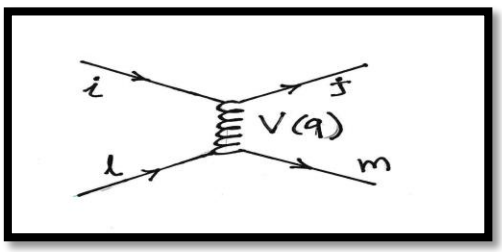
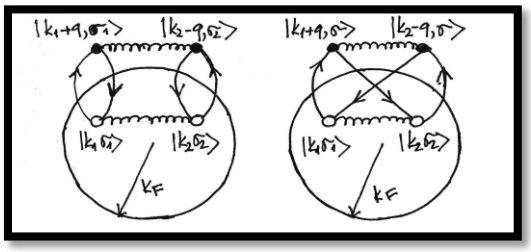
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ FEN-EDEBİYAT FAKÜLTESİ
FİZİK BÖLÜMÜ

ÇOK PARÇACIK SİSTEMLERİNİN KUANTUM MEKANİĞİNE GİRİŞ

Prof. Dr. Hasan TATLIPINAR

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \qquad G_{\sigma\sigma'}(r_1 - r_2) = <\psi_\sigma^+(r_1)\psi_{\sigma'}(r_2)>$$





$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}\sum_{kpq} V(q)\, a_{k+q}^\dagger a_{k-q}^\dagger a_p a_k$$

ÜNİVERSİTE YAYIN NO: YTÜ. FE. DK-2018. 0919
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ BASIM-YAYIN MERKEZİ/ISTANBUL-2018

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN - EDEBİYAT FAKÜLTESİ

Bütün Hakları Saklıdır. c 2018, Yıldız Teknik Üniversitesi
Bu eserin bir kısmı veya tamamı, Y.T.Ü. Rektörlüğü'nün izni olmadan,
hiçbir şekilde çoğaltılamaz, kopya edilemez.

ÇOK PARÇACIK SİSTEMLERİNİN KUANTUM MEKANİĞİNE GİRİŞ

Prof. Dr. Hasan TATLIPINAR

ISBN: 978-975-461-554-8

Y.T.Ü. Kütüphane ve Dokümantasyon Merkezi Sayı
YTÜ.FE.DK-2018.0919

Baskı
Yıldız Teknik Üniversitesi
Basım-Yayım Merkezi-İstanbul
Tel: (0212) 383 34 43

Yıldız Teknik Üniversitesi Yönetim Kurulu'nun
16.08.2018 tarih ve 2018/16 sayılı Toplantısında Alınan karara göre
Üniversitemiz Matbaasında 300+10 (Üçyüz + On) adet bastırılan,
"Çok Parçacık Sistemlerinin Kuantum Mekaniğine Giriş"
adlı telif eserin her türlü
bilimsel ve etik sorumluluğu yayına hazırlayana aittir

ÖNSÖZ

Çok parçacıklı sistemlerin incelenmesi fizik, kimya matematik gibi temel bilimlerin önemli araştırma konularından birisidir. Son yıllarda nano-teknolojideki gelişmelerden dolayı birçok mühendislik bilimi için de önemli olmaya başlamıştır. Maddenin atomlardan oluştuğu ve bir Mol maddenin Avagadro sayısı ($N_A = 6{,}02.10^{23}$ parçacık/mol) kadar atom veya molekül içerdiği, her atomun çekirdek ve elektronlardan oluştuğu göz önüne alınır ise maddenin yapısının ve fiziksel özelliklerinin anlaşılmasının esasında çok parçacık probleminin incelenmesi olduğu görülür. Çok parçacık problemi genel olarak iki türlü incelenebilir. Birincisi temel kavramlarını olasılık teorisinden alan istatistik mekanik yaklaşımı ile problemi incelemek ikincisi ise Newton hareket denklemi, Schrödinger dalga denklemi gibi çözümü analitik olarak yapılan denklemlerden yola çıkarak problemin incelenmesidir. Bu iki yaklaşımın ne zaman kullanılacağı incelenecek problemin doğası ile ilgilidir. Her iki yaklaşımın da uygulanacağı durumlarda elde edilen sonuçlar birbiri ile uyumlu olmalıdır. Burada problemin istatistik mekaniğe göre incelenmesi yapılmayacaktır fakat gerekli yerlerde istatistik mekanikle elde edilen sonuçlardan bahsedilecektir. Kitapta çok parçacıklı sistemlerin kuantum mekaniği üzerinde durulacaktır. Bunun için kuantum mekaniğinin (KM) temel kavramları verilerek birkaç basit probleme uygulanması yapılacaktır. Ayrıca KM göre çok cisim probleminin incelenmesinde yaygın olarak kullanılan yöntemler biraz sadeleştirilerek anlatılacaktır.

Kitap bir yarıyıllık ders için planlanmış olup sekiz bölümden oluşmuştur. Birinci bölümde kuantum mekaniğinin temel kavramları verilerek, birkaç parçacıktan oluşan sistemlerin standart kuantum mekaniğine göre nasıl incelendiği anlatılmıştır. İkinci bölümde ikinci kuantizasyon veya parçacık sayısı gösterimi kullanılarak çok parçacıklı sistemler için alan operatörleri tanımlanmış ve çeşitli sistemler için bu alan operatörleri kullanılarak sistemin Hamiltoniyeninin nasıl yazılacağı üzerinde durulmuştur. Ayrıca bu bölümde çok parçacıklı sistemlerin ortak davranışını anlatan temel uyarımlar yöntemine örnekler verilmiştir. Üçüncü bölümde elektron gaz sistemi detaylı olarak incelenmiştir. Dördüncü bölümde çok parçacıklı sistemlerin incelenmesinde yaygın olarak kullanılan ortalama alan teorisi (MF) yöntemi tartışılarak birkaç örnek verilmiştir. Beşinci bölümde Green fonksiyonları yönteminin temel kavramları anlatılarak sıfır sıcaklık Green fonksiyonları üzerinde durulmuştur. Bu bölümde Green fonksiyonlarının Feynman diyagramları cinsinden nasıl ifade edileceği ve Feynman diyagramları ile ilgili kurallar kısaca anlatılmıştır. Bunun yanında Green fonksiyonlarının spektral gösterimi ve sonlu sıcaklık durumları özetlenerek lineer respons teori ile olan ilişkileri üzerinde durulmuştur. Altıncı bölümde Kuantum Sıvılarının Landau Teorisi ve sıvı helyum ile

ilgili çalışmaların genel kavramları verilmiştir. Yedinci bölümde Bose Einstein Yoğuşması ve bununla ilgili Gross-Pitaevskii denklemi anlatılmıştır. Sekizinci bölümde her konu ile ilgili birkaç çözümlü örnek verilmiştir. EK 1 de ise okuma parçası olarak kuantum teorisin başlangıcında günümüze kadar teori ile ilgili ortaya atılan tartışmaların kısa bir özeti verilmiştir. Ayrıca süperiletkenlik, Bose-Einstein yoğuşması gibi makroskobik ölçekte gözlenen kuantum etkilerle ilgili kısa tanımlar yapılmıştır.

Kitaptaki konular Fizik Lisans ve Yüksek Lisans, Kimya Lisans ve Yüksek Lisans öğrencileri, Fizik dışında Temel Bilimlerde eğitim gören Lisans ve Yüksek Lisans öğrencileri başta olmak üzere fiziğe ilgi duyan herkese yöneliktir. Çok parçacık fiziği konusu oldukça zengin bir yabancı dil literatürüne sahiptir. Fakat Türkçede hemen hemen hiç literatür bulunmamaktadır. Bu nedenle bu kitap bu konuda bir çabayı amaçlamaktadır. Kitap bu konularda uzmanlaşmak isteyenlerden daha çok bu konularda genel fikir sahibi olmak isteyenlere hitap etmektedir. Kitabın çok parçacıklı sistemlerin kuantum teorisi gibi oldukça önemli fakat kısmi zorluklar da içeren bir konuya okuyucunun ilgisini çekeceğini umarım.

Bu kitap *Yıldız Teknik Üniversitesi* (*YTÜ*), *Fizik Bölümünde* 2005 yılından itibaren Lisan bölümünde seçmeli ders olarak, Yüksek Lisan bölümünde aralıklı olarak açtığım *Çok Parçacık Fiziği* dersinin ders notlarından ve kaynaklarda belirtilen kitaplardan derlenmiştir. Bu dersi alan ve beni ders notlarımı kitaba dönüştürmem için motive eden öğrencilerimi saygı ve sevgi ile anarak teşekkür ederim. Kitap ile ilgili görüş ve önerilerini esirgemeyen İstanbul Teknik Üniversitesi (İTÜ) Fizik Mühendisliği Bölümünde hocam olan Prof. Dr. Bekir KARAOĞLUNA, Yıldız Teknik Üniversitesi Fizik Bölümünden Prof. Dr. Ahmet ALTINDAL'a bu konuya ilgimi çeken İstanbul Üniversitesi (İÜ)'nde doktora tez danışmanım Prof. Dr. Zehra AKDENİZ'e teşekkür ederim. Ayrıca çok parçacık sistemlerinin kuantum mekaniği konusunda ayrıntılı tartışma fırsatı bulduğum, Prof. Dr. Mario P. TOSİ'yi (Uluslararası Teorik Fizik Merkezi ICTP, Trieste, İtalya) saygıyla anarım.

Hasan TATLIPINAR, Şubat 2018

İçindekiler: **Sayfa No**

Önsöz i

Bölüm1:Temel Kavramlar **1**

1.1 Kuantum mekaniğine (KM) kısa bir bakış. 1

1.2 Schrödinger dalga denklemi. 2

1.3 İki cisim problemi. 4

1.4 Helyum atomu ve iki elektronlu iyonik atomların kuantum mekaniği. 6

Bölüm 2: Operatör Yöntemler İkinci Kuantizasyon **11**

2.1 Kuantum mekaniğinde operatör yöntemler 11

2.2 İkinci kuantizasyon. 16

2.3 Sipin Hamiltoniyenleri. 22

2.4 Temel uyarımlar (elementary excitations). 25

Bölüm 3: Elektron Gaz Sisteminin İncelenmesi **29**

3.1 Elektron gaz sistemi. 29

3.2 Jel modelde etkileşmeyen elektron sistemi. 33

3.4 Sonlu sıcaklıkta etkileşmeyen elektron gaz sistemi. 36

3.5 Pertürbasyon teorisinde elektron-elektron etkileşmeleri. 37

Bölüm 4: Ortalama Alan Teorisi **45**

4.1 Ortalama alan teorisi 45

4.2 Hartree-Fock yaklaşımı. 49

4.3 Homojen elektron gaz sistemi için Hartree-Fock yaklaşımı 51

4.4 Simetri Kırılması 52

4.5 a) İyonik ferromanyetler için Heisenberg modeli 54

4.5 b) Metalik ferromanyetler için Stoner modeli 57

Bölüm 5: Green Fonksiyonları ve Feynman diyagramları **61**

5.0 Green fonksiyonlarının tanımlanması. 61

5.1 Sıfır sıcaklık Green fonksiyonları, Temel kavramlar, 64

5.2 S Matrisi 68

5.3. Green fonksiyonlarına örnekler. 69

5.4 Wick teoremi. 74

5.5 Feynman diyagramları. 79

5.6 Dyson denklemi. 83

5.7 Feynman diyagramlarının oluşturulmasının kuralları. 89

5.8 Green fonksiyonlarının spektral gösterimi. 94

5.9 Lineer response teori. 97

Bölüm6: Kuantum Sıvıları ve Landau Teorisinin Temel Kavramları 105

6.1 Kuantum Sıvıları ve Landau Teorisinin Temel Kavramları 105

6.2 Nötral Fermi Sıvısı 108

6.3 Kuasi Parçacık Yaklaşımı 109

6.4 Kuasiparçacıklar arası etkileşmeler 115

6.5 Kuasiparçacıkların Sonlu Sıcaklıktaki Dağılımı 119

6.6 Sıvı Helyum ile İlgili Diğer Çalışmalar 121

Bölüm 7:Bose-Einstein Yoğuşması (BEC) Genel Kavramlar 127

7.1 Bose-Einstein Yoğuşması (BEC) Genel Kavramlar 127

7.2 Gross-Pitaevskii Denklemi (GPD) 132

Bölüm 8

Çözümlü Örnekler. 135

EK Okuma Parçası 161

EK a) Kuantum mekaniğinin ortaya çıkması esnasında yapılan bazı tartışmalar. 161

b) Makroskobik Sistemlerde Lineer Olmayan Kuantum Olayları. 165

Kaynaklar 169

Dizin 171

BÖLÜM 1

1.1 Kuantum Mekaniğine (KM) Kısa Bir Bakış.

1900'lu yılların başında atomik ölçekte yapılan bazı deneylerin (Siyah cisim ışıması, fotoelektrik olay, x-ışınları spektrumu vb.) sonuçları ile klasik mekanik yasalarının öngörülerinin birbirleri ile uyuşmadığı görülmüştür. Bu nedenle atomik ölçekteki olayları açıklayacak yeni bir fizik kavramları bütünlüğü oluşturuldu. Planck, Einstein, Bohr, Pauli, de Broglie, Schrödinger, Heisenberg, Born, Dirac ve dönemin daha birçok bilim insanı tarafından oluşturulan bu kavramlar bütünlüğü Kuantum Mekaniği adını aldı. Buna göre atomik ölçekteki mekanik ile iri ölçekteki klasik mekanik arasında bir çok kavramsal farklılık vardır. Klasik mekanikte bir büyüklük ölçüldüğünde, ölçülen (veya gözlenen) büyüklük ölçüm sisteminden bağımsızdır. Kuantum mekaniğinde ise ölçülen (veya gözlenen büyüklük) ile ölçüm sistemi birbirinden bağımsız değildirler bu nedenle farklı ölçüm koşulları farklı sonuçlar verebilir. Klasik mekanikte bir cismin hareketini veren denklemlerin çözümleri cismin konumunu kesin olarak belirler, Kuantum mekaniğinde ise bir sistemi temsil eden büyüklük kompleks olan bir fonksiyon ile temsil edilir ve bu fonksiyonun karesi (normu) o sistemin olasılık yoğunluğunu verir. Böylece kuantum mekaniğine göre tanımlanan kavramlar ile klasik mekaniğe göre tanımlanan kavramlar arsında önemli yorum farkları vardır. Daha belirgin bir fark da kuvvet kavramının tanımı ile ilgilidir, kuantum mekanik yasalarına göre doğadaki temel etkileşmeler (dolayısı ile temel kuvvetler) parçacıklar arası bir aracı "quanta" nın değiş tokuşu ile oluşur, klasik fizikte ise bu etkileşmelerin uzay zamanın geometrisinden kaynaklandığı savunulur. Bu iki temel görüş arasındaki yaklaşım farkı günümüzde de önemli bir araştırma konusudur[1]. Günümüzde Kuantum mekaniğinin daha ağırlıklı kabul görmüş yorumu Copenhagen yorumu olarak adlandırılır [2].

Kuantum mekaniğine göre her fiziksel büyüklüğe bir işlemci (operatör) karşılık gelir. Bu operatörler matematiksel olarak diferansiyel veya buna eşdeğer olan matris formunda olabilirler, bu operatörler bir fonksiyon veya vektör uzayında işlem görürler. Kuantum mekaniğinde fiziksel büyüklüklere karşılık gelen operatörler lineer (doğrusal) ve Hermitik olmalıdırlar. Buna göre KM herhangi bir $\hat{O}$ operatörü

$$\hat{O}\left(a\tilde{f} + b\tilde{g}\right) = a\hat{O}\tilde{f} + b\hat{O}\tilde{g} \tag{1.1}$$

$$\hat{O}^{+} = \hat{O} \tag{1.2}$$

$$\hat{O}\tilde{f} = \lambda\tilde{f} \tag{1.3}$$

$$\left(\tilde{f}_i, \tilde{f}_j\right) = \delta_{ij} \tag{1.4}$$

Eşitliklerini sağlamalıdır. Burada a ve b birer kompleks sabiti, $\tilde{f}$ ve $\tilde{g}$ normlanmış birer öz durumu, $\hat{O}$ operatörünün üssündeki "$+$" Hermitsel eşleniği, δ_{ij} ise Kronecker delta fonksiyonunu belirtmektedir. Birinci koşul işlemcilerin (operatörlerin) öz durumlarının toplanabilir olması (süperpozisyon ilkesi), ikinci koşul ise (3) eşitliğinde belirtilen λ öz değerlerinin reel (gerçel) olması için gereklidir. (4) koşulu ise ortonormallik (birbirine dik ve birimboylu) koşuludur. Bu özelliklerinden dolayı $\tilde{f}$ durumları Lineer bir vektör uzayı olan Hilbert uzayının elemanları olarak seçilmelidir [3]. Kuantum mekaniğinin postülaları rastgele bir sıralama ile şu şekilde ifade edilebilir:

$i-$ Kuantum mekaniğine göre gözlenebilir her fiziksel büyüklük (enerji, momentum, konum, sayı, vb.) bir operatör ile temsil edilir, bu büyüklük ölçüldüğünde bu operatörün özdeğer denklemi adı verilen (3) denklemini sağlayan λ özdeğerlerinden biri elde edilir. Bu özdeğere karşılık gelen çözüme özdurum denir.

$ii-$ Kuantum mekaniğinde gözlenebilir bir A operatörü için bir ölçüm yapıldığında bir a değeri ölçülmüş ise sistem bu özdeğeri sağlayan $\tilde{f}(a)$ özdurumunda bulunur.

$iii-$ Bir sistem herhangi bir t anında zamana bağlı, sürekli, diferansiyeli alınabilen bir durum fonksiyonu ile temsil edilir, bu fonksiyon sisteme ait bütün bilgileri içerir.

$iv-$ Sistemin zaman içindeki davranışı zamana bağlı Schrödinger dalga denklemi ile belirlenir.

KM bir sistemi temsil eden dalga fonksiyonu sisteme ait fiziksel, sınır değer ve olasılık yasalarını sağlayacak şekilde olmalıdır.

1.2 Schrödinger Dalga Denklemi

m kütleli bir parçacıktan oluşan bir sistem göz önüne alacak olursak zamana bağlı Schrödinger dalga denklemi

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = H\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{1.2.1}$$

şeklinde ifade edilir. Bu denklem sistemin toplam enerji operatörü H'ya ait özdeğer denklemidir. (1.2.1) eşitliğinde $\hbar = h/2\pi$ olup h Planck sabitidir. H ise sistemin toplam

enerjisini ifade eden Hamiltoniyen operatörüdür ve genellikle (korunumlu sistemlerde) zamandan bağımsız olup

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \tag{1.2.2}$$

şeklinde kinetik ve potansiyel enerjinin toplamıdır. (1.2.2) bağıntısı zamana açıkça bağımlı olmadığı için $\psi(\boldsymbol{r},t) = T(t)\psi(\boldsymbol{r})$ şeklinde seçilerek (1.2.1) denklemi değişkenlerine ayrıştırılabilir böylece;

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \exp(-\frac{iE}{\hbar}t)\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.2.3}$$

Şeklinde ifade edilebilir. Burada E sistemin toplam enerji operatörü H'nın özdeğeridir. Kartezyen koordinatlarda $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\vec{\imath} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{\jmath} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$ olmak üzere $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ olduğu göz önüne alınır ise $\psi(\boldsymbol{r})$ özdurumu için ;

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.2.4}$$

şeklinde zamandan bağımsız $Schrödinger\ Dalga\ Denklemi(SDD)$ adı verilen eşitlik yazılır. Bu denkleme göre bir sistemin etkileşme potansiyel enerjisi $V(r)$ biliniyor ise sistemin toplam enerji özdeğeri E ye karşılık gelen $\psi(\boldsymbol{r})$ özdurumu bulunur. Böylece (1.2.3) bağıntısı ile sistemin E enerjisine karşılık gelen dalga fonksiyonu elde edilir. (1.2.4) bağıntısı ile verilen zamandan bağımsız Schrödinger dalga denklemi ikinci mertebe lineer (doğrusal) bir diferansiyel denklemdir. Verilen bir $V(r)$ için bu diferansiyel denklemin çözümleri elde edilebilir. Sonsuz kuyu ve üç boyutlu harmonik salınıcı durumları için $V(r)$ ve bu potansiyel enerji için (1.2.4) denkleminden elde edilen E ve $\psi(\boldsymbol{r})$ çözümleri şu şekildedir;

$$V(r) = \begin{cases} 0 & ,r < L \\ \infty & ,r > L \end{cases},\ E_n = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2mL^2}, n = 1,2,\ldots \quad \psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}\exp(i\mathbf{k}.\mathbf{r}) \tag{1.2.5}$$

$$V(r) = \frac{1}{2}kr^2, \quad E_n = \hbar w(n + \frac{3}{2}),\ \ n = 0,1,2,\ldots,\ \ \psi(\boldsymbol{r}) = A_n\exp(-\frac{\alpha r^2}{2})H_n(\alpha r) \tag{1.2.6}$$

Burada $\alpha = (\frac{mk}{\hbar^2})^{1/4}$ ve $H_n(\alpha r)$ Hermite polinomlarıdır. $n = 0,1,2,3\ldots$ olmak üzere

$H_n(\alpha r) = (-1)^n(e^{(\alpha r)^2}\frac{\partial^n}{\partial(\alpha r)^n}e^{-(\alpha r)^2}$ ve

$A_n = (2^n n!\sqrt{\pi})^{1/2}$ dır.

1.3 İki Cisim Problemi

Aralarında $V(\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2})$ etkileşme potansiyel enerjisi olan iki parçacıktan oluşmuş bir sistemin zamandan bağımsız Schrödinger dalga denklemi

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}{\nabla_1}^2-\frac{\hbar^2}{2m_2}{\nabla_2}^2+\ V(\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2})\right)\psi(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})=E\psi(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) \tag{1.3.1}$$

Şeklindedir. $V(\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2})=V(\boldsymbol{r_1})+V(\boldsymbol{r_2})$ şeklinde yazılabiliyor ise

$\psi(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})=\psi(\boldsymbol{r_1})\psi(\boldsymbol{r_2})$ Alınarak denklem (1.2.1) $\boldsymbol{r_1}$ ve $\boldsymbol{r_2}$ ye göre değişkenlerine ayrıştırılabilir ve her bir denklem bir parçacık problemi olarak ele alınır. Eğer $V(\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2})\neq V(\boldsymbol{r_1})+V(\boldsymbol{r_2})$ ise (Hidrojen atomu problemi) Eylemsiz koordinat sisteminde yazılan (1.2.1) denklemini değişkenlerine ayrıştıracak bir dönüşüm kullanılmalıdır. Bu dönüşüm $kütle\ merkezi+bağıl$ koordinat sistemi dönüşümüdür. Buna göre iki parçacıktan oluşmuş sistemin kütle merkezi koordinatı $\boldsymbol{R}$ ve bağıl koordinatı $\boldsymbol{r}$,

$$\boldsymbol{R}=\frac{m_1\boldsymbol{r_1}+m_2\boldsymbol{r_2}}{m_1+m_2}\ ,\ \boldsymbol{r}=\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2} \tag{1.3.2}$$

olarak tanımlar ve buna uygun dönüşümler kullanılırsa (1.2.1) denklemi bu yeni koordinat sisteminde her bir değişkene ait iki denklem şeklinde yazılabilir. Bu dönüşüm altında $\psi(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})=\Phi(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r})$ ye dönüşür. Buna göre kütle merkezi koordinatına ait denklem serbest parçacık denklemi olacak ve çözümleri

$$\Phi(\boldsymbol{R})=Aexp(i\boldsymbol{K}.\boldsymbol{R})+Bexp(\boldsymbol{iK}.\boldsymbol{R}) \tag{1.3.3}$$

şeklinde düzlem dalgalar olacaktır.

Bağıl koordinat $\boldsymbol{r}$ ye ait denklem ise ;

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.3.4}$$

şeklinde olacaktır. Burada μ, $\frac{1}{\mu}=\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}$ şeklinde tanımlanan indirgenmiş kütledir. Kuantum mekaniğinde iki cisim probleminin yaygın uygulaması $H, He^{1+}, Li^{2+}, Be^{3+},..$ gibi tek elektronlu atom ve iyonlardır. Bu durumda atomun çekirdeği kütle merkezi, çekirdeğin etrafındaki elektron ise bağıl koordinata sahip olacaktır. Atomik ölçekte atomlar arası elektromanyetik etkileşmelerden kaynaklanan kimyasal bağlanma, moleküler oluşum gibi birçok özellik atomun yörüngesinde bulunan elektronlar tarafından sağlanır, bu nedenle atomik yapının bu tür özelliklerini anlamak için elektronlara ait dalga fonksiyonlarının bilinmesi

gerekmektedir. Tek elektronlu atomlar için elektrona ait dalga fonksiyonunu (1.3.4) denkleminin çözümünden elde edilir. (1.3.4) denkleminde bulunan etkileşme potansiyel enerjisi için bu denklemi kartezyen koordinatlarda değişkenlerine ayrıştırıp çözmek mümkün değildir. Bu nedenle sistemin küresel simetrisi göz önüne alınarak, (1.3.4) denklemine ait diferansiyel denklem küresel koordinatlarda yazılarak çözülür. Kuantum mekaniğinin gerçek sistemler için çözümü analitik olarak yapılabilen birkaç örneğinden biri olan bu problemin çözümleri herhangi bir kuantum mekaniği kitabında tüm detayları ile verilir. Buna göre (1.3.4) ile verilen denklemin küresel koordinatlardaki çözümleri şu şekilde özetlenebilir:

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = A_{nl}R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{1.3.5}$$

$$E_n = -\frac{(13.6)Z^2}{n^2}(eV) \tag{1.3.6}$$

Burada $a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0{,}5292$ Å Bohr yarıçapı olmak üzere $\alpha = \frac{2Z}{na}$ dır. Buna göre radyal dalga fonksiyonu için

$$R_{nl}(\alpha r) = N_{nl}(\alpha r)^l e^{-\frac{\alpha r}{2}} L_{n+l}^{2l+1}(\alpha r), \qquad N_{nl} = (\frac{2Z}{na})^{3/2}[\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}]^{1/2} \tag{1.3.7}$$

$$L_{n+l}^{2l+1}(\alpha r) = \frac{d^{2l+1}}{\partial(\alpha r)^{2l+1}} L_{n+l}(\alpha r) \ , \ L_{n+l}(\alpha r) = e^{\alpha r}\frac{d^{n+l}}{d(\alpha r)^{n+l}}((\alpha r)^{n+l}e^{-\alpha r}) \tag{1.3.8}$$

Şeklinde assosiye (yandaş) Lagueere polinomları cinsinden yazılabilir. Benzer şekilde açısal kısma ait dalga fonksiyonu bileşeni olan küresel Harmonikler $Y_l^m(\theta,\phi)$ için,

$Y_l^m(\theta,\phi) = C_{lm}P_l^m(cos\theta)e^{im\phi}$, $C_{lm} = (-1)^m[\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{(4\pi)(l+|m|)!}]^{1/2}$, μ=cosθ alınırsa,

$$P_l^m(\mu) = (1-\mu^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{d\mu^{|m|}}P_l(\mu) \ , (|m|\leq l) \ , \quad P_l(\mu) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{d\mu^l}(\mu^2-1)^l \tag{1.3.9}$$

Şeklinde assosiye Legendre polinom ifadeleri yazılabilir.

(1.3.5) bağıntısında n,l,m elektrona ait kuantum sayılarını belirtmektedir.

$n = 1,2,3,4...$,

$l = 0,1,2,3,...n-1$,

$m = -l,...,-1,0,1,...,l$

değerlerini almakta olup sırasıyla baş kuantum sayısı, yörüngesel açısal momentum kuantum sayısı ve manyetik kuantum sayısı olarak isimlendirilirler. Yine bu bağıntıdaki $R_{nl}(r)$ elektronun radyal (ışınsal) dalga fonksiyonu olup $|rR_{nl}(r)|^2$ ifadesi elektronun çekirdekten r mesafede bulunma radyal olasılığını verir. $Y_l^m(\theta,\phi)$ ise açısal dalga fonksiyonu veya küresel harmonikler olarak adlandırılır ve elektronun r mesafede küresel yüzey üzerinde açısal dağılımı ile ilgilidir. Spektroskopide ve kimyada çok yaygın olarak kullanılan ve verilen bir kuantum sayıları durumuna karşılık gelen fonksiyonlardan elde edilmiş elektronik yörüngelerin elektronun olasılık yoğunluklarının maksimum olduğu yerler olduğu unutulmamalıdır. Elektronun sipini de göz önüne alınacak olursa toplam elektronik dalga fonksiyonu, $\psi(r,\theta,\emptyset,s,m_s)=\psi(r,\theta,\emptyset)\chi(\mathrm{s},m_s)$ şeklinde olacaktır. Burada elektron için spin değeri $S=1/2$, spinin z yönündeki bileşeni $m_s=\pm(\frac{1}{2})$ değerlerini alacaktır. $\chi(\mathrm{s},m_s)$ sipin dalga fonksiyonu olarak adlandırılır.

1.4 Helyum atomu ve iki elektronlu iyonik atomların kuantum mekaniği

Kuantum mekaniğinde üç cisim problemine örnek olarak iki elektronlu He atomu veya iki elektronlu iyonik atomlar incelenebilir. Üç parçacıklı sistemin klasik veya kuantum mekaniğine göre kesin analitik çözümleri yoktur bu nedenle bazı yaklaşımlar yapmak gerekir buna göre çekirdeğin kütlesinin elektronlara göre çok büyük olduğu için durgun varsayılıp koordinat sisteminin çekirdek üzerinde seçilmesi iyi bir yaklaşımdır. Buna göre çekirdeğinde $+Ze$ yükü olan iki elektronlu bir sistemin Hamiltoniyeni koordinat sistemi çekirdek üzerinde seçildiğinde

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1{}^2-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2{}^2-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}|} \qquad (1.4.1)$$

Şeklinde yazılır. Bu Hamiltoniyen için Schrödinger dalga denkleminin çözümleri pertürbasyon veya varyasyon yöntemi gibi yaklaşık yöntemler kullanılır. (1.4.1) Hamiltoniyenini

$$H_1=-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1{}^2-\frac{Ze^2}{r_1}\quad,\quad H_2=-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2{}^2-\frac{Ze^2}{r_2}$$

olmak üzere

$$H=H_1+H_2+V(|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}|) \qquad (1.4.2)$$

şeklinde yazılacak olursa H_1 ve H_2 ye ait çözümler hidrojen atomu tipi dalga fonksiyonları olacaktır. $V(|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}|)$ ye ait kısmı pertürbasyon terimi olarak ele almak bir iyi bir yaklaşım

değildir. Her ne kadar Helyum atomunda iki elektron itici Coulomb etkileşmesinden dolayı birbirlerinde uzak durmayı tercih ettikleri için pertürbasyon teorisi uygulanabilir ise de çok elektronlu sistemlerde $\frac{1}{|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}|}$ terimi diğer etkileşmelerle kıyaslandığında küçük olmayabilir, hatta ıraksayan bir değer alabilir. Bu nedenle Helyum atomu veya çok elektronlu atomlar için varyasyon yöntemi yaygın olarak kullanılmaktadır. Helyum atomu taban durumu enerjisi

$$E = < H > = < H_1 > + < H_2 > + < \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}|} > = E_0 + E' \tag{1.4.3}$$

hesaplanır ise

$$E = (-45 - 54 + 34)eV = (-109 + 34)eV = -75\, eV \tag{1.4.4}$$

elde edilir. Burada $H_i\Psi_i = E_i\Psi_i$, $(i = 1{,}2)$ olduğu göz önüne alınır ise aynı zamanda (1.4.3) bağıntısındaki son terim olan elektron-elektron etkileşme terimi için, bir elektronun taban durumunda diğer elektronun uyarılmış durumlarda olması halinde sistemin enerji özdeğerlerini bulmakta mümkündür. Buna göre

$$E' = < \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}|} > = (4\pi)^2 \int_0^\infty \int_0^\infty \Psi_{1s^2}^2 \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_{1s^2}^2 r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \tag{1.4.5}$$

Şeklindedir. Bu durumda elektronik dalga fonksiyonunu genel olarak

$$\psi = c_1\psi_{1s}(1)\psi_{nl}(2) \pm c_2\psi_{1s}(2)\psi_{nl}(1) \tag{1.4.6}$$

Şeklinde alınır ise

$H'\psi = \Delta E\psi$, $\Delta E = E - E_0$ olmak üzere ΔE hesaplandığında

$$J = \iint \Psi_{1s}^2(1) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_{nl}^2(2) d\boldsymbol{r_1} d\boldsymbol{r_2} = \iint \frac{\rho_{1s}(1)\rho_{nl}(2)}{r_{12}} d\boldsymbol{r_1} d\boldsymbol{r_2} \tag{1.4.7}$$

$$K = \iint \Psi_{1s}^*(1)\, \Psi_{nl}^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{nl}(1)\psi_{1s}(2) d\boldsymbol{r_1} d\boldsymbol{r_2} \tag{1.4.8}$$

$\Delta E = J \pm K$ değerleri elde edilir. Burada J terimi doğrudan Coulomb terimi olarak adlandırılır. Bunun nedeni bu terimin klasik elektromanyetik teoride de bilinen iki yük dağılımı arasındaki doğrudan Coulomb etkileşme potansiyel enerji terimi olmasıdır. K terimi ise değiş-tokuş (exchange) terimi olarak adlandırılır. Bu terimin klasik fizikte bir karşılığı yoktur. Tamamen kuantum mekaniksel bir terimdir. Helyum atomunda elektronların sipinleri de göz önüne alındığında anlamlı olan bir terimdir. $Pauli\ Prensibi$ ile beraber düşünüldüğünde $1s$ durumundaki bir elektronun nl uyarılmış durumundaki elektron ile yer değiştirmesini (değiş-

tokuşunu) ifade eder. Bu terimin değiş-tokuş edilen elektronların farklı sipin yönelimlerinden kaynaklanan enerji olduğu açıktır.

Çok elektronlu atomik yapıyı $+Ze$ yüküne sahip bir çekirdek ve etrafında elektron gaz sisteminden oluşmuş bir yapı olarak ele alan $Thomas-Fermi(TF)$ modeli ile de incelemek mümkündür. Probleme istatistiksel bir yaklaşım da sunan bu modelde elektronların maksimum kinetik enerjisi Fermi enerjisi olarak alınıp elektron sayı yoğunluğu ile elektronların gördüğü ortalama elektrostatik etkileşme cinsinden öz uyumlu olarak çözülebilen bir denklem yazıp bu denklemden atomik yapıya ait bilgiler elde etmek mümkündür. Fakat TF modelinde atomik yapıdaki kabuk modeli yok olduğu için bu model sabit bir kabuk yapı için çözüm olarak düşünülebilir.

Klasik fizikte çok parçacıklı sistemler incelenirken parçacıklar birbirinden ayırt edilebilir oldukları için her bir parçacığın davranışı ayrı ayrı incelenebilir ve bu parçacıklarla ilgili bir istatistik yapıldığında hepsi aynı istatistiğe uyar. Örneğin klasik parçacık olarak tanımlanan seyrek gazlar $Maxwell-Boltzmann$ istatistiğine uyarlar.

Kuantum mekaniğinde ise durum farklıdır, atomik ölçekte atomik yapı taşları (elektronlar, protonlar, …) veya daha genel anlamda maddenin temel yapı taşları olan "$temel\ tanecikler$" ayırt edilemez oldukları için klasik duruma göre farklı davranış gösterirler. Buna göre $Bozon$ ve $Fermiyon$ olmak üzere iki tür farklı istatistik davranış gösterirler. Bozonlar sipin kuantum sayıları $0,1,2,3,$ ...gibi tamsayı değerlerine sahip parçacıklardır ve $Bose-Einstein$ istatistiğine uyarlar. Fermiyonlar ise spin kuantum sayıları $\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\ldots$ gibi yarım tam sayı değerlerine sahip parçacıklardır ve $Fermi-Dirac$ istatistiğine uyarlar. Fermiyonlar için ayrıca Pauli dışarlama ilkesi denilen ilke geçerli olmalıdır. Bu ilkeye göre Fermiyonlardan oluşmuş bir sistemde aynı enerji seviyesinde bütün kuantum sayıları aynı olan birden fazla Fermiyon bulunamaz. Bütün bu özellikler parçacıkları veya genel olarak sistemi temsil eden dalga fonksiyonlarında da ayırt edilmesi gerekir. Bu nedenle kuantum mekaniğinde "dalga fonksiyonları için simetrileştirme ilkesi" tanımlanır. Buna göre Fermiyonlardan oluşmuş bir sistemin toplam dalga fonksiyonu "$antisimetrik$", Bozonlardan oluşmuş bir sistemin toplam dalga fonksiyonu ise "$simetrik$" olmalıdır. Doğada tek tür fizik olduğuna göre bu iki mekanik arasında atomik ölçekten makroskobik ölçeğe (iri ölçeğe, makroskobik ölçeğe, kuantum ölçeğinden klasik ölçeğe) , veya makroskobik ölçekten atomik ölçeğe geçişlerde bir uygunluk olmalıdır. Bu problem kuantum mekaniğinde Bohr'un "$uygunluk\ ilkesi$" (correspondance

principle) olarak bilinir, buna göre, kuantum sayılarının değeri sonsuz, h Planck sabitinin değerin sıfır alınacağı limit değerlerde kuantum mekaniği klasik mekaniğe dönüşür.

$$\lim_{\left\{\substack{Kuantum\ sayıları \to \infty \\ h \to 0}\right\}} Durumlarında: Kuantum\ Mekaniği \to Klasik\ Mekanik$$

Bu uygunluk ilkesi zaman zaman tartışma konusu olmaktadır. Helyum atomunda ve ikiden fazla elektrona sahip sistemlerde elektron seviyelerinin dizilişi $Pauli\ dışarlama\ ilkesine$ uymalı bu nedenle sistemin toplam dalga fonksiyonu $Antisimetrik$ olmalıdır. Bu koşul ise toplam dalda fonksiyonunu $Slater\ Determintı$ şeklinde yazmakla sağlanabilir. Buna göre N elektronlu (genel olarak N Fermiyondan oluşmuş) bir sistemin toplam enerji operatörü H ve toplam dalga fonksiyonu Ψ ;

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i}\right) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N-1}\frac{e^2}{|r_i - r_j|} \qquad (1.4.9\text{-a})$$

$$\Psi_{AS}(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \emptyset_\alpha(1) & \emptyset_\alpha(2) \dots & \emptyset_\alpha(N) \\ \emptyset_\beta(1) & \emptyset_\beta(2) \dots & \emptyset_\beta(N) \\ & \vdots & \\ \emptyset_\gamma(1) & \emptyset_\gamma(2) \dots & \emptyset_\gamma(N) \end{vmatrix} \qquad (1.4.9\text{-b})$$

şeklinde yazılabilir.

Burada $\emptyset_i(j)$ ifadesinde i indisi her bir parçacığa ait bütün kuantum sayılarını, j indisi ise konumu ile ilgili tüm değişkenleri içerir. Normalizasyon için determinant $1/\sqrt{N!}$ Faktörü ile çarpılmalıdır.

Helyum atomu için dalga fonksiyonu $\Psi(r,s) = \emptyset(r_1,r_2)\chi(s_1,s_2)$ şeklinde yazılacak olursa toplam dalga fonksiyonunun antisimetrik olmasının 2 farklı yolu vardır, bunlardan bir tanesi konuma bağlı kısmı simetrik, sipine bağlı kısmı antisimetrik almak (para durum), diğeri konuma bağli kısmı antisimetrik, sipine bağlı kısmı simetrik almakla(orto durum) mümkündür. Çok elektronlu atomlar için günümüzde yaygın olarak kullanılan ortalama alan teorisi $Hartree - Fock\ (HF)$ teorisidir. Bu teoride (1.4.9-b) de tanımlanan N elektronlu sistem için her bir elektronun sipin durumunu da içeren bireysel dalga fonksiyonlarından oluşturulmuş Slater tipi bir dalga fonksiyonu oluşturulur, bu dalga fonksiyonu ve (1.4.9-a) da tanımlanan Hamiltoniyenden yola çıkarak her bir elektronunun atomun çekirdeği ve diğer elektronlardan gelen ortalama bir etkileşmeyi içeren Hamiltoniyen için Schrödinger dalga denklemine varyasyon ilkesi uygulanarak sistemin özdeğer ve özdurumları elde edilir. Varyasyon ilkesi

sonucu ortaya çıkan $N+1$ tane integrodiferansiyel denklemden çözümler elde etmek için $\psi(N+1)=\psi(N)$ olacak şekilde bir öz $uyumlu\ alan\ (Self\ Consistent\ Field)(\ SCF)$ yöntemi uygulanır. Büyük N değerleri için HF denklemlerinin nümerikte olsa her zaman çözümleri kolay değildir ve uzun bilgisayar zamanları alabilir. Bu nedenle dalga fonksiyonunun karesi yerine olasılık yoğunluğu gibi bir fonksiyon için benzer denklemler yazıldığında ikinci derece durum fonksiyonların olduğu denklemler yerine birinci derece yoğunluk fonksiyonlarının olduğu denklemler elde edilecektir. Bu nedenle bu tür denklemlerden istenilen çözümlerin elde edilmesi kısmen daha kolay olacaktır. Bu nedenle günümüzde atomik sistemlerde $Yoğunluk\ Fonksiyoneli\ Teorisi(YFT)$ $(Density\ Functunal\ Theory)$ (DFT) yaygın olarak kullanılmaktadır. HF ve DFT yöntemleri oldukça geniş uygulama alanları olan ve çok iyi belirlenmiş kuralları içeren teorilerdir bu nedenle bu notların kapsamı dışında özel olarak incelenmelidir.

Kaynaklar:

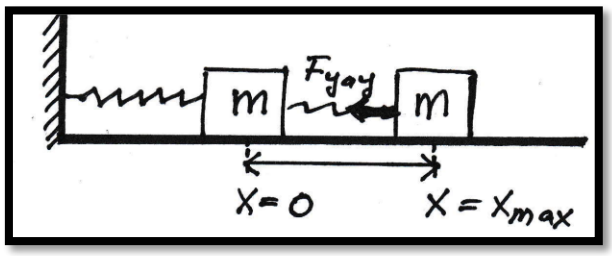
1- String, Conformal Fields and Topology, M. Kaku, Springer-Verlag 1991.
2- Stanford Encyclopedia of Philosophy: Cophenhagen Interpretation of Quantum Mechanics.
3- Mathematical Methods for Physicists, G. Arfken, Academic Press, 1970.
4- Principles and Techniques of Applied Mathematics, Bernard Friedman, John Wiley, 1956.
5- Introductory Quantum Mechanics, R.L. Liboff, Addison-Wesley, 1997.
6- Physics of Atoms and Molecules, B.H. Bransden, C.J. Joachain, Prentice Hall, 2003.

BÖLÜM 2

2.1 Kuantum Mekaniğinde Operatör Yöntemler

Kuantum mekanik sistemlerin incelenmesinde, birçok durum için, sistemin uzaysal dağılımını bulmaktan çok sistemin enerji, sipin gibi fiziksel büyüklüklere karşılık gelen özdeğerleri (Enerji spekturumu vb.) bulmak yeterli olabilir. Bu durumda diferansiyel yapıdaki Schrödinger dalga denklemini operatör formda (matris formunda) yazıp çözmek daha uygundur.

Buna örnek olarak bir boyuta $F_{yay} = -kx$ geri çağırıcı yay kuvvetine sahip Şekil 1.1 deki basit harmonik salınıcı problemini inceleyelim.



Şekil 1.1: Basit harmonik salınıcı

Bu bir boyutlu sistemin Hamiltonyen operatörü

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \qquad (2.1.1)$$

Şeklindedir. $\omega^2 = \frac{k}{m}$ ve $z = x(\frac{m\omega}{\hbar})^{\frac{1}{2}}$ diyecek olursak (2.1.1) Hamiltonyeni boyutsuz z değişkeni cinsinden,

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(-\frac{d^2}{dz^2} + z^2) \qquad (2.1.2)$$

şeklinde yazılabilir. Buna göre

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z + \frac{d}{dz}\right) = (\frac{m\omega^2}{2\hbar})^{\frac{1}{2}}(\mathrm{x} + \frac{ip}{m\omega}) \qquad (2.1.3)$$

$$a^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z - \frac{d}{dz}\right) = (\frac{m\omega^2}{2\hbar})^{\frac{1}{2}}(\mathrm{x} - \frac{ip}{m\omega}) \qquad (2.1.4)$$

yok etme ve yaratma (veya alçaltma ve yükseltme) operatörleri (işlemcileri) tanımlanacak olursa (2.1.2) denklemi

$$H = \hbar\omega\left(a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\right) \qquad (2.1.5)$$

şeklinde yazılabilir. (2.1.1) denkleminde x ve p konum ve momentum operatörleri için

$[x,p] = i\hbar\ ,\ \ [x,x] = 0\ ,\ \ [p,p] = 0$

komütasyon (sıra değiştirme) bağıntıları bu iki operatörün "$cebrini$" (işlem kurallarını) belirler.

Benzer şekilde, a ve $a^\dagger$ operatörleri de

$[a,a^\dagger] = i\hbar\ ,\ [a,a] = 0\ ,\ [a^\dagger,a^\dagger] = 0$

komütasyon bağıntılarını sağlar. (2.1.1) denklemi ile verilen Hamiltoniyen için SDD nin çözümleri

$$\psi_n(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{\frac{-y^2}{2}}, \quad E_n = \hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})\ \text{, n= 0, 1, 2…} \qquad (2.1.6)$$

şeklindedir. Burada

y=$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ ve $H_n(y)$ Hermite polinomlardır. $H_n(y) = (-1)^n e^{y^2}\frac{d^n}{dy^n}e^{-y^2}$ ifadesi ile n.inci dereceden Hermite Polinomları elde edilir. (2.1.5) şeklinde yazılan Hamiltonyen operatörünün öz durumları ise "$Dirac\ Notasyonu$" kullanılarak

$$\psi_n(y) \equiv |n> \equiv \frac{(a^\dagger)^n}{(n!)^{1/2}}|0> \qquad (2.1.7)$$

Şeklinde ifade edilir. Burada $|0> = \psi_0(y)$ için (2.1.6) ifadesinde $n = 0$ alınır ise;

$$|0> = <y|0> = \psi_0(y) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} H_0(y) e^{\frac{-y^2}{2}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

bulunur bu terim sistemin minimum enerjisine karşılık gelem taban durumunu belirler. Daha ileride bu durum "vakum" durumu olarak ta adlandırılacaktır. Benzer şekilde $n = 0$ durumuna karşılık gelen enerji $\hbar\omega/2$ enerjisi "$sıfır\ nokta\ enerjisi$" olarak adlandırılır ve tamamen KM sel bir terimdir. Buna göre (2.1.7) kullanılacak olursa

$H|n> = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})\,|n>$ olacağı açıktır.

a ve $a^\dagger$ operatörünün bir $|n>$ durumuna etkisi şu şekilde tanımlanır. $a^\dagger$ operatörü bir $|n>$ durumuna etki ettiğinde $|n+1>$ durumuna götürür.

$a^\dagger|n> = c^\dagger|\,n+1>$, $c^\dagger$ normalizasyon ile bulunacak bir sabittir. Buna göre, $a^\dagger$ operatörü basamak yükseltme, parçacık yaratma gibi isimler alır. Benzer şekilde

$a|n>=c|n-1>$ olur. a operatörü $|n>$ durumunu $|n-1>$ durumuna götürdüğü için,

basamak indirme veya parçacık yok etme operatörü olarak adlandırılır.

Basit harmonik salınıcının enerji değerlerine bakacak olursak, herhangi bir $|n>$ durumuna karşılık $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ olur.

