Порівнявши (+++) та (++) маємо

$$M_{AB}^{(2k+1)} \equiv -\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \omega^{2k+1}\, Im\, \chi_{AB}(\omega)\, d\omega =$$

$$= \frac{i}{\hbar}(-1)^k \langle [\hat{A}^{(2k+1)}, \hat{B}] \rangle_0 .$$

(i) Теорема про жорсткість (stiffness).

Приводжу цю теорему без доведення (воно є у Розділі 3.2.9).

Обернена статична ф-я відгуку $\chi_{AA}(0)$ є мірою жорсткості системи проти поля, яка намагається змінити величину $\langle \hat{A} \rangle$.

Найнижча можлива енергія системи при умові, що $\langle \hat{A} \rangle = A \neq 0$ рівняє

$$E(A) = \min_{\psi \to A} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle ,$$

де $\psi \to A$ показує, що мінімум береться по нормалізованим симетричним хвильовим ф-ям:

$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = A.$

Нагадаю, що відгук ми знаходимо для $\hat{H}_A = \hat{H} + F_A \hat{A}$.

А в границі $A \to 0$

$E(A)$ мінімізується, якщо $F_A = \frac{A}{\chi_{AA}(0)}$.

В результаті доведення маємо

$$E(A) \simeq E(0) - \frac{1}{2} \frac{A^2}{\chi_{AA}(0)}.$$

Бачимо, що $\alpha = -\frac{1}{\chi_{AA}(0)}$ і

$E(A) - E(0) = \alpha A^2/2$ має зміст жорсткості, а $\alpha > 0$ потрібно для стабільності системи.

(j) Нерівність Боголюбова.

Іншою загальною та цікавою властивістю ф-ій відгуку є нерівність Боголюбова:

$$\chi_{A^+A}(0)\langle[[\hat{H},\hat{C}],\hat{C}^+]\rangle_0 \geq$$
$$|\langle[\hat{A},\hat{C}]\rangle_0|^2 .$$

Одним із способів доведення є той факт, що статичну ф-ю відгуку можна використати для того, щоб визначити скалярний добуток:

$$(\hat{A},\hat{B}) \equiv -\chi_{A^+B}(0). \qquad (!)$$

Дійсно, легко перевірити, що (!) є лінійним по $\hat{B}$ та антилінійним по $\hat{A}$, задовільняє властивості $(\hat{A},\hat{B}) = (\hat{B},\hat{A})^*$ і, нарешті, є додатньо визначеним, оскільки $\chi_{A^+A}(0) \leq 0$ (нагадую, стабільність системи!).

З цих властивостей випливає нерівність Шварца

$$(\hat{A},\hat{A})(\hat{B},\hat{B}) \geq |(\hat{A},\hat{B})|^2 . \qquad (Ш)$$

Оскільки $(\hat{A},\hat{B}) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{p_m - p_n}{\omega_{nm}} A^+_{mn} B_{nm}$,

то взявши $\hat{B} = [\hat{H},\hat{C}^+]$ маємо

$$B_{nm} = \langle\psi_n|\hat{B}|\psi_m\rangle = \langle\psi_n|\hat{H}C^+ - C^+H|\psi_m\rangle$$
$$= E_n\langle\psi_n|C^+|\psi_m\rangle - E_m\langle\psi_n|C^+|\psi_m\rangle =$$
$$= \hbar\,\omega_{nm}\, C^+_{nm} .$$

Це дає

$$(\hat{A},\hat{B}) = \sum_{mn} (P_m - P_n) A^+_{mn} C^+_{nm} \; .$$

Тепер запишемо

$$\langle [\hat{A}^+, \hat{C}^+] \rangle_0 = \sum_{\substack{nm \\ n \leftrightarrow m}} \left(P_n A^+_{nm} C^+_{mn} - P_n C^+_{nm} A^+_{mn} \right)$$

$= \sum_{mn} (P_m - P_n) A^+_{mn} C^+_{nm}$ і бачимо, що

$$(\hat{A},\hat{B}) = \langle [\hat{A}^+, \hat{C}^+] \rangle_0 . \quad (!)$$

Аналогічно

$$(\hat{B},\hat{B}) = \frac{1}{\hbar} \sum_{nm} \frac{P_m - P_n}{\omega_{nm}} B^+_{mn} B_{nm} =$$

$\hat{B} = [\hat{H}, \hat{C}^+] \Rightarrow B_{nm} = \hbar \omega_{nm} C^+_{nm}$,

$B^+_{mn} = \hbar \omega_{mn} C_{mn}$

$$= \sum_{nm} (P_m - P_n) \hbar \omega_{nm} C_{mn} C^+_{nm} = \Big| \text{Перевірте!} \Big|$$

$$= -\langle [[\hat{H}, \hat{C}], \hat{C}^+] \rangle_0 . \quad (!!)$$

Підставимо (!) та (!!) у нерівність Шварцю (Ш):

$$-\chi_{A^+A}(0)\,(-1) \langle [[\hat{H}, \hat{C}], \hat{C}^+] \rangle_0 \geq \left| \langle [\hat{A}^+, \hat{C}^+] \rangle_0 \right|^2$$

Це і дасть нерівність Боголюбова, оскільки $\left| \langle [\hat{A}^+, \hat{C}^+] \rangle_0 \right|^2 = \left| \langle [\hat{A}, \hat{C}] \rangle_0 \right|^2$

$$\chi_{A^+A}(0) \langle [[\hat{H}, \hat{C}], \hat{C}^+] \rangle_0 \geq \left| \langle [\hat{A}, \hat{C}] \rangle_0 \right|^2 .$$

(k) Функція відгуку густина-густина та правило сум для неї.

