\mathbf{k}) && (5.102) \end{aligned}$$

$$\Sigma_x^{\mathrm{RPA}}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}} G^{(0)} V_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{1 - V_{\mathbf{q}} P^{(1)}(\mathbf{q}, \omega)} - 1 \right) \tag{5.103}$$

$$= -\underbrace{\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} G^{(0)}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}_{\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} n(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) = \Sigma_x(\mathbf{k})} + \sum_{\mathbf{q}} \frac{V_{\mathbf{q}} G^{(0)}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{1 - V_{\mathbf{q}} P^{(1)}(\mathbf{q})} \tag{5.104}$$

Dielektrik fonksiyonunu tanımlayalım.

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{1}{1 - V_{\mathbf{q}} P^{(1)}(\mathbf{q}, \omega)} \tag{5.105}$$

Renormalization of Coulomb lines

$$V_{\mathbf{q}}^{\mathrm{RPA}} = \frac{V_{\mathbf{q}}}{1 - V_{\mathbf{q}} P^{(1)}(\mathbf{q})} = \frac{V_{\mathbf{q}}}{\varepsilon(\mathbf{q})} \tag{5.106}$$

Son olarak

$$\Sigma_x^{\mathrm{RPA}}(\mathbf{k}) = \Sigma_x(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\mathrm{RPA}} G^{(0)}(\mathbf{q} + \mathbf{k}) \tag{5.107}$$