Enerjinin minimum olduğu durumda $a|n_{min}>=0$, benzer şekilde $a^\dagger|n_{max}>=0$ olacağı açıktır. Normalizasyon sabitleri de yerine yazıldığında

$a^\dagger\left|n>=(n+1)^{\frac{1}{2}}\right|n+1>$, $a|n>=(n)^{1/2}\,|n-1>$

ifadeleri bulunur buna göre (2.1.3) denklemleri kullanılarak bir parçacığın konum x ve momentum p operatörlerinin matris formu

$$<n'|x|n>=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(<n'|(a+a^\dagger)|n>)$$

$$=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}[(n)^{1/2}\delta_{n'=n-1}+(n+1)^{1/2}\delta_{n'=n+1}]$$

$$<n'|p|n>=i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{1/2}[<n'|(a-a^\dagger)|n>]$$

$$=i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{1/2}[(n+1)^{1/2}\delta_{n'=n+1}-(n)^{1/2}\delta_{n'=n-1}]$$

şeklinde elde edilir. Benzer yöntem herhangi bir $O(x,p)$ operatörü için de uygulanır.

Kuantum mekaniğinde bir A operatörünün zamana bağlı ifadesini bulmak için;

$\frac{\partial A(t)}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}[H,A]$ bağıntısı kullanılır. Burada H sistemin hamiltonyenidir. Buna göre

a ve $a^\dagger$'nın zamana bağlı durumları,

$$\frac{\partial}{\partial t}a^\dagger=\frac{i}{\hbar}\left[\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right),a^\dagger\right]$$

$$=i\omega\{(a^\dagger a+\tfrac{1}{2})\,a^\dagger-a^\dagger(a^\dagger a+\tfrac{1}{2})\}$$

$$=i\omega a^\dagger[a,a^\dagger]=i\hbar\omega a^\dagger$$

$\frac{\partial a^\dagger}{\partial t}=i\hbar\omega a^\dagger \rightarrow\ lna^\dagger+c_1=i\hbar\omega t+c_2 \rightarrow\ a^\dagger(t)=a^\dagger(0)e^{i\hbar\omega t}$, şeklindedir.

Benzer şekilde;

$a(t)=a(0)\,e^{-i\hbar\omega t}$ bulunur.

Buna göre, x ve p operatörleri zamana bağlı olarak;

$$x(t) = (\frac{\hbar}{m\omega})^{1/2}[a(0)\, e^{-i\hbar\omega t} + a^{\dagger}(0)e^{i\hbar\omega t}]$$

$$p(t) = i(\frac{\hbar m\omega}{2})^{1/2}[a^{\dagger}(0)e^{i\hbar\omega t} - a(0)\, e^{-i\hbar\omega t}]$$

şeklinde elde edilir. x ve p'nin karışımı olan operatörlerin zamana bağlı durumları içinde de benzer yöntemler kullanılır.

Basit harmonik salınıcı problemi KM de çözümü analitik olarak yapılabilen gerçek fizik problemlerinden birkaçından birisidir, bu nedenle birçok fizik olayının anlaşılması için başlangıç adım olarak kullanılır. Örneğin katıların düşük sıcaklıklardaki yapısı birbirine yaylarla bağlı m kütleli basit harmonik salınıcılar şeklinde modellenebilir bu modelden yola çıkarak atomların örgü noktaları etrafında titreşimlerinden kaynaklanan enerjinin kuantumları olan fononların özellikleri, spesifik ısı gibi katı yapıya ait fiziksel büyüklükler hesaplanabilir. Bu yaklaşım için maddenin katı yapısının en basit durumu olan N tane örgü noktasından oluşmuş bir boyutlu katıyı örnek alalım. Katı fazda atomlar örgü (latis) noktalarından birbirlerine k yay sabiti ile bağlı m kütleli basit harmonik salınıcılar gibi düşünülebilir. Buna göre sistemin toplam Hamiltonyeni

$$H = \sum_j \frac{p_j^2}{2m} + \frac{K}{2}\sum_j (x_j - x_{j-1})^2 \qquad (2.1.8)$$

şeklinde yazılabilir. (2.1.8) ifadesinde herhangi bir j parçacığı(salınıcısı) bir önceki ve bir sonraki parçacığa yay sabiti K olan bir yayla bağlı olduğu için bu denklem (N-1) defa "kuple olmuş" (çiftlenmiş) bir denklemdir. Bu hamiltonyene ait öz değer problemini çözmek için (2.1.8) denklemini "dekuple" yapacak (ayrıştıracak)

bir dönüşüm yapılmalıdır. Bu ise (2.1.8) denklemini Fourier Dönüşümü yardımı ile dalga vektörü uzayında (ters uzay) yazmakla mümkündür. Bu dönüşüm için örgü sabiti a olmak üzere k uzayında "normal koordinatlar" şu şekilde tanımlanır:

$$x_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{-ika_j}x_j \quad , \qquad p_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{ika_j}p_j \qquad (2.1.9)$$

denklemlerinden x_j ve p_j ifadeleri (2.1.8) denkleminde yazılacak olursa

$$H = \frac{1}{2m}\sum_k p_k p_{-k} + \frac{m}{2}\sum_k \omega_k^2\, x_k x_{-k} \qquad (2.1.10)$$

elde edilir. Bu Hamiltoniyen artık "dekuple" olmuştur, veya normal titreşim kiplerine (modları) ayrılmış durumdadır. (2.1.8) toplamdaki iki indis yerine tek indis kullanılmaktadır . Daha önce bir parçacıklı harmonik salınıcıda yapılan ve (2.1.3) , (2.1.4) ile verilen parçacık yok etme ve yaratma operatörlerinin dönüşümlerine benzer şekilde

$$a_k = \left(\frac{m\omega_k}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(x_k + \frac{i}{m\omega_k}p_{-k}\right)$$

$$a_k^\dagger = \left(\frac{m\omega_k}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(x_{-k} - \frac{i}{m\omega_k}p_k\right) \qquad (2.1.11)$$

dönüşümleri tanımlanır ve $[a_k, a_k^\dagger] = \hbar\delta_{kk'}$, $[a_k, a_{k'}] = 0$, $[a_k^\dagger, a_k^\dagger] = 0$ olduğu göz önüne alınır ise (2.1.10) Hamiltoniyeni

$$H = \sum_k \omega_k\left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}\right) \qquad (2.1.12\text{-a})$$

şeklinde basamak operatörlerine bağlı olarak yazılır. Burada

$$\omega_k^2 = \frac{k}{m}2(1 - coska) = \frac{4k}{m}sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \qquad (2.1.12\text{-b})$$

dir ve "$normal\ modlar$" olarak adlandırılır.

N tane atom ya da iyonik merkezin oluşturduğu bir boyutlu katı sisteminin toplam dalga fonksiyonu

$$\psi(1,2 \ldots N) = |n_{k1}, n_{k2}, \ldots n_{kN}> = \prod_{k=1}^{N}|n_k>$$

$$= \prod_{k=1}^{N}\left\{\frac{a_k^\dagger}{(n_k!)^{1/2}}\right\}^N|0> \qquad (2.1.13)$$

şeklinde tanımlanır ise (2.1.12) Hamiltonyeninin beklenen değeri

$$<\psi|H|\psi> = <H> = E_{n_k} = \sum_k \hbar\omega_k\left(n_k + \frac{1}{2}\right) \qquad (2.1.14)$$

bulunur burada $n = 0,1,2, \ldots \infty$, $k = 1,2, \ldots N-1$ ' dir.

Isısal(termal) denge durumunda n_k'nın ortalama değeri

$$<n_k> \equiv N_k \equiv \frac{1}{e^{\beta\omega_k - 1}} \equiv n_\beta(\omega_k)$$

olur. Sistem bu ortalama değer civarında küçük değişimler (flactuation) gösterir.

Ayrıca şunu da vurgulamak gerekir (2.1.12) ve (2.1.14) eşitleri ile temsil edilen sistem, (2.1.8) ile temsil edilen birbirine bağlı N tane yay sistemi yerine N tane bağımsız "fictitious" (sanal, imgesel) parçacığın davranışını verir.

2.2 İkinci Kuantizasyon

Çok parçacıklı sistemler kuantum mekanik olarak ikinci kuantizasyon veya parçacık sayısı yöntemi olarak ta adlandırılan bir yöntemle de incelenebilir. Burada ikinci kuantizasyondan incelenen sistemin bir daha kuantize edilmesi değil de bütün sistemin davranışının parçacık sayısı cinsinden ifade edilmesi olarak anlaşılmalıdır. Buna göre sistemi oluşturan parçacıklara ait Schrödinger dalga denkleminin çözümleri olan durumlar ile parçacık yaratma ve yok etme operatörleri kullanılarak, sistemin bütününü temsil eden durumlar oluşturulur. Bu durumlara "alan operatörleri" denir. Buna göre sistemi oluşturan parçacıkların her biri için birinci kuantizasyon olarak adlandırılan Schrödinger dalga denkleminin zamana bağlı olmayan kısmı (1 üst indisi 1. Kuantizasyonu belirtmek üzere);

$H^1 = \frac{p^2}{2m} + U(\boldsymbol{r})$ ve $H^1\Phi_\lambda(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_\lambda\Phi(\boldsymbol{r})$

olmak üzere alan operatörleri $\Phi_\lambda(\boldsymbol{r})$ ve $a_\lambda(t)$ cinsinden

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_\lambda a_\lambda(t)\,\Phi_\lambda(\boldsymbol{r}) \quad \text{ve} \quad \psi^\dagger(\boldsymbol{r},t) = \sum_\lambda a_\lambda{}^\dagger(t)\,\Phi_\lambda{}^*(\boldsymbol{r}) \tag{2.2.1}$$

olarak tanımlanır. Bu alanlar "$Bozonlardan$" oluşmuş bir sistemi temsil ediyor ise;

$$[\psi(\boldsymbol{r},t),\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t)] = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \tag{2.2.2}$$

$$[\psi(\boldsymbol{r},t),\psi(\boldsymbol{r}',t)] = 0 \quad , \quad [\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t),\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t)] = 0,$$

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

Komütasyon (sıradeğiştirme) bağıntılarını sağlarlar. Bu bağıntılar yeni tanımlanan bu büyüklükleri işlem kurallarını veya kısaca cebrini tanımlar. İncelenen sistem "$Fermiyonların$" oluşturduğu bir sistem ise, Pauli dışarlama prensibini sağlayabilmesi için, alan operatörleri "$Antikomütasyon$" bağıntılarını sağlamalıdır. $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ gibi iki işlemcinin antikomütasyonu $\{A,B\} = AB + BA$ şeklinde tanımlanır. Buna göre "$Fermiyon\ alanları$" için;

$$\{\psi(\boldsymbol{r},t),\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t)\} = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')) \tag{2.2.3}$$

$$\{\psi(\boldsymbol{r},t),\psi(\boldsymbol{r}',t)\} = 0\,, \quad \{\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t),\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t)\} = 0$$

$$\{a_\lambda(t),a_{\lambda'}{}^\dagger(t)\} = \delta_{\lambda\lambda'}\,, \quad \{a_\lambda(t),a_{\lambda'}(t)\} = 0 \quad , \quad \{a_\lambda{}^\dagger(t),a_{\lambda'}{}^\dagger(t)\} = 0$$

şeklindeki antikomütasyon bağıntıları geçerlidir. Tanımlanan bu alanlar için herhangi fiziksel büyüklüğe karşılık gelen operatörlerin ikinci kuantizasyondaki gösterimleri (temsilleri)

$$O = \int \psi(\boldsymbol{r},t) O^1 \psi(\boldsymbol{r},t) d^3r$$

şeklindedir. Buna göre (2.2.1) ile tanımlanan alanlara uygun olarak Hamiltonyen operatörünün 2. Kuantizasyondaki gösterimi,

$$H = \int \psi^\dagger(\boldsymbol{r},t) H^1 \psi(\boldsymbol{r},t)\, d^3r \qquad (2.2.4)$$

şeklinde ifade edilir. Burada H^1, alanı oluşturan parçacıklara ait Hamiltonyen ya da enerji operatörü yoğunluğudur. Buna göre;

$$H = \int \sum_i a_i^\dagger \Phi_i^\dagger(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right) \sum_j a_j \Phi_j(\boldsymbol{r})\, d^3r$$

$$= \int \sum_i a_i^\dagger \Phi_i^\dagger(\boldsymbol{r}) \sum_j \varepsilon_j a_j \Phi_j(\boldsymbol{r})\, d^3r$$

$$= \int \sum_i \sum_j \varepsilon_j\, a_i^\dagger a_j \Phi_i^*(\boldsymbol{r}) \Phi_j(\boldsymbol{r}) d^3r$$

$$\int d^3r\ \Phi_i^*(\boldsymbol{r})\Phi_j(\boldsymbol{r}) = \delta_{ij}\ ,\ \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

$$H = \sum_i \varepsilon_i a_i^\dagger a_i \qquad (2.2.5)$$

bulunur. Bu tür bir Hamiltonyen (2.1.12)'de görüldüğü gibi harmonik salınıcı sistemine benzer bir yapı gösterir. Eğer sistem $Bozonlardan$ oluşmuş ise (2.1.12, 2.1.13) dalga fonksiyonu için, $H\psi = E\psi$ ifadesinin sonucu $E = \sum_i \varepsilon_i n_i$ dir. $a_i^\dagger a_i \equiv n_i$ parçacık sayısı olduğu için ikinci kuantizasyon olarak adlandırılan bu yöntem, aynı zamanda parçacık sayısı gösterimi olarak da adlandırılır. (2.2.1) alan operatörleri kullanılarak (2.2.4)'e benzer şekilde toplam parçacık sayısının 2. Kuantizasyondaki gösterimi

$$N = \int d^3r \rho(\boldsymbol{r}) = \int d^3r\, \psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)\, \psi(\boldsymbol{r},t)$$

$$N = \sum_i a_i^\dagger a_i = \sum_i n_i \qquad (2.2.6)$$

şeklinde bulunur. Buna göre (2.2.5) ve (2.2.6) ifadelerinde görüldüğü gibi operatörlerin temsili $a_i^\dagger a_i$ şeklinde a_i ve Hermitik eşleniği ile çarpımını içermektedir. Bu tür Hamiltonyenlere '$bilineer$' Hamiltonyenler denir. Bilineer forma indirgenen Hamiltonyenlere ait sistemlerin çözümü genel olarak bir matrisin diyagonilize edilerek özdeğer probleminin çözümüne indirgenebilir. Bunu görmek için tekrar bir parçacık sistemini göz önüne alalım.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{r}) \qquad (2.2.7)$$

Bu Hamiltoniyene ait $\psi(\boldsymbol{r})$ çözümleri her zaman bulunamayabilir, bu durumda şöyle bir yöntem uygulanır. Çözümü bilinen bir Hamiltonyenin özdurumları $\Phi(\boldsymbol{r})$, biliniyor ise; $\psi(\boldsymbol{r})$ bu $\Phi(\boldsymbol{r})$ cinsinden $\psi(\boldsymbol{r})=\sum_n b_n \Phi_n(\boldsymbol{r})$ şeklinde yazılabilir. Böylece (2.2.7)'de verilen, çözümü aranan Hamiltoniyen,

$$H = \sum_{n,m} b_n^\dagger b_m H_{nm}\ , \qquad H_{nm} = \int d^3 r \Phi_n^* H\, \Phi_m$$

şeklinde elde edilir. Böylece problem H Hamiltonyenini çözümü bilinen Hamiltonyenin özdurumları cinsinden diyagonalize edilmesi(köşegenleştirilmesi) problemine dönüşür.

Çok parçacıklı sistemlerde (2.2.7) şeklinde verilen Hamiltonyen bir parçacığın kinetik enerjisini ve parçacığa etkiyen diş alandan kaynaklanan etkileşme terimini içerir bu nedenle genel olarak "bir parçacık Hamiltoniyeni" olarak adlandırılır. Gerçek sistemde parçacıklar arası çoklu etkileşmeler vardır. Bu çoklu etkileşmeler sistemin yapısına göre çok karmaşık olabilir. Problemi çözümü yapılabilir basit bir duruma getirmek için çoklu etkileşmeleri ortalama olarak parçacıklar arası ikili etkileşmeler şeklinde ifade etmek çoğu zaman iyi bir yaklaşımdır. Buna göre (2.2.7) Hamiltonyenine ek terimler gelir ve bu etkileşmeye karşılık gelecek çözümlerin ne olacağı araştırılır. Bu durumda sistemi temsil eden Hamiltoniyen,

$$H' = \sum_i H_i + \frac{1}{2}\sum_{ij} V(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)$$

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m}{\nabla_i}^2 + U(r_i) \qquad (2.2.8)$$

şeklinde yazılır. Bu tür bir Hamiltonyende yukarıda belirtildiği gibi H_i tek parçacık çözümlerini elde etmek sorun yaratmaz, sorun yaratan kısım parçacık-parçacık etkileşmelerini içeren $V(\vec{r_i} - \vec{r_j})$ terimidir. (2.2.8) Hamiltonyeni yaratma ve yok etme operatörleri cinsinden;

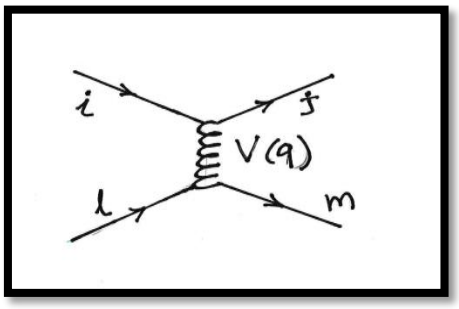
$$H = \sum_i H_i + \frac{1}{2}\sum_{ij} V(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j) = \sum_{lm} b_l^\dagger b_m H_{lm} + \frac{1}{2}\sum_{lmij} V_{lmij} b_j^\dagger b_m^\dagger b_l b_i$$

$$V_{lmij} = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \Phi_m^*(\boldsymbol{r_1})\Phi_l(\boldsymbol{r_1})\, V(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)\, \Phi_j^*(\boldsymbol{r_2})\Phi_i(\boldsymbol{r}_2) \qquad (2.2.9)$$

şeklinde yazılabilir.

Burada etkileşme terimi parçacıklar arası ikili etkileşmeler şeklinde ele alınmıştır. Bu nedenle iki yaratma ve iki yok etme operatörü vardır. Etkileşme terimini iki parçacığın saçılması gibi düşünerek, şematik olarak şu şekilde gösterebiliriz:

Bir parçacık i durumuna sahip, ikinci parçacık l durumuna sahip olsun, iki parçacık $V(q)$ etkileşme terimi ile etkileştikten sonra birisi j, diğeri m durumuna sahip olacaktır. (2.2.9) bağıntısında operatörlerin indislere göre yazılım sırası önemlidir. Her bir parçacığın kendisi ile etkileşmesinin olamayacağı göz önüne alınmalıdır. Buna göre (2.2.9) etkileşmesi şematik olarak şekil (2.1) deki gibi gösterilir.



Şekil 2.1: (2.2.9) bağıntısı ile verilen V_{iljm} etkileşme teriminin momentum uzayında şematik gösterimi.

Alan operatörlerini biraz daha detaylı inceleyelim. $Bozonlardan$ oluşmuş bir sistemde, her bir parçacığa ait durumlar düzlem dalga şeklinde olsun. Bu durumda alan operatörleri;

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_k a_k e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}\ , \qquad \psi^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)=\sum_{k'} a_{k'}^{\dagger} e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}}$$

şeklindedir.

Buna göre (2.2.8) ile verilen 1. Kuantizasyon Hamiltoniyeninin, 2. kuantizasyondaki gösterimi

$$H=\int \psi^{\dagger} H'\,\psi\, d^3r=\int \psi^{\dagger}(H_i+\tfrac{1}{2}\sum_{i\neq j} V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\psi d^3r$$

$$H=\int (d^3r \sum_{k'} a_{k'}^{\dagger} e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}}\,(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(r))\sum_k a_k e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}+$$

$$\tfrac{1}{2} d^3r_1 d^3r_2 \sum_{k_1}\sum_{k_2}\sum_{k_1'}\sum_{k_2'} e^{-i\boldsymbol{k'}_1.\boldsymbol{r}_1}.e^{-i\boldsymbol{k'}_2.\boldsymbol{r}_2} V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) e^{i\boldsymbol{k}_1.\boldsymbol{r}_1} e^{i\boldsymbol{k}_2.\boldsymbol{r}_2} a_{k_2'}^{\dagger} a_{k_1'}^{\dagger} a_{k_2} a_{k_1}) \qquad (2.2.10)$$

şeklindedir. Bu ifadenin birinci terimi kısmen daha kolay düzenlenebilir. Buna göre ilk terim,

$$\int \sum_{k'} a_{k'}^{\dagger} e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}} \varepsilon_k \sum_k a_k\, e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} dr=\int \sum_k \sum_{k'} a_{k'}^{\dagger} a_k \varepsilon_k e^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}').\boldsymbol{r}}\, d\boldsymbol{r}$$

$$=\sum_k \sum_{k'} \delta_{kk'}\, \varepsilon_k a_{k'}^{\dagger} a_k=\sum_k \varepsilon_k a_k^{\dagger} a_k$$

şeklindedir. Benzer şekilde 2. terim de biraz dikkat edilerek düzenlenirse; (2.2.10) bağıntısı;

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2v}\sum_{k'kq} V(q)\, a_{k+q}^\dagger a_{k'-q}^\dagger a_{k'} a_k \qquad (2.2.11)$$

şeklinde yazılabilir. (Bakınız örnek alıştırma). Burada

$$V(\boldsymbol{q}) = \int d^3r e^{i\boldsymbol{q}.\boldsymbol{r}}\, V(\boldsymbol{r}), \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (2.2.12)$$

olarak alınmıştır.

Parçacık yoğunluğu operatörünün ikinci kuantizasyondaki yapısı, düzlem dalga serbest parçacık çözümleri için;

$$\rho = \int d^3r \psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)\, \psi(\boldsymbol{r},t)$$

$$\rho = \int d^3\boldsymbol{r} \sum_k \sum_{k'} e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}}\, e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} a_{k'}^\dagger a_k = \int d^3\boldsymbol{r} e^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}).\boldsymbol{r}}\, a_{k'}^\dagger a_k$$

$$= \sum_k \sum_{k'} \delta_{kk'}\, a_{k'}^\dagger a_k \qquad (\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k} = \boldsymbol{q}) \quad \text{ise,}$$

$$\rho = \sum_k a_{k+q}^\dagger a_k \qquad (2.2.13)$$

elde edilir. ρ operatörü cinsinden (2.2.13) eşitliği,

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_q V(q)\rho_q \rho_{-q} \qquad (2.2.14)$$

şeklinde a ve ρ'ya göre 'bilineer' formda yazılabilir.

Bir sistemin ikinci kuantizasyon yöntemi ile ifade edilmesinde önemli zorluklardan birisi parçacıklar arası ikili etkileşmelerin Fourier Dönüşümü olan (2.2.11) bağıntısındaki V(q) teriminin bulunmasıdır. $V(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$ için Fourier dönüşümünün elde edilemediği durumlarda etkileşimlerin toplamı için farklı bir yöntem bulunmalıdır.

(2.2.3) bağıntıları ile tanımlanan $Fermiyonlardan$ oluşmuş bir sistemde alan operatörleri

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \Phi_i(\boldsymbol{r}), \quad \psi^\dagger(\boldsymbol{r}) = \sum_i c_i^\dagger \Phi_i(\boldsymbol{r})$$

şeklinde $\Phi_i(\boldsymbol{r})$ baz kümesi cinsinden tanımlanacak olursa c operatörleri;

$$\left\{c_i, c_j^\dagger\right\} = \delta_{ij}\ , \qquad \left\{c_i, c_j\right\} = 0\ , \quad \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 \qquad (2.2.15)$$

antikomütasyon bağıntılarını sağlarlar. c_i'yi, i durumunda olan bir parçacığı yok etme operatörü olarak tanımlayabiliriz. Fermiyonlar Pauli dışarlama ilkesine uydukları için, Fermiyonları temsil eden boş bir durum $|0>_i$ veya dolu bir durum $|1>_i$ şeklinde tanımlanır ise;

$c_i|0>_i = 0$, $c_i^\dagger|0>_i = |1>_i$, $c_j^\dagger|0>_j = |1>_j$, $c_j^\dagger|1>_j = 0$ olacağı açıktır.

Sayı operatörü N_j; $N_j = c_j^\dagger c_j$ ise $N_j^2 = c_j^\dagger c_j c_j^\dagger c_j$ komütasyon bağıntılarından

$c_j c_j^\dagger = (1 - c_j^\dagger c_j)$ olduğuna göre $N_j^2 = c_j^\dagger\left(1 - c_j^\dagger c_j\right)c_j = c_j^\dagger c_j - \underline{c_j^\dagger c_j^\dagger c_j c_j}$ (=0)

$= c_j^\dagger c_j = N_j$ bulunur.

Sayı operatörü $N_j^2 = N_j$ ise bu operatörün öz durumları ancak $|0>$ ve $|1>$ öz durumları olabilir. Böylece (2.2.15) antikomütasyon özellikleri doğrudan Fermiyonlara ait özellikleri garanti ederler.

Düzlem dalga baz kümesi alınarak katılardaki elektronlara ait Hamiltonyenin ikinci kuantizasyondaki temsili

$$H = \sum_{p,\sigma} \varepsilon_p c_{p,\sigma}^\dagger c_{p,\sigma} + \sum_q U(\rho)\rho(q) + \frac{1}{2}\sum_{qkk\prime\sigma\sigma\prime} V_q\, c_{k+q\sigma}^\dagger c_{k\prime-q\sigma\prime}^\dagger c_{k\prime\sigma\prime} c_{k\sigma} \qquad (2.2.16)$$

şeklinde ifade edilir. Bu Hamiltonyende (2.2.11) 'dan farkı toplamdaki ikinci terim olan ve elektronların örgü noktalarında bulunan atom veya iyonlarla etkileşme terimini ve toplamlardaki fazladan spin indisini σ'yı içermesidir. Elektron yoğunluk operatörü,

$$\rho(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}\sigma} c_{k+q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \qquad (2.2.17)$$

Bozonlarla aynıdır, yalnızca fazladan bir spin indisi de içerir. (2.2.16) eşitliğinde üçüncü terimdeki V(q) terimi elektron-elektron etkileşmelerinin Fourier dönüşümüdür.

$V\left(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|\right) = V(\boldsymbol{r}) = \frac{e^2}{r}$ ise, bu eşitliğin Fourier dönüşümü

$V(q) = F[V(\boldsymbol{r})] = \int e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} \frac{e^2}{r} d^3r$ dir.

$d^3r = r^2 dr sin\theta d\theta d\vartheta = r^2 dr d(cos\theta) d\vartheta$

olmak üzere;

$V(q) \equiv e^2 2\pi \int_0^\infty r dr \int_{-1}^1 d(cos\theta) e^{iqrcos\theta} = e^2 2\pi \int_0^\infty r dr \left(\frac{1}{iqr} e^{iqrcos\theta}\right)|_{-1}^{+1}$

$= \frac{e^2 2\pi}{iq} \int_0^\infty dr(e^{iqr} - e^{-iqr}) \quad = \frac{e^2 4\pi}{q} \int_0^\infty (sinqr) dr = -\frac{e^2 4\pi}{q^2} cosqr|_0^\infty$

$V_q = \frac{e^2 4\pi}{q^2}[1 - \lim_{r\to\infty}(\text{cosqr})\,]$,

$\lim_{r\to\infty}(\text{cosqr})$ için salınım yapan $cosqr \to 0$ olacağı varsayılır ise;

$$V_q = \frac{e^2 2\pi}{q^2}$$

bulunur. Çok cisim probleminde elektron-elektron etkileşme terimi önemli bir büyüklüktür. Gerçek uzayda $\frac{1}{r}$ ile değişirken $\vec{q}$ uzayında (ters örgü uzayı) $\frac{1}{q^2}$ ile değiştiğine dikkat edilmelidir. Bu sonuca göre uzun mesafeli Coulomb etkileşmelerini içeren sistemlerde özellikle nümerik hesaplamalarda cut-off (kesme) değeri için gerçek uzayda çalışmak yerine Fourier uzayında çalışmak daha uygundur.

2.3 Maddenin manyetik özellikleri ve Sipin Hamiltoniyenleri

Maddenin manyetik özellikleri başlı başına bir araştırma konusudur fakat çok kısaca malzemeler bir H dış manyetik alanı uygulandığında maddenin mıknatıslanmasındaki değişimin ölçüsü olan manyetik alınganlık (susceptibility) cinsinden sınıflandırılabilir. Manyetik alınganlık, M mıknatıslanma olmak üzere, $\chi = (\frac{dM}{dH})_T$ şeklinde tanımlanır. Alınganlık kullanılarak maddeler diyamanyetik, paramanyetik ve kollektif manyetik olarak sınıflandırılabilirler. Buna göre

a) Diyamanyetlerde uygulanan bir dış H manyetik alanına malzemede Lenz yasası gereği uygulanan alanı yok edecek yönde indüklenmiş dipol momentleri oluşur. Bu durumda alınganlık

   $\chi_{dia} < 0$ ve $\chi_{dia}(T,H) \sim sabit$

   Şeklindedir.

b) Paramanyetlerde ise maddede sürekli manyetik momentlerin varliği sözkonusudur. Bu sürekli momentler nadir elementlerde olduğu gibi lokalize olmuş elektronlardan veya yarı serbest elektronların taşıdığı momentlerden kaynaklanabilir. Buna göre

   $\chi_{para} > 0$ ve $\chi_{para}(T,H) \sim \chi_{para}(T,0) \sim \chi_{para}(T)$ dir. Diyamanyetlerin ve paramanyetlerin manyetik özellikleri klasik elektron dağılımı cinsinden açıklanabilir.

c) Kollektif manyetizasyon, yalnızca kuantum mekanik kavramlarla açıklanabilir, buna göre bu durum kararlı(sürekli) manyetik momentlerin değiş-tokuş etkisi ile oluşmaktadır. Bu kararlı momentler lokalize (yerel) , mobil veya belli bir $T = T_C$ kritik sıcaklığından düşük sıcaklıklarda kendiliğinden oluşabilir. Bu durumda

$$\chi_{KM} = \begin{cases} \chi_{KM}(T, H, Malzemenin\ hazırlanma\ geçmişi) & T \leq T_C \\ paramagnet & T > T_C \end{cases}$$

Şeklindedir. Kollektif manyetizasyon da üç gruba ayrılabilir,

c1) Ferromanyetlerde T_C Curie sıcaklığı olarak adlandırılan bir sıcaklık değerinin altındaki sıcaklıklarda madde mıknatıs özeliği gösterir. $T = 0$ da bütün manyetik momentler aynı yöne yönelmiş durumdadır. Sıcaklık $0 < T < T_C$ aralığında artığında , manyetik düzen azalma gösterir. $T \gg T_C$ olduğunda $\chi(T) = \frac{C}{T - T_C}$ Curie-Weiss yasasına uyar.

c2) Ferrimanyetizma durumunda ise maddenin kristal yapısı A ve B gibi iki farklı kendiliğinden manyetik geçiş durumuna sahip olabilir. Böylece

$M_A \neq M_B$ ve $M_A + M_B = M \neq 0$ dır.

c3) Antiferromanyetizma durumunda ise farklı iki manyetik durumun büyüklüğü birbirine eşit fakat yönleri zıt olabilir. Bu durumda Neel sıcaklığı (T_N) olarak adlandırılan bir sıcaklığın altındaki sıcaklıklarda manyetizma sıfır olur. Kısaca

$T < T_N$ için $|M_A| = |M_B| \neq 0, M_A + M_B = M = 0$ dır. $T \gg T_N$ olduğunda $\chi(T) = \frac{C}{T - \theta}$ şeklinde davranır. θ paramanyetik Curie sıcaklığı olarak adlandırılır.

Bütün bu durumları kuantum mekaniğine göre incelemek için manyetik dipol momentlerinin sipine bağlı olarak ifade edilmesi gerekmektedir. Bu nedenle çok parçacıklı sistemler fiziğinin önemli problemlerinden birisiside sipin sistemlerinin incelenmesidir. Birçok durumda madenin manyetik özellikleri maddeyi oluşturan atomik yada moleküler yapıdaki elektron dağılımına veya davranışına göre oluşur. Maddenin manyetizma ile ilgili özelliklerini incelemek için birçok sipin modeli ve bu modele uygun Hamiltoniyen yazılmıştır. Bu modellerin bazılarında yerel olarak sipinlerin kendi aralarında etkileşmeleri, bazı durumlarda yerel (lokalize olmuş) sipinlerin serbest elektronlarla etkileşmesi önemlidir. Bu modellerden çok azının kesin analitik çözümleri bulunmaktadır, birçok modelin ancak nümerik (sayısal) çözümleri mümkündür.

Sipini $\frac{1}{2}$ olan(elektron, proton, nötron, pozitron, ..) Fermiyon türü parçacıklardan oluşmuş bir sistemi göz önüne alalım. S pin operatörü $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{S} = S^{(x)}\boldsymbol{i} + S^{(y)}\boldsymbol{j} + S^{(z)}\boldsymbol{k}$ olmak üzere

($\frac{h}{2\pi} = 1$) alınacak olursa) sipin operatörlerinin komütasyon bağıntıları

$$\left[S_l^{(x)}, S_j^{(y)}\right] = iS_l^{(z)}\delta_{lj} \ , \left[S_l^{(y)}, S_j^{(z)}\right] = iS_l^{(x)}\delta_{lj} \ , \left[S_l^{(z)}, S_j^{(x)}\right] = iS_l^{(y)}\delta_{lj} \qquad (2.3.1)$$

şeklindedir. Burada j ve l sipinin tanımlandığı konumu belirtmektedir. Örneğin $S_l^{(x)}$

l konumunda (noktasında, atomunda, ..) bulunan sipin operatörünün x bileşenini temsil etmektedir. Sipin operatörleri Pauli sipin matrisleri cinsinden

$$S^{(x)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^{(y)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S^{(z)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

şeklinde ifade edilebilir. Çoğu zaman sipin operatörlerinin bu tanımı yerine, sipin yaratma ve yok etme operatörleri şeklindeki tanımları kullanılır. Buna göre

$$S_l^{(+)} = S_l^{(x)} + iS_l^{(y)} \text{ ve } S_l^{(-)} = S_l^{(x)} - iS_l^{(y)}$$

şeklinde tanımlanacak olursa, bu operatörler sipin Hamiltoniyenine karşılı gelen özdurumların manyetik kuantum sayısı m yi artırıp azaltırlar. Spin yukarı durumlar $|+>$ ve spin aşağı durumlar $|->$ olarak belirtilir ise

$$S^+|+>= 0\,, \quad S^+|->= |+>\,, \quad S^-|->= 0\,, \quad S^-|+>= |+>$$

olacaktır. Ayrıca S^+ ve S^- operatörleri için aşağıdaki özellikler kolayca gösterilebilir.

$$S^+S^- = (S^x)^2 + (S^y)^2 - i(S^xS^y - S^yS^x) = (S^x)^2 + (S^y)^2 + S^{(z)}$$
$$S^-S^+ = (S^x)^2 + (S^y)^2 + i[S^x, S^y] = (S^x)^2 + (S^y)^2 - S^{(z)}$$

$$\left[S_l^{(+)}, S_j^{(-)}\right] = 2\,S_l^{(z)}\delta_{lj}\,, \quad \left[S_l^{(z)}, S_j^{(+)}\right] = S_l^{(+)}\delta_{lj}\,, \quad \left[S_l^x, S_j^-\right] = -S_l^{(-)}\delta_{lj} \tag{2.3.2}$$

Bu özelliklere sahip sipin operatörleri kullanılarak homojen sipin sistemleri için aşağıdaki Hamiltonyenler tanımlanabilir.

Homojen spin Hamiltoniyenleri

Heisenberg Hamiltoniyeni: Bu modele göre incelenecek çok parçacık sistemi bir örgü (latis) gibi düşünülür. Her örgü noktasında bir sipin bulunur ve bu sipin bir vektörle ile temsil edilir. Etkileşmeler iki sipin vektörünün etkileşmesi şeklindedir. Eğer etkileşmeler genellikle en yakın komşu sipinler ile sınırlandırılır ise sistemin Hamiltoniyen şöyle yazılabilir

$$H = -J\sum_{j\delta}\boldsymbol{S}_j.\boldsymbol{S}_{j+\delta} = -J\sum_{j\delta}(S_j^x S_{j+\delta}^x + S_j^y S_{j+\delta}^y + S_j^z S_{j+\delta}^z) \tag{2.3.3}$$

Burada j indisi latis noktasını, δ komşulukları belirtmektedir. $\delta = 1,2,3,..$ alınarak istenilen miktarda komşuluk etkileşmesi hesaba katılabilir. Bu hamiltoniyenin bir boyutta ve bazı özel durumlar için iki boyutta belirli yaklaşımlar yapılarak kesin çözümleri elde edilebilir. Daha yüksek boyutlarda ise sayısal çözümleri yapılabilir. Hamiltonyendeki J bağlantı sabiti (coupling constant) bir doğrultuda (örneğin z doğrultusunda) farklı değerler alabilir, bu durumda

Hamiltoniyen "Anizotropik Heisenberg Modeli" olarak adlandırılır ve seçilen bir doğrultuya paralel (J_p) ve dik (J_d) bileşenler cinsinden

$$H = -J_p \sum_{j\delta} S_j^z S_{j+\delta}^z - J_d \sum_{j\delta} (S_j^x S_{j+\delta}^x + S_j^y S_{j+\delta}^y)$$

$$H = -J_p \sum_{j\delta} S_j^z S_{j+\delta}^z - J_d \sum_{j\delta} S_j^{(+)} S_{j+\delta}^{(-)} \tag{2.3.4}$$

Şeklinde yazılır. $[S_l^{(+)}, S_{l+\delta}^{(-)}] = 0$ olduğu için $S_l^{(+)} S_{l+\delta}^{(-)}$ çarpımında sıralama önemli değildir. (2.3.4) Hamiltoniyeninde iki limit durum farklı isimler alır. Bunlardan birisi "Ising Modeli" olarak adlandırılır. Bu durumda (2.3.4) Hamiltoniyeninde $J_d = 0$ alınır. Bu durum sisteme bir dış manyetik alan da etki ediyor ise bu dış alanla etkileşme terimi de eklenerek **"Ising Sipin Hamiltoniyeni"** olarak adlandırılır ve

$$H_I = -J_p \sum_{j\delta} S_j^z S_{j+\delta}^z + H_0 \sum_j S_j^z \tag{2.3.5}$$

Şeklinde yazılır. Burada H_0 dış manyetik alanı belirtir. Bu Hamiltoniyenin bir boyutta kesin çözümleri vardır. $H_0 = 0$ için iki boyutta çözümleri yapılabilir. Üç boyutta ise sayısal çözümleri mevcuttur. (2.3.4) de $J_p = 0$ alınacak olursa Hamiltoniyen *"**XY**"* **modeli** olarak adlandırılır. Buna göre

$$H_{XY} = -J_d \sum_{j\delta} S_j^{(+)} S_{j+\delta}^{(-)} \tag{2.3.6}$$

"XY" Hamiltoniyeninin bir boyutta kesin çözümleri vardir. (2.3.2) bağıntılarını sağlayan spin sistemleri için (2.3.3) Hamiltoniyeninin başındaki $(-)$ işareti de göz önüne alınarak

$J > 0$ durumunda bütün sipinler paralel konuma geçme eğiliminde olacaklardır ve bu durum "$Ferromanyetik\ düzen$" olarak adlandırılır. $J < 0$ durumunda ise sipinler birbirine ters yönde yönelime sahip olma eğilimindedirler ve bu durum "$Antiferromanyetik\ düzen$" olarak adlandırılır.

2.4 Temel Uyarımlar ("elementary excitations")

Birbiri ile kuvvetli etkileşen çok cisim problemlerinin incelenmesinde, hidrojen atomunda olduğu gibi iki-cisim problemini $kütle\ merkezi + bağıl$ koordinat sistemini kullanarak problemi iki ayrı tek parçacık problemine dönüştüren, veya birbirine yaylarla bağlı örgü(latis) modelinde olduğu gibi birbirine kuple olmuş $N-1$ denklemi dekuple yapacak normal koordinat dönüşümü kullanmak gibi $kanonik\ dönüşüm\ yöntemleri$ yanında, problemin incelenmesinde $temel\ uyarımlar$ (elementary excitations) denilen bir yöntem de

kullanılmaktadır. Bir örgü sisteminin titreşim enerjilerinin kuantumlu haline "fonon" denir ve fonon enerjisi (2.1.14) ifadesi ile verilmişti.

$$E_{n_k} = \sum_k \hbar\omega_k(n_k + \tfrac{1}{2}) \quad n = 0,1,2,3,.., \;\; k = 1,2,3,... \tag{2.4.1}$$

Bu enerji ifadesi bulunurken örgü noktalarının titreşim davranışı ses dalgalarının davranışı gibi düşünülebilir. Fononları latis noktalarının titreşim enerjilerinin (ses dalgalarının enerjilerinin) kuantumları gibi düşüneceğimiz gibi, ses dalgalarının parçacıkları gibi de düşünebiliriz. Buna göre (2.4.1) eşitliğinin en düşük terimi $n = 0$ olan $\hbar\omega_k/2$ terimidir. Bu terim sıfır nokta enerji terimi olarak adlandırılmıştı. Bir sonraki terimler bu terimden $\hbar\omega_k$ kadar farkla değişmektedirler bu nedenle $\hbar\omega_k$ terimi "$elementary\ excitation$" temel uyarım terimi olarak alınır ise diğer bütün enerji değerleri bu temel uyarım cinsinden veya bunların karışımı cinsinden ifade edilebilir.

Birbiri ile etkileşen N parçacıklı bir sistemin Hamiltoniyeninin genel yapısı

$$H = \sum_i(\boldsymbol{p_i}, \boldsymbol{r_i}) + \tfrac{1}{2}\sum_{i,j} V(\boldsymbol{r_i}, \boldsymbol{r_j}, \boldsymbol{p_i}, \boldsymbol{p_j}) \tag{2.4.2}$$

şeklinde olsun bu Hamiltoniyen uygun bir koordinat dönüşümü alınarak operatörler cinsinden

$$H' = H_0 + \sum_k \varepsilon'_k A_k^+ A_k + f(...A_l, ...A_l^+, ...) \tag{2.4.3}$$

Şeklinde yazabildiğimizi düşünelim. Bu durumda (2.4.3) eşitliğinin sağ tarafındaki birinci terim sistemin taban durumu enerjisini, ikinci terim temel uyarımların enerjisini f ile belirtilen üçüncü terim ise temel uyarımlar arasındaki etkileşme enerjisini ifade eder. Bu f teriminin ilk iki terim ile kıyaslandığında küçük olmasını bekleriz bu nedenle bu terimin katkısı ε'_k teriminin genişlemesi şeklinde olur. Bu genişleme miktarın $\Delta\varepsilon'_k$ diyecek olursak KM de belirsizlik ilkesine göre temel uyarımların ömürleri için $\Delta\varepsilon'_k\Delta\tau_k = \hbar$ ifadesine göre $\Delta\tau_k \sim \hbar(\Delta\varepsilon'_k)^{-1}$ olarak bulunur. Buna göre bu yaşam ömürlerinin temel uyarımlarım bağımsız olarak var olmasına olanak tanıyacak şekilde (ya da deneysel ölçme sürelerine olanak sağlayacak) büyüklükte olmalıdır.

Temel uyarımlar genellikle iki gruba ayrılır, bunlar $ortak\ uyarımlar$ (collective excitations) ve $sanki\ parçacıklardır$ (quasi particles).

$\boldsymbol{A - Kolektif\ uyarımlar}$ (ortak uyarımlar): Bütün sistemin davranışı sonucu sistem içinde makroskobik ölçekte ortak hareketlerin kuantumlanmasıdır. Bunun bazı örnekleri şunlardır.

1- **Fononlar** (phonons): Düzenli bir yapıya sahip katılarda olduğu gibi katıyı oluşturan örgü noktalarının ortak davranışı ses dalgaları gibi ele alınabilir. Bu dalgaların enerjisinin kuantumlanmış haline "fonon" denir. Fononlar daha önce de belirtildiği gibi "ses quantası" veya "ses parçacığı" olarak adlandırılan bir eksitasyon olarak tanımlanabilir.
2- **Plazmonlar**(plasmons): Metallerde valans elektronlarının oluşturduğu elektron gaz sisteminde elektron yoğunluğu dalgalanma gösterir ve bu dalgalanma ses dalgası gibi düşünülebilir. Bu durumda yoğunluktaki dalgalanmayı "fictitious" (hayali) uydurma parçacıkların hareketi olarak tanımlayabiliriz. Bu parçacıklara plazma salınımları "plasma ossilations" denir. Bu salınımların kuantumlarına da plazmon denir.
3- **Magnonlar** (magnons): Ferromagnetlerde spin açısal momentlerinin yoğunluğunda belli dalgalanmalar vardır. Bu dalgalanmalar spin dalgaları adını alır. Bu durumda kollektif uyarımları bu spin dalgalarının kuantumları oluşturur ve "magnon" olarak isimlendirilir.
4- **Nükleer kuanta**: Çekirdek içinde , çekirdeği oluşturan proton ve nötronların çeşitli titreşim ve dönme hareketleri vardır. Bu hareketlere eşlik eden kuantumlu duruma "nükleer kuanta" adını alır.

$B-$ *Sanki Parçacıklar*:

Nasıl ki su dalgaları doğrudan suyu oluşturan H_2O molekülünü temsil etmiyor fakat onların ortak davranışını temsil ediyor ise temel uyarımlar da (elementary excitations) da sistemi oluşturan bireysel parçacıkları değil onların ortak davranışını temsil etmektedirler. Bunun yanında ortak uyarımların ikinci sınıfı olan "kuasi(sanki) parçacıklar" sistemi oluşturan parçacıklarla daha ilgilidirler. Bazı "sanki parçacıklar" şunlardır.

1- **Sanki elektronlar** (quasi elektrons): Elektron ve pozitif yüklerden oluşmuş ve bu yüklerin serbest hareket ettiği bir gaz sistemini düşünelim, elektronlar birbirini itecekleri için elektronların etrafında pozitif yükler birikecektir, bu elektronlar ve etrafındaki pozitif yük bulutu "sanki elektronlar" (quasi electrons) olarak adlandırılırlar. Herhangi iki sanki elektron arasındaki etkileşme , çıplak iki elektron arasındaki etkileşmeden daha zayıf ve kısa mesafeli olacağı açıktır.
2- **Polaron**: Yalıtkan polarize bir kristalde bir elektron hareket ettiğinde kristal iyonu ile etkileşir bu durumda sistem denge durumu civarında dalgalanmalara sahip olur. Bu dalgalanmalar yerel olarak fononların oluşmasını sağlar. Elektron ve onun etrafındaki fonon bulutuna "polaron" denir.

3- **Sanki nükleonlar**: Çekirdek içindeki etkileşmelerde çoğu zaman çekirdeği oluşturan proton, nötron gibi nükleonların tek tek hareketi yerine, bir parçacık ve onunla beraber hareket eden parçacıkların davranışına bakılır, bu duruma "sanki nükleon" denir.

4- **İletim elektronları** (Conduction elektrons): Bir kristalde sabit örgü noktalarının oluşturduğu periyodik bir potansiyelde haraket eden elektronlar bu peryodik potansiyel ile etkileşmeleri sonucu normal bir elektron gibi değil de "etkin kütleye" sahip bir elektron olarak hareket ederler. Etkin kütleli elektron modeli sanki parçacıkların yaygın olarak kullanılan ilk modellerinden birisidir.

Bu anlatılan örneklerin kategorisine girmeyen durumlarda olabilir. Örneğin yarıiletkenlerdeki elektron-hole(deşik) çifti gibi. Bu duruma "eksiton" denir ve çoğu zaman **kolektif uyarım** olarak adlandırılır. Başka bir örnekte süper iletkenlerde zıt yönlerde dalga vektörü ve yine zıt yönlerde sipine sahip iki $(+k\uparrow)$ ve $(-k\downarrow)$ elektonlarının lineer kombinasyonu olan bir duruma verilen ad olan "Bogoliubov sanki parçacığı" yada kısaca "**bogolon**" dur.

Bir sistemde yukarıda bahsedilen iki tür durum aynı anda mevcut olabilir bu durumda (2.2.3) eşitliği aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$H' = H_0 + \sum_k \varepsilon'_k A_k^+ A_k + \sum_l \varepsilon'_l B_l^+ B_l + k\text{üçü}k\ terimler \qquad (2.4.4)$$

Bu ifade de eşitliğin sağındaki k üzerinden toplam alınan ikinci terimi sanki parçacıkları, üçüncü terim ise ortak uyarımları temsil etmektedir. Elementer eksitasyonların kullanımı ile ilgili bir örnek bölüm 6 kısmında verilen, kuantum sıvılarının yapısı için Landau tarafında oluşturulan teori gösterilebilir.