Задачі ми розв'язували знаходячи явний вигляд ф-ї відгуку густина-густина. Тепер же проведемо більш формальний розгляд.

Ф-я відгуку $\chi_{nn}(\vec{r}, \vec{r}', t)$ описує відгук від величини очікування оператора густини

$$\hat{n}(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i),$$

у точці $\vec{r}$ на скалярний потенціал $V_{ext}(\vec{r}', t)$, який поєднується лінійно з густиною $\hat{n}(\vec{r}')$ у точці $\vec{r}'$. Таким чином, збурений гамільтоніан

$$\hat{H}_v(t) = \hat{H} + \int V_{ext}(\vec{r}', t)\,\hat{n}(\vec{r}')\,d\vec{r}'.$$

Відповідно, залежна від часу індукована густина $n_1(\vec{r}, t)$ дорівнює

(!) $$n_1(\vec{r}, t) = \int_0^\infty d\tilde{t} \int d\vec{r}'\, \chi_{nn}(\vec{r}, \vec{r}', \tilde{t})\, V_{ext}(\vec{r}', t - \tilde{t}),$$

де ми ввели позначення

(!!) $$\chi_{nn}(\vec{r}, \vec{r}', t) \equiv \chi_{n(\vec{r})n(\vec{r}')}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\left\langle \left[\hat{n}(\vec{r}, t), \hat{n}(\vec{r}')\right] \right\rangle_0 .$$

Тепер обчислимо лінійний відгук на зовнішній потенціал довільної форми як у просторі, так і у часі.

Вірно, що (!) є звичайною згорткою по часу і, оскільки Фур'є перетворення згортки є добутком, то я одразу перепишу (!) у формі:

$$n_1(\vec{r},\omega) = \int d\vec{r}\,' \chi_{nn}(\vec{r},\vec{r}\,',\omega) V_{ext}(\vec{r}\,',\omega).$$

З змінними $\vec{r}$ та $\vec{r}\,'$ поки складніше, бо ми ще не показали, що χ_{nn} залежить від $\vec{r}-\vec{r}\,'$.
Давайте взагалі поки опустимо змінну ω та, відповідно, час.
Давайте розглянемо найважливіший випадок періодичного потенціалу

$$V_{ext}(\vec{r}\,') = \frac{1}{L^d} V_{ext}(\vec{q}\,') e^{i\vec{q}\,'\vec{r}\,'},$$

оскільки загальний випадок отримуватиметься лінійною суперпозицією таких потенціалів.
Таким чином перепишемо (!) так:

$$n_1(\vec{r}) = \int d^d\vec{r}\,' \chi_{nn}(\vec{r},\vec{r}\,') \frac{1}{L^d} V_{ext}(\vec{q}\,') e^{i\vec{q}\,'\vec{r}\,'}.$$

Оскільки $n_1(\vec{r}) = \frac{1}{L^d}\sum_{\vec{q}} n_1(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}}$, то

$$n_1(\vec{q}) = \int d^d r\, e^{-i\vec{q}\vec{r}} n_1(\vec{r}).$$

Це дає

$$n_1(\vec{q}) = \int d^d r\, e^{-i\vec{q}\vec{r}} \int d^d r' e^{i\vec{q}\,'\vec{r}\,'} \chi_{nn}(\vec{r},\vec{r}\,') \frac{1}{L^d} \times$$
$$\times V_{ext}(\vec{q}\,').$$

Останню рівність тотожно перепишемо у вигляді (відповідною ω!)

$$n_1(\vec{q}, \omega) = \chi_{nn}(\vec{q}, \vec{q}\,', \omega) V_{ext}(\vec{q}\,', \omega),$$

якщо я введу позначення

$$\chi_{nn}(\vec{q}, \vec{q}\,', \omega) \equiv \frac{1}{L^d} \int d^d r e^{-i\vec{q}\vec{r}} \int d^d r' e^{i\vec{q}\,'\vec{r}\,'}$$

$$\times \int_0^{\infty} dt\, \chi_{nn}(\vec{r}, \vec{r}\,', t) e^{i\omega t}.$$

Скомбінувши останнє визначення з (!!!)

$$\chi_{nn}(\vec{q}, \vec{q}\,', \omega) = \frac{1}{L^d} \chi_{n_{\vec{q}}\, n_{-\vec{q}\,'}}(\omega),$$

де $n_{\vec{q}} = \sum_i e^{-i\vec{q}\vec{r}_i}$ – оператор флуктуацій густини з хвильовим вектором $\vec{q}$.

Взагалі, збурення з хвильовим вектором $\vec{q}$ створює модуляції густини для всіх значень $\vec{q}$, при яких ф-я $\chi_{nn}(\vec{q}, \vec{q}\,', \omega) \neq 0$. Основне спрощення відбувається для трансляційно-інваріантних систем, коли χ_{nn} залежить тільки від $\vec{r} - \vec{r}\,'$!
(Це також вірно для самоусереднених невпорядкованих систем.)