Kaynaklar:

1- Quantum Theory of Many-Particle Systems, A.L. Fetter, J. D. Walecka,, 1971.

2- Many-Particle Physics, G.D. Mahan, Plenum Press, 1986.

3- Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, H. Bruus, K. Flensberg, Oxford Press, 2005.

4- A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problems. Richards D. Mattuck, McGraw-Hill, 1967

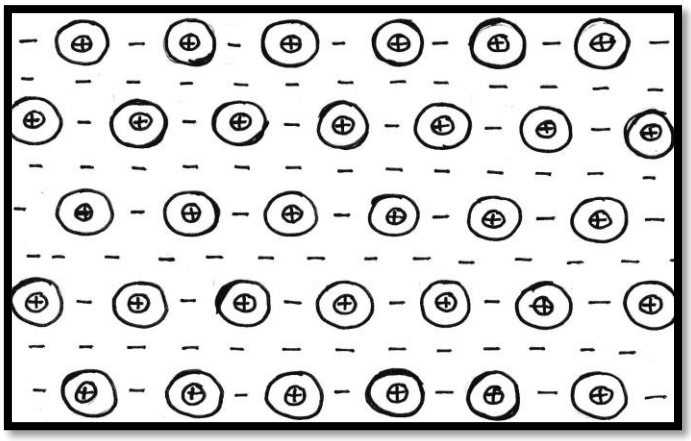
5- Introduction to Solid State Physics, Charles Kittel, John Wiley&Sons Inc, 2005.

BÖLÜM 3

3.1 Elektron Gaz Sistemi

Pozitif yüklü çekirdeklerle veya iyonlarla yük dengesi durumunda bulunan N tane elektrondan oluşmuş bir sistemi göz önüne alalım. Böyle bir sistemi kullanarak, etrafımızda bulunan katıların (metal, yarıiletken, yalıtkan) iletkenlik, özdirenç vb. gibi birçok fiziksel özelliğinin modellenmesi yapılabilir. Ayrıca bu elektron gaz modelini kullanmak kuantum ve istatistik fiziğin birçok problemi için başlangıç oluşturur. Böyle bir sistemin zamandan bağımsız durumları bir önceki bölümde tanımlanan ikinci kuantizasyon ifadeleri yardımı ile incelenebilir. Örnek olarak bir metali göz önüne alacak olursak bir metaldeki atom, üç kısımdan oluşur, merkezde pozitif yüklü ağır bir çekirdek, bir çok elektrondan oluşmuş ve çekirdeğe sıkı bağlı negatif iç kabuk elektronları ve en dış kabukta (kısımda) yer alan birkaç serbest (valans) elektronları. Sekil (3.1)

İyonun kütlesi M, atom Z valans elektronununa sahip ise; iyonun sahip olduğu yük $+Ze$'dir. Atomda iç kabuk (kor) elektronları çekirdekle beraber $\boldsymbol{R}_j$ kütle merkezi koordinatına göre hareket ederler. Bu kısmın toplam spini S_j'dir. R_j ve S_j kütle merkezi koordinatının hareketini belirler. Katıların birçok özelliği için kütle merkezinin hareketi fazla önem taşımaz. Kor elektronları dışındaki m kütleli ve $(-e)$ yüklü elektronlar ise bulundukları atomda iyonlar arasında serbestçe hareket ederek bir elektron gazı oluştururlar ve katının iletkenlik gibi birçok özelliği bu elektronların davranışına bağlıdır. Bu anlatılan model en azından alkali metaller için tam olarak doğrudur.



Şekil 3.1 : Metallerde atomlar $(+Ze)$ pozitif yüklü çekirdek, çekirdeğe sıkı bağlı iç kabuk elektronları (kor elektronları) ve yaklaşık olarak serbest olan dış yörünge (valans) elektronları şeklinde ele alınabilir.

Bu şekilde tanımlanmış elektron gaz sisteminin Hamiltoniyeni, iyonik ve elektronik kısımların kinetik ve potansiyel enerjisinin toplamı şeklindedir.

$$H = T_{iyon} + V_{iyon-iyon} + T_{elektron} + V_{el-el} + V_{el-iyon} \tag{3.1.1}$$

Bu Hamiltoniyen ikinci kuantizasyonda ψ alan operatörleri kullanılarak

$$T_{iyon} + V_{iyon-iyon} = \int d\vec{R}\psi_{ion}^{\dagger}(\boldsymbol{R})(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2)\psi_{ion}(\boldsymbol{R})$$

$$+\frac{1}{2}\int d\boldsymbol{R}_1\, d\boldsymbol{R}_2\psi_{ion}^{\dagger}(\boldsymbol{R_1})\psi_{ion}^{\dagger}(\boldsymbol{R}_2)\frac{z^2e^2}{|\boldsymbol{R_1}-\boldsymbol{R_2}|}\psi_{ion}(\boldsymbol{R_1})\psi_{ion}(\boldsymbol{R}_2) \tag{3.1.2}$$

$$T_{el} + V_{el-el} = \sum_r \int d\vec{r}\psi_r^{\dagger}(\boldsymbol{r})(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2)\,\psi_r(\boldsymbol{r})$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{r_1,r_2}\int d\boldsymbol{r_1}d\boldsymbol{r_2}\,\psi_{\sigma_1}^{\dagger}(\boldsymbol{r_1})\psi_{\sigma_2}^{\dagger}(\boldsymbol{r_2})\frac{e^2}{|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}|}\psi_{\sigma_2}(\boldsymbol{r_2})\psi_{\sigma_1}(\boldsymbol{r_1}) \tag{3.1.3}$$

$$V_{el-iyon} = \sum_\sigma \int\, d\boldsymbol{r}\, d\boldsymbol{R}\;\psi_\sigma^{\dagger}(\boldsymbol{r})\psi_{ion}^{\dagger}(\boldsymbol{R})\;\frac{-ze^2}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|}\psi_{iyon}(\boldsymbol{R})\psi_\sigma(\boldsymbol{r}) \tag{3.1.4}$$

Şeklinde yazılabilir. $V_{el-iyon}$ teriminde $\frac{1}{2}$ terimi yoktur; çünkü $\psi_i^{\dagger}(\boldsymbol{R})$ ve $\psi_\sigma^{\dagger}(\boldsymbol{r})$ gibi iki farklı durum vardır.

Sıfır sıcaklıkta, sistemin taban durumu elektron gazı ile çevrelenmiş periyodik iyon örgü sistemidir (latisidir). Genel olarak *ab initio* (Kuantum mekaniğinde birinci kuantizasyon olarak ta adlandırılan doğrudan Schrödinger dalga denkleminden yola çıkarak yapılan hesaplama anlamında kullanılabilir) yöntemi ile (3.1.1) hamiltoniyenine ait hesaplamaları yaparak, sistemin enerjisini hesaplayıp sistemde bulunan büyüklüklere göre minimize ederek, denge durumu için latisteki parametreleri bulmak (iyonun konumu R_i gibi) mümkündür. Ayrıca bu yolla elde edilen taban durumuna göre sistemin çeşitli eksitasyonlarını (uyarımlarını) incelenebilir. Bu eksitasyonlar iyon titreşimleri (fononlar), tek parçacık uyarımları (electron-hole excitations), elektronik yük yoğunluğu ortak dalgalanmaları (plasmon), spin dalgalanmaları (magnon) vb. gibi eksitasyonlardır. Bu temel uyarımlar bölüm 2 de anlatılmıştı.

Burada *ab initio* hesaplarının detaylarına girilmeyecektir. Bunun yerine iki yaklaşımdan bahsedilecektir. Birincisi yaklaşım "Fenomenolojik Latis" yaklaşımıdır. Burada latis yapısı deneysel olarak belirlenir, deneyde elde edilen latis parametreleri ve elastisite sabitleri teoriye girdi olarak girilerek, elektronik ve titreşimsel (fononik) özellikler hesaplanır.

İkincisi yaklaşım ise "Jellium Model" olarak adlandırılır. Jellium Model, esasında *ab initio* modeldir, fakat gerçekte iyonlar kesikli yük dağılımına sahip olmalarına rağmen sistem, pozitif

yüklü, homojen bir akışkan gibi ele alınır, böylece iyon 'jellium' şeklini alır. Deneysel olarak elde edilen bir çok elektronik ve fononik özellik, bu "Jellium model" e göre yazılmış Hamiltonyenler ile elde edilen sonuçlarla uyum içerisindedir.

Etkileşmeyen Elektron Gaz

Örnek olarak daha sade olması için örgü(latis) modelini ve Jellium modelini elektron etkileşmelerinin olmadığı durumlar için inceleyelim. Önce fenomenolojik(deneylere dayalı, gözlemlere dayalı) latis modelini göz önüne alalım. X-ışını deneyleri göstermiştir ki kristallerde iyonların denge durumu periyodik bir örgüye sahiptir. Bu örgü $E_{lattice} \equiv E_{lat}$ enerjisine ve buna eşlik eden V_{el-lat} elektrik potansiyeline sahiptir. Bunlar; (3.1.1) Hamiltoniyeninde 'de verilen $T_{ion}, V_{ion-ion}, V_{el-ion}$ terimlerinin kombinasyonundan kaynaklanır. Sonlu sıcaklıkta, iyonlar denge konumu etrafında titreşirler, bu titreşim enerjilerinin kuantumları " fonon" olarak adlandırılır. Fonon alanının etkileşme içermeyen kısmının hamiltonyenini H_{ph} ile gösterilsin. Elektronların kinetik enerjisi T_{el}, etkileşmeleri V_{el-el}, elektron latis etkileşmesi $V_{el-lattice}$, elektron fonon etkileşmesini V_{el-ph} olarak tanımlansın. Böylece (3.1.1) Hamiltonyenini, şu şeklinde yazılabilir.

$$H \equiv \left(E_{lat} + H_{ph}\right) + (T_{el} + V_{el-el}) + (V_{el-lat} + V_{el-ph}) \tag{3.1.5}$$

Sıfır sıcaklıkta, iyonlar sıfır sıcaklık kuantum mekanik titreşimler dışından titreşmezler. Böylece Hamiltoniyende fononlarla ilgili bütün terimleri düşürebiliriz. Eğer sistemde elektron-elektron etkileşmelerini de ihmal edecek olursak (3.1.2) Hamiltonyeni durgun, periyodik iyon örgüsünde hareket eden elektronlar için Bloch teorisindeki Hamiltonyene indirgenir. Buna göre,

$$H_{Bloch} = T_{el} + V_{el-lat}(\vec{r}), \quad \begin{cases} V_{el-lat}(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}) = V_{el-lat}(\boldsymbol{r}) \\ herhangi\ bir\ \text{örgü}\ vekt\text{örü}\ \boldsymbol{R}\ için \end{cases} \tag{3.1.6}$$

Bu sistemin Schrödinger dalga denklemini çözmek ve daha sonra karşılaşacağımız fonon problemini incelemek için, periyodik bir fonksiyonun Fourier dönüşümününden faydalanılacaktır. Statik iyon örgüsünde bir iyonun denge durumu konumu $\boldsymbol{R}$ ile belirlensin, örgü taban vektörleri

$$\{a_1, a_2, a_3\} \text{ ise } \boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{a_1} + n_2\boldsymbol{a_2} + n_3\boldsymbol{a_3} \quad , \quad (n_1, n_2, n_3\ \epsilon\ Z) \tag{3.1.7}$$

Periyodik bir örgü ile uğraşıyor isek, reel uzay yerine, Fourier dönüşümü yardımı ile , "$reciprocal\ space$" (RS) ters uzay olarak isimlendirilen $\boldsymbol{k}$ uzayında, ("$reciprocal\ lattice$"

(RL)) ters örgü vektörleri tanımlayarak çalışmak çoğu zaman daha uygundur. Çünkü bu konuda yapılan deneysel çalışmalarda elde edilen sonuçlar ters örgü sonuçları ile doğrudan ilintilidir.

Buna göre ters örgü için şu koşullar sağlanmalıdır.

$RL = \{\boldsymbol{G} \epsilon \text{ RS} \mid e^{i\boldsymbol{G}.\boldsymbol{R}} = 1\} \rightarrow \boldsymbol{G} = m_1\boldsymbol{b_1} + m_2\boldsymbol{b_2} + m_3\boldsymbol{b_3} \qquad m_1, m_2, m_3 \epsilon Z$

$V(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}) = V(\boldsymbol{r})$, şeklindeki periyodik bir örgü için Fourier Dönüşümü

$V(\boldsymbol{r}) = \sum_{G\epsilon\, RL} V_G e^{i\boldsymbol{G}.\boldsymbol{R}}$ dir. (3.1.8)

Bu tanımlara göre $H_{Bloch}\psi = E\psi$ Schrödinger dalga denkleminin çözümü düzlem dalga tabanı $|k\sigma >$ alınarak bulunabilir.

$|k\sigma > \equiv e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}\chi_\sigma$, $\chi_\uparrow = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\chi_\downarrow = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$\psi_\sigma(\boldsymbol{r}) \equiv \frac{1}{V}\sum_{k'} c_{k'}\, e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}\chi_\sigma$

$< \boldsymbol{k}_\sigma | H_{Bloch}\psi_0 > = \sum_{k'}(\varepsilon_k \delta_{kk'} + \sum_G V_G \delta_{kk'+G})c_{k'}$ (3.1.9)

böylece verilen bir k' için Schrödinger denklemi,

$c_{\boldsymbol{k}}\varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \sum_G V_G c_{\boldsymbol{k}-G} = E c_{\boldsymbol{k}}$ (3.1.10)

olacaktır. Herhangi bir c_k sonsuz sayıda c_{k-G} terimi ile kuple olmuş durumdadır. Bu, her sonsuz sayıdaki(sayılabilir sonsuz) denklem bir $\boldsymbol{k}$ ile temsil edilebilir. (**k** Birinci Brillion Bölgesi içinde alınarak, (k ϵ FBZ)), FBZ içindeki sonsuz sayıdaki $\boldsymbol{k}$ için kesikli enerji spektrumları $\varepsilon_{n\boldsymbol{k}}$, n ϵ N elde edilir. Buna uygun öz durumlar,

$\psi_{n\boldsymbol{k}\sigma}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{V}\sum_G c_{k+G}^{(n)} e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}).\boldsymbol{r}}\chi_\sigma = (\frac{1}{V}\sum_G c_G^{(n\boldsymbol{k})})e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}\chi_\sigma \equiv u_{nk}(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}\chi_\sigma$ (3.1.11)

Şeklindedir. Denklem (3.8)'e göre $u_{nk}(\boldsymbol{r})$ örgüye göre periyodiktir. Böylece, Bloch teoremini sağlar. Yani,

$$H_{Bloch}\psi_{nk\sigma} = \varepsilon_{nk}\psi_{nk\sigma}\,,\ \psi_{nk\sigma} = \psi_{nk}(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}\chi \begin{cases} \boldsymbol{k} \epsilon\, FBZ \\ n\ band\ indeksi\ ise \\ u_{nk}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = u_{nk}(\boldsymbol{r}) dir \end{cases} \quad (3.1.12)$$

Böylece periyodik örgüdeki serbest elektronlara ait durumlar, periyodik bir fonksiyon ile modüle edilmiş düzlem dalgalardır.

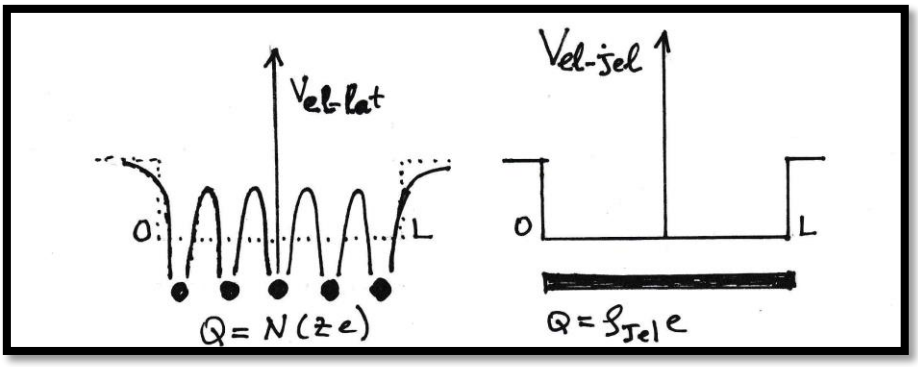
Bir çok uygulama için $\psi_{nk\sigma}$ ile verilen Bloch elektronları, elektron kütlesi malzeme içinde m^* etkin kütle olarak alınır ise, düzlem dalgalarla yer değiştirilirler.

Bu duruma, etkin kütle yaklaşımı denir.

Etkin kütle yaklaşımına göre $\begin{cases} \psi_{nk\sigma} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} \chi_\sigma \\ m \rightarrow m^* \\ \boldsymbol{k} \rightarrow koşul\ yok \end{cases}$ (3.1.13)

Genellikle bu etkin kütle yaklaşımının kullanıldığı belirtildiğinde ve $m^* \equiv m$ alınır.

3.2 Jel modelde etkileşmeyen elektron sistemi.



Şekil 3.3 Gerçek örgü sisteminde elektronların gördüğü periyodik potansiyel ve Jel modelde karşılığı. Q her iki durum için elektron gazın gördüğü birim pozitif yük [3].

Örgü sisteminde elektronlar için etkin kütle yaklaşımı yapıldığında elektronlara ait özdurumlar düzlem dalgalardır. Jel modelde örgüdeki iyonların dağılımı $(+e\rho_{jel}L)$ yüküne sahip homojen dağılmış bir jel olarak varsayılır. Buna göre gerçek periyodik potansiyel $V_{el-\text{örgü}}$, jel modelde V_{el-jel} ile yer değiştirir. Şekil 3.3. Böylece (3.1.1) eşitliğindeki

$V_{iyon-iyon} + V_{el-el} + V_{el-iyon} = 0$ olduğu göz önüne alınır ise

$$H_{jel} = T_{el} \tag{3.2.1}$$

olur. Kenar uzunlukları L_x , L_y , L_z olan $V = L_x L_y L_z$ hacmine sahip bir kutudaki serbest parçacıklar için Schrödinger dalga denkleminin çözümleri olan dalga fonksiyonlarının düzlem dalgalar olduğunu biliyoruz. Bu fonksiyonlar $\psi(L_x, y, z) = \psi(0, y, z)$ ve $\psi'(L_x, y, z) = \psi'(0, y, z)$ sınır koşullarını sağlarlar. (Benzer koşullar y ve z doğrultuları için de geçerli). Burada sınır koşulları olarak $\psi(L_x, y, z) = \psi(0, y, z)$ (y ve z içinde aynı) olan ve durağan dalgalar gibi akım taşımayan durumlara karşılık gelen Dirichlet sınır koşullarını kullanacağız.

Türevleri de içeren sınır koşulları transport olayı gibi elektronların akımına karşılık gelen durumlarını belirler . Buna göre serbest parçacık taban durumları

$$H_{jel}\psi_{k\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi_{k\sigma} \quad , \quad \psi_{k\sigma}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}\chi_\sigma = |k\sigma> \quad ,$$

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x \, , \, n_x = 0, \pm 1, \pm 2, .. \, , V = L_x L_y L_z \tag{3.2.2}$$

Şeklindedir. Buna uygun 2. Kuantizasyonda H_{jel} şöyle yazılır.

$$H_{jel} = \sum_\sigma \int d\boldsymbol{r}\psi_\sigma^+(\boldsymbol{r})(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}) = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \tag{3.2.3}$$

k uzayında hacim

$\frac{2\pi}{L_x}\frac{2\pi}{L_y}\frac{2\pi}{L_z} = \frac{(2\pi)^3}{V}$ dir. $\boldsymbol{k}$ nın kuantize olması durumunda bu hacmi dolduran durumlar üzerinden toplam yapılmalıdır. Fakat pratikte $\sum_k = \frac{(2\pi)^3}{V}\int d\boldsymbol{k}$ almak birçok durumda önemli bir kolaylık sağlar.

İkinci kuantizasyon analizi için tek-parçacık elektron durumları Pauli ilkesine göre sıralanmalıdır.

$\psi_{k\sigma}(\boldsymbol{r}) = |k\sigma>$ durumlarının enerjileri $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ dir. Buna göre $|k\sigma>$ durumları

$|k_1 \uparrow>$, $|k_1 \downarrow>$, $|k_2 \uparrow>$, $|k_2 \downarrow>$, ... şeklinde sıralanabilir. Burada

$$\varepsilon_{k_1} \leq \varepsilon_{k_2} \leq \varepsilon_{k_3} \leq \cdots \tag{3.2.4}$$

şeklindedir. Sıfır sıcaklıkta N elektronlu sistemin taban durumu Fermi Denizi veya Fermi Küresi ($|FS>$) olarak tanımlanır. Bu ise N durumun en alttan başlayarak Pauli ilkesini sağlayacak şekilde doldurulması ile oluşturulur. Buna göre ;

$$|FS> = c^+_{k_{\frac{N}{2}\uparrow}} c^+_{k_{\frac{N}{2}\downarrow}} \ldots c^+_{k_2\uparrow} c^+_{k_2\downarrow} c^+_{k_1\uparrow} c^+_{k_1\downarrow} |0> \tag{3.2.5}$$

Bu durumda en üst dolu yörünge Fermi Enerjisi (ε_F) olarak adlandırılır. Fermi enerjisine eşlik eden dalga vektörü, dalgaboyu ve hızı ise aşağıdaki gibidir.

$$k_F = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\varepsilon_F} \quad , \quad \lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} \quad , \quad v_F = \frac{5k_F}{m} \tag{3.2.6}$$

Bu şekilde tanımlanan Fermi küresinde $\varepsilon_k < \varepsilon_F$ veya $|\boldsymbol{k}| < k_F$ durumlarının hepsi dolu , diğer durumlar ise boştur. Bu tanımlar kullanılarak makroskobik bir büyüklük olan yoğunluk $n = \frac{N}{V}$ ile mikroskobik bir büyüklük olan dalga sayısı k_F arasında bir bağıntı yazılabilir. Buna göre

$$N =< FS\big|\widetilde{N}\big|FS >=< FS|\sum_{k\sigma} n_{k\sigma}|FS >= \sum_{\sigma} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\,\boldsymbol{k} < FS|n_{k\sigma}|FS > \qquad (3.2.7)$$

(3.21) bağıntısı kolayca hesaplanabilir ,

$|n_{k\sigma}|FS >= \begin{cases} |FS > & |\boldsymbol{k}| < k_F \\ 0 & diğer\ durumlar \end{cases}$, bu denklem $\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 1 \\ 1 & x > 1 \end{cases}$ fonksiyonu cinsinden

$$N = \sum_{\sigma} \frac{v}{(2\pi)^3} \int d\,\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{\theta}(k_F - |\boldsymbol{k}|) < FS|FS >=$$

$$\frac{2v}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk k^2 \int_{-1}^{1} d(cos\theta) \int_0^{2\pi} d\emptyset\, 1 = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \qquad (3.2.8)$$

Böylece

$$k_F^3 = 3\pi^2 n \qquad (3.2.9)$$

Bulunmuş olur. Bu bağıntı mikroskobik parametreler olan k_F , ε_F , v_F büyüklüklerin bulunmasını sağlayan önemli bir eşitliktir. Hall ölçüm yöntemi Bakır (Cu) elementinde elektron yoğunluğunun $n = 8.47 * 10^{28}\ (m^{-3})$ olduğunu vermektedir. Buna göre Bakır atomundaki valans elektronları için

$$k_F = 13.6\ nm^{-1}\ , \varepsilon_F = 7.03\ eV\ ,\ \lambda_F = 0.46\ nm\ , v_F = 1.57 * 10^6 \frac{m}{s} = 0.005\ c \qquad (3.2.10)$$

değerleri elde edilir. Burada Fermi enerjisinin çok yüksek bir sıcaklığa karşılık geldiğini belirtelim, Fermi hızı da çok yüksek olmasına karşılık hala ışık hızının yüzde birinden küçüktür. Şimdi Fermi küresinin taban durumu enerjisini hesaplayalım.

$$E^0 =< FS\big|H_{jel}\big|FS > = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} < FS|n_{k\sigma}|FS > =$$

$$2 \frac{v}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2}{2m} \int \boldsymbol{d}\,\boldsymbol{k}\, k^2 \theta(k_F - |\boldsymbol{k}|) < FS|FS > \quad \text{(2 çarpanı sipinden dolayı gelmiştir)}$$

$$= 2 \frac{v}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk k^4 \int_{-1}^{1} d(cos\theta) \int_0^{2\pi} d\emptyset 1 = \frac{v}{5\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} k_F \ , \quad (k_F^3 = 3\pi^2 n \text{ ise})$$

$$E^0 = \frac{3}{5} N \varepsilon_F \qquad (3.2.11)$$

Bulunur. N elektron sisteminde her elektronun kinetik enerjisi $0 < \varepsilon_k < \varepsilon_F$ için geçerli olan

$$\frac{E^0}{N} = \frac{3}{5}\varepsilon_F = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)n^{2/3} \qquad (3.2.12)$$

Bağıntısı yazılabilir. Etkileşmeyen elektron gaz sisteminde durum yoğunluklarıda hesaplanabilir. ε enerjisi civarında $\Delta\varepsilon$ aralığına düşen ΔN durumlarının sayısı

$D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon}$, $\Delta N = D(\varepsilon)\Delta\varepsilon$, ve hacim başına durum yoğunluğu $d(\varepsilon) = \frac{D(\varepsilon)}{V} = \frac{dn}{d\varepsilon}$ dir.

Buna göre yukarıdaki bağıntılardan

$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3}$ ve

$n(\varepsilon) = \frac{1}{3\pi^2}(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}\varepsilon^{3/2}$ $\varepsilon > 0$ için $\qquad (3.2.13)$

bulunur, buradan da

$$d(\varepsilon) = \frac{dn}{d\varepsilon} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\varepsilon^{\frac{1}{2}}\theta(\varepsilon) \text{ ve } D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{v}{2\pi^2}(\frac{2m}{\hbar^2})^{3/2}\varepsilon^{\frac{1}{2}}\theta(\varepsilon) \qquad (3.2.14)$$

Elde edilir. Çok parçacıklı bir sistemde durum yoğunluğu oldukça önemli bir fonksiyondur. Eğer sistemin $D(\varepsilon)$ durum yoğunluğu biliniyor ise toplam parçacık sayısı N ve taban durumu enerjisi E^0 ,

$N = \int d\varepsilon D(\varepsilon)$ ve $E^0 = \int d\varepsilon\ \varepsilon\ D(\varepsilon)$

bağıntıları ile hesaplanabilir.

3.3 Sonlu sıcaklıkta etkileşmeyen elektron gaz sistemi

Elektron gaz sisteminde Coulomb etkileşmelerini hesaba katmadan önce , sistemde sıcaklık artar ise bunun etkisinin nasıl olacağına bakılabilir. Sıcaklık sıfırdan başlayarak artırıldığında

$n_F(\varepsilon_k) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$, $(\beta = \frac{1}{k_B T})$ $\qquad (3.3.1)$

Şeklinde değişir. $T = 0$ da kimyasal potansiyel μ, ε_F ye eşittir. Gerçekte ise μ sıcaklık değişimi ile yavaşça artmaktadır. Sıcaklık değişmesi ile elektron sayılarının değişmediği (toplam elektron sayısı sabit) göz önüne alınarak dikkatli bir analiz yapıldığında Sommerfeld açılımı olarak adlandırılan ifade $\mu(T)$ için

$$n(T=0) = n(T) = \int_0^\infty d\varepsilon d(\varepsilon) f(\varepsilon) \ \rightarrow\ \mu(T) = \varepsilon_F\left[1 + \frac{\pi^2}{12}(\frac{k_B T}{\varepsilon_F})^2 + \cdots\right] \qquad (3.3.2)$$

olduğunu belirtir. Daha önce bakır (Cu) için $\varepsilon_F \cong 80\,000\ K$ verilmişti, buna göre bakırın erime sıcaklığında bile çok az miktarda elektron ısısal değişimden etkilenir. Gerçekte ε_F, $2k_BT$ kadar değişir. Oda sıcaklığında $\frac{\Delta N}{N} = \frac{6k_BT}{\varepsilon_F} \cong 10^{-3}$ tür. Buna göre sıcaklığın artması Fermi küresini yapısını bozmuyor fakat kürenin hafifçe basıklaşmasına neden oluyor. Bu bilgilerin ışığında metallerde spesifik ısıya neden yalnızca iyon titreşimlerinin katkıda bulunduğunu daha iyi anlayabiliriz. Buna göre metallerde elektronik serbestlik derecesi donmuş gibi davranır ve spesifik ısıya katkıda bulunmaz. Sıcaklık ε_F civarı olduğunda elektronik serbestlik derecesi spesifik ısıya katkıda bulunur. Bu özellik serbest elektron yoğunluğunun daha düşük olduğu yarı iletkenlerde geçerli değildir.

3.4 Pertürbasyon teorisinde elektron-elektron etkileşmeleri.

Latis(örgü) ve Jell yaklaşımlarından sonra şimdi (3.1.3) Hamiltoniyeninde verilen V_{el-el} (elektron-elektron) etkileşmesini pertürbasyon teorisi ile inceleyelim. Bu etkileşme ifadesinde $q = 0$ terimi pozitif arka fon (background) ile birbirini yok ettiği için elektron-elektron etkileşmesinde göz önüne alınmayacaktır. Bu nedenle $q = 0$ terimini içermeyen V yerine V' alalım.

$$V'_{el-el} = \frac{1}{2v}\sum_{k_1k_2q}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\frac{4\pi e_0^2}{q^2}c^+_{k_1+q,\sigma_1}c^+_{k_2-q,\sigma_2}\,c_{k_2\sigma_2}c_{k_1\sigma_1} \qquad (3.4.1)$$

Bu terim için birinci derece pertürbasyon hesapları yaklaşık olarak iyi sonuçlar veriyor. İkinci ve daha yüksek dereceden pertürbasyon hesaplamalarında ise ıraksamalar meydana gelmektedir. Bu ıraksamaları yok etmek için daha detaylı bir yöntem olan alan teorisi yöntemleri ve renormalizasyon teorisi kullanmak gerekir. Birinci derece katkıları hesaplamadan önce hangi değerler için pertürbasyon yaklaşımı yapılabilir buna bakılmalıdır. Bunun için, kinetik enerjinin yoğunluk cinsindeki ifadesine bakalım. $E_{kin} = \frac{E^{(0)}}{N} \propto n^{2/3}$ idi. Bu ifadeyi $\overline{d}$ uzaklığındaki bir yükün tipik potansiyel enerjisi

$E_{pot} = \frac{e_0^2}{\overline{d}} \propto n^{1/3}$ ile karşılaştırıldığında

$$\frac{E_{pot}}{E_{kin}} \propto \frac{n^{1/3}}{n^{2/3}} = n^{-1/3} \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} 0 \qquad (3.4.2)$$

olur buna göre elektron-elektron etkileşmeleri, elektron gazının yoğunluğu arttığında sıfıra gitmektedir (önemsizleşir). Pauli dışarlama ilkesinden dolayı yüksek yoğunluktaki elektron

gazında dominant enerji ölçüsü kinetik enerji terimidir. Bu çerçevede probleme aşağıdaki gibi yaklaşılacaktır.

Pertürbasyon işlemi için, uygun bir uzunluk skalası (ölçeği) ve enerji skalası seçelim, bunun için prototipimiz hidrojen atomu olsun. Hidrojen atomunda taban durumu enerjisi küresel simetrik (proton etrafında) s-dalgalı tek elektronun momentumu $\lambda_{dB} = \frac{h}{P}$ deBroglie ifadesine göre $p = \hbar/a_0$ alınabilir. Burada $a_0 =$ Bohr yarıçapıdır. Buna göre elektronun toplam enerjisi $E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e_0^2}{r_0} \equiv \frac{\hbar^2}{a_0^2 2m} - \frac{e_0^2}{a_0}$ olacaktır. a_0 değeri $\frac{\partial E}{\partial a_0} = 0$ veya $E_{kin} = -\frac{1}{2}E_{pot}$ virial teoreminden bulunur. Buna göre

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me_0^2} = 0.053 \text{ nm}, \; E_0 = -\frac{e_0^2}{2a_0} = 13.6\, eV \qquad 1Ry \equiv \frac{e_0^2}{2a_0} = 13.6\, eV \tag{3.4.3}$$

$Rydberg \equiv Ry$ genellikle atomik fizikte enerji ölçeği olarak kullanılır. Sistemde uzunluklar a_0 cinsinden ölçülür ise, boyutsuz r_s uzunluğu, ortalama elektronlar arası mesafeyi tanımlar bu mesafe, yalnızca bir elektron içeren kürenin hacmi olarak tanımlanır.

$$\frac{4\pi}{3}(r_s a_0)^3 = \frac{1}{n} = \frac{3\pi^2}{k_F^3} \implies a_0 k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} {r_s}^{-1} \implies r_s = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{a_0 k_F} \tag{3.4.4}$$

$$\frac{E^{(0)}}{N} = \frac{3}{5}\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{m}k_F^2 = \frac{3}{5}\frac{1}{2}(a_0 e_0^2)\frac{(a_0 k_F)^2}{{a_0}^2} = \frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{{e_0}^2}{2a_0}{r_s}^{-2} \approx \frac{2.21}{{r_s}^2}\, Ry \tag{3.4.5}$$

bulunur. Bu homojen olmayan elektron sisteminin taban durumu (pertürbe olmamış, sıfırıncı derece pertürbe terimi) enerjisidir.

3.5 Birinci Derece Pertürbasyon Teorisinde Elektron-Elektron Etkileşmesi

Standart pertürbasyon teorisinde birinci derece enerji terimi şöyledir.

$$\frac{E^{(1)}}{N} = \frac{<FS|V'_{el-el}|FS>}{N}$$
$$= \frac{1}{2VN}\sum_q \sum_{k_1 k_2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{4\pi {e_0}^2}{q^2} < FS|c^\dagger_{k_1+q,\sigma_1} c^\dagger_{k_2-q,\sigma_2} c_{k_2\sigma_2} c_{k_1\sigma_1}|FS >$$

Bu ifadedeki matris elemanı şu şekilde elde edilir. Öncelikle matris elemanı iki tane yok etme operatörü $|k_1| < k_F$, $|k_2| < k_F$ ise sıfır olmayan sonuç elde edilir. Sonra $< FS|$ faktörü, iki tane yaratma operatörünün, bizi tekrar |FS>'ye götürmesini gerektirir, böylece, ya $q = 0$ (ki bu terim daha önce elimine edilmişti) veya $k_2 = k_1 + q$ ve $\sigma_1 = \sigma_2$ olmalıdır. Fermi denizinde,

$|k_1\sigma_1>, |k_2\sigma_2>$ iki durumu için, birinci derece pertürbasyon teorisine göre iki mümkün işlem olasıdır. Doğrudan işlem $q = 0$, hali hazırda homojen kısımda hesaba katılmıştı. Dolayısı ile yalnızca değiş tokuş kısmı V'_{el-el} işlemine katkıda bulunur. Herhangi bir $\vec{q}$ için $\vec{k}$ integrasyonunun geometrisi de şekil 3.4 te gösterilmiştir. $q \neq 0$ durumu için

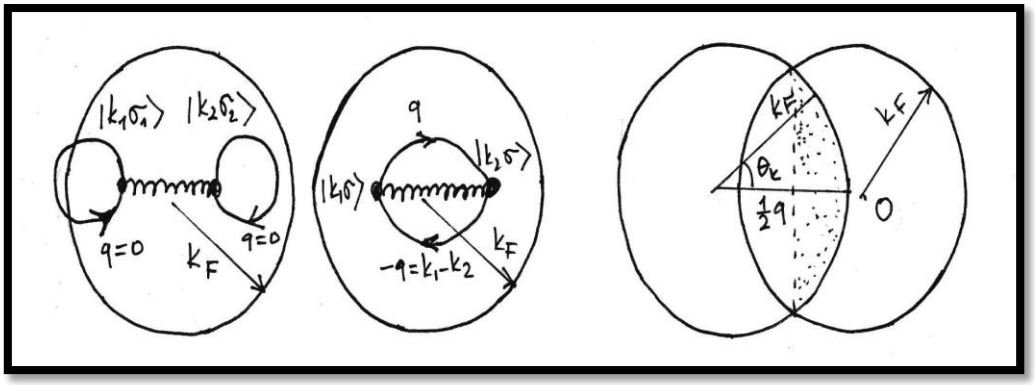
$$< FS|c^{\dagger}_{k_1+q\sigma_1} c^{\dagger}_{k_2-q\sigma_2} c_{k_2\sigma_2} c_{k_1\sigma_1}|FS >$$

$$=\delta_{k_2,k_1+q}\delta_{\sigma_1\sigma_2} < FS|c^{\dagger}_{k_1+q\sigma_1} c^{\dagger}_{k_1\sigma_1} c_{k_1+q\sigma_1} c_{k_1\sigma_1}|FS$$

$$=-\delta_{k_2,k_1+q}\delta_{\sigma_1\sigma_2} < FS|n_{k_1+q\sigma_1} n_{k_1\sigma_1}|FS >$$

$$=-\delta_{k_2,k_1+q}\delta_{\sigma_1\sigma_2}\theta(k_F - |k_1+q|)\,\theta(k_F - |k_1| \quad \text{şeklindedir.} \qquad (3.5.1)$$

{ $(c^{\dagger}_{k_1\sigma_1} c_{k_1+q\sigma_1} = -c_{k_1+q\sigma_1} c^{\dagger}_{k_1\sigma_1})$ olmak üzere }



Şekil 3.4 Birinci derece pertürbasyon yaklaşımında Fermi küresi içindeki $|k_1\sigma_1>$ ve $|k_2\sigma_2>$ gibi iki durumun doğrudan(en soldaki şekil) ve değiştokuş (exchange)(ortadaki şekil) gibi iki olası etkileşme işlemi. En sağdaki şekil $0 < q < 2k_F$ olan herhangi bir **q** için integral alma geometrisi [1].

Burada $\vec{q} \neq 0$ ise $\vec{k}_1 + \vec{q} \neq \vec{k}_1$ olmasını gerektirir, bu ise basitçe işgal edebilme sayısını veren antikomütatör bağıntısında $(-)$ işaretinin gelmesine neden olur. Toplamda yalnızca $\vec{k}_1$ göründüğü için (1) indisi düşürülebilir. Şimdi $\vec{k}$ ve $\vec{q}$ toplamına bakalım, bu toplamı integrale dönüştürülüp polar koordinatlarda $(k, \theta_k, \vartheta_k)$ ve $(q, \theta_p, \vartheta_p)$ cinsinden hesaplanabilir.

Birincisi, integral $\boldsymbol{q}$'nun doğrultusundan bağımsız, bu nedenle $\int_{-1}^{+1} d(cos\,\theta_p) \int_0^{2\pi} d\vartheta_p = 4\pi$, ikincisi, θ fonksiyonu $0 < q < 2k_F$ durumunda, sıfır olmayan bir sonuç verir. Verilen sabit bir $\boldsymbol{q}$ değeri için, integralin geri kalan kısmı k_F yarıçaplı iki kürenin q kadar yer değiştirmesinden

kaynaklanan, iki kürenin kesişen hacmine eşittir. Bu geometri (Şekil 3.4) da gösterilmiştir. Bu hacmin hesaplanırken, verilen bir $(k, \theta_k, \vartheta_k)$ için integral,

$\frac{q}{2k_F} < cos\theta_k < 1,\ \frac{q}{2cos\theta_k} < k < k_F\ ,\ 0 < \vartheta_k < 2\pi$

aralıklarında alınmalıdır. Böylece,

$$\frac{E^{(1)}}{N} = -\frac{4\pi {e_0}^2}{2vN} 2(4\pi) \frac{v}{(2\pi)^3} \int_0^{2k_F} dq \frac{q^2}{q^2} 2(2\pi) \int_{q/2k_F}^{1} d(cos\,\theta_k) \frac{v}{(2\pi)^3} \int_{q/2cos\theta_k}^{k_F} dk k^2 \tag{3.5.2}$$

Burada spinden dolayı (2), ve simetriden dolayı (2) çarpanları gelmiştir. q açısı için 4π, ϑ_k için 2π, iki defa $\frac{v}{(2\pi)^3}$ integrali ise $\vec{k}$ ve $\vec{q}$ toplamlarını integrale çevirdiğimiz için gelmiştir. Geri kalan integral elemanter bir integraldir ve alınacak olursa,

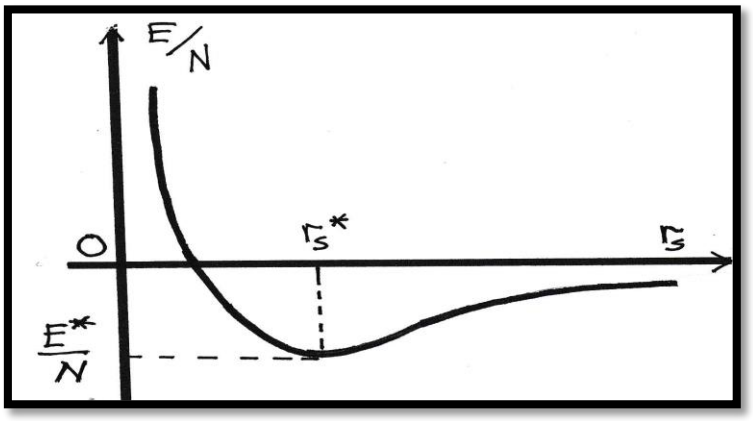
$$\frac{E^{(1)}}{N} = -\frac{{e_0}^2}{2} \frac{v}{N} \frac{{k_F}^2}{(2\pi)^3} = -\frac{{e_0}^2}{2a_0} (a_0 k_F) \frac{{k_F}^3}{2\pi^3 n} = -\frac{{e_0}^2}{2a_0} ((\frac{9\pi}{4})^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_s}) \frac{3\pi}{2}$$

$$\cong \frac{0.916}{r_s} Ry$$

Sonuç olarak,

$$(\frac{E}{N}) \rightarrow_{r_s \rightarrow 0} (\frac{E^{(0)} + E^{(1)}}{N}) = \left(\frac{2.211}{{r_s}^2} - \frac{0.916}{r_s}\right) Ry \tag{3.5.3}$$

elde edilir.



Şekil 3.5 (3.38) bağıntısına göre, 3D elektron gazının 1. derece pertürbasyon teorisine göre parçacık başına enerjisinin boyutsuz parametre r_s göre değişimi.

Şekilde görüleceği gibi elektron değiş tokuş etkileşmesinden dolayı $r_s = r_s{}^* = 4.83$ değerinde $\frac{E}{N} = \frac{E^*}{N} = -1.29eV$ iyonizasyon enerjisine sahip olacak şekilde kararlı yapıya sahiptir.

Şekil (3.5)'de görüleceği gibi elektron-elektron etkileşmesi hesaba katıldığında (itici Coloumb etkileşmesi) elektron gazı kararlı bir yapıya sahiptir. İyonlardan oluşmuş Jellium ile elektronları bir arada tutmak için bir dış sınırlayıcı potansiyele "confinement" gerek yoktur. n^* gibi optimum bir yoğunlukta, (veya parçacıklar arası mesafe r_s'de), enerji minimize olur, bunun sonucu $E^* < 0$ bağlı durumu oluşur. Elektron gaz sisteminde r_s in iki limit durumu özel önem taşır. r_s 'in sıfıra yaklaştığı yüksek yoğunluk limit durumunda elektron gaz sisteminde kinetik enerji terimi baskındır bu durumda sistemin analitik çözümünü yapmak mümkündür. r_s'in büyük değerleri için elektron değiştokuş enerji katkısı (daha yüksek pertürbasyon terimleride hesaba katıldığında korelasyon enerji katkısı) kinetik enerjiye baskın olacaktır. Bu durum elektron gaz sisteminde "Wigner Kristali" (elektronların bir kristal yapıya sahip olması) olarak adlandırılır. Birinci derece pertürbasyon hesabına göre sistemin denge durumu,

$\frac{\partial}{\partial r_s}\left(E^{(0)} + E^{(1)}\right) = 0$ ifadesi ile elde edilir ve sonuç deneysel değerler ile kıyaslanabilir.

$r_s{}^* = 4.83,\ \ \frac{E^*}{N} = -0.095Ry = -1.29eV$ (Birinci dereceden pertürbasyon teorisi)

$r_s = 3.96,\ \ \frac{E}{N} = -0.083Ry = -1.13eV$ (Na için deneysel değer) (3.5.4)

Bu sonuçlardan 1.derece pertürbasyon yaklaşımının iyi bir yaklaşım olduğu görülür.

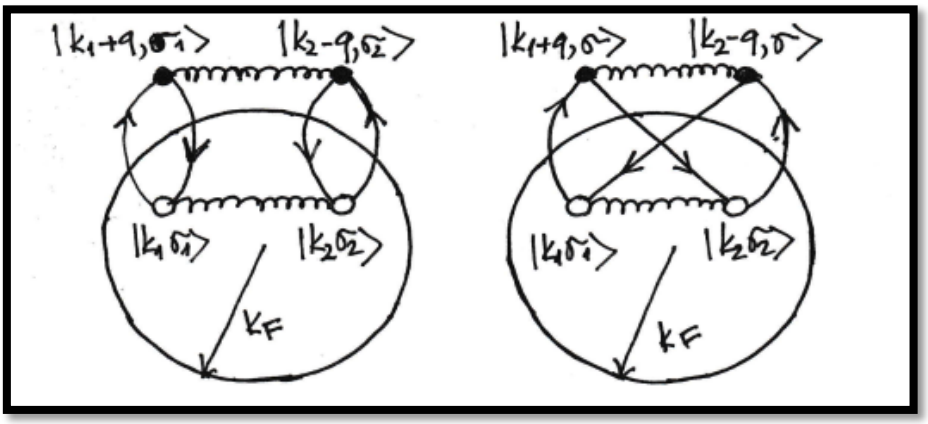
Negatif bağlanma enerjisi Coulomb değiş-tokuş etkileşmelerinden kaynaklanır. Bu durum fiziksel olarak Pauli dışarlama ilkesinin etkisi olarak yorumlanabilir. Buna göre elektronlar, birbirlerinden kaçınırlar, bir noktada verilen bir zamanda yalnızca bir elektron bulunabilir. Klasik doğrudan Coloumb etkileşmeleri, bunu hesaba katmaz ve enerji değeri yalnız Coloumb değeri göz önüne alındığında hesaplanırsa, büyük çıkar, halbuki değiş-tokuş etkileşmesi devreye girdiğinde negatif olarak katkıda bulunur ve bu fazlalığı düzeltir. Elektronlar arası etkileşmeler göz önüne alındığında ε_F'ye nasıl etki ettiğini de merak edebiliriz. Daha önce de gördüğümüz gibi, ısısal genişlemenin meydana geldiğini söylemiştik, fakat bu genişleme $\varepsilon_F \approx 7eV$ gibi büyük bir değer ile karşşılaştırıldığında önemsizdir. Fakat parçacık başına etkileşme enerjisi $\cong 1.3eV$, olduğu için göz önüne alınmalıdır . Bu değer Fermi enerjisinden küçük ama mertebe olarak karşılaştırılabilir. Kuantum alan teorisi kullanarak, elektronlar arası güçlü Coloumb etkileşmelerinin Fermi küresini niçin bozmadığını açıklanabilir. Bu kuantum alan teorisinin (QFT) nin önemli bir sonucudur.