Див. додаток A з книги Flensberg.
$f(\vec{r}, \vec{r}\,') = f(\vec{r} - \vec{r}\,')$.
Запишемо як для неперервних систем, тобто з інтегралами.

$$f(\vec{r},\vec{r}\,') = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} f_{\vec{k},-\vec{k}'} e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-i\vec{k}'\vec{r}\,'} = *$$

$$\vec{k}\vec{r} - \vec{k}'\vec{r}\,' = \vec{k}\vec{r} - \vec{k}\vec{r}\,' + \vec{k}\vec{r}\,' - \vec{k}'\vec{r}\,' =$$
$$= \vec{k}(\vec{r}-\vec{r}\,') + (\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}\,'.$$

$$* = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} f_{\vec{k},-\vec{k}'} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}\,')} \cdot e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}\,'} \quad (a)$$

Оскільки $f(\vec{r},\vec{r}\,')$ має залежати від $\vec{r}-\vec{r}\,'$, то множник з $\vec{r}\,'$ має бути незалежним від $\vec{r}\,'$. Це можливо тільки коли $f_{\vec{k},-\vec{k}'} \propto \delta(\vec{k}-\vec{k}')$.

Коефіцієнт, звісно, теж можна знайти:

$$f(\vec{r},\vec{r}\,') = \tilde{f}(\vec{r}-\vec{r}\,') = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{f}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}\,')}. \quad (в)$$

Порівнявши (а) з (в) бачимо, що

$$f_{\vec{k},-\vec{k}'} = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}') \tilde{f}_{\vec{k}}, \text{ тобто}$$

$f(\vec{r},\vec{r}\,') \leftrightarrow f_{\vec{k},-\vec{k}'}$ в трансляційно-інваріантній системі.

У дискретному випадку

$$f_{\vec{k},-\vec{k}'} = V \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \tilde{f}_{\vec{k}}.$$

Повертаємося до χ_{nn}.

Оскільки ми вже визначили $\chi_{nn}(\vec{q},\vec{q}\,',\omega)$ так, що туди увійшов $\frac{1}{\mathcal{V}}$, то для трансляційно-інваріантної системи маємо

$$\chi_{nn}(\vec{q},\vec{q}\,',\omega) = \chi_{nn}(\vec{q},\omega)\delta_{\vec{q},\vec{q}\,'}.$$

Далі нагадаю, що

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{\rho_m - \rho_n}{\omega - \omega_{nm} + i\eta} A_{mn} B_{nm}.$$

Відповідно

$$\chi_{nn}(\vec{q},\omega) = \frac{1}{L^d}\chi_{n_{\vec{q}}n_{-\vec{q}}}(\omega) =$$

$$= \frac{1}{\hbar L^d}\sum_{nm}\frac{\rho_m-\rho_n}{\omega-\omega_{nm}+i\eta}\left|(n_{-\vec{q}})_{nm}\right|^2.$$

Із загальних співвідношень

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega) = \mathrm{Re}\,\chi_{A^+B^+}(-\omega),$$

$$\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega) = -\mathrm{Im}\,\chi_{A^+B^+}(-\omega)$$

(нагадаю, що наші $n_{\vec{q}}$ такі, що $\hat{n}^+_{\vec{q}} = \hat{n}_{-\vec{q}}$ див. лекцію про співвідношення симетрії)

та того, що за припущенням виконується також симетрія відносно інверсії $\chi_{nn}(\vec{r},t) = \chi_{nn}(-\vec{r},t)$ маємо

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

$$\mathrm{Re}\,\chi_{nn}(\vec{q},-\omega) = \mathrm{Re}\,\chi_{nn}(\vec{q},\omega),$$

$$\mathrm{Im}\,\chi_{nn}(\vec{q},-\omega) = -\mathrm{Im}\,\chi_{nn}(\vec{q},\omega).$$

Це так звані співвідношення парності.

Тепер розглянемо поведінку $\chi_{nn}(\vec{q},\omega)$ при високих частотах, а також так зване правило f-сум.

Оскільки $\chi_{nn}(\vec{q},\omega)$ задовільняє співвідношення парності, які були використані при отриманні правила сум для непарних моментів, то можемо їх використати:

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{M_{AB}^{(2k+1)}}{\omega^{2k+2}},$$ де

моменти

$$M_{AB}^{(2k+1)}\equiv-\frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}\omega^{2k+1}\,\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega)\,d\omega= \quad (*)$$

$$=\frac{i}{\hbar}(-1)^k\left\langle\left[\hat{A}^{(2k+1)},\hat{B}\right]\right\rangle_0,$$

$$\hat{A}^{(l)}=\left(\frac{d^l\hat{A}(t)}{dt^l}\right)_{t=0}=\left(\frac{i}{\hbar}\right)^l\left[\hat{H},\left[\hat{H}\ldots\left[\hat{H},\hat{A}\right]\right]\right].$$

Тому, у нашому випадку

$$\mathrm{Re}\,\chi_{nn}(\vec{q},\omega)\xrightarrow{\omega\to\infty}\frac{M_{nn}^{(1)}(\vec{q})}{\omega^2}+\frac{M_{nn}^{(3)}(\vec{q})}{\omega^4},$$

де $M_{nn}^{(1)}(\vec{q})$ та $M_{nn}^{(3)}$ – перший та третій моменти, відповідно.

Правило сум для третього моменту розглянуто у підручнику також, але ми обмежимося лише розглядом правила сум $(*)$ для першого моменту.

$$M^{(1)}_{nn}(\vec{q}) = -\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \omega \, \mathrm{Im}\, \chi_{nn}(\vec{q}, \omega)\, d\omega =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[A^{(1)}(t), \hat{B}\right]\right\rangle_0 \qquad (**)$$

У нашому випадку маємо

$\hat{B} = n_{-\vec{q}}$ та $\hat{A}^{(1)}(t) = \frac{1}{L^d}\frac{\partial \hat{n}_{\vec{q}}}{\partial t}$.

Нагадаю, що L^{-d} виникає з означення $\chi_{nn}(\vec{r}, \vec{r}\,', \omega) = \frac{1}{L^d}\chi_{n_{\vec{q}} n_{-\vec{q}}}(\omega)$.

І для знаходження явного вигляду правої частини (**) нам треба явно обчислити

$$\frac{i}{\hbar L^d}\left\langle\left[\frac{\partial \hat{n}_{\vec{q}}}{\partial t}, \hat{n}_{-\vec{q}}\right]\right\rangle_0 \qquad (!)$$

Для цього скористаємося рівнянням неперервності $\frac{\partial}{\partial t}\hat{n}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{r})$, або його Фур'є перетворенням:

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{n}_{\vec{q}} = -i\vec{q}\cdot\vec{j}_{\vec{q}}\,. \qquad (***)$$

Оператор струму (парамагнітного) в нас такий:

$$\hat{\vec{j}}_p(\vec{r}) = \frac{1}{2m}\sum_i\left[\hat{\vec{p}}_i\,\delta(\vec{r}-\hat{\vec{r}}_i) + \delta(\vec{r}-\hat{\vec{r}}_i)\,\hat{\vec{p}}_i\right].$$

Відповідно

$$\hat{\vec{j}}_{p,\vec{q}} = \int \hat{\vec{j}}_p(\vec{r})\, e^{-i\vec{q}\vec{r}} =$$

$$= \frac{1}{2m}\sum_i\left[\hat{\vec{p}}_i e^{-i\vec{q}\hat{\vec{r}}_i} + e^{-i\vec{q}\hat{\vec{r}}_i}\hat{\vec{p}}_i\right] =*$$

$$\hat{\vec{p}}_i e^{-i\vec{q}\vec{r}_i} = -i\hbar(-i\vec{q})e^{-i\vec{q}\vec{r}_i} + e^{-i\vec{q}\vec{r}_i}\hat{\vec{p}}_i .$$

$$* = \frac{1}{m}\sum_i \left(\hat{\vec{p}}_i + \frac{\hbar\vec{q}}{2}\right)e^{-i\vec{q}\vec{r}_i} .$$

Підставивши (***) до (!) маємо

$$M^{(1)}_{nn}(\vec{q}) = \frac{\vec{q}\cdot\langle[\hat{\vec{j}}_{p\vec{q}}, \hat{n}_{-\vec{q}}]\rangle_0}{\hbar L^d} .$$

Нагадаю, що у представленні первинного квантування

$$\hat{n}_{\vec{q}'} = \sum_e e^{-i\vec{q}'\vec{r}_e} .$$

Цей комутатор можна обрахувати або у представленні первинного квантування, або вже у представленні вторинного квантування, де

$$\hat{\vec{j}}_{p\vec{q}} = \frac{\hbar}{m}\sum_{\vec{k}\sigma}\left(\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}\right)\hat{a}^+_{\vec{k}-\vec{q}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}$$

та

$$n_{\vec{q}'} = \sum_{\vec{p}\sigma'} \hat{a}^+_{\vec{p}-\vec{q}'\sigma'}\hat{a}_{\vec{p}\sigma'} .$$

Для обрахунку використовується правило

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B ,$$

або одразу

$$[AB, CD] = A[B, C]D + [A, C]BD + CA[B, D] + C[A, D]B$$

Нагадаю, що $[a_n, a^+_m] = \delta_{nm}$ та $[a_n, a_m] = [a^+_n, a^+_m] = 0$.

Це раз (опускаю все зараз непотрібне)

$$[a^+_{k-q}\, a_k,\, a^+_{p+q'}\, a_p] =$$

A B C D

$$= a^+_{k-q}[a_k, a^+_{p+q'}]a_p + \underbrace{[a^+_{k-q}, a^+_{p+q'}]}_{=0}a_k a_p$$

$$= 0$$

$$+ a^+_{p+q'}\, a^+_{k-q}[a_k, a_p] + a^+_{p+q'}[a^+_{k-q}, a_p]a_k =$$

$$= a^+_{k-q}\,\delta_{k,p+q'}\,a_p + a^+_{p+q'}(-\delta_{k-q,p})a_k$$

$$k = p+q' \qquad\qquad p = k-q$$

В результаті, маємо наступний внесок до $[\vec{j}_{pq}, n_{-q'}] \sim$

$$\sim \sum_p (\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2})a^+_{p+q'-q}\,a_p - \sum_{k \to p}(k+\frac{q}{2})a^+_{k+q'-q}\,a_k$$

$$\text{"}p+q'$$

$$= \vec{q}\,' \sum_p a^+_{p-(q-q')}\,a_p \,. \qquad \text{Опустив } \sigma.$$

Таким чином,

$$[\hat{\vec{j}}_{\vec{q}}, \hat{n}_{-\vec{q}'}] = \frac{\hbar \vec{q}\,' \hat{n}_{\vec{q}-\vec{q}'}}{m}.$$

$$\hat{n}_{\vec{q}=0} = \sum_{\vec{p}\sigma} \hat{a}^+_{\vec{p}\sigma} a_{\vec{p}\sigma}$$ – оператор кількості частинок

$\langle \hat{n}_{\vec{0}} \rangle = N$ – кількість частинок.

$$M^{(1)}_{nn}(\vec{q}) = -\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \omega\, \mathrm{Im}\, \chi_{nn}(\vec{q},\omega) = \frac{n q^2}{m}.$$

Це так звана f-sum rule.