3.6 İkinci Derece Pertürbasyon Teorisine Göre Elektron Etkileşmeleri

İkinci derece pertürbasyon teorisi yapıldığında, elektron etkileşmeleri için bulunan sonucun, birçok ıraksama oluşturduğu görülür. Şimdi bu ıraksamaların nasıl oluştuğuna ve bunlarla nasıl baş edilebileceğine kısaca bakalım. İkinci derece pertürbasyon teorisine göre $E^{(2)}$ şöyle ifade edilebilir.

$$\frac{E^{(2)}}{N} = \frac{1}{N}\sum_{|V>\neq|FS>} \frac{<FS|V'_{el-el}|v><v|V'_{el-el}|FS>}{E^{(0)}-E_v}$$

Burada bütün v ara durumları(intermediate state), $|FS>$'den farklı olmalı. Şekil (3.6)'de gösterildiği gibi, bu durum Coloumb etkileşmelerinde momentum korunumu ile birleştirilir ise şu sonuca varılır, ara durumlardaki iki parçacık Fermi küresinin dışına çıkarılır. Bu ara durumlar için $|FS>$, kendini tekrar oluşturur. Bunun için daha önce oluşan iki boşluk, yerine uyarılmış iki elektron konulur. Bu durumda iki türlü işlem mümkündür, direkt işlem ve değiş tokuş işlemi.



Şekil 3.6 Fermi denizindeki $|k_1\sigma_1>$, $|k_2\sigma_2>$ iki durumu için, ikinci derece pertürbasyon teorisine göre, mümkün olan iki işlem. Soldaki doğrudan terim, $\frac{E}{N}$ enerjisinin ıraksamasına neden olur, Sağdaki değiş tokuş terimi ise $\frac{E}{N}$ enerjisine sonlu bir katkıda bulunur [1].

Doğrudan etkileşmelerde, Coloumb etkileşmelerindeki küçük $\boldsymbol{q}$ momentum transferinde tekillikten dolayı, nasıl ıraksayan bir terim verdiğine bakalım. Doğrudan etkileşmeler için, $|v>\neq|FS>$ kısıtlaması(constraint) bize şunu verir.

$$|v>=\theta\left(|\vec{k}_1+\vec{q}|-k_F\right)\theta(|k_2-q|-k_F)\theta(k_F-|k_1|)*$$

$$\theta(k_F - |k_2|)c^{\dagger}_{k_1+q\sigma_1}c^{\dagger}_{k_2-q\sigma_2}c_{k_2\sigma_2}c_{k_1\sigma_1}|FS> \quad (3.6.1)$$

$|FS>$'yi tekrar oluşturmak için aynı miktarda $\vec{q}$ momentumu

$< v|V'_{el-el}|FS>$ ve $< FS|V'_{el-el}|v>$

içinde içerilmek zorundadır.

$V_q = \frac{4\pi\varepsilon_0{}^2}{q^2}$ ise,

$$E^{(2)} = \frac{1}{v^2}\sum_q \sum_{\substack{k_1\sigma_1 \\ k_2\sigma_2}} \frac{\left(\frac{1}{2}V_q\right)^2}{E^{(0)}-E_v}\ \theta(|k_1+q|-k_F)\theta(|k_2-q|-k_F)\theta(k_F-|k_1|)\theta(k_F-|k_2|) \quad (3.6.2)$$

$E^{(2)}$ enerjisine küçük $\vec{q}$'lardan gelecek katkı

$V_q{}^2 \propto \frac{1}{q^4}$

$E_0 - E_v \sim k_1{}^2 + k_2{}^2 - (k_1+q)^2 - (k_2-q)^2 \propto_{(q\to 0)} q$

$\sum_{k_1} \ldots \theta(|k_1+q|-k_F)\ \theta(k_F-|k_1|) \sim_{(q\to 0)} q \quad (3.6.3)$

Buradan;

$$E^{(2)}_{direct} \propto \int_D dq q^2 \frac{1}{q^4}\frac{1}{q} qq = \int_{q\to 0} dq \frac{1}{q} = \ln(q)|_{q=0} \propto \infty \quad (3.6.4)$$

olduğu görülür. Değiş tokuş terimi ıraksamaya neden olmaz, çünkü bu durumda, uyarılmış durum için momentum transferi $\vec{q}$'dur, fakat releksasyon (geri uyarım) durumunda şekilde görüleceği gibi momentum transferi $k_2 - k_1 - q$ olur. Böylece, q→ 0 için $V_q{}^2$, $V_q V_{k_2-k_1-q} \propto q^{-2}$ olacak terimle yer değiştirir. Bu ise $V_q{}^2 \propto q^{-4}$'ten daha az tekildir (singulerdir).

Bu Iraksama durumu fiziksel olarak bir çelişki içerir. Çünkü sonuçta elektron gaz sisteminin enerjisi sonlu bir değer olmalıdır. Elektron gaz sisteminin enerjisindeki bu ıraksamayı ortadan kaldırmak için daha fazla terim göz önüne alınmalı. Fakat pertürbasyon ifadesi daha fazla uzatıldığında integrallerin hesabı içinden çıkılmaz olur. Bu nedenle, bu problem kuantum alan teorisi kavramları ile ortadan kaldırılır.

Kaynaklar:

1- Quantum Theory of Many-Particle Systems, A.L. Fetter, J. D. Walecka, , 1971.

2- Many-Particle Physics, G.D. Mahan, Plenum Press, 1986.

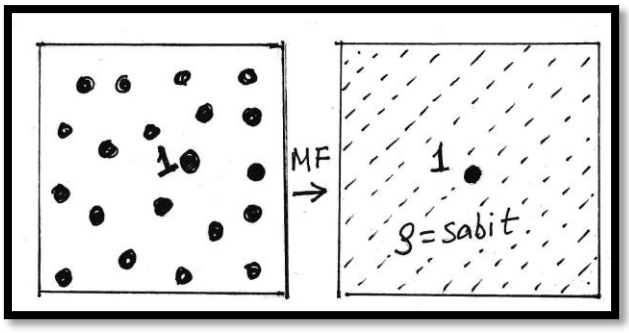
3- Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, H. Bruus, K. Flensberg, Oxford Press, 2005.

4- Fundamentals of Many-body Physics, Wolfgang Nolting, Springer, 2009.

BÖLÜM 4

4.1 Ortalama Alan Teorisi

Çok parçacıklı bir sistemde her bir parçacığın etkileşmelerini göz önüne alarak sistemin incelenmesi kolay bir problem değildir. Basit bir örnek olarak N tane elektrondan oluşmuş bir sistemi göz önüne alalım. Yoğunluk düşük ise (veya hacım büyük ise) sistem "seyrek elektron gaz" sistemi olarak adlandırılır. Elektronlar Coulomb etkileşmelerinden dolayı birbirinden uzak durmaya çalışırlar sistemde elektronlar arasında bir korelasyon olasına rağmen boşluklar için bir korelasyondan bahsedilmez. Fakat basınç artırıldığında boşluklar arasında da korelasyonlar oluşur ve boşluklar pozitif yük merkezleri gibi davranır, böylece problem daha karmaşık hale gelir. Bu durumda sistem "seyrek elektron gaz" sistemi yerine "güçlü korelasyona sahip elektron sistemi" (strongly corelated electron system) sistemine dönüşür. Bu durumda sistemdeki bütün çoklu etkileşmeleri göz önüne almak gerekir. Bu problemin incelenmesinin zor olacağı açıktır. Bu nedenle problemin çözümü için bir takım yaklaşımlar yapılır. Bu yaklaşımlar bir önceki bölümde anlatıldığı gibi "elemanter eksitasyonlar" yöntemi veya kanonik dönüşüm yöntemi gibi problemin yapısına uygun bir yaklaşım olmalıdır. Ortalama alan yaklaşımı da bu yöntemlerden birisidir. Bu yöntemde çoklu etkileşmelerden kaynaklanan korelasyonlar ihmal edilmez fakat ortalama yoğunluk (ortalama alan) gibi sabit bir değere indirgenir. Buna göre gerçek sistemde parçacıklar birbirleri ile etkileşirler, ortalama alan yaklaşımında ise her bir parçacık diğer parçacıkların oluşturduğu ortalamaa bir etki (alan) ile etkileşir. Ortalama alan sistemin serbest enerjisini minimum yapacak şekilde seçilir bu nedenle sistemin denge durumu özelliklerini belirler.



Şekil (4.1) Ortalama alanın şekilsel gösterimi. Solda gerçek sistemde parçacıklar birbirleri ile etkileşirler. **1** ile gösterilen parçacık (veya çisim) ortamdaki tüm parçacıklarla ikili ve çoklu etkileşmeler yapar. Sağdaki şekilde gösterilen Ortalama Alan Yaklaşımında (OAY) (Mean Field (MF)) ise seçilen bir parçacık, diğer parçacıkların oluşturduğu ortalama bir alan ile etkileşir.

Ortalama Alan (Mean Field- MF) Teorisinin Temel Kavramları

Çeşitli fiziksel olayları anlamamızı sağlayan pek çok ortalama alan yöntemi vardır. Bu bölümde genellikle yoğun madde fiziğinde kullanılan birkaçından bahsedilecektir. Bunun için biraz matematik detaya ihtiyaç vardır. İki tür parçacıktan oluşmuş bir sistemi göz önüne alalım bu parçacıklar $a_i$ve b_j operatörleri ile temsil edilsin. Farklı türden parçacıklar arasındaki etkileşmelerin daha önemli olduğu bir durum için sistemin Hamiltoniyeni

$$H = H_0 + V_{etkileşme} \tag{4.1.1}$$

$$H_0 = \sum_i \varepsilon_i^a a_i^+ a_i + \sum_j \varepsilon_j^b b_j^+ b_j \tag{4.1.a}$$

$$V_{etki} = \sum_{ii'jj'} V_{iji'j'}\, a_i^+ b_j^+ b_j a_i \tag{4.1.b}$$

Şeklinde yazılabilir. Sistemi oluşturan parçacıkların $a_i^+ a_i$ ve $b_j^+ b_j$ yoğunluk operatörleri ile bunların ortalama değerleri olan $< a_i^+ a_i >$ ve $< b_j^+ b_j >$ değerleri arasında çok fazla fark olmadığını varsayalım. Bu durumda ortalamalardan olan sapmayı bir parametre olarak alıp bu parametreye göre Hamiltoniyen seriye açılabilir ve yüksek üstlü terimler ihmal edilebilir. Buna göre ortalamalardan oluşan sapma

$$d_{ii'} = a_i^+ a_i - < a_i^+ a_i > \tag{4.1.2}$$

$$e_{jj'} = b_j^+ b_j - < b_j^+ b_j > \tag{4.1.3}$$

şeklinde tanımlansın buna göre (4.1.1) denklemleri

$$H = H_0 + V_{MF} + \sum_{ii'jj'} V_{iji'j'} d_{ii'} e_{jj'} \tag{4.1.4}$$

şeklinde yazılabilir. (4.1.4) denkleminde eşitliğin sağ tarafındaki üçüncü terim MF yaklaşımında ihmal edilebilir.

$$V_{MF} = \sum_{ii'jj'} V_{iji'j'} \left(a_i^+ a_i < b_j^+ b_j > + b_j^+ b_j < a_i^+ a_i > \right)$$

$$- \sum_{ii'jj'} V_{iji'j'} < a_i^+ a_i >< b_j^+ b_j > \tag{4.1.5}$$

şeklindedir. Böylece

$$H = H_0 + V_{MF} \tag{4.1.6}$$

ortalama alan(MF) Hamiltoniyeni olarak adlandırılır. MF Hamiltoniyeni ayrışmış tek parçacık operatörlerini içerir bu nedenle çok parçacık problemini tek parçacık problemine indirgemiş olur. Tek parçacık problemi ise genel olarak çözülebilen bir durumdur. MF yöntemi başka bir

yolla şöyle de açıklanabilir. (4.1.1) Hamiltoniyeni A ve B gibi iki operatörün çarpımını içeren bir Hamiltoniyendir. $H_{AB} = AB$ şeklindedir buna göre ortalama alan(MF) yaklaşımında A nın B den kaynaklanan bir ortalama alan ile "couple" (etkileştiğini) olduğunu, B ninde A dan kaynaklanan bir ortalama alan ile "couple" (etkileştiğini) olduğunu söyler. Böylece

$$H_{MF}^{AB} = A < B > + B < A > - < A >< B > \tag{4.1.7}$$

yazılabilir. $H_{MF}^{AB} = < A >< B >$ koşulunu sağlaması için (4.1.7) de $< A >< B >$ terimi çıkartılmıştır. Burada esas problem $< A >$ ve $< B >$ ortalamalarının yani $< a_i^+ a_{i'} >$ ve $< b_j^+ b_{j'} >$ ortalamalarının nasıl bulunacağıdır. Bunun için aslında birbirine özdeş olan iki yöntem vardır. Birinci yöntem şöyledir. Ortalama öz-uyumlu (self-consistent) olarak hesaplanır. Buna göre

$$\bar{n}_{ij'}^{a} = < a_i^+ a_{i'} > \text{ ve } \bar{n}_{ij'}^{b} = < b_j^+ b_{j'} > \tag{4.1.8}$$

ortalamaları yeni Hamiltoniyen ile hesaplandığında aynı sonucu vermelidir. .

$$\bar{n}_{ij'}^{a} = < a_i^+ a_{i'} >_{MF} = \frac{1}{Z_{MF}} Tr[e^{-\beta H_{MF}} a_i^+ a_{i'}] \tag{4.1.9}$$

Burada

$$Z_{MF} = Tr[e^{-\beta H_{MF}}] \tag{4.1.10}$$

dir. $\bar{n}_{ij}^{b}$ içinde aynı tanım geçerlidir. $\bar{n}_{ij'}^{a}$ ve $\bar{n}_{ij'}^{b}$ denklemleri öz uyumlu (self consistent) denklemlerdir çünkü bu $\bar{n}_{ij'}^{a}$ ve $\bar{n}_{ij'}^{b}$ denklemleri H_{MF} ve Z_{MF} den dolayı yine $\bar{n}_{ij'}^{a}$ ve $\bar{n}_{ij'}^{b}$ değerlerine bağlıdırlar. MF Hamiltoniyeni kullanıldığında öz uyumlu alan koşulları sağlanmalıdır.

İkinci yöntem ise şu şekildedir. $n_{ij'}$ yi kullanarak MF Hamiltoniyenini için serbest enerji minimize edilir. Bunun için sistemin serbest enerjinin

$$F = U - TS = < H > - TS$$

olduğun $T = 0$ da $F = U = < H >$ olacağı açıktır. Böylece denge durumu için,

$$0 = \frac{d}{d\bar{n}_{ij'}^{a}} F_{MF} = \frac{d}{d\bar{n}_{ij'}^{a}} (-\frac{1}{\beta} ln Z_{MF})$$

$$= \frac{1}{Z_{MF}} Tr[e^{-\beta H_{MF}} \frac{d}{d\bar{n}_{ij'}^{a}} H_{MF}]$$

$$= \frac{1}{Z_{MF}} Tr[e^{-\beta H_{MF}} \sum_{ii'} V_{iji'j'} \, (b_j^+ b_{j'} - \bar{n}_{jj'}^b)$$

$$= \sum_{ii'} V_{iji'j'} (< b_i^+ b_{i'} >_{MF} - \bar{n}_{ii'}^b) \qquad (4.1.11)$$

elde edilir. (4.1.11) ifadesi bütün jj' ler için geçerlidir ve parantez içindeki terim sıfır olacaktır, böylece bu ifadenin $\bar{n}_{jj'}^b$ terimi için öz uyumlu olduğu gösterilmiş oldu. Benzer eşitlik $\bar{n}_{ij'}^a$ içinde gösterilebilir. Bu her iki sonucun aynı olduğu açıktır.

$< V_{etki} >$ ortalama terimine tekrar bakalım, doğal yaklaşım a ve b nin ortalamalarının ayrı ayrı alınması şeklindedir. Buna göre

$$< V_{etki} > \approx \sum_{ii'jj'} V_{iji'j'} (< a_i^+ a_i >< b_j^+ b_j >) \qquad (4.1.12)$$

yazılabilir, bu ise a ve b parçacıklarının etkileşmediği durumlara (veya korelasyonlarının olmadığı durumlara) karşılık gelir. Bunu görmek için $< V_{etki} >$ ortalaması MF Hamiltoniyeni kullanılarak hesaplanırsa

$$< V_{etki} >_{MF} = \frac{1}{Z_{MF}} Tr[e^{-\beta H_{MF}} < V_{etki} >] \qquad (4.1.13)$$

$$H_{MF} = H_{MF}^a + H_{MF}^b \qquad (4.1.14)$$

olarak alınabilir, buna göre

$$< V_{etki} >_{MF} = \sum_{ii'jj'} V_{iji'j'} (< a_i^+ a_i >_{MF} < b_j^+ b_j >_{MF}) \qquad (4.1.15)$$

olduğu görülür.

Sonuç olarak MF yaklaşımının sistemde korelasyonların çok önemli olmadığı durumlar için uygun bir yöntem olduğunu belirtilmelidir. Buna göre MF yaklaşımının (4.1.2) ifadesinde tanımlı d ile $< d >$ arasındaki farkın küçük olduğu durumlarda geçerli olacağı açıktır. Eğer bu fark küçük değil ise kullanılan MF yaklaşımı gözden geçirilmelidir.

Pratikte $< a_i^+ a_{i'} >$ ve $< b_j^+ b_{j'} >$ ortalamalarını nasıl hesaplanacağı önemlidir. (4.1.9) bağıntısı bunun nasıl yapılacağı ile ilgilidir fakat bu her zaman kolay değildir. İncelenen sistemde N tane kuantum sayısı var ise sistem genellikle N^2 tane kombinasyona karşılık gelen ve N^2 kere (bağlaşık) kuple olmuş doğrusal olmayan denkleme sahiptir. Daha önce de tartışıldığı gibi bu bağlaşıklığı çözmek bazı küçük sistemler için mümkün iken gerçek sistemler için çok çok gelişmiş bilgisayarlar ile bile her zaman mümkün değildir. Bu nedenle MF teorisin amaçlarından birisi de incelenen sistemde simetri gibi bazı fiziksel özellikler kullanılarak

sistemdeki parametrelerin sayılarının azaltılmasıdır. Bir sistemde simetri durumlarına bakalım. Sistem için kullanılan Hamiltoniyen yer değiştirme (translation) simetrisine sahip ise sistemi Fourier dönüşümü kullanarak momentum (ters konum veya ters örgü) uzayında incelemek daha uygundur. Buna göre c ve c^+ ile temsil edilen parçacıklardan oluşmuş bir sistemde

$$< c_k^+ c_{k'} >= \frac{1}{V} \int dr \int dr' \, e^{-i\boldsymbol{k'}.\boldsymbol{r'}} e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} < \psi(r)^+ \psi(r') > \tag{4.1.16}$$

olacaktır. Sistem aynı zamanda homojen ise

$< \psi(\boldsymbol{r})^+ \psi(\boldsymbol{r'}) > = f(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'})$ olacaktır. Buna göre

$$< c_k^+ c_{k'} > =< n_k > \delta_{kk'} \tag{4.1.17}$$

dır. Bu homojen olma varsayımı her zaman geçerli olmayabilir. Bazı durumlarda sistemin simetrisi Hamiltoniyenin simetrisinden düşük olabilir. Örneğin sistem yerel yoğunluk dalgalanmalarından dolayı kendiliğinden dalga davranışı gösteren (fononlar) gibi bir düzene sahip oluyor ise $< \psi(\boldsymbol{r})^+ \psi(\boldsymbol{r'}) >$ ortalaması yalnızca $(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'})$ farkına bağlı değil bunun yerine daha sınırlandırılmış ve düşük bir simetriye sahip olur. Buna göre $\boldsymbol{R}$ örgü vektörü olmak üzere

$$< \psi(\boldsymbol{r})^+ \psi(\boldsymbol{r'}) >= h(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}) = h(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{R}, \boldsymbol{r'} + \boldsymbol{R'}) \tag{4.1.18}$$

simetrisi geçerli olur. Bu tür simetriler doğada kristal yapı olarak mevcutturlar. Kristal yapı ile uğraşılıyor ise (2.5.17) yerine (2.5.18) simetri özelliği kullanılmalıdır. Bu durumda

$< c_k^+ c_{k'} >$ yerine $R.Q = 2\pi$ koşulu altında $< c_k^+ c_{k+Q} >$ ortalaması kullanılmalıdır. Görüldüğü gibi MF yöntemi, incelenecek sistemin özelliklerine bağlıdır.

4.2 Hartree-Fock Yaklaşımı

Bir önceki bölümde MF yöntemi etkileşen farklı tür parçacıklar için tanımlandı. d nin küçük değerleri için $a_i^+ a_{i'}$ ve $b_j^+ b_{j'}$ değerleri yerine ortalamaları ve küçük bir düzeltme terimi alındı. Etkileşen özdeş parçacıklardan oluşmuş bir sistem için bu yapılamaz. Çünkü (4.1.1.a) eşitliği $Hartree$ terimi olarak adlandırılan yalnızca doğrudan etkileşme terimlerini içerir. Şimdi Hartree yaklaşımından daha genel bir yöntem olan $Hartree - Fock$ (HF) yaklaşımına bakalım. Etkileşen özdeş parçacıklardan oluşmuş bir sistem için (4.1.1) Hamiltoniyenleri

$$H = H_0 + V_{etki} \tag{4.2.1}$$

$$H_0 = \sum_i \varepsilon_i c_i^+ c_{i'} \tag{4.2.2}$$

$$V_{etki} = \frac{1}{2}\sum_{ii'jj'} V_{iji'j'} c_i^+ c_j^+ c_{j'} c_{i'} \qquad (4.2.3)$$

şeklinde ifade edilebilir. MF yaklaşımında (4.1.15) eşitliğinde a ve b parçacıkları birbirinden bağımsız alınarak ortalamaları ayrı ayrı alındı. Daha sonra bahsedilecek olan Wick teoremi eğer parçacıklar birbirinden bağımsız alınır iseler (MF yaklaşımı aslında bunu yapar) (4.2.3) te verilen dörtlü $c_i^+ c_j^+ c_{j'} c_{i'}$ teriminin ortalamasını ikili terimler cinsinden yazılabileceğini söyler. Buna göre

$$< c_i^+ c_j^+ c_{j'} c_{i'} >_{MF} = < c_i^+ c_{i'} >_{MF} < c_j^+ c_{j'} >_{MF} \mp < c_i^+ c_{j'} >_{MF} < c_j^+ c_{i'} >_{MF} \qquad (4.2.4)$$

burada $(+)$ $Bozon$ türü özdeş parçacıklar için, $(-)$ ise $Fermiyon$ türü özdeş parçacıklar için kullanılmalıdır. Bu ifade (4.1.15) ile karşılaştırıldığında eşitliğin sağ tarafındaki ikinci terim yeni bir terimdir ve $değiş-tokuş$ $(exchange\ term)$ terimi olarak adlandırılır. Bu ikinci terimde $i = j$, $i' = j'$ alındığında $< c_i^+ c_j^+ c_{j'} c_{i'} >_{MF}$ ifadesi $Fermiyonlar$ için ($(-)$ işaretli durum) sıfır olur. Böylece MF yaklaşımı $Pauli\ dışarlama\ ilkesi$ ile uyumlu olur. (4.2.4) ifadesinde ikili ortalamalar için yine Wick teoremine göre olası bütün ikililer hesaba katılmalıdır fakat Fermiyon durumlarında iki parçacık yer değiştirdiğinde terimin önündeki işaret değişmelidir. Daha önce A ve B türü parçacıklara uygulanan MF yöntemini özdeş parçacıklardan oluşmuş sisteme uygulayalım, buna göre

$$c_i^+ c_j^+ c_{j'} c_{i'} \approx c_i^+ c_{i'} < c_j^+ c_{j'} >_{MF} + < c_i^+ c_{i'} >_{MF} c_j^+ c_{j'} \mp$$

$$c_i^+ c_{j'} < c_j^+ c_{i'} >_{MF} \mp < c_i^+ c_{j'} >_{MF} c_j^+ c_{i'} - < c_i^+ c_{i'} >_{MF} < c_j^+ c_{j'} >_{MF} \pm$$

$$< c_i^+ c_{j'} >_{MF} < c_j^+ c_{i'} >_{MF} \qquad (4.2.5)$$

(4.2.5) eşitliğinin (4.2.4) eşitliğinin ortalaması olduğunu kanıtlamak kolaydır.

(4.2.5) ifadesindeki ilk iki terim farklı iki yoğunluk arasındaki etkileşmeyi verir ve $doğrudan\ terim$ $(direct\ term)$ adını alır. Bu doğrudan etkileşme terimi iki noktasal yük arasındaki doğrudan Coulomb etkileşmesi olarak alınırsa (4.2.4) denklemindeki birinci terim birinci kuantizisyonda

$$\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 V(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) < \rho(\boldsymbol{r}_1) >< \rho(\boldsymbol{r}_2) >$$

şeklinde ifade edilebilir. (4.2.4) ve (4.2.5) eşitliklerinin sağ tarafındaki diğer terimler ise değiş-tokuş etkileşme terimleridir. Bu terimlerin klasik elektromanyetik teoride karşılıkları yoktur, ancak kuantum mekanik etkiler (sipin durumları gibi) hesaba katıldığında anlamları vardır. Bu nedenle bu terimlere kuantum düzeltme terimleri de denir. Bu değiş-tokuş terimleri örneğin

metallerde bağlanma enerjilerinin oluşmasını açıklarlar. Bu bakımdan oldukça önemlidirler. Doğrudan etkileşme terimi olan $Hartee$ etkileşmesini (4.2.3) eşitliğine uygulayacak olursak

$$V_{etki}^{Hartree} = V_{etki}^{H} = \frac{1}{2}\sum_{ii'jj'} V_{iji'j'}\bar{n}_{jj'}c_i^{+}c_{i'} + \frac{1}{2}\sum_{ii'jj'} V_{iji'j'}\bar{n}_{ii'}c_j^{+}c_{j'} - \frac{1}{2}\sum_{ii'jj'} V_{iji'j'}\bar{n}_{ii'}\bar{n}_{jj'} \tag{4.2.6}$$

değiş-tokuş terimi ise $Fock\ Terimi$ olarak adlandırılır ve şu şekildedir.

$$V_{etki}^{Fock} = V_{etki}^{F} = -\frac{1}{2}\sum_{ii'jj'} V_{iji'j'}\bar{n}_{ij'}c_i^{+}c_{j'} - \frac{1}{2}\sum_{ii'jj'} V_{iji'j'}\bar{n}_{ji'}c_i^{+}c_{j'} + \frac{1}{2}\sum_{ii'jj'} V_{iji'j'}\bar{n}_{ij'}\bar{n}_{ji'} \tag{4.2.7}$$

Sonuç olarak MF Hamiltoniyeni, Hartree-Fock yaklaşımında

$$H_{MF} = H_0 + V_{etki}^{H} + V_{etki}^{F} \tag{4.2.8}$$

şeklinde yazılabilir.

4.3 Homojen Elektron Gaz Sistemi İçin Hartree-Fock Yaklaşımı

Pozitif bir arka plan (background) elektrik yük ile dengede olan N tane elektrondan oluşmuş homojen elektron gaz sistemini göz önüne alalım. Bu sistem yer değiştirme (translational) simetrisine sahiptir bu nedenle $< c_k^{+}c_{k'} >$ beklenen değeri diyagonal yapıya sahiptir. Homojen elektron gaz sistemi için ikinci kuantizasyonda Hamiltoniyen $Hartee - Fock\ (HF)$ yaklaşımında şöyle yazılabilir

$$H^{HF} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k^{HF} c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma} \tag{4.3.1}$$

$$\varepsilon_k^{HF} = \varepsilon_k + \sum_{k'\sigma'}[V(0) - \delta_{\sigma\sigma'}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')]n_{k'\sigma'}$$

$$= \varepsilon_k + V(0)N - \sum_{k'\sigma'}[V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')]n_{k'\sigma'} \tag{4.3.2}$$

(4.3.2) eşitliğinin sağ tarafındaki birinci terim her bir elektronun kinetik enerjisinden kaynaklanan terim, ikinci terim bir elektronun diğer elektronların ortalaması ile etkileşme terimidir. Pozitif arka plan etkileşmesi göz önüne alındığında bu terime eşit olur ve birbirini yok eder. Üçüncü terim ise değiş-tokuş etkileşmesini göz önüne alan terimdir. Bu örnekte görüldüğü gibi HF yaklaşımında ortalama alınacak sonlu büyüklüğün ne olacağı sistemin fiziksel yapısından belirlenecek değerlere bağlıdır. Ayrıca burada sistemin sipin simetri durumları için $< c_{k\downarrow}^{+}c_{k\downarrow'} > = < c_{k\uparrow}^{+}c_{k\uparrow'} >$ olduğu varsayıldı. Bu ortalamalar farklı olsaydı

sistemin $ferromanyetik$ davranışı da söz konusu olacaktı. Bu durum daha sonra incelenecektir.

4.4 Simetri Kırılması

MF teorisi birçok durum için simetri değişimlerinin ve dolayısıyla faz geçişlerinin incelenmesinde de kullanılır. Belli bir simetriye sahip (gerçek uzayda öteleme, dönme, sipin uzayında sipin simetrisi gibi) sistemde , bu simetrileri içeren bazı operatörler (gerçek uzayda konum, dönme operatörleri , sipin uzayında spin operatörleri gibi) tanımlanabilir ve bu operatörler sistemin Hamiltoniyeni ile aynı simetriye sahip oldukları için Hamiltoniyen operatörü ile komütatif olurlar. Örneğin bir sıvı sistemini göz önüne alalım. Sıvılar öteleme simetrisine sahiptir, bu nedenle bu sistemin Hamiltoniyeni de öteleme simetrisine sahip olmalıdır. Buna göre sıvı sisteminde öteleme operatörü $T(\boldsymbol{R})$ için $[H, T(\boldsymbol{R})] = 0$ olmalıdır. Burada $T(\boldsymbol{R})$ sıvıda bir parçacığın koordinatını $\boldsymbol{R}$ kadar değiştiren bir operatördür. Bu operatör

$$T(\boldsymbol{R}) = \exp(i\boldsymbol{R}.\boldsymbol{P}) \tag{4.4.1}$$

olarak ifade edilebilir. $\boldsymbol{P}$ ise toplam momentum operatörüdür ve korunan bir büyüklüktür. İkinci kuantizasyona göre şu şekilde tanımlanabilir.

$$\boldsymbol{P} = \hbar \sum_{k\sigma} \boldsymbol{k} c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma} \tag{4.4.2}$$

Bu tanımlardan faydalanarak sonlu $|P>$ durumlarını temsil eden ortogonal (birbirine dik) bir baz kümesi (seti) seçelim. Böyle bir durum için sistemde yoğunluk değişiminden kaynaklanan yoğunluk dalgalarının asla oluşamayacağı gibi fiziksel olmayan bir durumun nasıl kanıtlanacağını inceleyelim. Dalga vektörü $\boldsymbol{Q}$ olan yoğunluk dalgaları, yoğunluk operatörünün Fourier dönüşümünden bulunur, buna göre,

$$\rho(Q) = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^{+} c_{k+Q,\sigma} \tag{4.4.3}$$

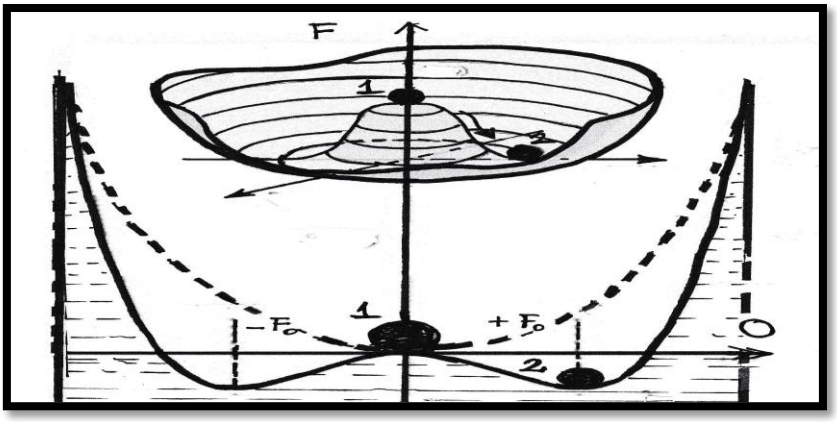
şeklinde tanımlanan yoğunluk operatörün ortalamasının sonlu olması gerekir, halbuki

$$< c_{k\sigma}^{+} c_{k+Q,\sigma} >= \frac{1}{Z} \sum_{p} e^{-\beta E_p} < P \left| c_{k\sigma}^{+} c_{k+Q,\sigma} \right| P >= 0 \qquad \text{dır.} \tag{4.4.4}$$

Çünkü $\left|c_{k+Q,\sigma}\right|P>$ ifadesi $|P-Q>$ ile orantılıdır ve bu da $|P>$ ye diktir bu nedenle sonuç sıfırdır. Bu ise fiziksel olarak anlamsız bir sonuçtur. Bu durum kristal yapının olamayacağını belirtir. Aynı zamanda manyetizma, süper iletkenlik gibi maddenin bilinen bazı fiziksel özelliklerinin olamayacağı anlamına gelir. Fakat maddenin bu özelliklerin olduğu gözlemsel olarak açıktır, öyleyse burada yanlış veya eksik olanın ne olduğu sorulmalıdır. Sistemde

termodinamik ortalamadaki durumların toplamı termodinamik limit olan $N \to \infty$ için değil de N in sonlu durumları için alınır kısıtlaması yapılırsa yukarıdaki elde edilen sonuç yok olur. Bir kristalde referans bir noktanın konumu, veya bir sipin sisteminde belli bir sipinin yönelimi diğer noktalara göre farklı olsa da onlarla aynı enerjiye sahip olabilir. Bu noktalar belli bir enerji bariyeri (farkları ile) ile birbirlerinden ayrışmışlardır ve bu enerji bariyerleri sistemin erimesini ve bu noktaların değişik bir durum almalarını engeller. Bu durumda sistemin birçok durumu dejeneredir ve bunlar belli enerji farkları ile birbirinden ayrılmışlardır, bu nedenle (4.4.4) ile tanımlanan ortalamaya hepsinin aynı katkıyı vereceği düşünülemez. Bu nedenle sistemin faz uzayını bu dejenere durumlardaki farkı da göz önüne alacak şekilde tasarlayarak ortalama tanımlanmalıdır. Bu durum genellikle Şekil (4.2) de ifade edilen çift-engel (double barrier) modeli ile ifade edilir. Belli bir kritik sıcaklığın altında sistemin termodinamik durumu, simetrisi Hamiltoniyenin simetrisinden daha düşük olan bazı makroskobik büyüklüklerin ortalama değerini sıfırdan farklı verir, bu duruma $kendiliğinden\ simetri\ kırılması$ "$spontaneous\ breaking\ of\ symetry$" denir. Bu durumda sistemin faz geçişini belirleyecek olan büyüklük $düzen\ parametresi$ $(order\ parameter)$ olarak adlandırılır. Buna göre MF teorisinde sistemdeki faz geçişini incelemek ve (4.4.4) teki çelişkiyi ortadan kaldırmak için teoride bunu sağlayacak yeni bir faz oluşturulmalıdır. MF yaklaşımında bu nedenle sonlu ortalama alan için bir düzen parametresi tanımlanır ve buna göre sistemin faz geçişi incelenir. Seçilen bu parametre sistemin Hamiltoniyeni için öz uyumlu sonlu bir sonuç vermelidir. Bu nitelikteki çeşitli durumlar ve bunlara uygun düzen parametreleri aşağıdaki tabloda verilmiştir.

Fiziksel durum	***Düzen parametresinin fiziksel karşılığı***	***Düzen parametresini 2. kuantizasyondaki ifadesi***
Kristal yapı	*Yoğunluk dalgası*	$\sum_k < c_k^+ c_{k+Q} >$
Ferromagnet	*Magnetizasyon*	$\sum_k < c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow} > - < c_{k\downarrow}^+ c_{k\downarrow} >$
Bose-Einstein yoğuşması	$k = 0$ *durumuna yoğuşma*	$< a_{k=0}^+ >$
Süperiletkenlik	*Çift yoğuşması*	$< c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow} >$



Şekil 4.2 F Serbest enerjinin faz geçişi esnasında sistemi temsil eden O düzen parametresine göre davranışı.

1. $\boldsymbol{Durum}$: Serbest enerji belli bir değerden (veya sistemin sıcaklığının belli bir kritik sıcaklık değerinden) büyük olduğu durum. Bu durumda sistemin serbest enerjisi simetri noktasında iyi belirlenmiş bir minimuma sahiptir ve sistem yüksek bir simetriye sahiptir.(kesikli çizgi ile belirtilen ve minimumu 0 başlangıç noktasından geçen parabol)

2. $\boldsymbol{Durum}$: Serbest enerji belli bir kritik değerden düşük ise serbest enerjinin minimum olacağı $(+F_0)$, $(-F_0)$ gibi iki seçenek vardır ve sistem bu seçeneklerden birinde bulunabilir. Sistem hala simetrik yapıya sahiptir fakat bu iki durum arasında bir potansiyel engeli vardır, bu nedenle sistemin durumunu temsil eden simetri sistemin potansiyeline göre daha düşük bir simetriye sahiptir. Şekilde üst kısımda Meksika şapkası (Mexican hat) veya çift-engel (double barrier) modeli olarak adlandırılan serbest enerji potansiyelinin üç boyutlu şekli, alt kısımda ise bunun düzlemdeki izdüşümü 1 ve 2 durumları için çizilmiştir. Konuyu biraz daha detaylandırmak için simetri kırılması ve buna karşılık gelen düzen parametresine ait iki örneği ele alalım.

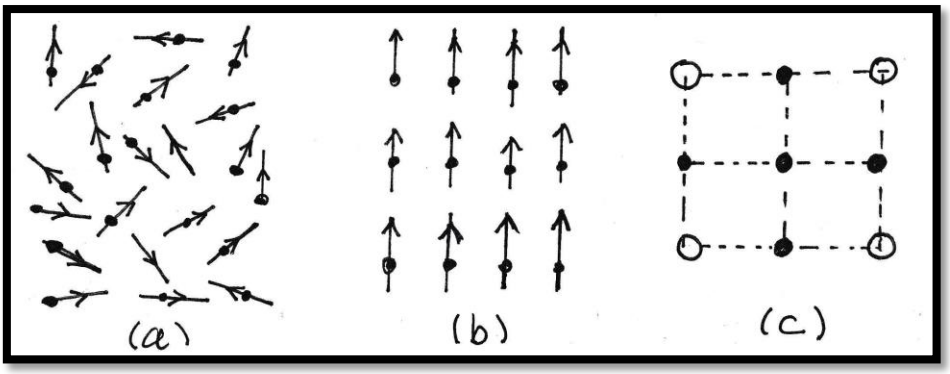
4-5 Ferromanyetizma

4.5 a) İyonik ferromanyetler için Heisenberg modeli

İyonik manyetik kristallerde iyonlar arasındaki etkileşmeler kökeni Coulomb etkileşmelerine dayanan değiş-tokuş etkileşmelerdir. Etkileşmelerin çok fazla detayına girmeden etkin bir Hamiltoniyen tanımlanabilir. Bu etkin Hamiltoniyen düşük enerji ölçeğinde sistemin temel serbestlik derecelerini içeren Hamiltoniyendir. Kristallerde iyonlar arası etkileşmeleri veren Hamiltoniyen, Heisenberg Hamiltoniyeni olarak bilinir ve aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$H = -2\sum_{ij} J_{ij}\boldsymbol{S}_i.\boldsymbol{S}_j \qquad (4.5.1)$$

Bura da $\boldsymbol{S}_i$ i örgü noktasındaki iyon için sipin operatörü, J_{ij} ise i ve j iyonlarının manyetik momentleri arasındaki etkileşmenin büyüklüğüdür. J_{ij} iyonlar arasındaki mesafeye bağlıdır. Etkileşmeler kısa mesafeli olduğunda en yakın komşular arasındaki etkileşmeleri almak iyi bir yaklaşımdır.



Şekil 4.3 (a) sipinlerin rastgele dizilişi, net manyetik dipol sıfır, manyetizasyon yok. (b) Sipinlerin bir yöne düzenli yönelimleri, manyetizasyon var. (c) Düzlemde kare örgü şeklindeki bir örgü noktasının birinci ve ikinci en yakın komşu noktaları

Şekil 4.3 (c) ye göre (4.5.1) Hamiltoniyenindeki J_{ij} ,

$$J_{ij} = \begin{cases} J_0 & eğer\ i\ ile\ j\ komşu\ ise \\ 0 & diğer\ durumlarda \end{cases}$$

Burada kolayca görüleceği gibi $J < 0$ ise sistemde sipinler antiparalel olma eğiliminde , $J > 0$ ise sistem enerjetik olarak sipinlerin paralel olma durumunu tercih edecektir. $J < 0$ durumu sistemin $antiferromanyetik$ durumuna , $J > 0$ durumu ise $ferromanyetik$ duruma karşılık gelecektir. Şimdi $J > 0$ durumunu göz önüne alalım.

(4.5.1) Hamiltoniyeni basit görünmesine rağmen aslında çok karmaşıktır. Bu Hamiltoniyenin genel bir çözümü yoktur, iyon noktalarında bulunan sipinler güçlü şekilde korelasyona sahiptirler. Bunun yanında MF yaklaşımı bu tür sistemler için bir çözüm önermekte aynı zamanda bazı durumlarda bu çözümler fiziksel duruma uygun gelmektedir. (4.5.1) Hamiltoniyenini MF yaklaşımında şöyle yazılabilir;

$$H \approx H_{MF} = -2\sum_{ij} J_{ij} < \boldsymbol{S}_i > . \boldsymbol{S}_j - 2\sum_{ij} J_{ij} \boldsymbol{S}_i . < \boldsymbol{S}_j > + 2\sum_{ij} J_{ij} < \boldsymbol{S}_i > . < \boldsymbol{S}_j > \qquad (4.5.2)$$

Burada $< \boldsymbol{S}_i >$ i noktasındaki ortalama sipindir. Uzayın simetri özelliğinden dolayı bu ortalama değerin sıfır olmasını bekleriz. Fakat gerçekte bu değer sıfır olmadığına göre simetri

kırılmış olmalı, çünkü sistemin ferromanyetik olması demek $< \boldsymbol{S}_i >$ nin sıfırdan farklı net bir değerinin var olmasıdır(mıknatıslanma var). Bundan başka sistem öteleme simetrisine sahip olduğu için bu ortalama değer i noktasının koordinatlarına bağlı olmamalıdır. Böylece sistemde sonlu fakat konuma bağlı olmayan ortalama bir sipin polarizasyonu varsayılabilir. Bunun dışında eğer z yönü manyetizasyon yönü olarak seçilir ise MF yaklaşımı;

$$< \boldsymbol{S}_i >=< S_z > \boldsymbol{e}_z \tag{4.5.3}$$

olacaktır. Buna göre her noktada aynı olacağı varsayılan ve her sipin tarafında hissedilen manyetik moment

$$m = 2\sum_j J_{ij} < S_z > \boldsymbol{e}_z = 2nJ_0 < S_z > \boldsymbol{e}_z \tag{4.5.4}$$

olacaktır. Burada n komşuluk sayısı olup kare latis için $n = 2d$ dir (d boyut olmak üzere). Buna göre MF Hamiltoniyeni

$$H = -2\sum_i \boldsymbol{m}.\boldsymbol{S_i} + mN < S_z > \tag{4.5.5}$$

şeklinde olur. Bu Hamiltoniyen artık örgü noktası indisine göre diyagonal(köşegen) haldedir ve kolayca çözülebilir. Burada N örgü noktası sayısı ve $m = |\boldsymbol{m}|$ dir. Basit olması açısından iyonların sipinlerinin $S = 1/2$ olduğunu varsayalım ($S_z = \pm 1/2$ olacaktır) bu durumda MF $böl$üş$üm\ fonksiyonu\ \ (partition\ function)$

$$Z_{MF} = (e^{\beta m} + e^{-\beta m})^N e^{\beta mN<S_z>} = [\left(e^{\beta m} + e^{-\beta m}\right)e^{\left(\beta\frac{m^2}{2nJ_0}\right)}]^N \tag{4.5.6}$$

Öz uyumluluk (self consistency) denklemi, F serbest enerjiinin minimize edilmesi ile bulunur.

$$\frac{\partial F}{\partial m} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial m} lnZ_{MF} = -N\left(\frac{e^{\beta m}-e^{-\beta m}}{e^{\beta m}+e^{-\beta m}}\right) + N\frac{m}{nJ_0} = 0$$

Bu eşitliğin çözümü $\alpha = \frac{m}{nJ_0}$ ve $b = nJ_0\beta$ olmak üzere;

$$\alpha = \tanh(b\alpha) \tag{4.5.7}$$

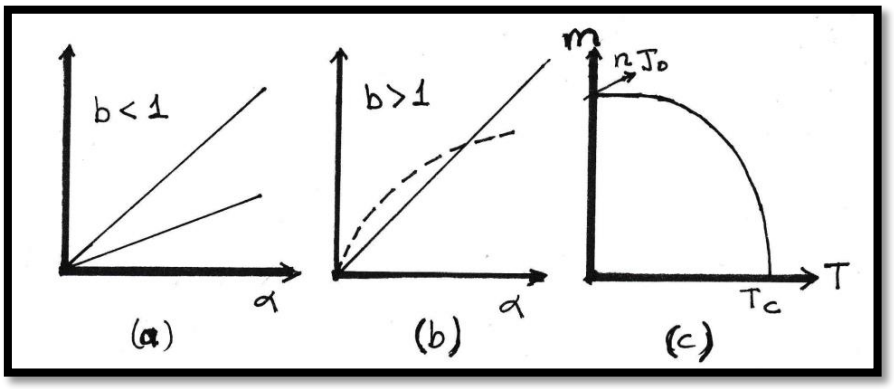
transandantal denklemi çözülerek bulunur. Bu denklem küçük α lar için seriye açılış ise

$$\alpha \approx b\alpha - \frac{1}{3}(b\alpha)^3 \tag{4.5.8}$$

olur, burada $b < 1$ için çözüm yoktur, bu durumda manyetizasyonun yok olacaktır. $b_c = 1$ koşulundan $k_B T_c = nJ_0$ olan bir kritik T_c sıcaklığı belirlenebilir. Bundan başka küçük α durumunda manyetizasyon için

$\alpha \approx \frac{1}{b}\sqrt{3(b-1)/b}$ ise $m \approx nJ_0\sqrt{3(1-\frac{T}{T_c})}$

ifadesi T_c civarinda geçerlidir. $T = 0$ da $b = \infty$ olur (4.5.7) denkleminin çözümü $\alpha = 1$ ve $m = nJ_0$ olur. Herhangi bir sıcaklık için denklem (4.5.7) ile verilen manyetizasyonun fonksiyonel formu sayısal olarak çözülmelidir. Bu ise kolaydır. Bu durum Şekil 4.4 de verilmiştir.



Şekil 4.4

a) Heisenberg modelinde MF yaklaşımına göre $\alpha = \tanh(b\alpha)$ denkleminin yüksek sıcaklık limiti $\frac{nJ_0}{k_BT} = b < 1$ için sıfırdan farklı $\alpha = \frac{m}{nJ_0}$ ferromanyetik momentin olmaması durumunun (çözümünün) grafik gösterimi (Bu durumda çözüm yok).

b) Aynı modelin $\frac{T_c}{T} = b > 1$ düşük sıcaklık limitinde sonlu manyetik momentin elde edilmesinin grafik gösterimi (Bu durumda çözüm var).

c) $b > 1$ için bulunan m manyetizasyonun sıcaklığa bağlı değişimi. [3]

4.5-b) Metalik ferromanyetler için Stoner modeli

Elektronların hem iletkenlik bandı hem de mıknatıslanmayı oluşturduğu magnetlerde Heisenberg modeli mıknatıslanmayı açıklayamaz, çünkü elektronlar dolayısı ile sipinler lokalize değildir. Örneğin geçiş elementlerinde iletkenlik bandı en dar orbitaller olan f ve d orbitalleri tarafından oluşurlar ve bu metallerde metalik manyetizasyon oluşur. Bu iki farklı orbitalde bulunan iki parçacık arasındaki etkileşme daha geniş bir bölgeye yayılmış olan s ve p orbitallerinde bulunan iki parçacık arasındaki etkileşmeden daha kuvvetlidir. Bu nedenle f ve d orbitallerindeki iki elektron arasında daha geniş(güçlü) bir korelasyon oluşur. İletkenlik

bandı elektronları arasındaki korelasyonun önemli olduğu iki tipik örnek Fe ve Ni elementleridir.