Таку назву з атомної фізики для dipole oscillator strength. Пов'язане зі спостереженням, що при великих енергіях електрони поводять себе вже як вільні невзаємодіючі частинки.

Ось воно

$$\sum_n f_{n0} = \frac{2m}{\hbar^2}\sum_n (E_n - E_0)\left|\langle \Psi_n | \hat{\varepsilon}\cdot r | \Psi_0 \rangle\right|^2 = 1.$$

$\hat{\varepsilon}$ – поляризація зовнішнього електрич. поля.

Вычисление функций отклика.

[По Разделу 10.5 Coleman p. 274 (2015г)]

Давайте вычислим ф-и отклика во мнимом времени, а затем сделаем аналитич. продолжение.

$$\hat{X} = \psi^{\dagger}_{\alpha}(x)\, X_{\alpha\beta}\, \psi_{\beta}(x).$$

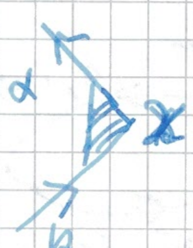
Вот примеры операторов $\hat{X}$ и соответств. ф-и отклика:

Величина	Оператор $\hat{X}$	$X(\vec{k})$	Ф-я отклика
Плотность	$\hat{\rho}(x) = \psi^{\dagger}(x)\psi(x)$	$\rho_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$	Зарядовая восприимчив.
Спиновая плотность	$\vec{S}(x) = \psi^{\dagger}_{\alpha}(x)\left(\frac{\vec{\sigma}}{2}\right)_{\alpha\beta} \times \psi_{\beta}(x)$	$M_{\alpha\beta} = \mu_B \vec{\sigma}_{\alpha\beta}$	Спиновая восприимчив.
Плотность тока	$\frac{e}{m}\psi^{\dagger}(x)\left(-i\hbar\overset{\leftrightarrow}{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\psi(x)$	$\vec{j} = e\vec{v}_k = e\vec{\nabla}\varepsilon_k$	электропроводимость
Тепловой ток	$\frac{\hbar^2}{2m}\psi^{\dagger}(x)\overset{\leftrightarrow}{\nabla}\overset{\leftrightarrow}{\partial_t}\psi(x)$	$\vec{j}_T = i\omega_n \vec{v}_k = i\omega_n \vec{\nabla}\varepsilon_k$	теплопроводность.

Здесь $\overset{\leftrightarrow}{\nabla} \equiv \frac{1}{2}(\vec{\nabla} - \overleftarrow{\nabla})$. Токовым откликом займемся отдельно!

$$\overset{\leftrightarrow}{\partial_t} \equiv \frac{1}{2}(\vec{\partial}_t - \overleftarrow{\partial}_t)$$

Этому оператору соответствует вершина



$= X_{\alpha\beta}$,

где спиновые переменные свернуты с

внутренними спиновыми переменными диагр. Феймана. Это означает что $X_{\alpha\beta}$ становится частью Tr по спин. пер.

Разложив соотв. ф-ю отклика

$$\chi(x) = \langle X(x)\, X(0)\rangle$$

по Фейн. диагр., получим

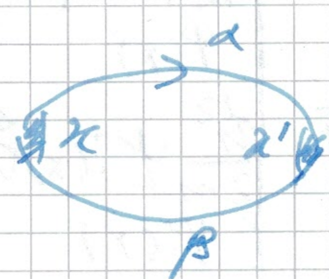
$$\chi(x) = \langle X(x)\, X(0)\rangle = \sum \text{замкнутые связные двухверш. диаграммы}$$

$=$ 

Например, для невзаимод. электрон. системы спиновая ф-я содержит

$$X(x) = \mu_B\, \psi^+_\alpha(x)\, \sigma_{\alpha\beta}\, \psi_\beta(x),$$

так что коррел. ф-я

$$\chi^{ab}(x-x') = \mu_B^2 \times \sigma^a_{\alpha\beta}$$ 

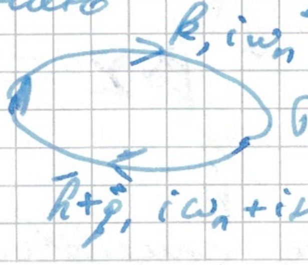
$\sigma^b_{\beta\alpha}$

a, b — компоненты.

$$= -\mu_B^2\, \mathrm{Tr}\left[\sigma^a G(x-x')\, \sigma^b G(x'-x)\right] =$$

$$= -\delta^{ab}\, 2\mu_B^2\, G(x-x')\, G(x'-x).$$

Далее делается переход к частотно-импульсному представлению

$$\chi^{ab}(\underset{\text{бозе}}{q} = \vec q, i\nu_n) = \mu_B^2 \times \sigma^a$$ 

$\sigma^b =$

Вы должны были изучать с Горбаром..

$$\equiv -\mu_B^2\, T \sum_{i\omega_n} \int \frac{d\bar{k}}{(2\pi)^d}\, \mathrm{Tr}\left[\sigma^a G(\bar{k}, i\omega_n)\sigma^b \times G(\bar{k}+\bar{q}, i\omega_n + i\nu_r)\right] \equiv$$

$$\equiv \delta^{ab}\, \chi(\bar{q}, i\nu_r), \text{ где}$$

$$\chi(\bar{q}, i\nu_r) = -2\mu_B^2 \int \frac{d\bar{k}}{(2\pi)^d} \sum_{i\omega_n} G(\bar{k}, i\omega_n)\, G(\bar{k}+\bar{q}, i\omega_n + i\nu_r),$$

$G(\bar{k}, i\omega_n) = \dfrac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\bar{k}}}$ или же с μ, $\xi_{\bar{k}} = \varepsilon_{\bar{k}} - \mu$.

Будем писать $\varepsilon_{\bar{k}}$, но есть пов. Ферми

Напомню как обычно вычисляются сум. по мацуб. частотам.

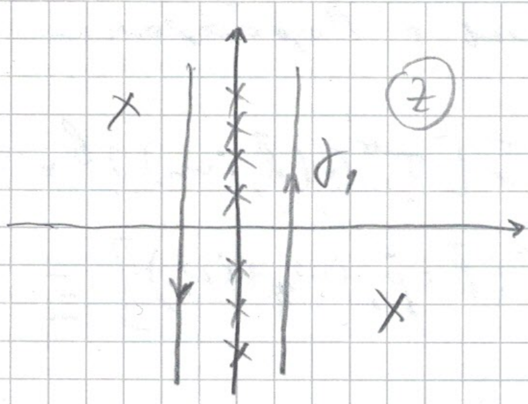
Пусть есть некая ф-я $h(\omega_n)$, где ω_n – бозонная или фермионная частота и нам нужно вычислить

$$S \equiv \sum_n h(\omega_n).$$

Основная идея – ввести комплексную вспомогат. ф-ю $g(z)$, кот. имеет полюса $z = i\omega_n$. Тогда сумма S возникнет как сумма вычетов, полученных интегрированием произведения gh вдоль правильно выбранного контура в комп. плоскости.

Обычно

$$g(z) = \begin{cases} \dfrac{\beta}{\exp(\beta z) - 1} & \text{– бозоны} \\ \dfrac{\beta}{\exp(\beta z) + 1} & \text{– фермионы}, \quad \text{или} \end{cases}$$



$$\rho(z) = \begin{cases} \frac{\beta}{2}\,\mathrm{cth}\frac{\beta z}{2} & \text{– бoз.} \\ \frac{\beta}{2}\,\mathrm{th}\frac{\beta z}{2} & \text{– ферм.} \end{cases}$$

в 4+land неверно!

$$\sum_n h(\omega_n) = -\rho \sum_i \operatorname*{res}_{z=z_i}\left[h(-iz)\,\rho(z)\right], \quad \rho = \pm 1$$

$$\omega_n \to -it$$

$$T\sum_n \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\bar k}}\,\frac{1}{i\omega_n + i\nu_r - \varepsilon_{\bar k+\bar q}} =$$

$$= \sum_i \operatorname{res}\left[\frac{1}{z-\varepsilon_{\bar k}}\cdot\frac{1}{z+i\nu_r-\varepsilon_{\bar k+\bar q}}\,\frac{1}{\exp(\beta z)+1}\right] =$$

$$z_1 = \varepsilon_{\bar k}, \quad z_2 = -i\nu_r + \varepsilon_{\bar k+\bar q}$$

$$\operatorname*{res}_{z=a}\frac{\varphi(z)}{\psi(z)} = \frac{\varphi(a)}{\psi'(a)}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon_{\bar k} + i\nu_r - \varepsilon_{\bar k+\bar q}}\,n_F(\varepsilon_{\bar k}) + \frac{1}{-i\nu_r + \varepsilon_{\bar k+\bar q} - \varepsilon_{\bar k}}\,n_F(-i\nu_r + \varepsilon_{\bar k+\bar q})$$

$$n_F(\omega) = \frac{1}{2}\left[1 - \mathrm{th}\frac{\omega}{2T}\right]$$

$$n_F(\varepsilon) \equiv \frac{1}{\exp(\beta\varepsilon)+1}$$

$$\nu_r = 2\pi r T \Rightarrow \exp\left[\underbrace{\ }_{\beta}(-i\nu_r + \varepsilon_{\bar k+\bar q})\right] = \exp\left[\beta\varepsilon_{\bar k+\bar q}\right]$$

$$= \frac{n_F(\varepsilon_{\bar k+\bar q}) - n_F(\varepsilon_{\bar k})}{\varepsilon_{\bar k+\bar q} - \varepsilon_{\bar k} - i\nu_r}$$

$$\frac{1}{2}\,\frac{\mathrm{th}\,\varepsilon_{k+q} - \mathrm{th}\,\varepsilon_k}{\varepsilon_k + i\nu - \varepsilon_{k+q}} = \frac{n_F(\varepsilon_{k+q}) - n_F(\varepsilon_k)}{\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k - i\nu}$$

Левитов, Шитов в зад. 24 и 37.