Kısa mesafeli etkileşmelerin önemli olduğu bu durumda Hubbard modeli olarak adlandırılan modeli kullanmak uygundur. Bu model de parçacıklar arası etkileşmeler gerçek uzayda noktasal Coulomb etkileşmeleri olarak alınırlar böylece ters Fourier uzayında sabit bir değere karşılık gelirler. Buna göre ters örgü uzayında ikinci kuantizasyonda Hubbard Hamiltoniyeni

$$H_{Hub} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{+} c_{k\sigma} + \frac{U}{2V} \sum_{kk'q\sigma\sigma'} c_{k+q,\sigma}^{+} c_{k'-q,\sigma}^{+} c_{k'\sigma'} c_{k\sigma'} \tag{4.5.9}$$

şeklindedir. Şimdi bu modelde sistemin ferromanyetik özellik gösterdiği durumuna Hartee-Fock yaklaşımını uygulayalım. Buna göre seçilen bir doğrultu için sipin ortalaması sıfırdan farklı olmalı. Bu durumda MF parametreleri

$$< c_{k\uparrow}^{+} c_{k'\uparrow} > = \delta_{kk'} \bar{n}_{k\uparrow} \text{ ve } < c_{k\downarrow}^{+} c_{k'\downarrow} > = \delta_{kk'} \bar{n}_{k\downarrow} \tag{4.5.9*}$$

şeklindedir. Buna göre (4.2.8) ifadesine göre MF etkileşme Hamiltoniyeni

$$V_{etki}^{MF} = \frac{U}{V} \sum_{kk'q\sigma\sigma'} c_{k+q,\sigma}^{+} < c_{k'-q,\sigma'}^{+} c_{k'\sigma'} > c_{k\sigma} - \frac{U}{V} \sum_{kk'q\sigma\sigma'} < c_{k+q,\sigma}^{+} c_{k'\sigma'} > c_{k'-q,\sigma'}^{+} c_{k\sigma-}$$

$$\frac{U}{2V} \sum_{kk'q\sigma\sigma'} [< c_{k+q,\sigma}^{+} c_{k\sigma} >< c_{k'-q,\sigma'}^{+} c_{k'\sigma'} > - < c_{k+q,\sigma}^{+} c_{k'\sigma'} >< c_{k'-q,\sigma'}^{+} c_{k\sigma}]$$

(4.5.10)

şeklinde yazılabilir. Bu ifade (2.4.6) ve (2.4.7) ile karşılaştırıldığında iki aynı terim olduğu için $1/2$ faktörü yoktur.(4.5.9*) MF tanımlarını kullanacak olursak;

$$V_{etki}^{MF} = \frac{U}{V} \sum_{k\sigma\sigma'} c_{k,\sigma}^{+} c_{k\sigma} [\bar{n}_{\sigma'} - \bar{n}_{\sigma} \delta_{\sigma\sigma'}] - UV \sum_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{\sigma} \bar{n}_{\sigma'} + UV \sum_{\sigma} \bar{n}_{\sigma}^{2} \tag{4.5.11}$$

Yazılabilir, burada sipin yoğunluğu

$$\bar{n}_{\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{k} < c_{k,\sigma}^{+} c_{k\sigma} > \tag{4.5.12}$$

olarak tanımlandı. Buna göre tam MF Hamiltoniyeni

$$H_{MF} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma}^{MF} c_{k,\sigma}^{+} c_{k\sigma} - \frac{UV}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \bar{n}_{\sigma} \bar{n}_{\sigma'} + \frac{UV}{2} \sum_{\sigma} \bar{n}_{\sigma}^{2} \tag{4.5.13}$$

$$\varepsilon_{k\sigma}^{MF} = \varepsilon_k + U(\bar{n}_{\uparrow} + \bar{n}_{\downarrow} - \bar{n}_{\sigma}) = \varepsilon_k - U\bar{n}_{\bar{\sigma}} \tag{4.5.14}$$

şeklinde yazılabilir. MF çözümü enerjinin minimizasyon veya bulunur.

$$\bar{n}_{\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{k} < c_{k,\sigma}^{+} c_{k\sigma} >_{MF} = \frac{1}{V} \sum_{k} n_F(\varepsilon_{k\sigma}^{MF}) \tag{4.5.15}$$

öz-uyumluluk denklemi kullanılarak bulunur.

Sıfır sıcaklık için

$$\bar{n}_{\uparrow} = \int \frac{dk}{(2\pi)^3}\theta\left(\mu - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - U\bar{n}_{\downarrow}\right) = \frac{1}{6\pi^2}k_{F\uparrow}^3 \qquad (4.5.16)$$

bulunur. Burada

$\mu = \frac{\hbar^2 k_{F\uparrow}^2}{2m} + U\bar{n}_{\downarrow}$ dır. Benzer eşitlik sipin aşağı durumu içinde yazılabilir. Buna göre her iki durum için

$$\frac{\hbar^2 6\pi^{2/3}}{2m}\bar{n}_{\uparrow}^{\,2/3} + U\bar{n}_{\downarrow} = \mu \;\; , \;\; \frac{\hbar^2 6\pi^{2/3}}{2m}\bar{n}_{\downarrow}^{\,2/3} + U\bar{n}_{\uparrow} = \mu \qquad (4.5.17)$$

denklemleri elde edilir.

$$z = \frac{\bar{n}_{\uparrow} - \bar{n}_{\downarrow}}{\bar{n}} \;\; , \;\; \gamma = \frac{2mUn^{1/3}}{(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2} \;\; , \; \bar{n} = \bar{n}_{\uparrow} + \bar{n}_{\downarrow} \qquad (4.5.18)$$

tanımlamaları yapılırsa ve bunlar (4.5.17) öz-uygunluk denkleminde yerine yazılırsa

$$\bar{n}_{\uparrow}^{\,2/3} - \bar{n}_{\downarrow}^{\,2/3} = \frac{2mU}{\hbar^2}(6\pi)^{-2/3}(\bar{n}_{\uparrow} - \bar{n}_{\downarrow})$$

$$\gamma z = (1+z)^{2/3} - (1-z)^{2/3} \qquad (4.5.19)$$

bulunur. Bu eşitlik Şekil 4.5 te gösterildiği gibi 3 tane çözüme sahiptir.

$\gamma < \frac{4}{3}$ ise izotropik çözüm (normal durum) , $z = 0$

$\frac{4}{3} < \gamma < 2^{2/3}$ ise kısmi polarizasyon (zayıf ferromagnet) , $0 < z < 1$

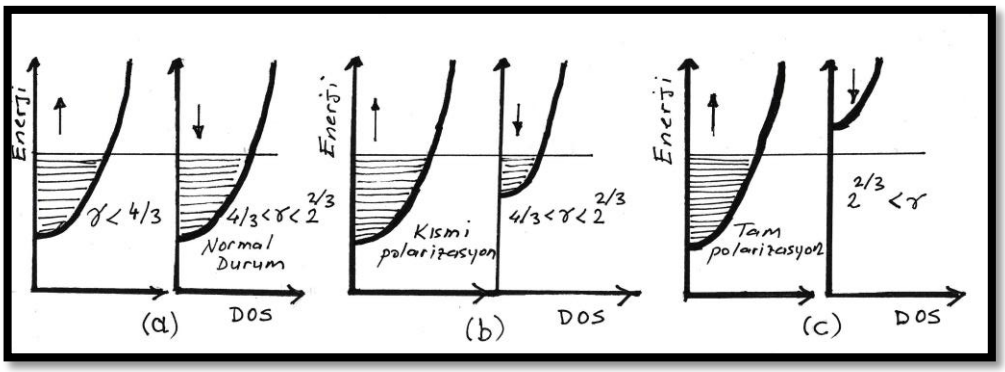
$\gamma > 2^{2/3}$ ise kuvvetli polarizasyon (güçlü ferromagnet) , $z = 1$ (4.5.20)

Bu üç farklı çözüm aşağıdaki Şekil 4.5 de gösterilmiştir.

Manyetik durumlar için olası çözüm (4.5.13) ile verilen sipine bağımlı enerji eşitliğinden gidilerek anlaşılabilir. Burada verilen bir doğrultusu için MF enerjisi farklı yönlerde yönlenmiş sipin doğrultularının sayısına bağlıdır, buna karşılık enerji aynı yönde yönlenmiş sipinlerin enerjisine bağlı değildir. Bu durum ise kısa mesafe ve değiş-tokuş etkileşmelerinden kaynaklanır. Bunu kısaca Pauli ilkesinden de anlayabiliriz, buna göre aynı sipinli elektronlar aynı enerji düzeyinde(aynı orbitalde) bulunamazlar, bu nedenle eğer etkileşme kısa mesafeli ise aynı yönlü sipine sahip iki elektron etkileşmezler. Buna göre yalnızca farklı sipin yönelimine sahip elektronlar etkileşir. Böylece polarize olmuş temel seviye için etkileşme enerjisi azalır,

diğer taraftan sabit bir yoğunluk için bu kinetik enerjiye mal olur. Potansiyel ve kinetik enerji arasındaki rekabetin katkısı ile faz geçişi olayı gerçekleşir.

Stoner modeli metalik magnetler için iyi sonuçlar verir. Aynı zamanda spin polarizasyon durumlarında oluşan uyarımlar (eksitasyonlar) da bu modelle açıklanabilir.



Şekil 4.5 Stoner modelinin olası üç farklı çözümü. Polarizasyon etkileşme kuvvetine bağlı, etkileşme kuvveti arttıkça polarizasyon da artıyor. Stoner modeli, güçlü yerinde (on-site) ve değiş-tokuş etkileşmeleri nedeni ile metallerdeki ferromanyetik faz geçiş mekanizmasının açıkça anlaşılmasını sağlar [3].

Kaynaklar :

1- Quantum Theory of Many-Particle Systems, A.L. Fetter, J. D. Walecka, McGraw-Hill, 1971.
2- Many-Particle Physics, G.D. Mahan, Plenum Press, 1986.
3- Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, H. Bruus, K. Flensberg, Oxford Press, 2005.
4- Statistical Physics of Fields, Mehran Kardar, Cambridge Univ. Press, 2007

BÖLÜM 5

5.0 Green fonksiyonlarının tanımlanması.

Green fonksiyonları yöntemi, fizikte karşılaştığımız bir çok adi ve kısmi diferansiyel denklemin çözümü için yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir. Buna göre

$$D_x y(x) = f(x) \tag{5.0.1}$$

homojen olmayan diferansiyel denklemi ele alalım, burada D_x x in lineer olmayan bir diferansiyel operatörü olsun. Denklemin genel çözümleri

$$y(x) = y(x)_{homojen} + y(x)_{\text{özel}} = y(x)_h + y(x)_{\text{ö}} \tag{5.0.2}$$

şeklinde yazılabilir. $D_x y(x)_h = 0$ dır. $y(x)_{\text{ö}}$ nasıl bulunacağı esas problemdir. D_x operatörüne uygun Green fonksiyonu $G(x,x')$ ise $D_x G(x,x') = \delta(x-x')$ olmak üzere,

$$y(x)_{\text{ö}} = \int dx' G(x,x') f(x') \tag{5.0.3}$$

şeklinde oluşturulabilir. Bu tanımlar için bir iki basit örnek ele alalım. Basit olarak Green fonksiyonunun nasıl tanımlandığına bakalım. Laplasyen operatörünü için

$$\nabla_r^2 G(r) = \delta(r) \tag{5.0.4}$$

denklemine bakalım, buna göre $G(r)$, ∇_r^2 operatörü için Green fonksiyonudur.

a) Şimdi $\rho_e(r)$ elektrik yük dağılımına sahip bir sistemin oluşturduğu potansiyel alanın bulunması problemine bakalım, bu problem klasik elektromanyetik teorinin önemli bir problemidir. Çözüm için Possion denklemi kullanılır,

$$\nabla_r^2 \Phi(r) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\rho_e(r) \tag{5.0.5}$$

buna göre $G(r)$ cinsinden,

$\Phi(r) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\int dr' G(r-r')\rho_e(r')$ şeklinde yazılabilir. Bu tanımın (5.0.5) denklemini sağladığı kolayca görülebilir. (5.0.4) Denkleminin Fourier dönüşümü alınır ise

$F([\nabla^2 G(r) = \delta(r)] \rightarrow \int \nabla_r^2 e^{i\boldsymbol{kr}} G(r) dk = \int e^{i\boldsymbol{kr}} \delta(r) dk \rightarrow -k^2 G(k) = 1$ ise

$G(k) = -\frac{1}{k^2}$ bulunur. Buna göre $G(r) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} e^{i\boldsymbol{kr}} G(k)$ ise

$G(r) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} e^{i\boldsymbol{kr}} \left(-\frac{1}{k^2}\right) = -\frac{1}{4\pi r}$ dir. Buna göre

$$\Phi(r) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\int dr' G(r-r')\rho_e(r') = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int dr \frac{\rho(r')}{|r-r'|} \quad (5.0.6)$$

olarak bulunur.

b) Bir parçacık Schrödinger dalga denkleminin (SDD) çözümünü Green fonksiyonları cinsinden nasıl yazılacağına bakalım. Zamandan bağımsız SDD $H = H_0(r) + V(r)$ olmak üzere

$$\{H_0(r) + V(r)\}\Psi(r) = E\Psi(r) \quad (5.0.7)$$

şeklindedir. Burada $H_0(r)$ çözümü bilinen kısım $V(r)$ ise pertürbasyon etkisi gibi düşünülebilir. Buna göre Green fonksiyonu cinsinden

$$[E - H_0(r)]G_0(r, r', E) = \delta(r - r') \quad (5.0.8)$$

yazılabilir. $G_0(r, r')$, $G_0(r, r') = G_0(r', r)$ sınır koşularına sahiptir. (5.0.8) denkleminden

$E - H_0(r) = \frac{1}{G_0(r,E)}$ demek doğaldır. Çünkü $\frac{1}{G_0(r,E)}G(r, r', E) = \delta(r - r')$ oladuğu açıktır.

Buna göre SDD

$$[G_0^{-1}(r, E) - V(r)]\Psi(r) = 0 \quad (5.0.9)$$

şeklinde yazılabilir, aynı zamanda $\Psi(r)$ integral denklem formunda

$$\Psi(r) = \Psi_0(r) + \int dr'\ G_0(r, r', E)V(r')\Psi(r') \quad (5.0.10)$$

Şeklinde yazılabilir. Burada $\Psi_0(r)$, $H_0(r)$ ın özdurumudur. (5.0.10) denklemi (5.0.8) ve (5.0.9) tanımlarında yerine yazılır ise

$$\Psi(r) = \Psi_0(r) + \int dr'\ G_0(r, r', E)V(r')\Psi_0(r') + O(V^2) \quad (5.0.11)$$

Elde edilir. Bu eşitliği sembolik olarak (veya daha doğru bir ifade ile k uzayında)

$$\Psi = \Psi_0 + G_0V\Psi_0 + G_0VG_0V\Psi_0 + G_0VG_0VG_0V\Psi_0 + \cdots$$

$= \Psi_0 + (G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + \cdots)V\Psi_0$ yazılabilir. Bu ifade (5.0.11) denklemi ile karşılaştırıldığında tam green fonksiyou G için

$$G = (G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + \cdots) = G_0 + G_0V(G_0 + G_0VG_0 + \cdots) \quad (5.0.12)$$

Şeklinde bir bağıntı yazılır.

$G = G_0 + G_0VG$ ifadesi Dyson denklemi olarak adlandırılır.

Bir parçacık dalga fonksiyonunun zamana bağlı durumu $\Psi(r,t)$ için ($\frac{\partial}{\partial t} = \partial_t$ olmak üzere)

$H\Psi(r,t) = i\hbar\partial_t\Psi(r,t)$ zamana bağlı SDD $(\hbar = 1)$

$$[i\partial_t - H_0(r) - V(r)]\Psi(r,t) = 0 \qquad (5.0.13)$$

Buna göre Green fonksiyonu cinsinden bu denklem

$$[i\partial_t - H_0(r)]G_0(rt,r't') = \delta(r-r')\delta(t-t') \qquad (5.0.14)$$

$$[i\partial_t - H_0(r) - V(r)]G(rt,r't') = \delta(r-r')\delta(t-t') \qquad (5.0.15)$$

olarak ifade edilir. Burada

$G_0^{-1}(r,t) = i\partial_t - H_0(r)$ ve $G(r,t)^{-1} = i\partial_t - H_0(r) - V(r)$ şeklindedir. Buna göre

$\Psi(r,t) = \Psi_0(r,t) + \int dr' \int dt'\ G_0(rt,r't',E)V(r')\Psi(r',t')$ ve

$$\Psi(r,t) = \Psi_0(r,t) + \int dr' \int dt'\ G_0(rt,r't',E)V(r')\Psi_0(r',t') + O(V^2) \qquad (5.0.16)$$

yazılabilir.

$\Psi(r,t) = \int dr' G(rt,r't')\Psi(r',t')$ şeklinde etkileşme teriminin olmadığı durum için yazıldığında $G(rt,r't')$ nin $(r't')$ zaman ve konumundaki dalga fonksiyonunun (r,t) zaman ve konumuna getiren bir dönüşüm "$propagat$ör" olduğu kolayca görülür. Bu aynı zamanda dalga fonksiyonunu genliğidir.

$$G(rt,r't') = G^R(rt,r't') = -i\theta(t-t') < r\left|e^{-iH(t-t')}\right|r' > \qquad (5.0.17)$$

şeklinde yazıldığında (5.0.13) ile verilen kısmi diferansiyel denklemin çözümüdür. Aynı denklemin ikinci bir çözümü ise

$$G(rt,r't') = G^A(rt,r't') = -i\theta(t'-t) < r\left|e^{-iH(t-t')}\right|r' > \qquad (5.0.18)$$

şeklindedir. Bu ifadelerdeki R ve A indisleri sırasıyla göre $retarded$ ve $advanced$ anlamındadır. Retarded durumunda parçacık geçmişte (r',t') noktasında iken şimdi (r,t) durumundadır. Bu çerçevede $G^R(rt,r't')$ bu durumda dalga fonksiyonunun genliğinin şu andaki miktarını belirler. Advanced durumunda ise parçacık şimdi (r,t) durumundadır, gelecekte (r',t') durumunda olacaktır.

Bu genel bilgilerden sonra sıfır sıcaklık Green fonksiyonlarına geçilebilir.

5.1 Temel Kavramlar, Sıfır Sıcaklık Green Fonksiyonları

Kuramsal fiziğin genel amacı deneysel olarak ölçülebilen fiziksel büyüklükleri fizik kuramları yardımı ile elde etmektir. Bu hem deney sonucunun teyit edilmesini hem de deneysel olarak elde edilmesi zor olan bazı sonuçların elde edilmesini sağlar. Kuantum mekaniğine göre ölçülebilen her fiziksel büyüklük bir işlemci ile temsil edilebilir ve bir ölçüm yapıldığında bu operatöre ait özdeğerler elde edilmiş olur. Çoğu zamanda bu operatörlerin zaman içindeki ortalamaları ve birbirlerine olan etkileri (korelasyonları) ölçülmek istenebilir. Bu durumda sistemin $bölüşüm\ fonksiyonuna$ ihtiyaç vardır. Bölüşüm fonksiyonu için de yine sistemi temsil eden operatörün özdeğerleri gereklidir. Çok parçacıklı sistemlerde , parçacıklar arası çoklu etkileşmelerden dolayı sistemin gerçek özdeğerlerini ve bölüşüm fonksiyonunu oluşturmak kolay olmayabilir. Green fonksiyonları yöntemi ortalama değer ve korelasyon fonksiyonlarının elde edilmesinde, bölüşüm fonksiyonunun açık şekline ihtiyaç duymadan hesaplanmasını sağlar. Ayrıca "alan" olarak ifade edilen ortak davranış analizinde kullanılır.
Bir H Hamiltonyeni için sistemin kesin çözükleri $Green$ fonksiyonları dışında biliniyor ise Green fonksiyonları yöntemini kullanmaya gerek yoktur. Diğer yöntemlerle çözülemeyen bazı problemlerin Green fonksiyonu yöntemi ile kesin çözümlerini yapmak mümkündür. Bazı durumlarda da çözümü bilinmeyen bir problemin farklı iki yöntemle çözümü bize sonuç hakkında kesin bilgi verir, bu nedenle Green fonksiyonları çok cisim problemlerinde, alan teorisi yöntemlerinde yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir.

Kuramsal olarak çok-parçacıklı sistemler için yapılan hesaplamalarının çoğu sıfır sıcaklıkta yapılır, fakat bu sistemlerle ilgili deneysel çalışmalar sonlu sıcaklıklarda yapılırlar, bu nedenle sıfır sıcaklıkta yapılan hesaplamalar anlamsız gibi görünebilir. Bununla beraber, fizikte birçok olay sıcaklığa doğrudan bağlı değildir veya az bağımlıdır. Yine oda sıcaklığı civarında yapılan deneyler veya daha düşük sıcaklıkta yapılan deneyler çoğunlukta olduğu için, sıfır sıcaklıkta yapacağımız hesaplamalar bizim için iyi bir başlangıç oluşturacaktır. Sıfır sıcaklıkta elde edilen sonuçlar genellikle taban duruma ($ground\ state$) karşılık gelecektir. Sonlu sıcaklıkta bulduğumuz deneysel sonuçlar ise bu temel durumların uyarılmış düzeyleri gibi düşünülebilir. Bazı durumlarda da sonlu sıcaklık çözümlerini doğrudan elde etmek daha kolay (uygun) olabilir, bu durumda sıcaklığın sıfır limiti, sıfır sıcaklık çözümlerini verir.

Bir sistemi H Hamiltonyeni ile belirtecek olursak, $H = H_0 + V$ şeklinde yazabiliriz, burada H_0 çözümü kesin olarak yapılabilen kısım, V ise geri kalan kısımı belirtsin. Genellikle V'nin etkisi H_0'ın yanında çok küçüktür. Çok cisim teorisinde esas amaç H_0'ın belirlenmesi ve V'nin bu

terimi nasıl değiştireceğini belirlemek üzerinedir. Konu ile ilgili daha fazla detaya girmeden önce kuantum mekaniğinde kullanılan gösterimleri (temsil biçimlerini) hatırlayalım. Kuantum mekaniğinde üç türlü gösterim tanımlanabilir bunlara kısaca göz atalım.

a) **Schrödinger Gösterimi** Elemanter kuantum mekaniğinde Schrödinger gösterimi kullanılır. Planck sabiti için $\hbar = 1$ olan birim sistemini göz önüne alınır ise denklemler daha sade ifade edilir, buna göre zamana bağlı Schrödinger dalga denklemi,

$$H\psi(\boldsymbol{r},t) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{5.1.1}$$

şeklindedir . Bu denklemin genel çözümleri H' nın zamandan bağımsız olması koşuluyla, $\psi(\vec{\boldsymbol{r}},t) = e^{-iHt}\psi(\vec{r})$ şeklinde yazılabilir. $\psi(\boldsymbol{r},t) \to \psi(t)$ ve $\psi(\boldsymbol{r}) \to \psi(0)$ alınır ise buna göre $\psi(t) = e^{-iHt}\psi(0)$ yazılabilir. Burada açıkça görülebileceği gibi $\psi(t)$ dalga fonksiyonu e^{-iHt} gibi bir çarpan ile zamana bağlıdır.

b) **Heisenberg Gösterimi** Heisenberg gösteriminde ise, dalga fonksiyonu zamandan bağımsız alınıp, operatörler zamana bağlı alınır. Bir operatörün zamana bağlılığı şöyle tanımlanır. $\mathcal{O}(t) = e^{iHt}\mathcal{O}(0)e^{-iHt}$ ya da buna eşdeğer olarak $\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{O}(t) = -i[\mathcal{O}(t), H]$ şeklinde yazılabilir. Kuantum fiziğinde, çoğu zaman bir operatörün iki durum için matris temsilini oluştururuz. Buna göre Schrödinger gösteriminde

$\mathcal{O}(\vec{r}) = \mathcal{O}(0)$ gibi bir operatörün farklı iki durum fonksiyonu için matris temsili

$< \psi_1^{\dagger}(t)\mathcal{O}(0)\psi_2(t) > = < \psi_1^{\dagger}(0)e^{iHt}\mathcal{O}(0)e^{-iHt}\psi_2(0) >$

şeklinde ifade edilir, aynı büyüklük Heisenberg gösteriminde

$< \psi_1^{\dagger}(0)\mathcal{O}(t)\psi_2(0) > = < \psi_1^{\dagger}(0)e^{iHt}\mathcal{O}(0)e^{-iHt}\psi_2(0) >$

şeklindedir görüldüğü gibi iki gösterim de aynı sonucu vermektedir. Heisenberg gösterimin de etkileşmenin oluşturduğu değişim zamana bağlı Hamiltonyen tarafından oluşturulur, Schrödinger gösterimin de ise etkileşmenin etkisi dalga fonksiyonu tarafından temsil edilir.

c) Etkileşme Gösterimi Bu gösterimde ise hem operatörler hem de dalga fonksiyonu zamana bağlıdır. Bu durumda Hamiltonyeni $H = H_0 + V$ şeklinde iki kısıma ayırabiliriz. Burada H_0 pertürbe olmamış duruma karşılık gelir. V ise etkileşme terimidir. Buradaki etkileşmenin açık şeklinden bahsetmeyeceğiz bu daha önceki bölümlerde tartışılan etkileşmelerin herhangi biri olabilir. H_0 ise genellikle çözümü tam olarak yapılabilen kısım olarak seçilir.

Etkileşme gösterimini diğerlerinden ayırmak için operatör ve dalga fonksiyonlarının üzerine (^) (şapka) işareti koymalıyız. Böylece operatörlerin ve dalga fonksiyonunun zamana bağımlılığı

$$\hat{\mathcal{O}}(t) = e^{iH_0 t}\mathcal{O}(t)e^{-iH_0 t} \tag{5.1.2}$$

$$\hat{\psi}(t)=e^{iH_0 t}e^{-iHt}\psi(0) \tag{5.1.3}$$

şeklindedir. Burada $[H_0, V] \neq 0$ olduğunu göz önüne alıyoruz. Eğer bu operatörler komütatif (sıra değiştirebilir) olsaydı, işlemler daha basit olacaktı.

$[A, B] = 0$ ise $e^A e^B = e^{A+B}$ yazılabilir fakat, $[A, B] \neq 0$ ise $e^A e^B \neq e^{A+B}$ olduğunu biliyoruz. Bu tanımlamalara göre yapılan etkileşme gösteriminde elde edilen matris elemanları da, diğer gösterimlerle aynı olmalı, buna göre;

$$< \hat{\psi}_1^{\dagger}(t)\hat{\mathcal{O}}(t)\hat{\psi}_2(t) >=< \psi_1^{\dagger}(0)e^{iHt}e^{-iH_0 t}\left(e^{iH_0 t}\mathcal{O}e^{-iH_0 t}\right)e^{iH_0 t}e^{-iHt}\psi_2(0) >$$

$$=< \psi_1^{\dagger}(0)e^{iHt}\mathcal{O}e^{-iHt}\psi_2(0) >$$

Bu ise, daha önceki gösterimlerde bulduğumuz sonucun aynısıdır. Etkileşme gösteriminde operatörlerin zamana bağımlılığı, pertürbe olmamış Hamiltonyen H_0 tarafından sağlanır, şimdi dalga fonksiyonunun zamana göre değişiminin etkileşme terimi $\hat{V}(t)$ tarafından sağlandığını gösterelim.

$$-i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(t) = \left[\hat{\psi}(t), H\right] = \hat{\psi}(t)H - H\hat{\psi}(t), \qquad (H\psi_0 = H_0\psi_0)$$

$$= e^{iH_0 t}e^{-iHt}\,\psi(0)H - He^{iH_0 t}e^{-iHt}\,\psi(0), \qquad (\psi_0 H = H_0\psi_0)$$

$$= e^{iH_0 t}e^{-iHt}(H_0 - H)e^{iH_0 t}e^{-iHt}\,\psi(0), \qquad (H_0 - H = H_0 - H_0 - V)$$

$$= -ie^{iH_0 t}e^{-iHt}Ve^{iH_0 t}e^{-iHt}\,\psi(0) \;\; = -ie^{iH_0 t}\hat{\psi}(t)$$

$$= -ie^{iH_0 t}Ve^{-iHt}\hat{\psi} = -i\;\hat{V}(t)\hat{\psi}(t) \quad , \qquad (\hat{V} = e^{iH_0 t}Ve^{-iH_0 t})$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(t) = -i\hat{V}(t)\psi(t) \tag{5.1.4}$$

Buradan da görülebileceği gibi, dalga fonksiyonunun zamana bağımlılığı etkileşme terimi tarafından sağlanır. Denklem (5.1.3) ile tanımlı dalga fonksiyonunu

$$U(t) = e^{iH_0 t}e^{-iHt} \tag{5.1.5}$$

şeklinde tanımlayalım, böylece $U(0) = 1$ olacaktır. ($U(t)$ zaman evrimi operatörü olarak ta adlandırılır). Aynı zamanda;

$$\frac{\partial}{\partial t}U(t) = -i\hat{V}(t)U(t)$$

olacaktır. Şimdi bu denklemi çözmeye çalışalım.

$$\int_0^t \partial U(t) = -i\,\hat{V}(t)U(t)\partial t \rightarrow U(t) - U(0) = -i\int_0^t d\,t_1\hat{V}(t_1)U(t_1)$$

veya $U(0) = 1$ alınır ise

$$U(t) = 1 - i\int_0^t d\,t_1\hat{V}(t_1)U(t_1)$$

$U(t)$, $U(t_1)$'e bağlı; benzer şekilde $U(t_1)$'i $U(t_2)$ cinsinden yazabiliriz.

$U(t) = 1 - i\int_0^t d\,t_1\hat{V}(t_1)[1 - i\int_0^{t_1} d\,t_2\hat{V}(t_2)\,U(t_2)$

$U(t_2), U(t_3)$ cinsinden yazılabilir.

$$= 1 - i\int_0^t d\,t_1\hat{V}(t_1)\left[1 - i\int_0^{t_1} d\,t_2\hat{V}(t_2)\,\left[1 - \int_0^{t_2} d\,t_3\hat{V}(t_3)\,U(t_3)\right]\right]$$

$$= 1 - i\int_0^t d\,t_1\hat{V}(t_1) - (i)^2\int_0^t d\,t_1\int_0^{t_1}\hat{V}(\,t_1)V(t_2) + \cdots$$

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty}(-i)^n\int_0^t d\,t_1\int_0^{t_1} d\,t_2 \ldots\int_0^{t_{n-1}} d\,t_n\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\ldots\hat{V}(t_n) \qquad (5.1.6)$$

Burada zaman sıralama operatörü T tanımlayacak olursak (sıcaklık ile karıştırılmasın); bu T zaman sıralama operatörü zamana bağlı birçok operatöre etkidiği zaman, bu operatörleri erken zamana göre sıralama işlemi yapacaktır.

$T[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_3)\hat{V}(t_2)] = \hat{V}(t_3)\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_1), \quad t_3 > t_2 > t_1$

$\theta(x)$ fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanırsa:

$$\theta(x) = 1 \qquad x > 0$$
$$= 0 \qquad x = 0$$
$$= \frac{1}{2} \qquad x < 0$$

$\theta(x)$ fonksiyonu kullanılarak $\hat{V}(t_1), \hat{V}(t_2)$ gibi zamana bağlı iki operatör için T zaman sıralama operatörü açıkça şöyle tanımlanabilir:

$T\left[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\right] = \theta(t_1 - t_2\,)\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2) + \theta(t_2 - t_1\,)\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_1)$

Burada $\hat{V}(t_1)$ ile $\hat{V}(t_2)$ birbiri ile komütatiftir, bu nedenle operatörlerin sırası önemli değildir. Fakat T operatörü farklı zamanlar için birbiri ile komütatif olmayan operatörlere uygulanmalıdır. Buna göre yukarıdaki ifade için

$$\frac{1}{2!}\int_0^t d\,t_1\int_0^t d\,t_2\,T\left[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\right]$$
$$= \frac{1}{2!}\int_0^t d\,t_1\int_0^{t_1} d\,t_2\,\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2) + \frac{1}{2!}\int_0^t d\,t_2\int_0^{t_2} dt_1\hat{V}(t_2)\,\hat{V}(t_1)$$

integraldeki ikinci terimde; $t_1 \to t_2\,, t_2 \to t_1$ dönüşümü altında birinci integral ile aynı sonucu verecektir. Böylece;

$$\frac{1}{2!}\int_0^t d\,t_1\int_0^t d\,t_2\,T\left[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\right] = \int_0^t\int_0^{t_1} d\,t_2\,\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)$$

yazabiliriz. Benzer şekilde;

$$\frac{1}{3!}\int_0^t d\,t_1\int_0^t d\,t_2\int_0^t d\,t_3\,T\left[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_3)\right]$$
$$= \int_0^t d\,t_1\int_0^{t_1} d\,t_2\int_0^{t_2} d\,t_3\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_3)$$

buluruz. Böylece $U(t)$'nin genel ifadesi için;

$$U(t) = 1 + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{n!}\int_0^t d\,t_1\int_0^t d\,t_2 \ldots\int_0^t d\,t_n T\left[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\ldots\hat{V}(t_n)\right] \qquad (5.1.7)$$

yazılabilir. (5.1.7) bağıntısı şu şekilde kısaltılmış olarak yazılabilir,

$$U(t) = Texp\left[-i\int_0^t d\,t_1\hat{V}(t_1)\right] \quad (5.1.8)$$

Burada (5.1.8) bağıntısı, (5.1.6) ve (5.1.7) ifadelerinin üstel seri özellikleri kullanılarak yazılmış halidir özel bir gösterimdir. $U(t)$ nin açık şekli (5.1.6) de verildiği gibidir. Başka bir yardımcı büyüklük S matrisidir ve aşağıdaki gibi tanımlanır.

5.2 S Matrisi

Daha önce etkileşme gösteriminde $\hat{\psi}(t) = U(t)\hat{\psi}(0)$ şeklinde tanımlanmıştı, şimdi $S(t,t')$ şeklinde S matrisi tanımlayalım, S matrisi $\hat{\psi}(t')$ operatörünü $\hat{\psi}(t)$ operatörüne dönüştürme işlemi yapan bir matris olsun.

$\hat{\psi}(t) = S(t',t)\hat{\psi}(t') = S(t',t)U(t')\hat{\psi}(0)$, buna göre $S(t,t') = U(t)U^{\dagger}(t')$

Olduğu görülür. S operatörünün bazı özellikleri şu şekildedir:

1- $S(t,t) = 1 = U(t)U^{\dagger}(t) = e^{iH_0t}e^{-iHt}\left(e^{iHt}e^{-iH_0t}\right)$

2- $S^{\dagger}(t,t') = U(t')U^{\dagger}(t) = S(t',t)$

3- $S(t,t')\,S(t',t'') = S(t,t'')$

Burada 3. özellik S'nin tanımını kullanarak gösterilebilir,

$\hat{\psi}(t) = S(t,t')\hat{\psi}(t') = S(t,t')S(t',t'')\hat{\psi}(t'') = S(t,t'')\hat{\psi}(t'')$ ve

$\frac{\partial}{\partial t}S(t,t') = \frac{\partial}{\partial t}U(t)U^{\dagger}(t) = -i\hat{V}(t)\,S(t,t')$

dir. Buradan da;

$$S(t,t') = T[\exp(-i\int_{t'}^{t} dt_1\hat{V}(t_1)] \quad (5.2.1)$$

Şeklinde ifade edilebilir. Heisenberg gösteriminde kullandığımız $\hat{\psi}(0) = \psi(0)$ zamandan bağımsız dalga fonksiyonunu, Schrödinger gösteriminde, $\psi_s(t) = e^{-iHt}\psi(0)$ şeklinde tanımlayacak olursak, $\psi(0)$ aynı zamanda $t = 0$'da ki Schrödinger dalga denkleminin çözümleri olan fonksiyonlara karşılık gelir. $\hat{\psi}(t) = U(t)\,\psi(0)$ olarak tanımlanacak olursa, $U(0) = 1$ olduğundan $t = 0$'da $\psi(0)$ göz önüne alınan sistemin çözümü kesin yapılabilen durum fonksiyonları olacaktır. Bu aşamada esas öncelik $\psi(0)$'ın bulunmasıdır. Hamiltonyeni $H = H_0 + V$ şeklinde yazacak olursak daha önce belirtildiği gibi, H_0 özdeğer ve özfonksiyonları kesin olarak bilinen kısım olmak üzere, H_0 fonksiyonlarının taban durumuna karşılık gelen en küçük durumu Φ_0 olsun, böylece bilinmeyen $\psi(0)$'ı bu Φ_0 cinsinden bulmaya çalışalım. Gell-Man ve Low S matrisini kullanarak bu iki fonksiyon arasında şöyle bir bağıntı olacağını belirttiler.

$$\psi(0) = S(0,-\infty)\Phi_0 \quad (5.2.2)$$

Bu sonucun elde edilişini bulmaya çalışalım.

$\hat{\psi}(t) = S(t,0)\,\psi(0)$ buradan da, $\psi(0) = S(0,t)\hat{\psi}(t)$ yazabiliriz.

$S(0,t)S(t,0) = 1$ olduğu göz önüne alınırsa, $t \to -\infty$ durumunda,

$$\psi(0) = S(0,-\infty)\,\hat{\psi}(-\infty) \tag{5.2.3}$$

olacaktır. Burada $\hat{\psi}(-\infty)'$ ın Φ_0 olduğunu belirtmemiz gerekir. Buna göre Φ_0, herhangi bir V etkileşmesi içermeyen durumlar olarak düşünülebilir. $S(0,-\infty)$ fonksiyonu $t = -\infty$ dan bu etkileşme olmayan sistemi $t = 0$'a getirir. Böylece, $t = 0$'da V etkileşmelerini de içeren $\psi(0)$ sıfır sıcaklık dalga fonksiyonunu elde edilir. $t \to \infty$ durumunda probleme bakacak olursak $\hat{\psi}(\infty) = S(\infty,0)\psi(0)$ buluruz, simetriden dolayı bunun da Φ_0 ile ilgisi olmalı, gerçekte $\hat{\psi}(\infty)$, $\hat{\psi}(-\infty)$ 'dan bir faz farkı ile farklıdır, yani $\hat{\psi}(\infty) = e^{iL}\Phi_0$ 'dır.

$$\hat{\psi}(\infty) = e^{iL}\Phi_0 = S(\infty,0)\psi(0) = S(\infty,-\infty)\Phi_0 \tag{5.2.4}$$

Burada faz faktörü e^{iL} şöyle tanımlanır;

$$e^{iL} = <\Phi_0|\,S(\infty,-\infty)|\Phi_0> \tag{5.2.5}$$

5.3 Green Fonksiyonlarına Örnekler.

Basit birer örnek olarak elektron, fonon ve foton gibi üç tür etkileşme için Green fonksiyonundan bahsedilecektir.

Sıfır sıcaklık Green fonksiyonu şöyle tanımlanır;

$$G(\lambda, t-t') = -i < \left|T c_\lambda(t) c_\lambda^\dagger(t')\right| > \tag{5.3.1}$$

Burada λ kuantum sayısı, incelenen probleme göre herhangi bir kuantum sayısı olabilir. Birçok durumda bu kuantum sayısı, serbest elektron gazına ait olan $\lambda = (\vec{k}, \sigma)$ alınacaktır. Sıfır sıcaklıkta $(\psi(0) = |>)$ durumu, temel durum olmak zorundadır. Eğer incelediğimiz problemin Hamiltonyeni H ise sıfır sıcaklıkta sistemi temsil eden $(|>)$ durumu H'ın bir öz durumudur. Bu $(|>)$ durumunun ne olduğunu bilmiyoruz ve Green fonksiyonu yardımıyla bunu bulmaya çalışacağız. Hamiltonyeni $H = H_0 + V$ gibi yazacak olursak, H_0 pertürbe olmamış durumu belirtir. V ise etkileşme terimidir. H_0 için çözümlerin tam olarak yapılacağını varsaymıştık bu nedenle öz durumlarını biliyoruz. Bu öz durumlar Φ_λ olarak alınacak olursa, bunlar önceki konuda fermiyonlardan oluşmuş parçacıkların oluşturduğu sistem için Fermiyon alanları $\psi_\lambda = \sum_\lambda c_\lambda \Phi_\lambda$ şeklinde tanımlanmıştı. Böylece c_λ'lar komple bir seti oluşturacak şekilde seçilmiş olur. Bu komple set H_0'ın öz durumları olsun, böylece, c_λ'lar H_0'ın öz durumlarıdır; fakat $(|>)$ durumları ise H'ın öz durumlarıdır. $(|>)$ durumları zamandan bağımsızdır; fakat c_λ'lar ise,

$c_\lambda(t) = e^{iHt} c_\lambda e^{-iHt}$

bağıntısına göre zamana bağlıdırlar. $t > t'$ durumunda Green fonksiyonuna bakalım,

$G(\lambda, t > t') = -i < \left| c_\lambda(t) c_\lambda^\dagger(t') \right| >$

olacaktır. Burada şunu göz önüne alalım. Gerçek bir taban durumu ele alalım, bir $t = t'$ 'de bu taban durumu λ uyarılmış durumuna geçsin, yine bir başka t durumunda ise, bu uyarılmış durum yok edilsin. $\{c_\lambda(t) c_\lambda^\dagger(t')| >\}$ Şimdi eğer $c_\lambda| >$, H'ın bir öz durumu olsaydı

$H c_\lambda^\dagger| >= \varepsilon_\lambda c_\lambda^\dagger| >$ ve $H| >= \varepsilon_0| >$

olacaktı. Bu durumda, t' uyarılmış durumundan t durumuna yayılım (propagation) basit bir üstel terim şeklinde aşağıdaki gibi olacaktır.

$G(\lambda, t > t') = -e^{-i(t-t')(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_0)}$,

genellikle λ durumu (uyarılmış durum) H'ın bir öz durumu olmayabilir, bu durumda λ durumundaki parçacık $t - t'$ süresinde saçılmaya uğrar veya enerjisi kaymaya sahip olur.

Böylece bir $t > t'$ anında ölçme yaptığımızda t' anında var olan genliğin ne kadarının geriye kaldığını ölçmüş oluruz, bu ise bize sistem hakkında bilgi verir.

İkinci bir zaman düzenlemesi ise, $t' > t$ durumudur. Bu durumda;

$G(\lambda, t' > t) = +i < \left| c_\lambda^\dagger(t') c_\lambda(t) \right| >$

şeklindedir. Burada braket içindeki iki fermiyon operatörü (işlemcisi) yer değiştirdiği için, ifade (-1) ile çarpılmalı bu nedenle i'nin katsayısı $(+)$ olur. Bu durumda bir t anında $(t < t')$ taban durumdan bir elektron yok edilir, daha sonra bir t' anında bir elektron yaratılır, bu ise ancak sıfır sıcaklıkta temel durumda elektron mevcut ise olabilir. Bu işlemin gerçekleşebileceği bir örnek olarak metallerdeki elektron gaz sisteminin oluşturduğu Fermi denizi gösterilebilir. Buna göre, $(| >)$ metallerdeki Fermi denizinin temel durumuna karşılık gelmek üzere $((c_\lambda(t)| >)$ ifadesi t anında Fermi denizinden bir elektron yok edilmesine karşılık gelir bu durumda deşik olarak adlandırılan bir "vacancy" (boşluk) oluşur. Bu deşik $t - t'$ zaman aralığında saçılmaya uğrar, daha sonra t' anında $c_\lambda^\dagger(t')$ λ uyarılmış durumunda bulunan deşiği yok eder (bir elektron yaratır ve bu elektron boşluğu doldurur. Bu işlem bize deşik uyarımı (excitation) hakkında bilgi verir.

Şimdi Heisenberg gösteriminde tanımladığımız Green fonksiyonunu etkileşme gösteriminde elde etmeye çalışalım. H_0'ın öz fonksiyonları $| >_0 \equiv \Phi_0$ olmak üzere,

$| >= S(0, -\infty)| >_0$ yazılabilir. $c_\lambda(t)$'yi de bu gösterimde,

$c_\lambda(t) = e^{iHt} e^{-iH_0 t} \hat{c}_\lambda(t) e^{iH_0 t} e^{-iHt} = U^\dagger(t) \hat{c}_\lambda(t) U(t) = S(0,t) \hat{c}_\lambda(t) S(t,0)$

şeklinde yazabiliriz. Böylece (5.3.1) Green fonksiyonu

$G(\lambda, t - t') =$

$$-i\theta(t-t')\ {}_0<\left|S(-\infty,0)S(0,t)\hat{c}_\lambda(t)S(t,0)S(0,t')c_\lambda^\dagger(t')S(t',0)S(0,-\infty)\right|>_0+$$

$$i\theta(t'-t)\ {}_0<||S(-\infty,0)S(0,t')c_\lambda^\dagger(t')S(t',0)S(0,t)\hat{c}_\lambda(t)S(t,0)S(0,-\infty)|>_0$$

Şekline gelir. Bu ifadeyi daha önce tanımladığımız S matrisini kullanarak tekrar düzenleyebiliriz, şöyle ki soldaki braket için;

$${}_0<|S(-\infty,0)=e^{-iL}\ {}_0<|S(\infty,-\infty)S(-\infty,0)=\frac{{}_0<|S(\infty,0)}{{}_0<|S(-\infty,\infty)|>_0}$$

ifadesini kullanacak olursak, Green fonksiyonu şu hale gelir,

$$G(\lambda,t-t')=\frac{-i}{{}_0<|S(-\infty,\infty)|>_0}[\theta(t-t')\ {}_0<|S(\infty,t)\hat{c}_\lambda(t)S(t,t')\ c_\lambda^\dagger(t')\ S(t'-\infty)|>_0$$

$$-\theta(t'-t)\ {}_0<\left|S(\infty,t')c_\lambda^\dagger(t')S(t',t)\hat{c}_\lambda(t)S(t,-\infty)\right|>_0]$$

Burada $S(\infty,-\infty)$ operatörü, $(\infty,t),(t,t'),(t',-\infty)$ gibi üç zaman aralığını içermektedir, T operatörü ise bu zaman aralıklarını otomatik olarak sıraya koyar. Buna göre toplam Green fonksiyonunu şöyle yazabiliriz.

$$G(\lambda,t-t')=\frac{-i\ {}_0<|T\hat{c}_\lambda(t)\ c_\lambda^\dagger(t')S(\infty,-\infty)|>_0}{{}_0<|S(\infty,-\infty)|>_0} \qquad (5.3.2)$$

Green fonksiyonu etkileşmenin sıfır olduğu $(V=0)$ özel durumu için yazılacak olursa, S matrisi 1 olacağından;

$$G^{(0)}(\lambda,t-t')=-i\ {}_0<|T\hat{c}_\lambda(t)\ c_\lambda^\dagger(t')|>_0$$

Bu $G^{(0)}$ çoğu zaman, pertürbe olmamış Green fonksiyonu veya serbest propagatör olarak adlandırılır. Örnek olarak birbirinden oldukça farklı iki elektronik yapıya sahip sistem için Green fonksiyonu yöntemini uygulayalım. Bu iki farklı yapının, taban durumları etkileşme yok ise $|>_0$ olarak, etkileşmenin olduğu gerçek durum ise $|>$ olarak tanımlansın.

Boş Bant Green Fonksiyonu

Burada tek başına bir elektronun enerji bandındaki davranışını göz önüne alalım. Bir yarı iletken veya yalıtkanda, bir elektronu iletkenlik bandına yerleştirdiğimizi düşünelim. Bu durumda taban durum $|0>$ parçacıkların oluşturduğu vakumudur. Bu durum en düşük enerji durumuna karşılık gelen durumdur ve şu özelliklere sahiptir. c_p Fermiyon, a_q Bozon yok etme operatörleri olmak üzere $c_{\vec{p}}|0>=0$, $a_{\vec{q}}|0>=0$ Bu nedenle, H_0 ve V operatörleri bu vakuma etkiyince sıfır değerini verirler. Ayrıca S matrisi $|0>$ vakumuna etkiyince birim değeri verir. Buna göre $S(t,-\infty)|0>=|0>$ olacaktır bu da $|>_0$ ve $|>$ durumlarının ikisinin de vakuma karşılık geldiğini gösterir.

Green fonksiyonu yalnızca,

$$G(\lambda,t-t')=-i\theta(t-t')<\left|\hat{c}_\lambda(t)c_\lambda^\dagger(t')\right|>$$

şeklinde bir zaman sıralaması için tanımlıdır. Özel olarak pertürbe olmamış Green fonksiyonu incelemek kolaydır, buna göre

$< 0\left|c_\lambda c_\lambda^\dagger\right|0 > = 1$ olmak üzere,

$$G^{(0)}(\lambda, t-t') = -i\theta(t-t')e^{-i\varepsilon_\lambda(t-t')} < 0\left|c_\lambda c_\lambda^\dagger\right|0 >$$

$$= -i\theta(t-t')e^{-i\varepsilon_\lambda(t-t')}$$

şeklindedir. $G(\lambda, t)$'nin Fourier dönüşümü

$$G(\lambda, E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iEt} G(\lambda, t)$$

şeklinde tanımlanır. Bu integralin yakınsamasını sağlamak için üstel kısma $i\delta$ gibi sonsuz küçük bir terim ekleyecek olursak,

$$G^{(0)}(\lambda, E) = -i\int_0^{\infty} dt e^{it(E-\varepsilon_\lambda+i\delta)}$$

$$G^{(0)}(\lambda, E) = \frac{1}{E-\varepsilon_\lambda+i\delta} \qquad (5.3.3)$$

Şeklinde bulunur. Bu ifade iletken veya yarıiletkenlerde boş bant içindeki bir elektronun ters örgü uzayındaki davranışını verir. Saçılma deneylerinden elde edilen doğrudan sonuçlar saçılma yasaları ve geometriden dolayı ters örgü uzayı ile ilgilidir. Bu nedenle deneysel sonuçlar ile (5.3.3) bağıntısı kolayca karşılaştırılır. Kolayca görüleceği gibi E = ε_λ olduğunda $G^{(0)}$ bir maksimuma sahip olacaktır.

Dejenere Elektron Gaz Green fonksiyonu

İkinci örnek olarak sıfır sıcaklıkta Fermi denizindeki bir elektronu göz önüne alalım. Buna basit metaller örnek gösterilebilir. Sistemin kimyasal potansiyeli μ'dür. Böylece $E < \mu$ olan bütün enerji seviyeleri dolu olacaktır. Eğer, pertürbe olmamış duruma ait elektronların enerjisini $\varepsilon_{\vec{k}}$ ile gösterecek olursak, $|>_0$ taban durumu için $\varepsilon_{\vec{k}} < \mu$ durumları tamamen dolu, $\varepsilon_{\vec{k}} > \mu$ durumları ise tamamen boş olacaktır. Bu nedenle, elektronun enerjisini kimyasal potansiyele göre ölçmek daha uygun ve kullanışlı olacaktır. Buna göre; $\xi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \mu$ büyüklüğünü tanımlayacak olursak, $\boldsymbol{p}_F$, Fermi dalga vektörü olmak üzere, küresel Fermi yüzeyi için,

$$_0 < \left| c_k^\dagger c_k \right| >_0 = \theta(p_F - k)$$

$$_0 < \left| c_k c_k^\dagger \right| >_0 = \theta(k - p_F)$$

Olacaktır. Bunu yazmanın daha uygun bir yolu ise,

$$_0 < \left| c_k^\dagger c_k \right| >_0 = \theta\left(-\xi_{\vec{k}}\right) = \lim_{\beta\to\infty} \frac{1}{e^{\beta\xi_{\vec{k}}}+1} = \eta_F\left(\xi_{\vec{k}}\right)$$

şeklindedir. Buna göre pertürbe olmamış Green fonksiyonu;

$$G^{(0)}\left(\vec{k}\,, t-t'\right) = -i\ {}_0 < |T c_k(t)\ c_k^{\dagger}(t')| >_0$$

$$= -\,i[\theta(t-t')\theta\left(\xi_{\vec{k}}\right) - \theta(t'-t)\theta\left(-\xi_{\vec{k}}\right)]e^{-i\xi_{\vec{k}}(t-t')}$$

şeklindedir.

$G^{(0)}\left(\vec{k}\,, t-t'\right)$'nın Fourier Dönüşümü ise,

$$G^{(0)}\left(\vec{k}\,, E\right) = -i[\theta\left(\xi_{\vec{k}}\right)\int_0^{\infty} dt e^{it\left(E-\xi_{\vec{k}}+i\delta\right)} - \theta\left(-\xi_{\vec{k}}\right)\int_{-\infty}^{0} dt\, e^{it\left(E-\xi_{\vec{k}}-i\delta\right)}]$$

$$= \frac{\theta\left(\xi_{\vec{k}}\right)}{E-\xi_{\vec{k}}+i\delta} + \frac{\theta\left(-\xi_{\vec{k}}\right)}{E-\xi_{\vec{k}}-i\delta} \qquad (5.3.4)$$

Burada $\xi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \mu$ olduğundan $\varepsilon_{\vec{k}} = \mu$ durumunda $\xi_{\vec{k}} = 0$ olacaktır. $G^{(0)}$'ın başka bir yazım şekli ise;

$$G^{(0)}\left(\vec{k}\,, E\right) = \frac{1}{E - \xi_{\vec{k}} + i\delta_k}$$

$$\delta_k = \delta sgn\ \xi_{\vec{k}} \qquad (5.3.5)$$

şeklindedir. Burada δ_k kimyasal potansiyelin işaretini değiştiren sonsuz küçük bir büyüklüktür.

Fonon Green Fonksiyonu:

Fononlar için Green fonksiyonu şu şekilde tanımlanır q genelleştirilmiş konum koordinatı olmak üzere;

$$D(\boldsymbol{q}, \lambda; t-t') = -< \left|TA_{q,\lambda}(t)A_{-q,\lambda}(t')\right| > \quad \text{ve} \quad A_{q,\lambda} = a_{q,\lambda} + a^{+}_{-q,\lambda}$$

Burada λ indisi fononun polarizasyonu ile ilgilidir. Burada tek tip fononlar ele alınacaktır bu nedenle λ indisi göz önüne alınmayacaktır. Buna göre etkileşme gösteriminde

$$D(\boldsymbol{q}, t-t') = \frac{-\,o<|TA_q(t)A_{-q}(t')S(\infty,-\infty)|>o}{o<|S(\infty,-\infty)|>o}$$

Sıfır sıcaklıkta fononlar olmayacağı için $| > o$ ve $| >$ taban durumları parçacık vakumu

$|0>$ durumlarıdır. Pertürbe olmamış Green fonksiyonu şu şekildedir;

$$D^{(0)}(q, t-t') = -i\ o < |TA(\boldsymbol{q}, t)A(-\boldsymbol{q}, t')| > o$$

$$= -i\ o < |T(a_q e^{-iw_q t} + a^{+}_{-q} e^{w_q t})(a_{-q} e^{-iw_q t'} + a^{+}_{q} e^{iw_q t'})| > o$$

Sıfır sıcaklıkta

$o < \left|a_q a_q^+\right| > o = 1 \;\; ve \; o < \left|a_q^+ a_q\right| > o = 0$

Olduğundan

$D^{(0)}(\boldsymbol{q}, t-t') = -i\left[\theta(t-t')e^{-iw_{\boldsymbol{q}}(t-t')} + \theta(t'-t)e^{iw_{\boldsymbol{q}}(t-t')}\right]$

Bu ifadenin Fourier dönüşümü

$D^{(0)}(\boldsymbol{q}, w) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iwt} D^{(0)}(\boldsymbol{q}, t)$

$D^{(0)}(\boldsymbol{q}, w) = \frac{1}{w-w_q+i\delta} + \frac{1}{w+w_q-i\delta} = \frac{2w_q}{w^2-w_q^2+i\delta}$

Şeklinde enerjiye bağlı pertürbe olmamış Green fonksiyonu elde edilir.

Bazen fonon Green fonksiyonlarını sonlu sıcaklıkta almak gerekir. Bu durumda fonon işgal etme operatörlerinin termal ortalaması alınmalıdır, buna göre

$< \left|a_q a_q^+\right| > = N_q + 1 \quad$ ve $\quad < \left|a_q^+ a_q\right| > = \; N_q = \frac{1}{e^{iw_q - 1}}$

ise zamana bağlı Green fonksiyonu

$D^{(0)}(\boldsymbol{q}, t-t') = -[\left(N_q + 1\right)e^{-w_q(t-t')} + N_q e^{iw_q(t-t')}]$

Şeklinde yazılabilir. Bazı durumlar için çok parçacıklı sistemde etkileşmeler fonon enerjisinde değişime neden olabilir, bu durumda sonlu sıcaklık termal ortalaması etkileşmeler sonucu oluşan frekanslar üzerinden olmalıdır.

5.4 Wick Teoremi

Green fonksiyonunu (5.2.1) deki S(∞,-∞) matrisini (5.1.7) deki gibi seri açılımına göre tekrar yazalım

$$G(\boldsymbol{p}, t-t') = \sum_{n=0} \frac{(-i)^{n+1}}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{o<\left|TC_p(t)V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n)C_p^+\right|>o}{o<|S(\infty,-\infty)|>o} \qquad (5.4.1.a)$$

Paydadaki terimi daha sonra tekrar incelemek üzere bir tarafa bırakacak olursak, esas problem paydaki zaman sıralama operatörünü de içeren terimin nasıl hesaplanacağıdır.

$$o < \left|TC_p(t)V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n)C_p^+\right| > o \qquad (5.4.1.b)$$

Buradaki V etkileşme terimleri herhangi bir etkileşme olabilir, örneğin V elektron-elektron etkileşmesi ise şu şekilde yazılabilir.

$$V(t_1) = \frac{1}{2}\sum_{k'k,q} \frac{4\pi e^2}{q} C^+_{k+q} C^+_{k'-q} C_{k'} C_k e^{it_1(\varepsilon_{k+q}+\varepsilon_{k-q}-\varepsilon_k-\varepsilon_{k'})} \quad (5.4.2)$$

(5.4.1) bağıntısında birçok parçacık yaratma ve yok etme operatörü olduğu için bu terimin hesaplanması oldukça karışık bir iştir. $|>o$ taban durumunda n tane parçacık yaratma ve parçacık yok etme operatörü ile uğraşmak gerekir. Bu durumda birçok zaman sıralama ve ikili oluşturma olasılığı vardır. İkili oluştururken (pairings) n tane yaratma ve n tane yok etme operatörü olacak şekilde oluşturulmalıdır. Daha iyi anlamak için şu iki örneğe bakalım;

$o < \left|TC_\alpha(t)C^+_\beta(t')\right| > o$ terimi $\alpha = \beta$ olmadıkça sıfıra eşit olacaktır. Benzer şekilde

$$o < |TC_\alpha(t)C^+_\beta(t_1)C_\gamma(t_2)C^+_\delta(t') > o \quad (5.4.3)$$

ifadesinde $\alpha = \beta$ ve $\gamma = \delta$ yada $\alpha = \delta$ ve $\beta = \gamma$ olmadıkça bu bra-ket terimi sıfır olacaktır. Bu basit örneklerden de anlaşılacağı gibi (5.4.1.b) ifadesindeki çift oluşturmanın birçok yolu olmasına karşılık bunlardan yalnızca fiziksel olanları göz önüne alınacaktır. Ayrıca (5.4.1.b) ifadesindeki bra-ketin içi zaman-sıralı (time-ordered) olmalı bu ise Wick teoremi yardımı ile sağlanabilir. Bu teoreme göre mümkün tüm ikililer oluşturulurken ikililer zaman sıralı olmalı, bu teorem (5.4.1.b) ifadesine uygulanır ise ikililerin tamamının zaman sıralı olması sağlanır. Örneğin (5.4.3) ifadesine bakalım

$$o < |TC_\alpha(t)C^+_\beta(t_1)C_\gamma(t_2)C^+_\delta(t') > o =$$

$$o < \left|TC_\alpha(t)C^+_\beta(t_1)\right| > o\, o < \left|TC_\gamma(t_2)C^+_\delta(t')\right| > o$$

$$-o < |TC_\alpha(t)C^+_\delta(t')| > o o < \left|TC_\gamma(t_2)C^+_\beta(t_1)\right| > o$$

$$= \delta_{\alpha\beta}\,\delta_{\gamma\delta} o < |TC_\alpha(t)C^+_\alpha(t_1)| > o\, o < \left|TC_\gamma(t_2)C^+_\gamma(t')\right| > o$$

$$-\delta_{\alpha\delta}\,\delta_{\gamma\beta}\, o < |TC_\alpha(t)C^+_\delta(t')| > o\, o < \left|TC_\gamma(t_2)C^+_\beta(t_1)\right| > o \quad (5.4.4)$$

$n = 3$ için benzer 6 tane terim olacaktır, n tane yaratma ve yok etme operatörü için $n!$ mümkün ikili durumu vardır. Parçacık yaratma ve yok etme operatörlerinden çiftler(ikililer) oluşturulurken bazı basit kurallar şunlardır.

a) Birincisi Fermiyonlardan oluşan ikililerde iki komşu yer değiştirirse işaret değişir. Örneğin (5.4.4) eşitliğinde ikinci terimdeki $(-)$ işareti bu yüzdendir.

b) İkinci kural, farklı tür uyarımlar yapan operatörlerin karışık olması durumunda bu operatörler kendi içlerinde ayrı ayrı ikili oluşturmalı, çünkü genellikle bu operatörler diğerleri ile sıra değiştirme özelliğine sahiptirler (komütatifdirler). Örneğin elektron ve fonon operatörlerinin karışımı olan

$< \left|TC_p(t)C^+_{p_1}(t_1)A_{q_1}(t_1)C_{p_2}(t_2)C^+_{p_3}(t_3)A_{q_2}(t_2)\right| > o$ ifadesini

$< 0\left|TC_p(t)C^+_{p_1}(t_1)C_{p_2}(t_2)C^+_{p_3}(t_3)\right|0 > \; o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_2}(t_2)\right| > o$

şeklinde ayrıştırabiliriz. (5.4.3) ifadesinde ki Fermiyon operatörleri için yapılan işlemler Bozon operatörleri içinde uygulanır , örneğin fononlar için

$o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_2}(t_2)A_{q_3}(t_3)A_{q_4}(t_4)\right| > o$

$= o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_2}(t_2)\right| > o \; o < |TA_{q_3}(t_3)A_{q_4}(t_4)| > o$

$+ o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_3}(t_3)\right| > o \; o < |TA_{q_2}(t_2)A_{q_4}(t_4)| > o$

$+ o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_4}(t_4)\right| > o \; o < |TA_{q_2}(t_2)A_{q_3}(t_3)| > o$ (5.4.5)

Bu ifadede braketler iki q vektörü birbirine eşit ve zıt yönlü değillerse sıfır olacaklardır buna göre (4.4.5) ifadesi

$= \delta_{q_1+q_2}\delta_{q_3+q_4} o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{-q_1}(t_2)\right| > o \; o < |TA_{q_3}(t_3)A_{-q_3}(t_4)| > o$

$+ \delta_{q_1+q_3}\delta_{q_2+q_4} o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{-q_1}(t_3)\right| > o \; o < |TA_{q_2}(t_2)A_{-q_2}(t_4)| > o$

$+ \delta_{q_1+q_4}\delta_{q_2+q_3} o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{-q_1}(t_4)\right| > o \; o < |TA_{q_2}(t_2)A_{-q_2}(t_3)| > o$ (5.4.6)

Şeklinde olmalıdır.

c) İkili oluşturmanın üçüncü kuralı, aynı zamana sahip iki operatörün sıralanması ile ilgilidir. Bu durumda yok etme operatörü daima sağ tarafta olmalıdır. Buna göre örneğin $o < |TC^+_{k_1}(t_1)C_{k_2}(t_1)| > o$ ifadesi

$= \delta_{k_1=k_2} o < |TC^+_{k_1}(t_1)C_{k_1}(t_1)| > o = \delta_{k_1=k_2}\, n_F(\varepsilon_{k_1})$ (5.4.7)

şeklinde bir sayı olduğu için zamandan bağımsızdır. Bir sisteme ait H Hamiltoniyeni de operatörler cinsinde yazıldığında bu kurallara dikkat etmek gerekir. Eğer iki elektron (yada daha genel olarak Fermiyon) operatörü farklı zamanlara sahip iseler bu durumda parçacık yaratma operatörü daima sağ tarafa yazılmalıdır.

$o < |TC_{k_1}(t_1)C^+_{k_2}(t_2)| > o$ ifadesi

$= \delta_{k_1=k_2} o < |TC_{k_1}(t_1)C^+_{k_1}(t_2)| > o = i\, G^{(0)}(k_1, t_1 - t_2)$

olur bu ise pertürbe olmamış Green fonksiyonunun tanımından başka bir şey değildir. Buna göre bu koşulları

$o < |TC_\alpha(t)C^+_\beta(t_1)C_\gamma(t_2)C^+_\delta(t') > o$

durumuna uygularsak bu ifadenin pertürbe olmamış Green Fonksiyonları cinsinden ifadesi aşağıdaki gibi olacaktır.

$o < |TC_\alpha(t)C^+_\beta(t_1)C_\gamma(t_2)C^+_\delta(t') > o =$

$o < \left|TC_\alpha(t)C^+_\beta(t_1)\right| > o\; o < \left|TC_\gamma(t_2)C^+_\delta(t')\right| > o$

$- o < |TC_\alpha(t)C^+_\delta(t')| > oo < \left|TC_\gamma(t_2)C^+_\beta(t_1)\right| > o$

$= \delta_{\alpha\beta}\,\delta_{\gamma\delta} o < |TC_\alpha(t)C^+_\alpha(t_1)| > o\; o < \left|TC_\gamma(t_2)C^+_\gamma(t')\right| > o$

$- \delta_{\alpha\delta}\,\delta_{\gamma\beta}\, o < |TC_\alpha(t)C^+_\delta(t')| > o\; o < \left|TC_\gamma(t_2)C^+_\beta(t_1)\right| > o$

$= (i)^2\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}G^{(0)}(\alpha, t - t_1)G^{(0)}(\gamma, t_2 - t')$

$-(i)^2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\gamma\beta}G^{(0)}(\alpha, t - t')G^{(0)}(\gamma, t_2 - t_1)$ (5.4.8)

Benzer şekilde fononlar için de

$o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_2}(t_2)A_{q_3}(t_3)A_{q_4}(t_4)\right| > o$

$= o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_2}(t_2)\right| > o\; o < |TA_{q_3}(t_3)A_{q_4}(t_4)| > o$

$+ o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_3}(t_3)\right| > o\; o < |TA_{q_2}(t_2)A_{q_4}(t_4)| > o$

$+ o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_4}(t_4)\right| > o\; o < |TA_{q_2}(t_2)A_{q_3}(t_3)| > o$

$= \delta_{q_1+q_2}\delta_{q_3+q_4} o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{-q_1}(t_2)\right| > o\; o < |TA_{q_3}(t_3)A_{-q_3}(t_4)| > o$

$+ \delta_{q_1+q_3}\delta_{q_2+q_4} o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{-q_1}(t_3)\right| > o\; o < |TA_{q_2}(t_2)A_{-q_2}(t_4)| > o$

$+ \delta_{q_1+q_4}\delta_{q_2+q_3} o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{-q_1}(t_4)\right| > o\; o < |TA_{q_2}(t_2)A_{-q_2}(t_3)| > o$

$= \delta_{q_1=-q_2}\delta_{q_3=-q_4} o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{-q_1}(t_2)\right| > o\; o < |TA_{q_3}(t_3)A_{-q_3}(t_4)| > o$

$$+\delta_{q_1=-q_3}\delta_{q_2=-q_4} o<\left|TA_{q_1}(t_1)A_{-q_1}(t_3)\right|>o\, o<|TA_{q_2}(t_2)A_{-q_2}(t_4)|>o$$

$$+\delta_{q_1=-q_4}\delta_{q_2=-q_3} o<\left|TA_{q_1}(t_1)A_{-q_1}(t_4)\right|>o\, o<|TA_{q_2}(t_2)A_{-q_2}(t_3)|>o$$

$$=\delta_{q_1=-q_2}\delta_{q_3=-q_4}D^{(0)}(\boldsymbol{q}_1,t_1-t_2)D^{(0)}(\boldsymbol{q}_3,t_3-t_4)$$

$$+\delta_{q_1=-q_3}\delta_{q_2=-q_4}D^{(0)}(\boldsymbol{q}_1,t_1-t_3)D^{(0)}(\boldsymbol{q}_2,t_2-t_4)$$

$$+\delta_{q_1=-q_4}\delta_{q_2=-q_3}\ D^{(0)}(\boldsymbol{q}_1,t_1-t_4)D^{(0)}(\boldsymbol{q}_2,t_2-t_3) \qquad (5.4.9)$$

Bağıntıları yazılır. Sonuç olarak Wick teoremi bize zamana göre sıralanmış $<|T\ldots.|>$ durumlarının (bra-ketlerin) uygun ikililer seklinde yazılarak her bir ikilinin n_F Fermiyon veya n_B Bozon sayı operatörleri yada pertürbe olmamış Fermiyon veya Bozon Green fonksiyonları $G^{(0)}(\ldots)$, $D^{(0)}(\ldots)$ cinsinden yazılacağını belirtir.

Daha kapsamlı bir örnek olarak (5.1.1.a) ifadesini $n=2$ için göz önüne alalım

$$G(\boldsymbol{p},t-t')=G^{(0)}(\boldsymbol{p},t-t')+\ (-i)^2\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\, o<|TC_p(t)V(t_1)C_p^{+}(t')|>o$$

$$+\frac{(-1)^3}{2!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\int_{-\infty}^{\infty}dt_2\ \ o<|TC_p(t)V(t_1)V(t_2)C_p^{+}(t')|>o \qquad (5.4.10)$$

Etkileşme terimleri de $V=\sum_{q,k}M_qA_qC_{k+q}^{+}C_k$ şeklinde elektron-fonon etkileşme terimleri olsun. Bu etkileşme terimi (5.4.10) ifadesinde yerine yazıldığında $n=1$ terimi $o<\left|TA_q\right|>o$ terimini içeriyor. $A_q|>o=0$ olduğundan , $n=1$ terimi sıfır olacaktır. Buna göre $o<|T\ldots.|>o$ Bra-Keti içindeki tekli durumların hepsi sıfır olacaktır. Bra-ket içindeki operatörlerin sayısı çift ise sıfırdan farklı olacaktır. Buna göre

$$G(\boldsymbol{p},t-t')=G^{(0)}(\boldsymbol{p},t-t')+$$

$$\frac{(-1)^3}{2!}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\int_{-\infty}^{\infty}dt_2\sum_{q_1q_2}M_{q_1}M_{q_2}o<|TA_{q_1}(t_1)\,A_{q_2}(t_2)|>o^{*}$$

$$\sum_{k_1k_2}o<|TC_p(t)C_{k_1+q_1}^{+}(t_1)C_{k_1}(t_1)C_{k_2+q_2}^{+}(t_2)C_{k_2}(t_2)C_p^{+}(t')\,|>o+\cdots \qquad (5.4.11)$$

Yukarıdaki ifadede fonon ile ilgili Bra-ket bir parçacık fonon Green fonksiyonunu verecektir.

$$-i\ o<\left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_2}(t_2)\right|>o=\delta_{q_1=-q_2}D^{(0)}(\boldsymbol{q}_1,t_1-t_2)$$

Elektronla ilgili braketin ise Wick teoremi ve $q_1=-q_2$ olması gerektiği koşulu göz önüne alınarak 6 farklı terimi aşağıdaki gibi yazılır.

$$o<\left|TC_p(t)C_{k_1+q_1}^{+}(t_1)C_{k_1}(t_1)C_{k_2+q_2}^{+}(t_2)C_{k_2}(t_2)C_p^{+}(t')\right|>o$$

$$= o < TC_p(t)C^+_{k_1+q_1}(t_1) > o\ o < TC_{k_1}(t_1)C^+_{k_2+q_2}(t_2) > o\ o < TC_{k_2}(t_2)C^+_p(t') > o$$

$$+ o < TC_p(t)C^+_{k_2+q_2}(t_2) > o\ o < TC_{k_2}(t_2)C^+_{k_1+q_1}(t_1) > o\ o < TC_{k_1}(t_1)C^+_p(t') > o$$

$$+ o < TC_p(t)C^+_{k_1+q_1}(t_1) > o\ o < TC_{k_1}(t_1)C^+_p(t') > o\ o < C^+_{k_2+q_2}(t_1)C_{k_2}(t_2) > o$$

$$+ o < TC_p(t)C^+_p(t') > o\ o < C^+_{k_1+q_1}(t_1)C_{k_1}(t_1) > o\ o < C^+_{k_2+q_2}(t_2)C_{k_2}(t_2) > o$$

$$+ o < TC_p(t)C^+_{k_2+q_2}(t_2) > o\ o < C^+_{k_1+q_1}(t_1)C_{k_1}(t_1) > o\ o < TC_{k_2}(t_2)C^+_p(t') > o$$

$$+ o < TC_p(t)C^+_p(t') > o\ o < TC_{k_1}(t_1)C^+_{k_2+q_2}(t_2) > o\ o < TC_{k_2}(t_2)C^+_{k_1+q_1}(t_1) > o$$

Bir sonraki adım oluşturulan ikililerin Fermiyon sayı operatörüleri n_F veya $G^{(0)}$ cinsinden yazmaktır. Buna göre yukarıdaki eşitlik şu şekilde ifade edilir.

$$(i)^3\delta_{p=k_1+q_1=k_2}G^{(0)}(p,t-t_1)G^{(0)}(p-q_1,t_1-t_2)G^{(0)}(p,t_2-t') +$$

$$(i)^3\delta_{p=k_1=k_2-q_2}G^{(0)}(p,t-t_2)G^{(0)}(p+q,t_2-t_1)G^{(0)}(p,t_1-t') +$$

$$(i)^2\delta_{q_1=0}\delta_{p=k_1}n_F(\varepsilon_{k_2})G^{(0)}(p,t-t_1)G^{(0)}(p,t_1-t') +$$

$$i\delta_{q_1=0}n_F(\varepsilon_{k_1})n_F(\varepsilon_{k_2})G^{(0)}(p,t-t') +$$

$$(i)^2\delta_{q_1=0}\delta_{p=k_2}n_F(\varepsilon_{k_1})G^{(0)}(p,t-t_2)G^{(0)}(p,t_2-t')$$

$$-(i)^3\delta_{k_1=k_2-q_1}G^{(0)}(p,t-t')G^{(0)}(k_1,t_1-t_2)G^{(0)}(k_1+q_1,t_2-t_1) \qquad (5.4.12)$$

5.5 Feynman Diyagramları

Feynmann (5.4.12) türü terimler içeren ifadeleri grafik (çizim) yolu ile göstermek için çok kullanışlı bir yöntem geliştirdi. Bu çizimleri "diyagram"(çizit) olarak adlandırdı. Bu diyagramlar (5.4.12) ile verilen terimlerin fiziksel anlamlarını anlamakta oldukça fayda sağlamaktadırlar. Bu diyagramlar zamana bağlı $G(\boldsymbol{p},t)$ Green fonksiyonları için çizileceği gibi bunların Fourier dönüşümü olan enerjiye bağlı $G(\boldsymbol{p},\ E)$ içinde çizilebilir. Buna göre zaman uzayında elektron Green Fonksiyonu $G^{(0)}(\boldsymbol{p},t-t')$, t' den t ye giden sürekli bir doğru ile temsil edilir. Zaman yönü uygunluk açısından $t > t'$ olarak seçilir. Fonon Green fonksiyonları kesikli bir doğru ile temsil edilirler, bunlarda zaman yönünü belirten ok yoktur. Çünkü $D^{(0)}(\boldsymbol{q},t-t') = -D^{(0)}(-\boldsymbol{q},t'-t)$ dir. $\boldsymbol{q}$ nun $(-)$ işaretlisinin zamanla bir ilgisi yoktur. Bu nedenle fonon i zaman içinde her yöne ilerler görünür. (5.4.12) ifadesindeki $o < C^+_p(t)C_p(t) > o = n_F(\varepsilon_p)$ Teriminin nasıl çizileceğine bakalım. Fermiyonlar için işgal etme sayıları

(occupation numbers) elektron doğrusunun aynı zaman noktasında kapanacak şekilde kapalı bir döngü ($loop$) oluşturacak şekilde oluşturulur. Sekil (5.1). Bu kuralları kullanarak (5.4.12) daki 6 terim Şekil (5.2) deki gibi çizilebilirler. Şekil (5.2) deki (c) , (d), (e) terimleri sıfırdır, çünkü bu terimler fonon dalga vektörü $\boldsymbol{q} = 0$ olması durumunda tanımlıdırlar. $\boldsymbol{q} = 0$ durumu kristal örgüsünün yer değiştirmesi veya kalıcı bir gerilmenin altında olması durumlarında geçerlidir. Halbuki göz önüne alınan Hamiltoniyende böyle bir terim yoktur. Bu nedenle (5.4.3) toplamındaki $\boldsymbol{q} = 0$ terimi toplam dışında tutulmalıdır. Şekil (5.2) deki (a) ve (b) sıfır değildir. Bunların katkıları başlıca öneme sahiptir. Buna göre (5.4.12) denkleminden

$$\frac{(-1)^3}{2!}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \sum_q |M_q|^2 D^{(0)}(\boldsymbol{q}, t_1 - t_2)[G^{(0)}(\boldsymbol{p}, t - t_1) *$$

$$G^{(0)}(p - q, t_1 - t_2)\, G^{(0)}(p, t_2 - t') + G^{(0)}(\boldsymbol{p}, t - t_2) *$$

$$G^{(0)}(p + q, t_2 - t_1) G^{(0)}(\boldsymbol{p}, t_1 - t')) \qquad (5.5.1)$$

Elde edilir. Şekil (5.2) deki (a) ve (b) grafikleri birbirine benziyor, yalnızca $t_1, t_2 , \pm q$ indis sıralamaları birbirinden farklıdır. Bu indisler ise integral alma indisleridir ve yeniden isimlendirilebilirler. Bu yapılacak olursa şekil (5.2) deki iki terimin aynı olduğu görülür. Şekil (5.2) deki (f) terimi

$$G^{(0)}(\boldsymbol{p}, t_1 - t')F_1 \qquad (5.5.2)$$

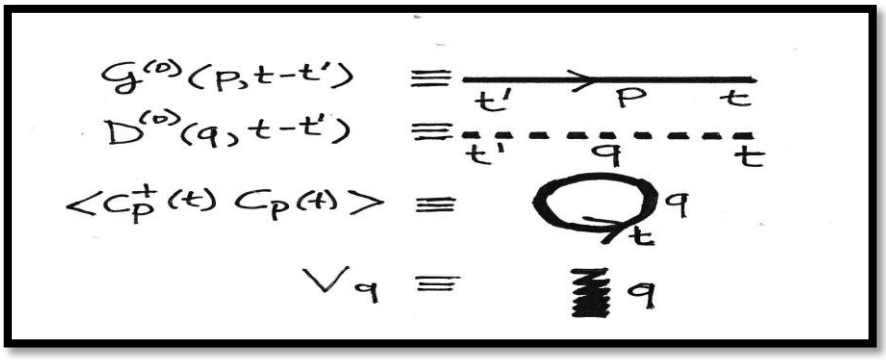
terimidir.

Burada F_1

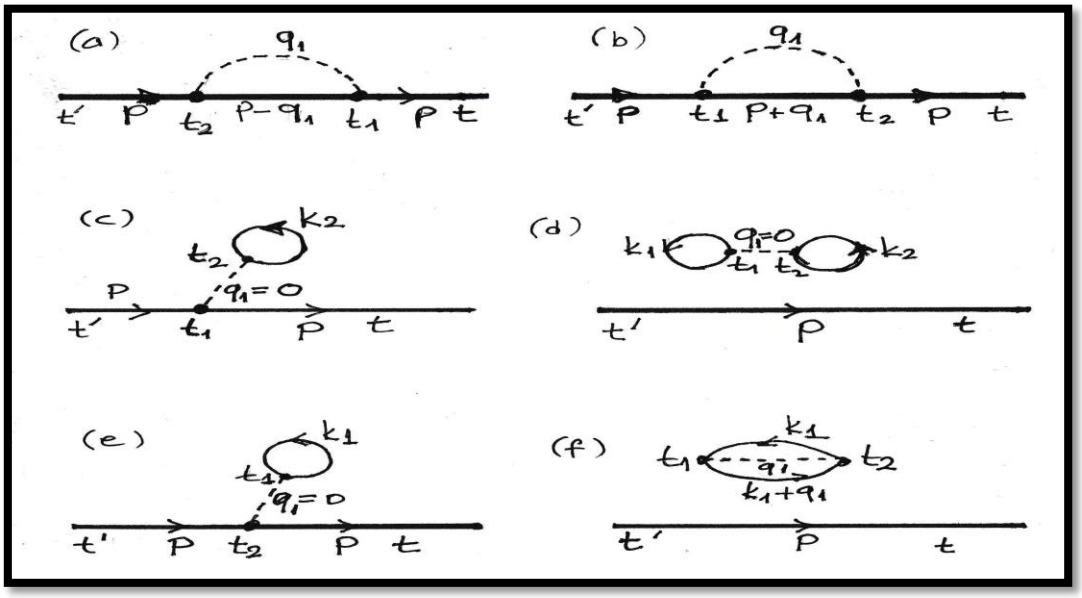
$$F_1 = -\frac{(-1)^3}{2!}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \sum_q |M_q|^2 D^{(0)}(\boldsymbol{q}, t_1 - t_2)[G^{(0)}(\boldsymbol{k}, t_1 - t_2) *$$

$$G^{(0)}(p + q, t_2 - t_1) \qquad (5.5.3)$$

Şeklindedir. Bu diyagramlarda $G^{(0)}(p, t - t')$ Green fonksiyonunu çizgisinin topolojik olarak bağlı olmayan bir kısım vardır. Bu şekilde bütün kısımları birbirine bağlı olmayan "graflar " diyagramlar "disconnected" bağlı olmayan graflar denir. Örneğin şekil (5.4) te (a) grafı bağlı olmayan, (b) grafı (çiziti) bağlı olan (connected) grafları gösterir. (5.5.2) teriminde olduğu gibi bağlı olmayan terimin katkısı bağlı duruma F_1 gibi bir çarpan şeklinde olur.



Şekil 5.1 Green fonksiyonları ve Feynman diyagram karşılıkları[1].



Şekil 5.2 Feynman kuralları kullanarak (5.4.12) bağıntısındaki 6 terimin diyagram gösterimi [1].

$\boldsymbol{Vakum\ Polarizasyon\ Grafları}$ (çizitleri)

Daha önce (5.4.1.a) bağıntısındaki paydadaki göz önüne alınmayan terime tekrar bakalım.

$$o < |S(\infty, -\infty)| > o = \sum_{n=0} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n o < |TV(t_1)V(t_2) \dots V(t_n)| > o$$

Bu ifadeyi elektron-fonon etkileşmelerini göz önüne alarak için $n = 2$ durumu için inceleyelim. $n = 1$ terimi daha önce anlatıldığı gibi sıfır olacaktır.

$$o < |S(\infty,-\infty)| > o = 1 + \frac{(-1)^2}{2!}\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 o < |TV(t_1)V(t_2)| > o + \ldots$$

Burada

$$o < |TV(t_1)V(t_2)| > o = \sum_{q_1 q_2 k_1 k_2} M_{q_1} M_{q_2} o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_2}(t_2)\right| > o * o <$$
$$\left| TC^{+}_{k_1+q_1}(t_1)C_{k_1}(t_1)C^{+}_{k_2+q_2}(t_2)C_{k_2}(t_2)\right| > o$$

Şeklindedir. Wick teoremini kullanarak bu ifade şöyle yazılzbilir.

$$o < \left|TA_{q_1}(t_1)A_{q_2}(t_2)\right| > o = i\delta_{q_1+q_2=0} D^{(0)}(\boldsymbol{q}_1, t_1 - t_2)$$

$$o < \left|TC^{+}_{k_1+q_1}(t_1)C_{k_1}(t_1)C^{+}_{k_2+q_2}(t_2)C_{k_2}(t_2)\right| > o$$

$$= \delta_{q_1=0} n_{k_1} n_{k_2} + \delta_{k_1=k_2-q} G^{(0)}(\, k_1, t_1 - t_2) G^{(0)}(k_1 + q_1, t_2 - t_1) \qquad (5.5.4)$$

(5.5.4) için Feynman diyagramları Şekil (5.3) te gösterilmiştir. Bu şekilde (a) durumu sıfıra eşittir çünkü $q = 0$ fononu yoktur. (b) terimi sonludur ve katkısı

$$o < |S(\infty,-\infty)| > o = 1 + F_1 +$$

şeklindedir F_1 daha önce (5.5.3) bağıntısı ile verilmişti. F_1 terimi şekil (5.3.b) deki gibi kapalı bir çevrimin "$bubble$" ın varlığında veya bundan bağımsız olarak $G(p, t - t')$ nin içinde bağlantılı olmayan "$diskonnected$" diyagramlar olduğunda veya $o < |S(\infty,-\infty)| > o$ ın seri açılımında karşımıza çıkar. $o < |S(\infty,-\infty)| > o$ in seri açılımındaki terimlere "$vakum\ polarizasyon\ terimleri$" denir. Buna göre

$$o < |S(\infty,-\infty)| > o = \sum_{j=0}^{\infty} F_j$$

şeklindedir. Yok etme teoremi "$Cancallation\ Theorem$" olarak adlandırılan teoreme göre paydada bulunan vakum polarizasyon terimleri ile $G(p, t - t')$ nin payında bulunan bağlı olmayan diyagramların katkısı birbirini yok edecektir, bu nedenle yalnızca $G(p, t - t')$ nin içindeki bağlı diyagramların hesaplanması yeterli olacaktır. Buna göre

$$G(p, t - t') = G_C(p, t - t')$$

Şeklinde yazılabilir. Bu teoremin ispatı burada yapılmayacaktır. Bu teorem oldukça faydalıdır çünkü vakum polarizasyon ve bağlı olmayan terimlerin hesaplanmasına gerek olmadığını belirtmektedir. Buna göre bir parçacık Green fonksiyonu bağlantılı diyagramlardan oluşur.

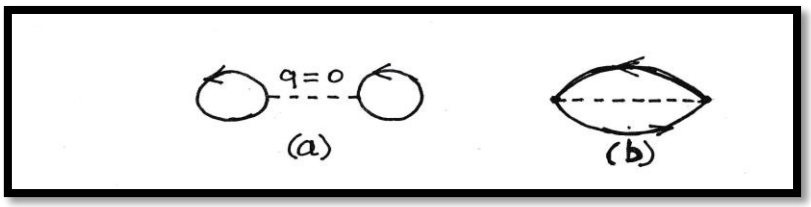
$$G(\boldsymbol{p}, t - t') = -i \sum_{n=0} (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \ldots$$

$\int_{-\infty}^{\infty} dt_n o < \left|TC_p(t)C_p^{+}V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n)\right| > o$ (bağlantılı diyagramlar) (5.5.5)

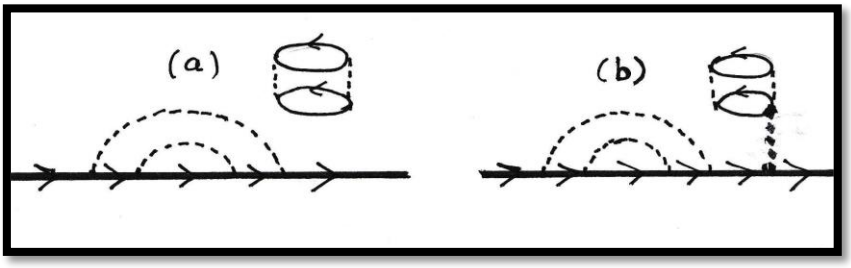
Bir sonraki adım (5.4.1.a) bağıntısında $\frac{1}{n!}$ Terimini atmak olacaktır çünkü n terimli braket içinde $n!$ kere birbirine benzer bağlantılı terimler olacaktır ve bu iki terim birbirini yok edecektir. Buna göre birbirine farklı bağlantılı terimler göz önüne alınır ise

$G(\boldsymbol{p}, t-t') = -i\sum_{n=0}(-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \ldots$

$\int_{-\infty}^{\infty} dt_n o < \left|TC_p(t)C_p^{+}V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n)\right| > o$ elde edilir. (5.5.6)



Şekil 5.3 (a) gibi diyagramların katkısı sıfırdır, (b) gibi diyagramların katkısı F_1 dir.



Şekil 5.4 Farklı bağlantılı durumlar. (a) Bağlantılı olmayan durum, (b) Bağlantılı durum

Burada farklı bağlantılı durumların nasıl belirleneceği sorusu akla gelmektedir. Bu ise biraz dikkatlice davranıldığında çözülecek bir problemdir. Örneğin Şekil (5.2) de (a) ve (b) tamamen aynıdır. Benzer şekilde (c) ve (e) tamamen aynıdır. (c), (d) ve (e) terimlerinin sıfır olduğu daha önce belirtilmişti. (a) ve (b) terimleri uygun integral değişkeni değişimi ile birbirine eşittir bu nedenle tek bir terim olarak alınır ise (f) terimi ile beraber sıfır olmayan farklı iki terimi oluşturur. Bu ise $n = 2$ için $2! = 2$ tane birbirinden farklı diyagram olduğunu gösterir. Daha genel olarak herhangi bir n değeri için $n!$ tane farklı diyagram olduğu söylenebilir.

5.6 Dyson Denklemi

Enerjiye bağlı Green fonksiyonları zamana bağlı Green fonksiyonlarının Fourier dönüşümü alınarak elde edilir, buna göre

$$G(\boldsymbol{p},E)=\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i(t-t')}\,G(\boldsymbol{p},t-t') \tag{5.6.1}$$

Bu zamana bağlı integral pertürbe olmamış durumlar için daha önceden ele alınmıştı. Örneğin boş enerji bandındaki tek elektron için

$$G^{(0)}(p\,,E)=\frac{1}{E-\varepsilon_p+i\delta} \tag{5.6.2}$$

Dejenere elektron gaz içindeki bir Fermiyon için

$$G^{(0)}(p\,,E)=\frac{\theta\left(\xi_{\vec{k}}\right)}{E-\xi_{\vec{k}}+i\delta}+\frac{\theta\left(-\xi_{\vec{k}}\right)}{E-\xi_{\vec{k}}-i\delta}=\frac{1}{E-\xi_{\vec{k}}+i\delta_k}$$

Bulunmuştu. Fourier dönüşümünü S matrisindeki toplam ifadesine uygulanacak olursa

$$G(\boldsymbol{p},E)=-i\sum_{n=0}(-i)^n\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i(t-t')}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\ldots$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}dt_n o<\left|TC_p(t)V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n)C_p^{+}\right|>o \quad \text{(farklı bağlantılı durumlar)}$$

şeklinde ifade edilir. Burada etkileşme terimini yine elektron-fonon etkileşmesi olarak alınacak olursa Şekil (5.2) deki sıfırdan farklı iki terimden biri olan (a) terimi

$$G(\boldsymbol{p},E)=G^{(0)}(p,E)+(-i)^3\sum_q|M_q|^2\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i(t-t')}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\int_{-\infty}^{\infty}dt_2\,*$$

$$G^{(0)}(p,t-t_1)G^{(0)}(p-q_1,t_1-t_2)D^{(0)}(\boldsymbol{q},t_1-t_2)$$

şeklinde olur. Fonon Green fonksiyonu içinde benzer şekilde

$$D(q,w)=\int_{-\infty}^{\infty}dte^{iwt}D(q,t)$$

$$D(q,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dw}{2\pi}e^{-iwt}D(q,w) \tag{5.6.3}$$

ifadeleri yazılabilir.

Pertürbe olmamış fonon Green fonksiyonu olarak

$$D^{(0)}(\boldsymbol{q},t_1-t_2)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dw}{2\pi}e^{-iw(t_1-t_2)}\,D^{(0)}(q,w)$$

ise kalan integral için

$$\int_{-\infty}^{\infty}dtG^{(0)}(p,t-t_1)\,e^{i(t-t_1)E}\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\,e^{i(t_1-t_2)(E-w)}G^{(0)}(p-q,t_1-t_2)\,*$$

$\int_{-\infty}^{\infty}dt_2\,e^{i(t_2-t)E}G^{(0)}(p,t_2-t')$=$(G^{(0)}(p,E))^2G^{(0)}(p-q,E-w)$ yazılabilir, Böylece ilk iki terim ,

$$\mathrm{G}(\mathbf{p},\mathrm{E}) = G^{(0)}(p,E) + (G^{(0)}(p,E))^2 \sum(p,E)^{(1)} \tag{5.6.4}$$

olarak yazılabilir. Burada $\sum(p,E)^{(1)}$ bir-fonon işlemlerinden kaynaklanan elektron "$öz-enerji$" $(self-energy)$ terimidir ve aşağıdaki gibidir.

$$\sum(p,E)^{(1)} = \mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2\pi} \sum_q M_q^2 \, D^{(0)}(q,w) G^{(0)}(p-q, E-w) \tag{5.6.5}$$

Bu terimin hesaplanması burada yapılmayacaktır.

Elektron-fonon etkileşmesinde $n = 4$ için dört tane bağlantılı terim vardır, bunlar iki tane fonon içeren self enerji diyagramlarıdır ve Şekil (5.5) de gösterilmişlerdir. Bu dört terim (5.5.6) ile verilen Green fonksiyonuna sırası ile katkıda bulunurlar. Buna göre bu katkı terimleri aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_4 \{\sum_{qq'} M_q^2 M_{q'}^2, D^{(0)}(\boldsymbol{q}, t_1 - t_2)\, D^{(0)}(\boldsymbol{q}', t_3 - t_4) * \Big[G^{(0)}(p, t - t_1) G^{(0)}(p+q, t_1 - t_2) G^{(0)}(p, t_2 - t_3) G^{(0)}(p+q, t_3 - t_4) \; + \; G^{(0)}(p, t_4 - t') G^{(0)}(p, t - t_1) G^{(0)}(p+q, t_1 - t_3) G^{(0)}(p+q+q', t_3 - t_2) * \; G^{(0)}(p+q', t_2 - t_4) G^{(0)}(p, t_4 - t') + G^{(0)}(p, t - t_1) G^{(0)}(p+q, t_1 - t_3)_* \quad G^{(0)}(p+q+q', t_3 - t_4) G^{(0)}(p+q, t_4 - t_2) G^{(0)}(p, t_2 - t')\Big] + \sum_q M_q^4 \, D^{(0)}(q, t_1 -) D^{(0)}(q, t_3 - t_4) G^{(0)}(p, t - t_1) G^{(0)}(p+q, t_1 - t_4) G^{(0)}(p, t_4 - t') \sum_k G^{(0)}(\boldsymbol{k}, t_2 - t_3) G^{(0)}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}, t_3 - t_2)\}$$

Şekil (5.5) elektron ve fonon Green fonksiyonlarının zaman ve verteks indislerini göstermektedir. Bu terimlerin Fourier dönüşümleri Green fonksiyonlarının enerjiye katkıları olarak alınır buna göre

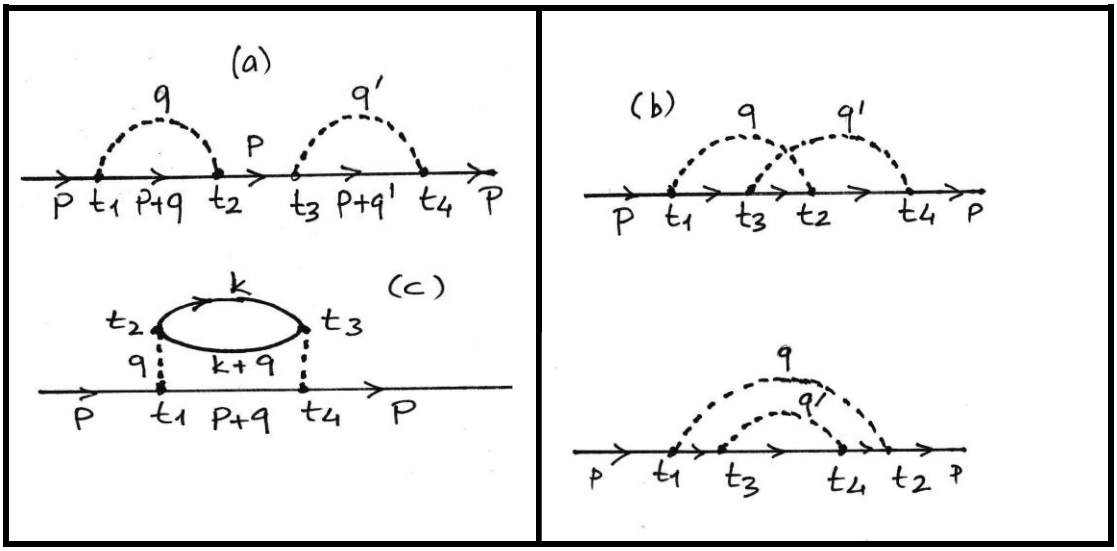
$$(G^{(0)}(p,E))^3 \left(\sum(p,E)^{(1)}\right)^2 +$$

$$(G^{(0)}(p,E))^2 [\sum(p,E)^{(2a)} + \sum(p,E)^{(2b)} + \sum(p,E)^{(2c)}] \tag{5.6.6-a}$$

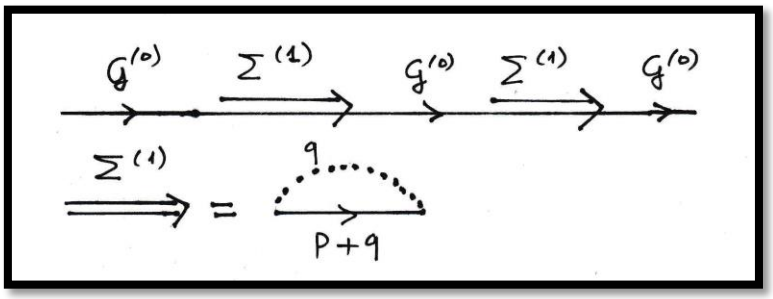
Böylece bunu (5.6.4) ile karşılaştırırsak

$$\mathrm{G}(\mathbf{p},\mathrm{E}) = G^{(0)}(p,E)[1 + G^{(0)}(p,E) \sum(p,E)^{(1)} + \left(\sum(p,E)^{(1)}\right)^2 +$$

$$G^{(0)}(p,E) \left\{\sum(p,E)^{(2a)} + \sum(p,E)^{(2b)} + \sum(p,E)^{(2c)}\right\} + \cdots] \tag{5.6.6-b}$$



Şekil 5.5 Elektron ve fonon Green fonksiyonlarının zaman ve verteks indisleri [1].