50

Коммент. по поводу зад. 24

В п а) вычисляется коррелятор плотность – плотность ферми-газа $\langle T\,\hat{n}(\vec r, t)\,\hat{n}(\vec r', t')\rangle$ при $T=0$.

$$\Pi(\omega, k) = -2\nu_0\left[1 - \frac{\omega}{2kv_F}\ln\left|\frac{kv_F+\omega}{kv_F-\omega}\right| + \frac{i\pi}{2}\frac{|\omega|}{kv_F}\,\Theta\left(1-\frac{|\omega|}{kv_F}\right)\right], \quad \nu_0 = \frac{p_0 m}{2\pi^2\hbar^3}.$$

Видите, что $\Pi(-\omega) = \Pi(\omega)$.

В п б) предлагается найти парамагнитн. вклад в магн. восприимч. $\chi(\omega, k)$ при $T=0$.

Помните, у нас было $\mathrm{Re}\,C^+(\omega) = \mathrm{Re}\,C^-(\omega)$ и $\mathrm{Im}\,C^+(\omega) = -\mathrm{Im}\,C^-(\omega)$.

Уже не такие аналитич. св-ва, как у $\Pi(\omega)$: $\chi(-\omega) = \chi^*(\omega)$.

Зад. 87 используя т-цу об аналит. продолжении найдите χ.

~~Ф~~-ла (7-87) (по нов. изданию!)

$$\chi^M_{(i\nu, k)} = -2\mu_B^2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,\frac{n_F(\xi_{\vec p}) - n_F(\xi_{\vec p+\vec k})}{i\nu - \xi_{\vec p+k} + \xi_{\vec p}},$$

$\xi_{\vec p} = \frac{\vec p^{\,2}}{2m} - \mu$ отсчитыв от х. п.

~~Аналогично~~ получить (см. 3-ч.):

$$\chi(\omega, k) = 2\mu_B^2\nu_0\left(1 + \frac{\omega}{2kv_F}\ln\frac{\omega - kv_F + i0}{\omega + kv_F - i0}\right)$$

$$\mathrm{Re}\,\chi(\omega, k) = 2\mu_B^2\nu_0\left(1 + \frac{\omega}{2kv_F}\ln\left|\frac{\omega - kv_F}{\omega + kv_F}\right|\right)$$

$$\mathrm{Im}\,\chi(\omega, k) = \pi\mu_B^2\nu_0\frac{\omega}{kv_F}\,\Theta(kv_F - |\omega|)$$

5

В результате,

$$\chi(\vec{q}, z) = 2\mu_B^2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^D} \frac{n_F(\varepsilon_{\vec{k}}) - n_F(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}} - z}.$$

о.к.

Мы уже говорили, что спектр флуктуаций (в нашем случае спиновых) определяется $\chi''(\vec{q}, \omega)$. Найдём её и разберём пример.

$$\chi''(\vec{q}, \omega + i0) = 2\mu_B^2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \pi\, \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}} - \omega) \times$$

$$\times \left[n_F(\varepsilon_{\vec{k}}) - n_F(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) \right].$$

$$\frac{1}{x \pm i0} = \mp i\pi\delta(x) + \text{V.p.}\frac{1}{x}$$

Пример. Вычислить $\operatorname{Im}\chi(\vec{q}, \omega + i0)$ при $\omega \ll \varepsilon_F$.

В пределе $\lim\limits_{\omega \to 0} \dfrac{\chi''(\vec{q}, \omega + i0)}{\omega} =$

$$= 2\mu_B^2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^D} \pi\, \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}) \frac{n_F(\varepsilon_{\vec{k}}) - n_F(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega} =$$

$\omega = \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}$

In $D = 3$

$$= 2\mu_B^2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \pi\, \delta(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}) \left(-\frac{dn_F}{d\varepsilon_{\vec{k}}} \right) = *$$

$\simeq \delta(\varepsilon)$

$$\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \to \int d\varepsilon\, N(\varepsilon) \int_{-1}^{1} d\,\frac{\cos\theta}{2}$$

DOS на 1 spin

$\varepsilon = 0$ пов. Ферми

В принципе лучше писать $\xi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \mu$!

$$* = 2\mu_B^2 N(0) \int_{-1}^{1} \frac{d\cos\theta}{2} \delta\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{q k_F}{m} \cos\theta \right) =$$

$$= \begin{cases} \pi \mu_B^2 \dfrac{N(0)}{v_F q}, & q \leq 2k_F, \\ 0, & q > 2k_F \end{cases}$$

Спектроскопия: [Раздел 10.6 Coleman p. 277 (2012)]
Связь измерения и корреляции. §1

Мы уже говорили о спектроскопии. методах изучения в физике конденсир. сост.

Посмотрим таблицу из Coleman, хотя он и нарушил классификацию Altland включив STM и транспорт в принципы спектроскопии.

Давайте поговорим более формально.

Посылаем поток частиц с энергией E и импульсом $\vec{q}$ (волн. вект.). Дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\omega} = \frac{\text{уходящие частицы}}{\text{приходящие частицы}}.$$

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\omega} \sim \int d^4x \, \langle X(\vec{x},t)\, X(0)\rangle e^{-i(\vec{q}x-\omega t)}$$

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

Как так получилось, что как бы пробуем две точки?

Легче всего увидеть с пом. „золотого правила Ферми". Γ — вер. перех. за ?!