Şekil 5.6 $G^{(0)}$ Green fonksiyonu ve iki tane bir-fonon self enerji terimi $\sum(p,E)^{(1)}$

(5.6.6-a) daki birinci terim Şekil (5.5-a) da gösterilmiştir, üç tane pertürbe olmamış $G^{(0)}$ Green fonksiyonu ve iki tane bir-fonon self enerji terimi $\sum(p,E)^{(1)}$ yı kapsar. Şekil (5.6). Bu faktörlerin her biri Şekil (5.6) de gösterildiği gibi Şekil (5.5-a) ya eşlik eder. Benzer şekilde Şekil(5.5) deki son üç terim iki-fonon self enerji terimlerini temsil eden üç integrali kapsar.

$$\sum(p,E)^{(2a)} + \sum(p,E)^{(2b)} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dw}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dw'}{2\pi}\sum_{qq'} M_q^2 M_{q'}^2 D^{(0)}(\boldsymbol{q},w)\, D^{(0)}(\boldsymbol{q}',w') *$$

$$[G^{(0)}(p+q,E+w)G^{(0)}(p+q+q',E+w+w')G^{(0)}(p+q',E+w') +$$

$$G^{(0)}(p+q,E+w)G^{(0)}(p+q+q',E+w+w')G^{(0)}(p+q,E+w) * \qquad (5.6.6\text{-c})$$

$$\sum(p,E)^{(2c)} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dw}{2\pi}\sum_q M_q^4 \left(D^{(0)}(q,w)\right)^2 G^{(0)}(p+q,E+w)*$$

$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw'}{2\pi} \sum_k G^{(0)}(k', w') G^{(0)}(k+q, w+w')$ (5.6.6-d)

(5.6.5) ile tanımlanan self enerji terimleri kullanılarak Dyson denklemi

$$G(\boldsymbol{p}, E) = \frac{G^{(0)}(p,E)}{1-G^{(0)}(p,E)\sum(p,E)} \quad (5.6.7)$$

Şeklinde yazılabilir. Burada

$\sum(p,E) = \sum_j \sum(p,E)^{(j)}$ dir. Şimdiye kadar göz önüne alınan elektron-fonon etkileşmesi 4 tane self enerji terimi verir bunlar şu şekildedir.

$$\sum(p,E) = \sum(p,E)^{(1)} + \sum(p,E)^{(2a)} + \sum(p,E)^{(2b)} + \sum(p,E)^{(2c)} + \cdots$$

$$G = \frac{G^0}{1-G^0\sum(p,E)} = G^0 + (G^0)^2\sum(p,E) + (G^0)^3(\sum(p,E))^2 + \cdots \quad (5.6.8)$$

Buna göre Dyson Teoremi, Green fonksiyonlarının hesaplanmasının $\sum(p,E)$ self enerji teriminin hesaplanması ile bulunacağını belirtmektedir.

$\sum(p,E)$ self enerji terimi sonsuz terimin toplamına sahiptir bu nedenle bu yöntemde self enerji toplamındaki birkaç terimin yeterli olacağı durumlar için bu yöntemi uygulamak daha uygundur. Birkaç terimin yeterli olmadığı durumlar için ya toplamın yapılması için yeni bir yöntem uygulanmalı yada problemin incelenmesi için yeni bir yöntem uygulanmalı. Bu nedenle Dyson denklemi genellikle zayıf bağlantılı "$week\ coupling$" etkileşmeye sahip durumlar için daha uygundur. Güçlü bağlantılı "$Strong\ coupling$" etkileşme durumları için Dyson denklemi ayrıca oluşturulmalıdır.

Dyson denklemi birkaç değişik şekilde yazılabilir fakat bunların hepsi birbirine özdeştir.

Bir enerji bandındaki elektron için

$$G^0(\boldsymbol{p}, E) = \frac{1}{E-\varepsilon_p+i\delta}, \quad G(\boldsymbol{p}, E) = \frac{1}{E-\varepsilon_p+i\delta-\sum(p,E)} \quad (5.6.9)$$

Elektron sıfır sıcaklıktaki Fermi denizinde ise

$$G^0(\boldsymbol{p}, E) = \frac{1}{E-\varepsilon_p+i\delta_p}, \quad G(\boldsymbol{p}, E) = \frac{1}{E-\varepsilon_p+i\delta_p-\sum(p,E)} \quad (5.6.10)$$

Şeklindedir. Green fonksiyonundaki sonsuz küçük δ_p terimi $\varepsilon_p > 0$ ve $\varepsilon_p < 0$ durumlarına göre işaret değiştirir. Buna göre $ImG^0(p,E)$ de $E > 0$ ve $E < 0$ durumlarına göre işaret değiştirir. Self enerji teriminin

$$\sum(p,E) = (\sum(p,E))_R + i(\sum(p,E))_{Im} \quad (5.6.11)$$

Gibi reel ve sanal bileşenleri vardır. Bu terimin sanal kısmı $E = 0$ da işaret değiştirir.

$(\sum(p,E))_{Im} < 0$ dır $E > 0$ ise, $(\sum(p,E))_{Im} > 0$ dır $E < 0$ ise. δ_p deki işaret değişiminin nedeni Fermi denizindeki elektron uyarımlarının $(\varepsilon_p > 0)$ ve boşluk uyarımlarının $(\varepsilon_p < 0)$ olması sonucunda oluşmaktadır. Fermi denizindeki etkileşmeler göz önüne alındığında aynı etki $\sum(p,E)$ terimi için de geçerlidir. (5.6.9) daki bir parçacık Green fonksiyonu için $(\sum(p,E))_{Im} < 0$ değerine sahiptir, bu nedenle paydadaki sanal terim her zaman aynı işaretlidir. Elektron self enerji terimi bazen kütle operatörü *"mass operatör"* olarak adlandırılır.

Fonon Green fonksiyonları da benzer Dyson denklemine sahiptirler.

$$D(q,w) = \frac{D^0(q,w)}{1 - D^0(q,w)\prod(q,w)} \quad (5.6.12)$$

Bu ifadede $D^0(q,w)$ nın

$$D^0(q,w) = \frac{2w_q}{w^2 - w_q^2 + i\delta} \quad (5.6.13)$$

tanımlanırsa

$$D(q,w) = \frac{2w_q}{w^2 - w_q^2 + i\delta - 2w_q\prod(q,w)} \quad (5.6.14)$$

şeklinde yazılır. (5.6.12) deki $\prod(q,w)$ fonon öz-enerji terimi bazen "*polarizazyon operatörü*" olarak adlandırılır. Bu isim oldukça doğru bir tanımlamadır, çünkü fononlardan gelen self enerji terimi ortamın polarize olmasını sağlar. $\sum(p,E)$ elektron self-enerji terimi ve $\prod(q,w)$ fonon self-enerji terimlerinin reel ve sanal kısımlarının incelenen sistem için farklı etkileri vardır. Bu terimlerin sanal kısımları parçacık hareketinin sönümlenmesine neden olurlar, bu nedenle parçacık uyarımlarının (*eksitasyonlarının*) ortalama serbest yollarının sonlu olması veya uyarımların enerji ve momentumlarının belirsizlikleri ile ilgilidirler. Reel kısımlar ise uyarımların enerji değerlerinin kaymasına karşılık gelirler, bu nedenle uyarımların dinamik özelliklerini değiştirirler. Böylece uyarımların etkin kütlesi, grup hızları gibi fiziksel özellikleri self enerji teriminden dolayı bir değişime sahip olurlar.

5.7 Feynman Diyagramlarının Oluşturulmasının Kuralları

Green fonksiyonlarına ait diyagramları çizmek için daha öncede belirtildiği gibi (5.2) konusunda anlatılan S matrisi seriye açılmalı bu açılımda hangi diyagramların bağlantılı (connected) olduğuna karar verilmeli, bunların dışındakilerinin katkıları sıfır olacaktır. Daha sonra Fourier dönüşümü yolu ile self enerji terimleri bulunmalıdır. Bu işlemleri yapmadan self enerji terimleri için birtakım basit kurallar tanımlayarak Green fonksiyonu hesaplanabilir. (5.6.5) ve (5.6.6) ile verilen self enerji terimleri bu yeni kurallara göre basitçe ifade edilebilir. Bu işlemler yapılırken zor olan tek şey frekanslar üzerinde integral alınması işlemidir. Bu zorluluğun aşılabileceğini varsayarak, ifade edilen kuralları şöyle sıralayabiliriz. (Şekil 5.1 ve 5.6 da ki çizimler de göz önüne alınarak)

1- Bütün fonon, elektron ve Coulomb etkileşmeleri için self enerjileri çiz.

2- Her elektron çizgisi için

$G^0_{\alpha\beta}(p,E) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{E-\varepsilon_p+i\delta_p}$

Green fonksiyonınu tanımla, burada $\delta_{\alpha\beta}$ fonksiyonu spin indislerini belirler ve elektron çizgisinin her iki ucunun aynı spin değerinde olmasını sağlar. Spinlerin göz önünde olduğu problemlerde bu özellik önemlidir. δ_p terimi elektron bandı içindeki δ yı belirler ve sıfır sıcaklıkta dejenere elektron gaz sisteminde $\delta sgn(\varepsilon_p)$ şeklindedir.

3- Her fonon çizgisi için $D^0(q,w) = \frac{2w_q}{w^2-w_q^2+i\delta}$ fonon Green fonksiyonunu (propagatörünü) tanımla. Ayrıca her Green fonksiyonu için $\frac{M_q^2}{V}$ terimini ekle, burada M_q elektron-fonon etkileşme matrisi, V ise hacimdir.

4- Her Coulomb etkileşmesi için $v_q = \frac{4\pi e^2}{q^2 V}$ terimini ekle. Coulomb etkileşme terimleri düşey spiral veya testere dişli eğrilerle ifade edilmeli. Coulomb etkileşmelerinin zaman içinde anlık olduğu düşünülmeli ve zaman çizgisi yatay şekilde soldan sağa doğru değişeceği varsayılmalıdır. İsteniyorsa Coulomb etkileşmesi yatay doğrultuda zaman çizgisi düşey doğrultuda da seçilebilir.

5- Her kesişim ($"vertex$) noktasında enerji ve momentum korunumunu sağlanmalı. Böylece her kesişim noktasında ve etkileşmelerin tanımlandığı noktalarda bu korunum yasalarını göz önüne alacak şekilde indislerin yazılımına dikkat edilmeli.

6- Enerji, momentum, spin gibi iç serbestlik dereceleri için toplam alınmalı. Böylece eğer $\sum(p,E)$ self enerji terimi hesaplanıyor ise p ve E dışındaki tüm momentum ve enerjiler iç serbestlik dereceleri olacaktır, bu nedenle bunların toplamı yapılmalıdır.

7- Bu adıma gelene kadar elde edilen sonucu

$\frac{(i)^m}{(2\pi)^{4m}}(-1)^F(2S+1)^F$ terimi ile çarpılmalı. Burafa F kapalı lopların(döngülerin) sayısıdır. m indisinin seçimi şu şekildedir.

i- Elektron self enerjisi için m içerilen fonon ve Coulomb çizgilerinin sayısıdır. (5.6.5) için $m=1$, (5.6.6-c) için $m=2$ dir.

ii- Fonon self enerjisi için m köşelerin ("$vertices$") sayısına eşittir.

Sipini S olan bir parçacık için $(2S+1)$ terimi bu sipine ait m_s değerlerinin toplamından gelir. $v\to\infty$ olduğunda dalga vektörü üzerinde toplam integrale dönüşür bu nedenle $(2\pi)^{-4}$ terimi gelir. Sonlu boyutlu v hacmi için kutu normalizasyonu yapıldığında $\frac{(i)^m}{(2\pi)^{4m}}(-1)^F(2S+1)^F$ sonucu elde edilir.

Buraya kadar foton etkileşmelerinden bahsedilmedi, fonon etkileşmeleri içinde kurallar tanımlanırsa konu tamamlanmış olur. Foton çizgileri yüklü parçacıkları temsil eden çizgilerin arasında çizilir. Foton çizgileri noktalı çizgiler şeklinde ifade edilirler ve genel olarak fonon çizgilerine benzerler. Yüklü parçacıkların foton ile etkileşmesi, bu sistemlerin Hamiltoniyeninde gösterilen iki olası terimle ifade edildiği gibi etkileşirler. Bunlardan birincisi $\vec{J}.\vec{A}\equiv \boldsymbol{j}.\boldsymbol{A}$ terimidir. Serbest parçacık için bu terim

$$\frac{1}{c}e\sum_{\boldsymbol{j}}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r_i}).\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r_i})=e\sum_{q\mu}j_\mu(\boldsymbol{q})\,A_\mu(q)=\frac{e}{m}\sum_{q\mu}A_\mu(\boldsymbol{q})\sum_{k\sigma}(k+\frac{1}{2}q)_\mu C^+_{k+q,\sigma}\,C_{k,\sigma}$$

Şeklindedir. Bu terimden dolayı diyagramlar için bir sonraki kural şudur.

8- Parçacıklarla $\boldsymbol{j}.\boldsymbol{A}$ yolu ile etkileşen her foton çizgisi için

$\frac{e}{m}\sum_{\mu\gamma}\left(k+\frac{1}{2}q\right)_\mu D_{\mu\gamma}(q,w)(k'+\frac{1}{2}q)$

terimini ekle. Burada $D_{\mu\gamma}(q,w)$ terimi foton Green fonksiyonu , k ve k' ise iki köşede saçılan parçacıkların dalga vektörüdür.

Yüklü parçacıkların fotonlarla etkileşmesinin ikinci olası bir durumu da

$$\frac{e^2}{2mc^2}\sum_i A^2(r_i)-\frac{e^2}{2m}\sum_{qk\mu}\rho(q)A_\mu(k)A_\mu(q-k)$$

şeklindedir. Bu terimden dolayı self enerji terimine gelen katkılar n_0 yüklü parçacıkların sayı yoğunluğu olmak üzere $\frac{e^2 n_0}{m}$ dir. Bazı farklı kitaplarda foton Green fonksiyonunun değişik ifade biçimleri vardır. Burada foton green fonksiyonu

$$D^0(q,w) = \frac{w_q^2}{w^2 - w_q^2 - i\delta}$$

Şeklinde ifade edecek olursak, diyagramları oluşturma kurallarına göre bu ifade her verteks çifti için $\frac{2M_q^2}{w_q v}$ terimi ile çarpılmalıdır böylece fotonlardan gelecek toplam katkı

$$\frac{1}{v}\frac{2w_q M_q^2}{w^2 - w_q^2 - i\delta}$$

şeklinde olacaktır. (5.6.5) ve (5.6.6) ile verilen fonon-elektron etkileşmesi örneğini daha detaylı inceleyelim. Buna ait bazı self enerji diyagramları Şekil (5.7) de verilmiştir. Elektron-fonon etkileşmesinde self enerji terimine yapılan katkıya örnek olarak kapalı fermiyon döngüsünü (loop) alalım Şekil (5.7-a). Burada kural 7 ye göre $F = 1$ dir. Bu terimin katkısı

$$\prod(q,w) = M_q^2 P^{(1)}(q,w)$$

$$P^{(1)}(q,w) = -i2\int \frac{dE}{2\pi}\int \frac{d^2p}{(2\pi)^3} G^0(p,E)G^0(p+q,E+w)$$

şeklindedir. Diğer fonon self enerji terimi katkısı latis anharmonisinden gelir ve iyon Hamiltoniyenininde fonon yerdeğiştirmesinin üçüncü kuvveti ile orantılı bir etkileşme terimine neden olur. Buna göre

$$V = \sum Q_i^3 V_i = \sum_{qq'} M_{qq'} A_q A_{q'} A_{-q-q'}$$

Şeklindedir. Self enerji terimi ise

$$\prod(q,w)^{(1)} = i\int \frac{dw'}{2\pi}\int \frac{d^3q'}{(2\pi)^3}\left|M_{q,q'}\right|^2 D^0(q',w')D^0(q+q',w+w') \qquad (5.7.1)$$

Bir sonraki durum elektron self enerjisine elektron-elektron etkileşmelerinden gelen katkıları göz önüne almaktır. Şekil (5.7-b) de gösterilen self enerji terimi "perdelenmemiş değiş-tokuş enerjisi" (unscreened exchange energy) olarak adlandırılır ve elektron enerjisine katkısı çok önemlidir. Bu terimin self enerjisi

$$\sum(p,E) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int dw \int d^3q V_q G^0(p+q,w+E) \qquad (5.7.2)$$

şeklinde yazılabilir. Bu terimi

$$i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dw}{2\pi}\,G^0(p+q,w+E)=-n_F(\varepsilon_{p+q}) \qquad (5.7.3)$$

eşitliğini kullanarak daha sade yazabiliriz. (5.7.3) eşitliği Green fonksiyonunun Fourier dönüşümü yardımı ile ispatlanabilir.

$i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dw}{2\pi}\,dte^{it(w+E)}G^0(p+q,t)$ ve $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dw}{2\pi}\,dte^{itw}=\delta(t)$

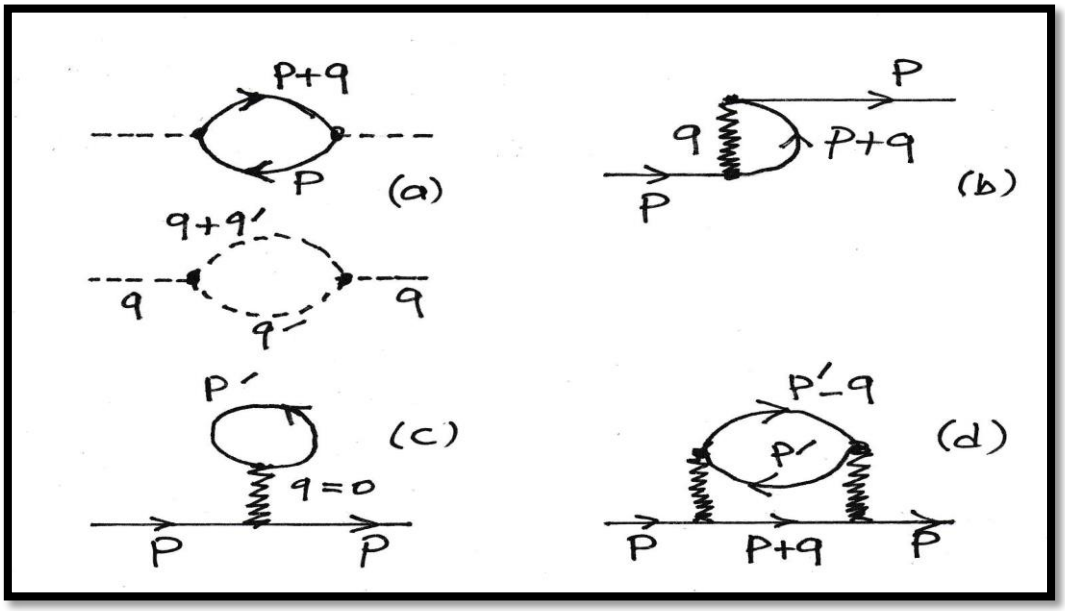
ise, böylece,

$$i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dw}{2\pi}\,G^0(p+q,w+E)=iG(p+q,t=0)$$

Bu eşitliğin sağ tarafında bir tutarsızlık var, çünkü Green fonksiyonu zaman sıralamasını içeren bir fonksiyondur. Buna göre $t=0$ için sağdan ve soldan yaklaşıldığında farklı değerler bulunur. Buna göre

$$G^0(p+q,t\to 0^+)=-i<C_{p+q}C_{p+q}^+>=-i[1-n_F(\varepsilon_{p+q})] \qquad (a)$$

$$G^0(p+q,t\to 0^-)=i<C_{p+q}^+C_{p+q}>=in_F(\varepsilon_{p+q}) \qquad (b)$$



Şekil 5.7 Bazı self enerji terimlerinin diyagram gösterimleri[1].

olacaktır. Daha önceden zaman sıralamasının soldan sağa doğru olacağı kuralına göre bu iki durumdan (b) durumu seçilmelidir. Buna göre (5.7.3) durumu kanıtlanmış olur. Buna göre x indisi değiştokuş ifadesini belirtmek üzere bu terim için self enerji ifadesi

$$\sum_x(p)=-\frac{1}{v}\sum_q V_q n_F(\varepsilon_{P+q}) \qquad (5.7.4)$$

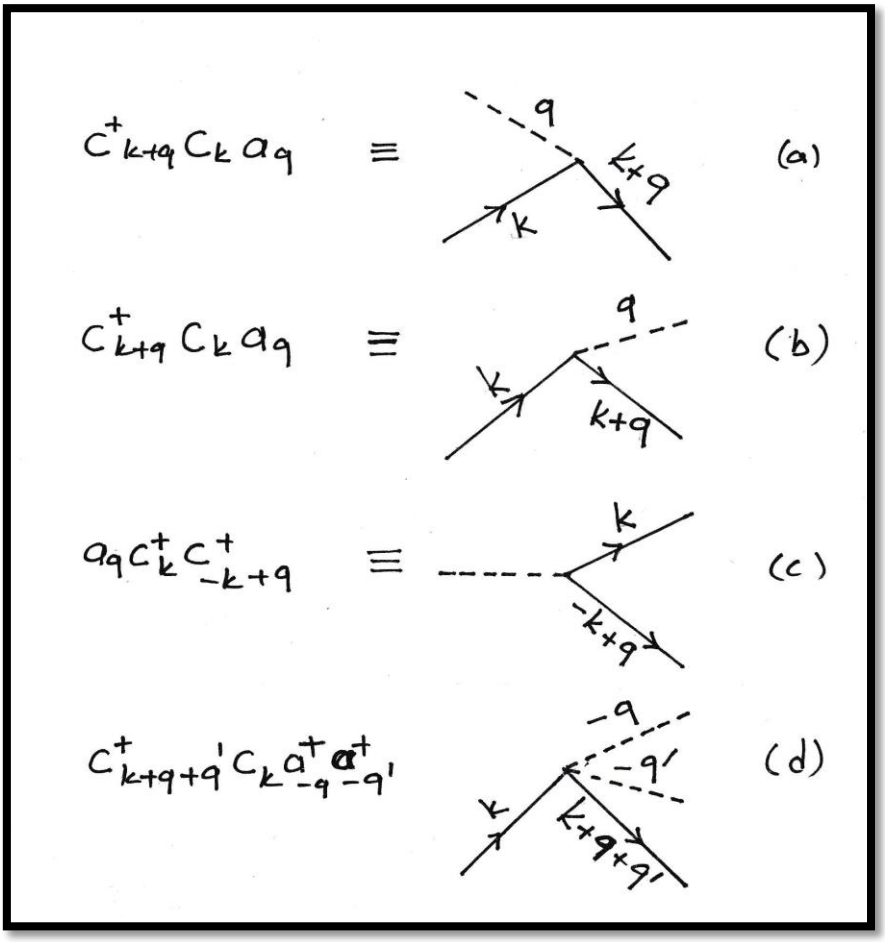
şeklinde basitçe yazılır. Bu ifadede görüleceği gibi self enerji E ye doğrudan bağlı değildir. Bir sonraki self enerji terimi şekil (5.7-c) de gösterilen elektron elektron etkileşmesinden gelmektedir. Bu terim Hartree terimi olarak ta isimlendirilir.

$$\sum_H(p,E) = -\frac{2i}{(2\pi)^4}\int dE'\, d^3p'\, V_{q=0}G^o(p',E')$$

Burada (5.7.3) tanımı kullanılarak

$$\sum_H(p,E) = 2V_{q=0}\sum_{p'} n_F\left(\varepsilon_{p'}\right) = V_{q=0}N$$

yazılabilir, Burada N elektron sayısıdır. $V_q = \frac{4\pi e}{q^2 v}$ olduğundan ve $\lim_{q\to 0} \to \infty$ olacaktır. Bu terim perdelenmemiş Coulomb terimidir ve elektron sistemindeki bütün diğer elektronlarla etkileşmeyi içerir. Sistemde $N \to \infty$ için ∞ olur. Fakat bu terim aynı



Şekil 5.8 Bazı etkileşme terimleri ve diyagram gösterimleri

zamanda toplamda nötral olan sistemde bu terime eşit miktarda olan elektron-pozitif yük etkileşmesine eşit olmalı. Bu nedenden dolayı bu iki terimin toplamı ıraksama problemini ortadan kaldırır.

Son olarak kullanılan Hamiltonyenlerdeki terimlerin çizimlerine birkaç örnek Şekil (5.8) da verilmiştir. (a) ve (b) elektron foton etkileşmesinin (köşesinin) (vertices) iki farklı durumunu göstermektedir. Her iki durumda $\boldsymbol{k}$ durumundaki elektron yok edilir (gelen ok çizgisi) ve $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ da tekrar yaratılır (çıkan ok çizgisi) Bütün elektron foton etkileşmeleri bu temel diyagramlar kullanılarak oluşturulur. (c) durumundaki bir fotonun iki elektron oluşturduğu durumları çizmeyeceğiz , çünkü bu terimler Hamiltoniyeniyende yer almaz. Bu olay özel olarak incelenmelidir. Aynı zamanda (d) durumunda gösterilen bir elektron saçılmasında iki fotonun salındığı durumu da göz önüne almayacağız. Burada önemli olan incelenen Hamiltonyendeki terimlere göre hangi tür ikili köşelerin $(vertices)$ oluşacağının belirlenmesidir.

5.8 Green Fonksiyonlarının Spectral Gösterimi

Daha önce $t > t'$ için tanımlanan Green fonksiyonuna tekrar dönelim,

$$G(k,t-t') = -i < TD|c_k(t)c_k^+(t')|TD > \quad t > t' \tag{5.8.1}$$

Burada $|TD >= |GS >= | >$ taban durumu (ground state) belirtmektedir.

N parçacıklı sistem için $\sum_{\Phi_n}|\Phi_n >< \Phi_n| = 1$ Koşulunu sağlayan $|\Phi_n >$ baz kümesi kullanılarak yukarıdaki Green fonksiyonu

$$G(k,t-t') = \sum_{\Phi_n} -i < TD|c_k(t)|\Phi_n >< \Phi_n|c_k^+(t')|TD > \tag{5.8.2}$$

şeklinde yazılır. Aynı zamanda

$e^{iHt}|TD >= e^{-iE_0t}|TD >$, $e^{-iHt}\ |\Phi_n >= e^{-iE_nt'}|TD >$ ve $c_{n0}(k) =< TD|c_k|\Phi_n >$ ise

(5.8.2) denklemi $G(k,t-t') = -i\sum_n |c_{0n}(k)|^2 e^{i(E_n-E_0)(t-t')} \quad (t > t')$

şeklinde yazılabilir. Benzer işlemler $t < t'$ içinde yapılabilir buna göre,

$$G(k,t-t') = \begin{cases} -i\sum_n |c_{0n}(k)|^2 e^{i(E_n-E_0)(t-t')} & t > t' \\ i\sum_n |c_{n\prime 0}(k)|^2 e^{i(E_{n\prime}-E_0)(t-t')} & t < t' \end{cases} \tag{5.8.3}$$

Sistemde taban durumunda N tane parçacık olsun böylece

$c_{n0}(k) =< TD|c_k|\Phi_n >$ yalnızca $N+1$ ise sıfırdan farklı olacaktır, benzer şekilde $c_{n\prime 0}$ ise $|\Phi_{n\prime} >$ terimi $N-1$ ise sıfırdan farklı olacaktır. Buna göre

$\varepsilon_n = E_n - E_0(N+1)$, $\mu = E_0(N+1) - E_0 N$

tanımları yapılacak olursa termodinamik limit durumunda

$$G(k,t-t') = \begin{cases} -i\sum_n |c_{0n}(k)|^2 e^{-i(\mu+\varepsilon_n)(t-t')} & t > t' \\ i\sum_n |c_{n'0}(k)|^2 e^{i(\mu-\varepsilon_n)(t-t')} & t < t' \end{cases} \quad (5.8.4)$$

Yazılabilir. Bu fonksiyonun Fourier dönüşümü alındığında Green fonksiyonu momentum, enerji uzayında tanımlanır. Buna göre,

$$G(k,w) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{iw(t-t')} G(k,t-t') \quad (5.8.5)$$

tanımlanır. δ yeteri kadar küçük bir reel sayı olmak üzere

$$\int_{-\infty}^{0} e^{-i\alpha t} = \frac{-i}{\alpha - i\delta} \quad , \quad \int_0^{\infty} e^{-i\alpha t} = \frac{i}{\alpha + i\delta}$$

bağıntıları yardımı ile (5.8.5) integrali $t > t'$ ve $t < t'$ şeklinde ikiye ayrılabilir. Buna göre,

$$G(k,w) = \sum_n \frac{|c_{0n}|^2}{w - \varepsilon_n - \mu + i\delta} + \sum_{n'} \frac{|c_{n'0}|^2}{w - \varepsilon_{n'} - \mu - i\delta} \quad (5.8.6)$$

Şeklinde yazılabilir. Şimdi spektral fonksiyonlar olarak ta tanımlanan

$$A^+(k,w) = \sum_n |c_{0n}|^2 \delta(E - \varepsilon_n) \quad (5.8.7)$$

$$A^-(k,w) = \sum_{n'} |c_{n'0}|^2 \delta(E - \varepsilon_{n'})$$

Fonksiyonlar tanımlanırsa $A^+(k,w)$ için $c_{n0}(k) = < TD|c_k|\Phi_n >$ ifadesinde $|\Phi_n >$ durumu k momentumuna sahipse tanımlı, yoksa sıfır olacaktır. Buna göre $< TD|c_k|\Phi_n >$ ifadesinde $c_k|\Phi_n >$, k momentumlu durumu yok eder böylece $|TD >$ elde edilir. Taban durumu momentum taşımaz. Böylece A^+ kabaca kaç durumun k momentumuna sahip olduğunu belirler. Benzer şekilde A^- boşluk momentumu ve enerjisini belirler. $\varepsilon_n > 0$ olduğunda A^+ ve A^- $E > 0$ için sıfırdan farklı olacaktır. Buna göre $A(k,w)$ spektral fonksiyonu

$$A(k,w) = \begin{cases} A^+(k,w) & w > 0 \\ A^-(k,w) & w < 0 \end{cases} \quad \text{veya} \quad A(k,w) = A^+(k,w) + A^-(k,w)$$

$$= \sum_n |< \Phi_n|c_k^+|TD >|^2 \delta(w - \varepsilon_n) + \sum_n ||< \Phi_n|c_k|TD >|^2 \delta(w + \varepsilon_n) \quad (5.8.8)$$

şeklinde ifade edilir. $A(k,w)$ cinsinden Green fonksiyonu

$$G(k,w) = \int_0^{\infty} \{ \frac{A^+(k,E)}{w - E - \mu + i\delta} + \int_0^{\infty} \frac{A^-(k,E)}{w + E - \mu - i\delta} \} dE \quad (5.8.9)$$

olarak tanımlanır. Bu ifade "$Spectral\ Gösterim$" veya "$Lehmann\ Gösterimi$" olarak adlandırılır. $G(k,w)$ nın imajiner(sanal) kısmının

$ImG(k,w) = \begin{cases} -\pi A^{+}(k, w-\mu) & , w > \mu \\ \pi A^{-}(k, w-\mu) & , w < \mu \end{cases}$ olduğu açıktır. (5.8.9) ile verilen spektral gösterime göre "Gecikmiş" (retarded) $G_R(k,w)$ ve "İlerlemiş" (advanced) $G_A(k,w)$ Green fonksiyonları için $G_R(k,w)$ şöyledir.

$$G_R(k,w) = \int_0^{\infty} \{ \frac{A^{+}(k,E)}{w-E-\mu+i\delta} + \int_0^{\infty} \frac{A^{-}(k,E)}{w+E-\mu-i\delta} \} dE \qquad (5.8.10)$$

Bu ifadenin (5.8.6) bağıntısından tek farkı ikinci terimdeki $i\delta$ teriminin işaretinin artı olmasıdır. Bu ise Green fonksiyonunun analitiklik özelliği ile ilgilidir. $t > t'$ için $G_R(k,w)$ kompleks düzlemin üst yarısında analitiktir, sabit bir k için w dan kaynaklanan bütün tekil noktalar alt yarı düzlemdedir. $G_R(k,w)$ nin spektral fonksiyonlar cinsinden ifadesi,

$$A(k,w) = -\frac{1}{\pi} ImG_R(k, w-\mu) \qquad (5.8.11)$$

sistemde ölçümler Fermi enerjisine göre ($\mu = 0$) yapıldığında

$A(k,w) = -\frac{1}{\pi} ImG_R(k,w)$ olur. Ayrıca . $G_R(k,w)$ ile $G(k,w)$ arasında

$-i\delta = \begin{cases} G(k,w) & , \ w > \mu \\ G^{*}(k,w) & , \quad w < \mu \end{cases}$

şeklinde bir bağıntı vardır. Aynı zamanda $G_R(k,w) = G(k, w-i\delta)$ yazılabilir.

$-i\delta$ terimi (5.8.5) ve (5.8.10) eşitliklerine göre Fourier dönüşümü alındığında gelmiş oldu.

$t < 0$ için $-i\delta$ ve $t > 0$ için $+i\delta$ olacaktır.

Ters Fourier dönşümü ile tekrar konum-zaman Green fonksiyonuna dönülür ise

$$G_R(r-r', t-t') = \begin{cases} -i < \Psi(r,t)\Psi^{+}(r',t') + \Psi^{+}(r',t')\Psi(r,t) > & t > t' \\ 0 & t > t' \end{cases}$$

veya farklı zamanlara ait durumların anti-komütasyonu cinsinden

$$G_R(r-r', t-t') = \begin{cases} -i < \{\Psi(r,t), \Psi^{+}(r',t')\} > & t > t' \\ 0 & t > t' \end{cases} \qquad (5.8.12)$$

şeklinde yazılabilir. Benzer şekilde $G_A(r-r', t-t')$ için

$G_A(r-r',t-t') = \begin{cases} 0 & t > t' \\ i < \{\Psi(r,t), \Psi^+(r',t')\} > & t < t' \end{cases}$ ifadesi elde edilir. Bu iki fonksiyon karşılaştırıldığında $G_R(r-r',t-t') = {G_A}^*(r-r',t-t')$ olduğu görülür.

$G(k,w)$ nın tekilliklerine biraz daha detaylı bakalım. Daha önce serbest Green fonksiyonu için

$$G^0(k,w) = \frac{1}{w-\xi_k+i\delta sgn\xi_k} \tag{5.8.13}$$

şeklinde olduğu verilmişti. $(E = w)$ bu ifade $w = \xi_k$ da tekilliğe sahiptir. Bu tekillik (keskin maksimum) spektrumda tek parçacık uyarımına karılık gelir. Bu durum daha da genelleştirilebilir buna göre,

$G(k,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2\pi} e^{-iwt} G(k,w)$ ise, bu intergral bölgelere ayrılabilir böylece

$-\infty < w < 0 \;\; ise\; G = G_A \;\; , 0 < w < \infty \;\; ise\; G = G_R$

olur. Bu durumda G_R üst kompleks düzlemde analitik, alt kompleks düzlemde bir tekilliğe sahiptir. Bu tekillik $w = \epsilon(k - i\gamma)$ değerinde olsun, buna göre kompleks değişkenler için "rezidü " (kalan) yöntemi kullanılarak,

$$G(k,t) \sim a e^{i\epsilon(k)t} e^{-\gamma t} \tag{5.8.14}$$

elde edilir. Bu ifadede daha öncede belirtildiği gibi k momentumuna sahip bir durumun

$t = 0$ dan t ye kadar iletim(propagasyon) olasılık genliğine karşılık gelir. $G(k,t)$ fonsiyonu aynı zamanda enerjisi $\epsilon(k)$ olan quasi-parçacığın $\left(\frac{1}{\gamma}\right)$ yaşam ömrü boyunca bozunumunu ifade eder. Sonuç olarak $G(k,w)$ Green fonksiyonu tek parçacıkların kuasi-parçacık spektrumlarını verir. $G(k,w)$ nın reel(gerçel) kısmı kuasi-parçacık uyarımlarının enerjisini, sanal kısmı ise yaşam ömürlerinin tersi olan $(\frac{1}{\tau})$ yi verir. Böylece deneysel ve kuramsal çalışmalardan elde edilen sonuçların karşılaştırılması yapılabilir.

5.9 Lineer Respons (Doğrusal Tepki) Teorisi

Fizikteki temel problemlerden birisi bir sisteme bir dış etki (alan) uygulandığında sistemin bu etki altındaki değişiminin (tepkisini) ne olacağının bulunması problemidir. Buna göre bir sisteme etkiyen dış etkiye (alana) göre bu tepki fonksiyonları elektrik iletkenlik, manyetik alınganlık, ve dielektrik fonksiyonları şeklinde olabilir. Bu bölümde "$tepki\; fonksiyonları$" (response functions) ile Green fonksiyonları arasındaki ilişki incelenecektir.

Bir dış alan içine konulmuş sistemin Hamiltoniyeni

$$H = H_0 + V_d \tag{5.9.1}$$

şeklinde olsun, Burada H_0 dış etki sıfır olduğunda sistemi temsil eden kısım, V_d ise sistem ile dış alan arasındaki etkileşme terimi olsun. Sıfır sıcaklık veya genel olarak sonlu sıcaklık Green fonksiyonları denge durumu için hesaplanır. Sisteme dış alan uygulandığında sistem denge durumundan uzaklaşacağı için bu durum da hesap yapmak kolay değildir, bu nedenle sisteme etkiyen dış alanın zayıf olduğunu ve sisteme etkisinin pertürbasyonu (tedirgeme) teorisin uygulanacağı kadar önemli olduğu varsayılır ise bu durum $Lineer\ respons\ teorisi$ ($Lineer\ response\ theory$) olarak adlandırılır. Buna göre dış etki bir pertürbasyonu terimi olarak alınır ve lineer olmayan terimler göz önüne alınmaz. Bunun iyi iki örneği ideal bir yay için $F = kx$ olan Hook yasası ve ideal bir iletken için $V = RI$ olan Ohm yasasıdır. Burada dış etki F ve V, sistemin tepkisi (yanıtı) x ve I uygulanan dış alan ile doğru orantılıdır. Bu koşullar altında sistemin zayıf V_d dış alan etkisinde olduğunu varsayalım, bu dış alan elktromanyetik alanda olduğu gibi genellikle zamana bağlıdır. Böylece sistemin (5.9.1) ile verilen Hamiltoniyeni

$$H = H_0 + V_d(t) \tag{5.9.2}$$

olur. Daha önce açıklanan etkileşme gösteriminde bir sisteme ait yoğunluk operatörü

$\rho_{int} = e^{iH_o t}\rho(t)e^{-iH_o t}$ Şeklinde yazılır. Bu şekilde yazılan yoğunluk operatörü sisteme ait herhangi bir A gözlenebilirinin beklenen değeri için $< A > = tr(\rho A)$

özelliğini sağlar. Aynı zamanda ρ Liouvile denklemine göre

$$i\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = i\dot{\rho}(t) = [H_d(t), \rho(t)] \tag{5.9.3}$$

eşitliğini sağlar. Burada $H_d(t) = e^{iH_o t}V_d(t)e^{-iH_o t}$ dir. $\rho(t)$ yoğunluk operatörü sistemin durumlarının yoğunluğu olduğu için istatistik operatörü olarak ta adlandırılır. $\rho(t)$ herhangi bir A operatörünün t zaman ortalaması $< A >_t$ yi bulmak için kullanılırsa

$< A >_t = tr(\rho(t)A(t))$

olur. $\rho(t)$ için Liouvile teoreminin integral formu

$$\rho(t) = -i\int_{-\infty}^{t} dt'[\, V_d(t'), \rho(t')] + \rho(-\infty) \tag{5.9.4}$$

şeklinde tanımlanır. Bu tanımlamalara göre Lineer response teorisinin $Kubo$ yaklaşımı şöyledir. $t = -\infty$ da pertürbasyonu etkisi yoktur. Bu durumda sistem dengededir. Daha sonra

sistemin denge durumunu bozmadan yavaşça (adyabatik olarak) etkileşme başlatılır. Sistem dengede ise Ω büyük termodinamik potansiyel olmak üzere (kimyasal potansiyel μ için $T = 0$ da $\Omega(\mu = 0) = 0\ dır.$)

$$\rho(-\infty) = \rho_0 = e^{(\Omega - H_0)} \tag{5.9.5}$$

Buna göre sistemin dış etkiye doğrusal tepkisi(yanıtı)

$$\Delta\rho(t) = \rho(t) - \rho(0) = -i \int_{-\infty}^{t} dt' [\, V_d(t'), \rho_0\,] + Q({V_d}^2) \tag{5.9.6}$$

şeklinde olur. Bu ifade dengede olmayan sistemin istatistik operatörünün birinci derece pertürbasyonu yaklaşımı altındaki ifadesini verir. Buna göre bu lineer yaklaşım altında herhangi bir A operatörünün (gözlenebilirin) ortalamasındaki dış alana göre değişim $\Delta\rho(t)$ cinsinden

$$\Delta A(t) = tr(\Delta\rho(t)A(t) = -i \int_{-\infty}^{t} dt' Tr([\, V_d(t'), \rho_0]A(t))$$

$$= -i \int_{-\infty}^{t} dt' < [\, A(t), V_d(t')] > \tag{5.9.7}$$

şeklindedir. Pertürbasyonu terimi olan dış etki ile etkileşme terimini zamana bağlıdır , bu terim $V_d(t) = f(t)B$ şeklinde seçilebilir. Burada $f(t)$ genelleştirilmiş kuvvet , B ise zamandan bağımsız bu kuvvete uygun bir operatördür. Örneğin $H(t)$ gibi bir dış magnetik alana konulmuş sipin sistemi için $V_d(t) = -\boldsymbol{S}.\boldsymbol{H}(\boldsymbol{t})$, veya bir $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{t})$ vektör potansiyeli ile kuple olmuş akım için $V_d(t) = -\frac{1}{c}\,\boldsymbol{J}.\boldsymbol{A}(t)$ şeklindedir.

Şimdi iki operatör için daha önceden tanımlanan gecikmiş Green fonksiyonu ifadesini yazalım

$$\ll A(t), B(t' \gg_R = -i < [A(t), B(t')] > \theta(t - t') \tag{5.9.8}$$

Bu ifade Green fonksiyonunun $G_R(t, t') = \ll \Psi(t), \Psi^+(t') \gg$ ifadesi ile karşılaştırıldığında herhangi bir karışıklık yoktur, çünkü $A(t)$ ve $B(t)$ operatörleri $\Psi(t)$ alan operatörleri cinsinden yazılabilir böylece bilinen $G_R(t, t')$ cinsinden elde edilir. (5.9.8) bağıntısı fiziksel olarak $A(t)$ ile tanımlanan büyüklüğünün $t' < t$ anında $B(t)$ ile etkileşmesi sonucu tepkisi (yanıtı) olarak düşünülebilir. Bu durumda $t < t'$ için $\theta(t' - t)$ nin fiziksel bir karşılığı yoktur. Buna göre bu etkileşme sonucu $A(t)$ deki değişim $\Delta A(t)$

$$\Delta A(t) = -\int_{-\infty}^{\infty} dt' f(t') \ll A(t)B(t') \gg_R \tag{5.9.9}$$

olarak yazılır ve $Kubo\ Bağıntısı$ olarak adlandırılır. Bu eşitlik açıkça $A(t)$ gözlenebilirindeki değişimin $f(t)$ dış etkisinin birinci derece terimi ile değiştiğini belirtir. (5.9.9) eşitliğindeki

$\ll A(t)B(t') \gg_R$ çekirdek (kernel) terim tam olarak Green fonksiyonudur. Sistemin denge durumu zamandan bağımsızdır bu nedenle

$\ll A(t)B(t') \gg_R = \ll A(0)B(t'-t) \gg_R = \ll A(t'-t)B(0) \gg_R = \ll AB \gg_R = G_R$

dir. (5.9.9) ifadesinin Fourier dönüşümü alındığında

$\Delta A(w) = -f(w) \ll AB \gg_R$ olur. Genelleştirilmiş suseptibilite $\chi(w) = -\ll AB \gg_R{}^w = G_R^w$ olmak üzere

$$\chi(w) = \frac{\Delta A(w)}{f(w)} \qquad (5.9.10)$$

Şeklinde ifade edilir. Böylece deneysel olarak ölçülebilen büyüklüklerle G_R^w Green fonksiyonu arasında bir ilişki elde edilir.

Örnek olarak elektrik iletkenlik için $J_\alpha(w) = \sigma_{\alpha\beta}(w)E_\beta$ ise $G_R^w \sim \sigma_{\alpha\beta}(w)$

Manyetik alınganlık için $m_\alpha(w) = \chi_{\alpha\beta}(w)H_\beta(w)$ ise $G_R^w \sim \chi_{\alpha\beta}(w)$ şeklindedir.

Bazı fiziksel büyüklüklere karşılık gelen operatörlerin konum uzayında ($A(r)$) ve momentum uzayında ($A(k)$) temsilleri bu operatörlere karşılık gelen tepki fonksiyonları. Aşağıdaki tabloda verlmiştir. ($\hat{o}$ bir operatör olmak üzere $\overleftrightarrow{o} = \frac{1}{2}(\vec{o} - \overleftarrow{o})$ şeklindedir.)