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, d\omega} \sim \Gamma_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_f p_i \left|\langle f|V|i\rangle\right|^2 \delta(E_f-E_i),$$

где p_i — вероятность пребывания в начальном состоянии i, f — final state.

Это всё как борновское приближение.

Имеем падающую частицу (фотон, электрон, нейтрон) с импульсом $\vec{k}$, кот. рассеивается в конечное состояние (фотон, электрон, нейтрон) с импульсом $\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q}$.

Сама же система переходит из состояния $|\lambda\rangle$ в состояние $|\lambda'\rangle$.

т.е. $|i\rangle = |\lambda\rangle|\vec{k}\rangle$, $|f\rangle = |\lambda'\rangle|\vec{k}'\rangle$.

Если гамильтониан, описывающий рассеяние имеет вид

$\hat{V} \sim g\int d\vec{x}\, \rho(\vec{x})\, \hat{X}(\vec{x})$, где $\rho(\vec{x})$ – плотность падающих частиц, то матр. элемент

$$\langle f|\hat{V}|i\rangle = g\int d\vec{x}'\langle \vec{k}'|\vec{x}'\rangle\langle\lambda'|\hat{X}(\vec{x}')|\lambda\rangle \cdot \langle\vec{x}'|\vec{k}\rangle =$$

$$= \frac{g}{V}\int d\vec{x}'\, e^{i\vec{q}\vec{x}}\langle\lambda'|\hat{X}(\vec{x}')|\lambda\rangle.$$

Отсюда (scattering rate)

$$\Gamma_{i\to f} = \frac{g^2}{V^2}\int d\vec{x}\, d\vec{x}'\, p_\lambda \langle\lambda|\hat{X}(\vec{x})\lambda'\rangle \cdot \langle\lambda'|\hat{X}(\vec{x}')|\lambda\rangle \cdot \;?$$
$$\cdot 2\pi\, \delta(E_{\lambda'} - E_\lambda - \omega)\, e^{-i\vec{q}(\vec{x}-\vec{x}')}$$

где $p_\lambda = e^{-\beta(E_\lambda - F)}$ – вероятность (больцмановский множитель)

Теперь, если проделать спектральное разложение корреляционной ф-и (как мы уже делали), то

8

$$\int dt\, e^{i\omega t} \langle \hat{X}(\vec{x},t) X(\vec{x}',0)\rangle =$$

$$= 2\pi \sum_{\lambda,\lambda'} p_\lambda \langle \lambda | \hat{X}(x) | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \hat{X}(\vec{x}',0) | \lambda \rangle \times \delta(E_{\lambda'} - E_\lambda - \omega)$$

то можно увидеть, что

$$\Gamma_{i\to f} \sim \frac{f^2}{V^2} \int d\vec{x}\, d\vec{x}' \int dt\, e^{i\omega t} \langle \hat{X}(\vec{x},t) X(\vec{x}',0)\rangle \times e^{-i\vec{q}(\vec{x}-\vec{x}')} =$$

$$= \frac{f^2}{V} \int d\vec{x}\, dt\, e^{-i(\vec{q}\vec{x}-\omega t)} \langle \hat{X}(\vec{x},t)\, \hat{X}(0)\rangle,$$

где за счёт трансляц. инвар-ти

$$\int d\vec{x}' = V .$$

Если поделить $\Gamma_{i\to f}$ на плотн. потока падающ. частиц $\sim \frac{1}{V}$, то получ. дифф. сечение рассеяния.

Пример. Неупругое рассеяние нейтронов. Нейтроны взаимод. со спиновой плотн. электронов

$$\hat{X} = S(\vec{x}) .$$

Отсюда

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}(\vec{q},\omega) \sim \int d^4x \langle \hat{S}_-(\vec{x},t) \hat{S}_+(0)\rangle \times e^{-i(\vec{q}\vec{x}-\omega t)}$$

$$\propto \frac{1}{1-e^{-\beta\omega}} \chi''(\vec{q},\omega)$$

Имеем домнож. фак. т-ку для бозонов

9 Другой пример. ARPES.
Падает рентг. излучение и из материала „выбиваются" электроны.

$\hat{X} = \psi$ и интенсивность „выбитых" электронов

$$I(\vec{k},\omega) \sim \int d^4x \, \langle \psi^{+}(x)\psi(0)\rangle e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)}$$

$$= \underbrace{\frac{1}{1+e^{\beta\omega}}}_{f(-\omega)} A(\vec{k},-\omega).$$

Из последнего Совета про ARPES.

$H_I = -\int d^3x \, \vec{j}(x)\vec{A}(x)$, где

$\vec{j}(x) = i\frac{e\hbar}{2m}\psi^{+}_{\sigma}(x)\vec{\nabla}\psi_{\sigma}(\vec{x})$ —

парамагнитный ток.

„Внезапное приближение" — предполагается, что дипольный матричный элемент между начальн. и кон. состояниями имеет медленную зависимость от энергии и импульса входящего фотона:

$$\langle \varphi, \vec{k}+\vec{q} \,|\, -\vec{j}\cdot\vec{A} \,|\, \lambda, \vec{q} \rangle \sim \Lambda(\vec{q}, \hat{e}_{\lambda}) \times \langle \varphi | c_{\vec{k}\sigma} | \lambda \rangle$$

ARPES основан на предположении, что Λ слабо зависит от импульса и энергии. Это предполож. гораздо более слабо обосновано, чем $T = const$ для STM.