Büyüklük	Operatör $A(r)$	$A(k)$	Tepki fonksiyonu
Yoğunluk	$\rho(r) = \Psi^+(r)\Psi(r)$	$\rho_{ij} = \delta_{ij}$	Yük suseptibilitesi (alınganlığı)
Sipin yoğunluğu	$\vec{S}(r) = \Psi_i^+(r)(\frac{\vec{\sigma}}{2})_{ij}\Psi_j$	$M_{ij} = \mu_j\sigma_{ij}$	Sipin suseptibilitesi
Akım yoğunluğu	$\frac{e}{m}\Psi_i^+(r)(-i\hbar\overleftrightarrow{\nabla} - e\vec{A})\Psi(\mathrm{r})$	$\vec{J} = e\vec{v}_k = e\overrightarrow{\nabla}\epsilon_k$	İletkenlik
Termal akım	$\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^+(r)\overleftrightarrow{\nabla}\vec{\partial}_t\Psi(r)$	$\vec{J}_T = iw_n\vec{v}_k$ $= iw_n\overrightarrow{\nabla}\epsilon_k$	Termal iletkenlik

5.10 Sonlu sıcaklık Green fonksiyonları.

Buraya kadar Green fonksiyonlarının $T = 0$ sıcaklıktaki özellikleri incelendi. Bu yaklaşım problemin anlaşılması ve başlangıç için iyi bir yaklaşımdır. Ayrıca birçok sistemin bazı davranışlarıda da sıcaklıkla çok değişmeyebilir. Fakat genellikle bizim için önemli olan gerçek sistemlerin birçok fiziksel özelliği sıcaklığa bağlıdır. Bu durumda bu sistemlerin sıcaklığa bağlı Green fonksiyonlarını tanımlamak önemlidir. Bu konuda en önemli adım Japon fizikçi Kubo tarafından ortaya atılmıştır. Burada ana fikir *N* parçacıklı sisteme sıcaklığın nasıl dahil edileceği üzerinedir. $T = 0$ da sistem taban durumunda bulunur, fakat sonlu sıcaklıklarda $(T \neq 0)$ sistemin bir kısmı taban durumunda kalsa da diğer kısmı uyarılmış durumlarda bulunur. Bu nedenle sistemin bütün durumları üzerinde ağırlıklı bir ortalaması alınmalıdır. Bu ortalamada ağırlık faktörü Z sistemin bölüşüm fonksiyonu olmak üzere Boltzmann faktörü olan $p_j = e^{-\beta E_j}/Z$ dir. Buna göre H hamiltoniyani ile temsil edilen bir sistemde Kuantum mekaniğine göre olasılık yoğunluk operatörü $\hat{\rho} \sim e^{-\beta \hat{H}}$ şeklindedir. Kubo'nun ortaya attığı fikir bu bölüşüm fonksiyonunun imajiner (sanal) zaman kullanılarak $T = 0$ için (5.5) te tanımlanan zaman-gelişim operatörü cinsinden yazılmasına dayanır. $T \neq 0$ da $\mu \neq 0$ olduğundan $H = H_o - \mu N$ olmak üzere

$$\hat{\rho} \sim e^{-\beta \hat{H}} = \hat{U}(-i\hbar\beta)$$

alınır. Burada $U(t) = e^{-i\frac{tH}{\hbar}}$ zaman-gelişim (evrimi) operatörüdür. Bu durumda Kubo

$$\boldsymbol{\tau = \frac{it}{\hbar}}$$

şeklinde imajiner(sanal) zaman tanımı yaparak sonlu sıcaklık zaman gelişimini bu imajiner zamana göre olacağını belirtti. Kubo'nun bu fikri Matsubara tarafından geliştirilerek çok parçacık fiziğinin imajiner zaman için formülasyonu oluşturuldu. Burada imajiner zaman kullanıldığında sistemin sonlu sıcaklık davranışını doğru şekilde nasıl verdiği aslında bir tartışma konusudur. Fakat bu yöntemin iyi sonuçlar verdiği genel kabul görmüştür. Sonuç olarak $T = 0$ da elde edilen bütün bağıntılar, $T \neq 0$ için $(\frac{it}{\hbar})$ terimi yerine $\boldsymbol{\tau}$ imajiner zamanı seçilerek oluşturulur. Buna göre sistemin sonlu sıcaklıkta bölüşüm fonksiyonu Z,

$$Z = Tre^{-\beta H} = TrU(-i\hbar\beta) \qquad (5.10.1)$$

şeklindedir. Termal dengede olan sistemin beklenen değeri,

$$< A > = \frac{Tr[U(-i\hbar\beta]A}{Tr[U(-i\hbar\beta]} \qquad (5.10.2)$$

şeklinde tanımlanır. Bu anlatılanlara göre aşağıdaki tabloda gerçek ve sanal zaman durumları için bazı büyüklükler karşılaştırılmıştır.

Büyüklük	Gerçek zaman $-\infty < t < \infty$	İmajiner(sanal) zaman $0 < \tau < \infty$
Schrödinger Gösterimi.	$\|\Psi_S(t) > = e^{-itH}\|\Psi_S(0) >$	$\|\Psi_S(\tau) > = e^{-\tau H}\|\Psi_S(0) >$
Heisenberg Gösterimi.	$A_H = e^{itH}A_S e^{-itH}$	$A_H = e^{\tau H}A_S e^{-\tau H}$
Etkileşme Gösterimi.	$\|\Psi_I(t) > = e^{-itH_0}\|\Psi_I(t) >$	$\Psi_I(\tau) > = e^{-\tau H_0}\|\Psi_I(\tau) >$
Pertürbasyon Açılımı.	$S =< -\infty\left\|Te^{-i\int Vdt}\right\|\infty >$	$\frac{Z}{Z_0} = Tr[e^{-\int_0^\beta Vd\tau}]$
Green Fonksiyonu	$G_{ij}(t) = -< 0\left\|T\Psi_i(t)\Psi_j^+(0)\right\|0 >$	$G_{ij}(\tau) = -< T\Psi_i(\tau)\Psi_j^+(0) >$

Sonlu sıcaklıkta termal dengede bulunan sistemde denge durumu civarında salınımlar "fluctuations" olabilir. Bu salınımlar sistemin enerjisinde k_BT kadar belirsizliğe neden olur. Bu durumda $\tau_T = \frac{\hbar}{k_BT}$ termal salınımların karakteristik zamanını temsil eder. Bu zamandan büyük işlemler için sistem eş evreli (coherence) olma durumunu kaybeder. Bu nedenle eş evreli süreçler τ_T süresi ile sınırlıdır. Respons teori kısmında tartışıldığı gibi sonlu sıcaklıktaki sisteme bir dış alan uygulandığında dış sistemin dış alana yanıtı olan alınganlık (suseptibilite) büyük ise sistemdeki salınımlar da büyük olacaktır. Bu durum Salınım-Dağılma, $(fluctuation - dissipation)$ teoremi olarak ifade edilir. Bir sistemin Hamiltoniyeninde $f(t)$ dış alanına, $H_e = -f(t)A(t)$ şeklinde bağlantılı olarak yer alan bir $A(t)$ büyüklüğü için dinamik alınganlık (response)

$$\chi(t-t') = i < [A(t), A(t')] > \theta(t-t') \quad (5.10.3)$$

Olarak tanımlanır ve gecikmiş (retarded) yanıt(response) fonksiyonu olarak

$< A(t) > = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi(t-t') f(t')$ veya

$$< A(w) > = \chi(w) f(w) \quad (5.10.4)$$

Şeklinde ifade edilir. Benzer şekilde imajiner zaman için response fonksiyonu.

$$\chi(\tau-\tau') =< TA(\tau)A(\tau') > \quad (5.10.5)$$

Şeklindedir. $A(t)$ fonksiyonu için başka bir Green fonksiyonu ise korelasyon fonksiyonudur .

$$S(t-t') =< A(t), A(t') >= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2\pi}\, e^{-iw(t-t')} S(w) \quad (5.10.6)$$

$Fluctuation - dissipation$ (salınım-dağılma) teoremi bu büyüklüklerin Fourier dönüşünü şu şekilde birbirine bağlar.

$$S(w) = 2\hbar[1 + n_B(w)]\chi''(w) \quad (5.10.7)$$

Burada eşitliğin sol tarafındaki $S(w)$ sistemdeki salınımları (fluctuations), eşitliğin sağ tarafındaki köşeli parantez içindeki ilk $2\hbar$ terimi kuantum etkileri, ikinci $2\hbar n_B(w)$ terimi termal etkileri , $\chi''(w)$ terimi ise dağılmayı (dissipation) vermektedir. Buradaki $\chi''(w)$terimi

$\chi''(w) = Im\chi(w)$ şeklinde yanıt fonksiyonunun (yayılım) disipatif kısmıdır. $w \ll k_B T$ durumunda $n(w) \sim \frac{k_B T}{w} \chi''(w)$ olur. Buna göre

$$S(w) = \frac{2k_B T}{w} \chi''(w) \quad (5.10.8)$$

şeklinde klasik salınım-dağılım (fluctuation-dissipation) sunucu elde edilir.

Bu sonuçlara göre eğer termal denge durumunda sistemin korelasyon fonksiyonunu biliyor ise (deneysel vb.) sistemin yanıt (response) fonksiyonunu hesaplanır. Tersi de mümkündür.

Kaynaklar:

1- Many-Particle Physics, G.D. Mahan, Plenum Press, 1986.
2- Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, H. Bruus, K. Flensberg, Oxford Press, 2005.
3- Theory of Quantum Liquids, P. Nozieres, D. Pines, Westview Press, 1999.
4- Introductory to Many Body Physics, Piers Coleman, Cambridge University Press 2016.

BÖLÜM 6

6.1 Kuantum Sıvıları ve Landau Teorisinin Temel Kavramları

Nötral atomlardan oluşmuş bir gaz sistemini göz önüne alalım. Gaz parçacıkları arasındaki etkileşimler ikili etkileşmeler şeklinde olsun. Yeteri kadar yüksek sıcaklıkta ve düşük yoğunluklarda her atom seyrekte olsa kendi aralarındaki saçılmalar dışında serbestmiş gibi hareket eder. Böyle bir sistem seyrek gaz olarak adlandırılır bu durumda göz önüne alınan atomik yapı klasik gaz sistemi ile yer değiştirir ve fiziksel özellikleri gazların kinetik teorisi ile tanımlanır. Buna göre ideal gazın sabit hacimdeki spesifik ısısı C_v sıcaklıktan bağımsızdır. Bu sistemde Fermiyon durumları için sipin de göz önüne alınır ise sipin "suseptibilitesi" (alınganlığı) Curie Yasası gereği sıcaklıkla ters orantılı olarak değişir. Buna göre bir $\vec{B}$ manyetik alanına konmuş her atom $\vec{\mu}$ dipol momentine sahip ise dipol ile manyetik alanın etkileşmesinden kaynaklanan enerji şu şekildedir.

$$E = -\vec{\mu}.\vec{B}$$

Manyetik alan keyfi olarak z yönünde seçilir ve dipol momenti $\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s$ atomun taban durumları $l = 0$ için yalnızca sipinden kaynaklanıyor ise

$$E = = \pm \mu \ B \tag{6.1.1}$$

Olur. Bu iki yönelim durumu için paramanyetik sistemin manyetizasyonu spin dipol momentin ortalama değeri olarak tanımlanır. Buna göre Z bölüşüm fonksiyonu, $P(\mu)$, atomun E enerjisinde olma olasılığı olmak üzere

$$< \mu > = \mu\, P(\mu) + (-\mu)P(\mu) = \frac{1}{z}\left(\mu e^{\frac{-\mu B}{kT}} + e^{\frac{\mu B}{kT}} \right) = \frac{2\mu}{z} sinh\left(\frac{\mu B}{kT}\right) \tag{6.1.2}$$

$$Z = \sum_{n=0,1,2,} e^{\frac{E_n}{kT}} = e^{\frac{\mu B}{kT}} + e^{\frac{-\mu B}{kT}} = 2cosh\left(\frac{\mu B}{kT}\right) \Rightarrow < \mu > = \mu tanh\left(\frac{\mu B}{kT}\right)$$

Sistemde N tane atom varsa toplam manyetizasyon

$$M = N < \mu >= N\mu tanh\left(\frac{\mu B}{kT}\right) \tag{6.1.3}$$

$\frac{\mu B}{kT} << 1 \Rightarrow$ "Curie regime" Curie Bölgesi için

$$M(T \to \infty) = \frac{N\mu^2}{k}\frac{B}{T} \Rightarrow M = \chi B \tag{6.1.4}$$

$$\chi = M/B = \frac{N\mu^2}{k}\frac{1}{T} \qquad (6.1.5)$$

Şeklinde χ spin alınganlığının $(susceptibility)$ sıcaklıkla ters orantılı olduğu görülür.

Bu sistemde basınç artırılır ve sıcaklık düşülür ise gaza özgü davranış iki sebepten dolayı değişir. Birincisi, yoğunluktaki artış sonucu parçacıklar arası etkileşme daha etkin olur. Diğer taraftan sıcaklıktaki düşüş, parçacıkların kinetik enerjisini, parçacıklar arası etkileşme potansiyel enerjisine göre azaltır. Buna göre belli bir değer için sistem $1.tür$ faz değişimi göstererek gaz fazından sıvı faza geçer. Sıvı faz parçacıklar arası güçlü korelasyonlarla temsil edilir. (karakterize edilir). Geçiş parçacıklar arası etkileşmelerden kaynaklandığı için dinamik yapıya sahiptir. Geçiş tamamen klasik etkilerden kaynaklandığı için, oluşan sıvı sistemi $Klasik\ Sıvılar$ olarak adlandırılır.

Sıcaklık biraz daha düşürülür ise, her bir parçacığın kinetik enerjisi biraz daha azalır ve parçacıklar arası etkileşme biraz daha artar ve daha önemli olur. Sonuç olarak yine birinci tür faz geçişi ile sistem sıvı fazdan katı faza geçiş yapar. Bu klasik faz geçişleri şemasına Helyumun izotopları olan ^3_2He ve ^4_2He uymazlar. Deneysel olarak gözlenen Helyumun bu uyumsuz (anomali) durumu yani sıcaklık çok düşürüldüğünde katı faza geçmeyip sıvı fazda kalma durumu, Helyum atomları arasındaki kuvvetlerin görece zayıf olması (Helyum soygaz elektronlar dolu $1S^2$ yörüngesinde bulunur vb.) ve kütlesinin küçük olmasından dolayı sıfır-nokta enerjisinin büyük olmasından kaynaklanmaktadır.

$$\omega = \sqrt{(k/m)}, \quad \omega = 2\pi\upsilon \;\Rightarrow\; \upsilon = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \qquad (6.1.6)$$

Helyum molekülünün düşük sıcaklıklardaki davranışı birbirine yaylarla bağlı kütleler gibi modellenerek (Einstein'in katıların spesifik ısılarını bulmak için kullandığı model) mümkündür bu durumda Kuantum mekaniğine göre sistemin enerjisi incelendiğinde

$$E_n = \sum_{n,k} \hbar w_k \left(n_k + \frac{1}{2}\right) \qquad (6.1.7)$$

$n = 0,1,2 \ldots., k = 1,2, \ldots$

Bulunur. Bu durumda sistemin en düşük enerji seviyesi

$$E_n = \frac{\hbar w_{o,k}}{2} \qquad (6.1.8)$$

sıfır nokta enerjisidir. Bu enerji sistemin katılaşma bağlanma enerjisinden ($kohesif\ enerji$) büyük olduğu için sistem sıvı yapısını korur. Bu durum klasik fizik yasaları ile açıklanamayan bir durumdur, tamamen sistemin kuantum doğasından kaynaklanmaktadır.

Bu nedenle Helyum sıcaklığın çok küçük olduğu durumlardade bu kuantum etkisi nedeni ile sıvı halde bulunur. Bu durumun bir kriteri de parçacıkların de Broglie dalga boyu

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2wE}} = \frac{h}{\sqrt{2wkT}}$$

parçacıklar arası mesafeye yaklaşık ise kuantum etkiler önemli olur. Helyum için bu durum $T = (3-4)\ K$ olduğunda oluşur. Kuantum etkiler sistemin çok-parçacık dalga fonksiyonunun simetri özelliklerinden kaynaklanıyor gibi tanımlanabilir fakat bu etkiler gerçekte parçacıkların istatistik doğasından kaynaklanırlar. Yeteri kadar düşük sıcaklıklarda ^3_2He Fermi-Dırac istatistiğine uyar, ^4_2He Bose-Einstein istatistiğine uyar. Bu nedenle kuantum sıvılarının teorisi incelenirken, bu farklı istatistik davranış ve parçacıklar arası etkileşmelerin ikisi birden göz önünde bulundurulmalıdır.

^3_2He (Fermi Sıvısı) ve ^4_2He (Bose Sıvısı) doğada bulunan gerçek tek '' $Kuantum\ Sıvısı$ '' olarak tanımlanabilir. Fakat bunun yanında metallerdeki iletim elektronları, yarı metaller, dejenere yarı iletkenler de kuantum sıvıları olarak incelenebilirler. Bu elektron sıvıları homojen değillerdir. Çünkü katılarda elektronlar periyodik iyon korlarının oluşturduğu alanda hareket ederler. Fakat birçok durumda bu periyodik etki ihmal edilebilir. Metallerdeki iletim elektronları için kuantum etkilerinin önemli olduğu sıcaklık (dejenerasyon sıcaklığı) 50.000 Kelvin (K) mertebesindedir. Yarı metaller için bu sıcaklık ~100 Kdir. İletim elektron yoğunluğu 10^{16}olan tipik yarı iletkenlerde ~3 K dir.

Yeteri kadar düşük sıcaklıklarda özdeş parçacıklar için simertileştirme ilkesi ve parçacıklar arası etkileşmeler göz önüne alınarak kuantum mekaniğine göre hesaplanan sıvı durumları (veya kuantum sıvıları) aynı parçacıkların oluşturduğu klasik sıvılardan daha iyi sonuç vermektedir. Buna göre "temel uyarımlar", '(elemantary excitations) teorisi tanımlanarak bu teori ile kuantum sıvısının bütün düşük-uyarım özellikleri elde edilebilir.

Normal Fermi sıvıları $(Normal\ Fermi\ Liquids)$ kuantum sıvılarının bir grubunu oluşturur. Bu grup için dejenere Fermi Sıvısı da denilebilir, burada sıvının özellikleri, etkileşmeler ne kadar kuvvetli olursa olsun sıvıyı oluşturan parçacıklar arası etkileşmelerden fazla etkilenmez, başka bir deyişle sıvı etkileşmeyen fermiyonların oluşturduğu sıvı gibi düşünülebilir. Bu

teoriye göre gayet iyi tanımlanmış bir Fermi yüzeyi var, spesifik ısısı sıcaklıkla doğru orantılı olarak artar vb. Fermi sıvılarına örnek olarak 4 mC° ve metallerde süper iletken olmayan iletim elektronları verilebilir.

1956'da Landau çok şık yarı fenomelojik bir yöntem ile düşük sıcaklıklarda Normal Fermi sıvılarının $''\,makroskopik\,''$ davranışını veren bir teori oluşturdu. Bu bölümde bu teorinin temel kavramları üzerinde durulacaktır. Fakat bu teori, parçacıklar arası mesafenin parçacık boyutunda olduğu durumlarda ve parçacıkların enerjisinin Fermi enerji seviyesine yakın olduğu durumlara karşılık gelen mikroskobik olaylara uygulanamaz. Landau teorisi deneylerde bulunan sonuçlara yorum yapmak için önemlidir. Bunun için Doğrusal Yanıt Teorisi (Lineer Respons Theory) konusu da incelenmelidir. Lineer Respons Teorisi hem makroskopik hem de mikroskobiktir olaylara uygulanabilir. Teori respons ve korelasyon fonksiyonlarının temel uyarımların spektrumu ile ilgilerini açıklamaktadır. Bu ayrı bir inceleme konusudur. Landau teorisinin başka bir faydası, kuantum sıvıları için ortak bir dil oluşturmasıdır. Bu dil diğer kuantum sıvılarına da uygulanabilen bir dildir.

6.2 Nötral Fermi Sıvısı

T sıcaklığında dengede olan etkileşmeyen bir Fermi gazını göz önüne alalım. Bu durumda bir parçacığın ε enerjisinde olma olasılığı iyi bilinen

$$f(\epsilon) = \frac{1}{1+exp[\frac{(\epsilon-\mu)}{kT}]} \qquad (6.2.1)$$

dir. Burada k Boltzmann sabiti, μ kimyasal potansiyeldir. μ doğru parçacık sayısının bulunmasını sağlar. Yüksek sıcaklıklarda μ, kT den çok düşük $\mu \ll kT \Rightarrow -\frac{\mu}{kT} \Rightarrow 0$ alınabilir. f(ϵ) Maxwell-Boltzmann ifadesine döner ve gaz klasik gaz olarak adlandırılır. Diğer taraftan $T \Rightarrow 0$ limitinde $f(\epsilon) \Rightarrow Fermi-Dirac$ dağılımına dönüşür. $\epsilon = \mu$ de $f(\epsilon)$ 1'den 0 değerine düşer. Bu durumda gaz tamamen dejenere durumdadır denir. Bir durumdan (rejimden) diğerine geçme sıcaklığı $T_F = \frac{\mu_0}{k}$ $''dejenerasyon\ sıcaklığı''$ olarak adlandırılır. Dejenere olmuş rejimde (bölgede) Pauli dışarlama ilkesinden dolayı sistemdeki uyarılmış durumlar azalmıştır, sistem bir şekilde T sıcaklığında donmuş durumdadır, yalnızca enerjileri $kT \sim E_F$ olan parçacıklar sıcaklıkta ki değişimden etkilenirler. Bu kısıtlama fiziksel bir sonuç doğurur, spesifik ısı sabit olacağına T ile doğru orantılı olur, spin suseptibilitesi ise $\frac{1}{T}$ ile orantılı olacağına sıcaklıktan bağımsız olur.

Gerçek Fermiyon sistemlerinde parçacıklar arası etkileşme ve Dışarlama ilkesi aynı anda etkin olur. Üstün iletken elektron gaz sisteminde olduğu gibi bazı sistemlerde parçacıklar arası etkileşmeler baskın faktör olur, fakat dışarlama ilkesinin (dolayısı ile simetrileştirme ilkesinin) etkisi daha önemli olduğu durumlar $Normal\ Fermi\ Sıvısı$ olarak adlandırılır.

$T = 0$ da normal Fermi sıvısı S_F keskin Fermi yüzeyi ile belirlenir. Normal Fermi sistemindeki $uyarımlar\ S_F$ Fermi yüzeyi dışındaki quasi-parçacıklar veya S_F Fermi yüzeyi içindeki kuasi-boşluklar (quasiholler) olarak adlandırılır. Bu analoji etkileşmeyen Fermi gaz sisteminde tek-parçacık uyarımları göz önüne alınarak yapılmıştır. Diğer taraftan katıların bir-elektron teorisine bakacak olursak (de Haas-van Alphen olayı, transport özellikler gibi) oldukça karmaşık olaylar, elektronlar arası etkileşmeler yok sayılarak açıklanabilmektedir.

Bu arada şunu da vurgulayalım, tek parçacık elektron teorisi tamamlanmış değildir, sıvıların genel karakterini oluşturan çok cisim etkileşmeleri anlaşılmadan teori tam olarak tamamlanamaz.

Burada , herhangi bir T sıcaklığında etkileşen Fermi sıvısının bütün özelliklerini veren bir teori üzerinde durulmayacaktır, bunun için oldukça ileri düzeyde alan teorisi yöntemleri gerekmektedir. Alan teorisi dışında bu konuda yapılan genel teoriler formal yapıdadırlar ve deneysel sonuçlarla pek uyumlu değillerdir. Fakat yine de düşük sıcaklık limitinde ($T \ll T_F$) sistemin makroskobik davranışını veren bazı sonuçları elde etmek mümkündür. Bu aşamada Landau'nun yarı fenomenolojik teorisini uygulayarak nötral dejenere bir sistem olan ^3_2He incelenecektir. Daha önce belirttiğimiz gibi ^3_2He dejenere Fermi sıvısının doğadaki tek örneğidir. Bazı küçük değişiklikler ile Fermi sıvısı teorisi metallerdeki elektronlara, yarı metallere, nükleer maddeye uygulanabilir. Landau Teorisinin yüklü sistemlere (metallerdeki elektronlar gibi) uygulanması uzun mesafeli etkileşmelerinden dolayı bazı önemli zorluklar içerir.

Şimdi kuasiparçacık kavramı üzerinde biraz duralım. Gerçek Fermi sisteminde quasi-parçacıklar tamamen bağımsız değillerdir, bu uyarılmış quasi parçacıklar arasında bir etkileşme vardır. Bu kavram ise Landau teorisinin alt yapısını oluşturur.

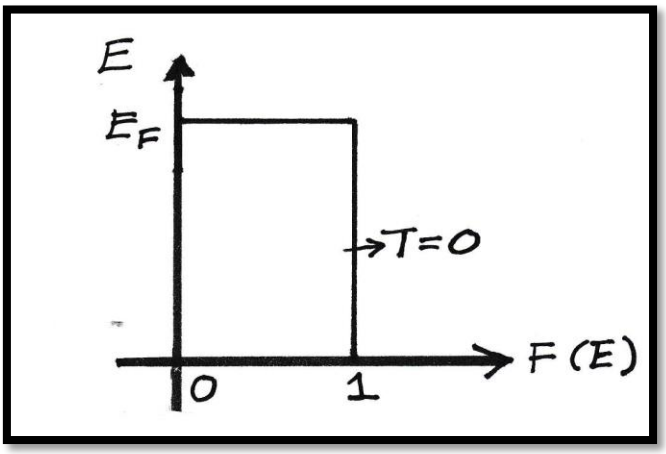
6.3 Kuasi Parçacık Yaklaşımı

Ω kofigürasyon uzayı hacmi içinde her biri m kütleli birbiri ile etkileşmeyen N serbest fermiyon sistemini göz önüne alalım. Sistemin öz durumu N tane tek parçacık durumunun antisimetrize edilmesinden elde edilir. Her bir parçacık iki kuantum sayısı ile karakterize edilir. Bunlar $\vec{p}$

momentum ve σ spin ($\sigma = \pm\frac{1}{2}$) kuantum sayılarıdır. Parçacıkların dalga fonksiyonları normalize edilmiş dalga fonksiyonlarının oluşturduğu konfigurasyon uzayında

$$\psi_p(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{p}.\vec{r}} \tag{6.3.1}$$

şeklinde basit düzlem dalgalardır. Sistemin toplam dalga fonksiyonu bu gibi N tane düzlem dalgadan oluşturulmuş Slater determinantı ile oluşturulur. Sistemin bütün öz durumları $n_{p\sigma}$ dağılım fonksiyonu ile karakterize edilebilir. $n_{p\sigma}$ eğer p ve σ durumu işgal edilmiş ise 1 diğer durumlarda 0 dır.



Şekil 6.1. Kuasi parçacıkların taban durumu dağılımı.

$\vec{p}$ momentumuna sahip parçacıklar $\frac{p^2}{2m}$ kinetik enerjisine sahiptirler. Eğer etkileşme yok ise parçacıkların enerjisi basitçe kinetik enerjilerin toplamı şeklindedir. Sistemin kinetik enerjisi E,

$$E = \sum_p n_p \frac{p^2}{2m} \tag{6.3.2}$$

şeklindedir. Taban durumu, N tane düzlem dalganın en düşük enerji seviyesini doldurarak oluşur. Taban durumu dağılımı Şekil 1 de verilmiştir.

Fermi momentumu P_F

$$\frac{N}{\Omega} = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{P_F}{\hbar}\right)^3 \tag{6.3.3}$$

olarak verilir. Bütün düzlem dalgalar Fermi yüzeyi S_F (yarıçapı P_F olan küre) içinde yer alır. Taban durumu için S_F dışı boştur. Şimdi sisteme bir parçacık ekleyelim. $(N+1)$ parçacıklı

sistemin taban durumu, Fermi yüzeyi üzerinde mümkün en düşük momentum durumuna bir parçacık eklemekle elde edilir. Kimyasal potansiyel μ

$$\mu = E_0(N+1) - E_0(N) = \frac{\partial E_0}{\partial N} \tag{6.3.4a}$$

şeklinde tanımlanır. Bu nedenle

$$\mu = \frac{p_F{}^2}{2m} \tag{6.3.4b}$$

şeklindedir. Kimyasal potansiyel Fermi yüzeyi üzerindeki bir parçacığın enerjisine (kinetik enerji) eşittir. Uyarılmış durumlar, en iyi taban durumla karşılaştırılarak anlaşılır. Verilen bir uyarılmış durum, belli miktarda parçacığın Fermi yüzeyini geçmesi ile elde edilir. Bu işlem belli miktarda parçacığın S_F Fermi yüzeyi dışında yaratılması ve aynı miktar boşluğun (hole) S_F içinde yaratılması ile özdeştir. Böylece parçacıklar ve boşluklar "temel uyarımlar''(elemantary excitations) olarak görünürler ve bunların dağılımı (konfügürasyonu) bütün uyarılmış durumları verir. Uyarılmış durumların miktarı denge durumu dağılımına göre

$$\delta n_p = n_p - n_p{}^o \tag{6.3.5}$$

şeklinde tanımlanır. $\overrightarrow{p'} > \overrightarrow{p_F}$ olan uyarılmış parçacıkların momentumu $\delta n_p = \delta p_{p'}$ durumuna, $\overrightarrow{p'} < \overrightarrow{p_F}$ olan boşlukların ise $\delta n_p = -\delta p_{p'}$ durumuna karşılık gelecektir. Etkileşmeyen sistem için uyarılma (eksitasyon) enerjisi

$$E - E_0 = \sum_p \frac{p^2}{2m} \delta n_p \tag{6.3.6}$$

olacaktır. Düşük sıcaklıklarda parçacıklar ve boşluklar Fermi yüzeyi yakınlarında bulunacaklardır. δn_p tipik olarak 1 mertebesinde olacaktır. (Fermi yüzeyine yakın yerlerde) diğer durumlarda ihmal edilebilecektir.

İzole bir sistemde toplam parçacık sayısı korunumludur. Bu nedenle uyarılmış parçacıkların sayısı uyarılmış boşlukların sayısına eşit olmalı, bu kısıtlama bazen uygun değildir. Bu yüzden istatistik olarak büyük kanonik topluluğu kullanmak daha uygundur. Bu durumda parçacık sayısı N yerine kimyasal potansiyel μ daha kullanışlı bir büyüklüktür. Bu durumda sistemin bir parçacıklar kaynağı (reservior) ile kontakta olduğu varsayılır. Bu durumda sistemi tanımlamak için ilgilenilecek büyüklük E enerjisi değil $F = E - \mu N$ serbest enerjisidir. Böylece (6.3.6) bağıntısı göz önüne alınarak δn_p dağılımına ait exitasyonların serbest enerjisi;

$$F - F_0 = \sum_p (\frac{p^2}{2m} - \mu)\delta n_P \qquad (6.3.7)$$

olacaktır. (6.3.7) bağıntısı parçacık sayısı korunduğundan yani $\sum_p \delta n_p$=0 olduğunda (6.3.6) eşitliğine indirgenir. (6.3.7) denklemine göre $\vec{P}$ momentumuna sahip bir parçacığın serbest enerjisi $(\frac{p^2}{2m} - \mu)$ dür. Bu da Fermi yüzeyin dışındaki elemanter uyarımın enerjisidir. Fermi küresi içinde ekşite (uyarılmış) olmuş parçacık boşluktur, boşluk için $\delta n_p = -1$ dir ve bu uyarımlara karşılık gelen serbest enerji $(\mu - \frac{p^2}{2m})$ dir. Fermi yüzeyi üzerinde $\mu = \frac{p^2}{2m}$ olduğu için ''elemanter uyarımın'' momentumu $\vec{P}$ olmak üzere serbest enerjisi $\left|\frac{p^2}{2m} - \mu\right|$ olarak yazılır, bu S_F için hem iç bölgede hem de dış bölgede geçerlidir. Şunu da not edelim, taban durumun kararlılığını sağlamak için uyarımın serbest enerjisi daima pozitiftir.

Kuasi-Parçacıklar ve Kuasi-Holler(Deşikler)

Şimdi etkileşen Fermi sıvısına bakalım. Bu durumda Elemanter uyarımların doğasına bakalım. Probleme doğrudan bakacak olursak Green Fonksiyonları ve many-body pertürbasyon teorisini yöntemleri kullanılmalıdır. Bu ise bu konularla ilgili detaylı bilgileri tanımlamayı gerektirir. Bu nedenle bu bölümde yeni bir yaklaşım sunulacaktır. Bunun için etkileşen gerçek sıvı sistemi etkileşmeyen ideal gaz durumu ile birebir karşılaştırılarak incelenecektir.

Bu karşılaştırma yolu ile etkileşen sistemde uyarım spektrumunun nitel davranışını incelenecektir. n_p dağılım fonksiyonu ile karakterize edilen ideal sistemi göz önüne alalım. Bu ideal sistem ile gerçek sistem arasında geçişi sağlamak için, gaz sisteminde parçacıklar arasında sonsuz küçük şekilde etkileşmelerin başladığını varsayalım. Bu ''adyabatik'' koşullar altında ideal sistemin gerçek sisteme gittiğini düşünebiliriz (bu süperiletkenlerde olduğu gibi her zaman doğru olmayabilir). Fakat biz bu aşamada gerçek temel durumun ideal temel durumdan adyabatik olarak elde edilebileceğini varsayalım. Bu durum *''normal''* Fermi sistemi olarak adlandırılır. İdeal durumun dağılımı $n_{\vec{p}}^{\,0}$ ile gösterilir. Simetriden dolayı $n_{\vec{p}}^{\,0}$ izotropik sistemi küreseldir. Bu yüzden küresel Fermi yüzeyi etkileşmeler başladığında şekil değiştirmez. Gerçek taban durumu böylece ideal durumdan elde edilir. Metallerde olduğu gibi Fermi yüzeyi anizotropik ise, Fermi yüzeyi etkileşmeler başladığında deforme olacaktır. Bu durumda ise gerçek taban durumu bazı uyarılmış durumlardan adyabatik olarak elde edileceği düşünülebilir. Bu durum teoride esaslı bir zorluğa neden olmaz. Şimdi $n_p^{\,0}$ ideal dağılıma sahip sisteme bir parçacık ekleyelim ve etkileşmeyi adyabatik olarak başlatalım. Gerçek sıvıda bir uyarılmış

durum oluşturalım ve momentumu $\vec{P}$ olsun. Etkileşme arttığında bu çıplak $''bare''$ parçacık etrafındaki parçacıklarla etkileşmeye başlar, eğer etkileşme yeteri kadar yavaş ise $(N+1)$ parçacıklı sistem dengede kalır. Etkileşme tamamen etkin olduğunda $\vec{P}$ momentumlu parçacığımız (oluşturulan elemanter uyarım) etrafındaki parçacıklarla (çevresi ile) beraber hareket eder. Bu duruma alan teorisi dili ile parçacık ''self-enerji'' öz-enerji bulutu ile giydirilmiştir denir. Bu giydirilmiş $''dresssed''$ parçacığı bağımsız bir varlık $''entity''$ olarak ele alırız ve $''quassiparticle''$ olarak adlandırırız. Yukarıda anlatılan uyarılmış durum, gerçek taban durumu $+\vec{P}$ momentumlu quasi parçacığa karşılık gelir. S_F gerçek taban durumun üretildiği, pertürme olmamış $n_{\vec{p}}{}^0$ nin Fermi yüzeyi olsun. Dışarlama ilkesi gereği, kuasi-parçacık uyarımları $\vec{P}$ momentumu S_F in dışında olacak şekilde üretilebilirler. Bu nedenle $\vec{P}$ uzayında kuasi-parçacık dağılımları S_F yüzeyine keskince bağlıdırlar. Benzer adyabatik yaklaşımı kullanarak kuasi-boşlukları (kuasideşikleri) $''quasiholler''$ da oluştururuz. Yine benzer bir işlem kullanarak uyarılmış birkaç kuasi-parçacık da oluşturulabilir. Böylece bu kuasi parçacık ve kuasiholler "elemanter uyarımlar'' olarak adlandırılırlar. Adyabatik etkileşme tersinir değildir. Yani bir şekilde gerçek sistemden ideal sistemin elde edilmesi mümkün değildir. Bu etkileşmelerin uzun olan durulma zamanından kaynaklanır.

Saf sistemlerde sıfır sıcaklıkta uyarımların yaşam süreleri "life time'' S_F Fermi yüzeyine olan uzaklığın karesi ile ters orantılıdır.($\tau = \frac{1}{d^2}$ d≪1 , τ≫1) Bir quasi parçacık S_F Fermi yüzeyine ne kadar yakın ise o kadar iyi belirlenmiş olur. Bu nedenle burada anlatılacak teori temel uyarımların Fermi yüzeyine yakın olan uyarımlar için daha anlamlıdır. Etkileşmeyen sistemde çıplak parçacıkların dağılımı n_p^0 olsun. Etkileşen sistemi ''adyabatik'' yolla elde ettiğimizde gerçek sisteminde n_p dağılımına sahip olduğunu varsayalım. Etkileşen sistemde n_p quasiparçacıkların dağılımını belirler. Sistemdeki uyarım "excitation'' temel durumdaki ayrılma olarak alınabilir buna göre,

$$\delta n_p = n_p - n_p{}^0 \qquad (6.3.8)$$

Yazılabilir, düşük sıcaklıklarda düşük genlikli "low-lying'' uyarılmış durumları gözlemleriz, bunlarda S_F yüzeyine oldukça yakındırlar. Bu koşullarda quasiparçacık sönümü ihmal edilebilir. Burada fiziksel olarak önemli büyüklük δn_p dir. $\vec{\nabla} n_p{}^0$ teoride, Fermi yüzeyi üzerinde lokalize olmuş büyüklükte görülecektir.

Kuasi parçacıkların Enerjileri

İdeal bir sistem için, sistemin dağılım fonksiyonu ve enerjisi arasında doğrudan bir bağıntı vardır. Eğer parçacıklar arası etkileşme göz önüne alınır ise verilen bir durumun enerjisi E ile bu duruma karşılık gelen n_p arasındaki ilişki karmaşıklaşır. Bu ilişkiyi E[n_p] fonsiyoneli şeklinde gösterebiliriz ve bunun açık bir formülünü yazmak mümkün değildir. Fakat n_p taban durumu dağılımı (n_p^0) ye yeteri kadar yakınsa E[n_p] nın Taylor serisi açılımını yapabiliriz. Buna göre

$$E[n_p] = E_0 + \sum_p \epsilon_p \, \delta n_p + O(\delta n^2) \tag{6.3.9}$$

burada ϵ_p birinci fonksiyonel türevdir ($\epsilon_p = \frac{\delta E}{\delta n_p}$). Her toplam teriminde Ω terimi var bu nedenle $\epsilon_p \Omega^o$=1 mertebesindedir. Eğer δn_p , $\vec{p}$ momentumlu bir fazla parçacığı tanımlıyor ise bu durumun enerjisi (E_0+ϵ_p) olacaktır. ϵ_p quasiparçacığın enerjisidir. (6.3.9) eşitliğine göre birden fazla quasiparçacığın enerjisi toplam şeklindedir. (E_0+ϵ_{p_1}+ϵ_{p_2}+...+ϵ_{p_n}) tabi ki δn^2 li terimleri ihmal etmek koşulu ile. ϵ_p enerjisinin $\vec{p}$ Fermi yüzeyini geçtiğinde sürekli olduğunu varsayacağız, bu her zaman böyle değil fakat "normal'' Fermi sistemi tanımımıza göre böyledir. Fermi yüzeyi üzerinde ϵ_p sabit olmalı ve ϵ_F'ye eşit olmalı aksi halde biz en düşük enerji seviyesini sistemden bir parçacık alarak S_F dışında daha düşük bir enerji seviyesine götütülmüş olur.

(N+1) parçacıklı durumun taban durumunu Fermi yüzeyi ϵ_F ye bir parçacık ekleyerek bulduğumuza göre, kimyasal potansiyel sıfır sıcaklıkta $\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N}$ olacaktır . Bu çok önemli özellik ilk kez Hugenholtz ve Van Hove (1958) tarafından uygulanmıştır. Pratikte biz yalnızca Fermi yüzeyi civarında ϵ_p lere ihtiyaç duyarız, bu durumda seri açılımı yapacak olursak ϵ_p'nin gradyenti olan, quasiparçacıkların

$$V_p = \nabla_p \epsilon_p \tag{6.3.10}$$

"Grup Hızı" rolünü oynar. Daha sonra V_p'nin quasiparçacık dalga paketlerinin hızı olduğunu göreceğiz. Manyetik alanın olmadığı durumlarda sistem yansımaya göre simetriktir ve ϵ_p ve V_p σ spinine bağlı değildir. İzotropik sistemde ϵ_p yalnızca $\vec{p}$ ye bağlıdır. $\vec{v}$ hızı da $\vec{p}$ ye paralel olduğundan (Fermi yüzeyi üzerinde)

$$\vec{v}_{P_F} = \frac{\overrightarrow{P_F}}{m^*} \tag{6.3.11}$$

yazabiliriz. Burada m^* quasiparçacıkların "etkin kütlesi'' dir. Burada kullanılan etkin kütle, peryodik bir latiste hareket eden parçacığı belirten etkin kütleden farklıdır. Anizotropik sistemlerde $|v_p|$ Fermi yüzeyinde değişik değerler alır, buna göre etkin kütle tanımı biraz kurgusaldır. (yapmacık) Bu yüzden quasiparçacık durumlarının $(\mu + \epsilon)$ enerjisine sahip olanların durum yoğunluğu $\vartheta(\epsilon)$ tanımlamak uygundur.

$$\vartheta(\epsilon) = \sum_p \delta\,(\epsilon_p - \mu - \epsilon) \tag{6.3.12}$$

Düşük sıcaklıklarda, sistemin bütün özellikleri Fermi yüzeyindeki durum yoğunluğu $\vartheta(0)$ 'a bağlı olacaktır. Bu tanımlamalar Fermi gaz sistemindeki çıplak parçacık ve Fermi sıvısındaki quasiparçacık arasındaki benzerliği gösterir. Her ikiside $T = 0$ da momentum gösteriminde keskin bir değişim gösteren Fermi yüzeyine sahiptirler ve her ikiside Fermi-Dirac istatistiğine uyarlar. Her ikisi arasındaki önemli fark, çevreleri ile etkileştiklerinde enerji ve momentumdaki değişimlerdir. Gerçekte quasiparçacıklar etkileşme olmayan sistemlerde ortaya çıkmayan fiziksel özelliğe sahiptirler.

6.4 Kuasiparçacıklar arası etkileşmeler

Fermi Sıvılarının Landau Teorisinde Serbest Enerjinin Seriye Açılımı : Daha önceden belirtildiği gibi, fiziksel olarak ilgilendiğimiz büyüklük sistemin enerjisi E değil, serbest enerjisi $F = E - \mu N$ dir. Belli bir taban durumu F_0'a göre ölçülmüş uyarılmış durum serbest enerjisi veya ''excitation'' serbest enerjisi

$$F - F_0 = E - E_0 - \mu - (N - N_0) \tag{6.4.1}$$

şeklinde yazılabilir. Burada N_0 taban durumu parçacıkların sayısıdır. (6.3.9) ifadesini (açılımını) genelleştirmek için $(N - N_0)$ ın hesaplanması gerekmektedir. Bunun için sistemin taban durumuna bir kuasi parçacık eklemek demekle, sisteme tam olarak bir çıplak (bare) parçacık eklemeyi ifade ediyoruz. Bu işlem yapılırken adyabatik sürece uygun olduğunu varsayıyoruz. Fazladan bir kuasi-parçacığa sahip durum $(N + 1)$ ideal parçacık durumundan elde edilir. Bu işlem sırasında etkileşme adyabatik olarak başlar, parçacık sayısı korunur. $(N - N_0)$ farkı böylece

$$N - N_O = \sum_p \delta n_p \tag{6.4.2}$$

olarak yazılabilir. (6.3.9) ve (6.4.2) kullanılarak ve $(\delta n_p)^2$ terimi göz önüne alınmazsa

$$F - F_0 = \sum_p (\epsilon_p - \mu)\delta n_p \qquad (6.4.3)$$

Olarak yazılabilir.

Eğer parçacık sayısı sabit alınır ise (6.4.2) farkı sıfır olur. $(E - E_0) = (F - F_0)$ olur. (6.4.3) ifadesi (6.3.9) gibi yazılabilir. Burada elde edilecek birçok ifade, Fermi yüzeyinin küçük δ kadar değişiminden elde edilecektir. δn_p değerleri, δ 'yi Fermi yüzeyinin ortasında ince bir tabaka olarak alacak olursak ± 1 değerlerine sahip olacaktır. Bu tabaka dışında sıfır olacaktır. (ϵ_p-μ) δ mertebesinde ise δn_p sıfır olmayacaktır. (6.4.3) ile verilen $(F - F_0)$ böylece δ^2 mertebesinde olacaktır. (6.4.3) birinci mertebe gibi görünse de gerçekte ikinci mertebedir. Bu nedenle bu yaklaşım $(F - F_0)$ ın Taylor serisi açılımını bir adım daha fazla ilerletmektedir. Böylece Fermi yüzeyindeki değişimlerin ikinci mertebe katkıları da içerilmiş olur. Buna göre

$$F - F_0 = \sum_p (\epsilon_p - \mu)\delta n_p + \frac{1}{2}\sum_{pp'} f_{pp'}\delta n_p\, \delta n_{p'} + O(\delta n^3) \qquad (6.4.4)$$

(6.4.4) Denklemi (1956) da Landau tarafından tarafında önerilen Fenomenolojik Fermi sıvısı teorisinin esasını oluşturur. Burada en önemli terim quasiparçacıklar arası etkileşmeyi veren ''quadratik'' (ikinci mertebe) terimidir. Bu terim bu konuda yapılmış başka bir teori olan Sommerfeld yaklaşık teorisinde yoktur. (6.4.4) denklemi, $(F - F_0)$ ın quasiparçacıkların görece sayısına göre kuvvet serisine açılımında etkin terimi belirler.

Teorinin ikinci bir özelliği de

$$\alpha = \frac{\sum_p |\delta n_p|}{N} \qquad (6.4.5)$$

şeklinde α terimi tanımlanacak olursa Landau yaklaşımı α'nın küçük durumları için geçerli olacaktır. Bir hesaplama yapıldığında, yaklaşım yaparken α'ya göre etkin terimler göz önüne alınmalıdır. $f_{pp'}$ terimi E $(veya\ F)$ nin n_p'ye göre ikinci varyasyonel türevidir, $\vec{p}$ ve $\overrightarrow{p'}$ nün yer değiştirmesi altından invaryanttır (değişmezdir). Momentum indisi üzerindeki toplamlar Ω terimi getireceği için $f_{pp'}$, $\frac{1}{\Omega}$ boyutundadır. Daha sonraki terimler yüzey üzerinde dağılırlar ve ihmal edilebilirler. $(\lim_{v\to\infty} \frac{\mu}{V} \to 0)$ bir kuasi-parçacığın başka bir kuasi-parçacıkla etkileşme olasılığı $\frac{\alpha^3}{\Omega}$ mertebesindedir. Burada α etkileşme mesafesidir.

$\vec{p}$ ve $\overrightarrow{p'}$ Fermi yüzeyini geçtiğinde $f_{pp'}$ nün sürekli olduğunu varsayalım. Bu yaklaşım yine Normal Fermi Sıvısı yaklaşımına uygundur. Pratikte yalnızca Fermi yüzeyi üzerindeki f değerine ihtiyaç duyulur. Bu noktada $\epsilon_p=\epsilon_{p'}=\mu$ dür. Böylece $f_{pp'}$ yalnızca $\vec{p}$ ve $\overrightarrow{p'}$ nün ve σ ve σ'nün doğrultusuna bağlıdır. Eğer bir magnetik alan uygulamıyor ise sistem zaman terslenmesi (time reversal) altında değişmezdir. Buna göre

$$f_{p\sigma,p'\sigma'}=f_{-p-\sigma,-p'-\sigma'} \tag{6.4.6}$$

Bundan başka $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ dönüşümü altında Fermi yüzeyi değişmez ise (6.4.6) denklemi $f_{p\sigma,p'\sigma'}= f_{p-\sigma,p'-\sigma'}$ eşitliğine dönüşür. $f_{p\sigma,p'\sigma'}$ terim yalnızca spinlerin yönelimine bağlı ise, yalnızca spin paralel ve spin antiparalel olmak üzere iki bağımsız bileşen vardır bu durumları da

$$f_{pp'}^{\uparrow\uparrow}=f_{pp'}^{s}+f_{pp'}^{a} \quad , \quad f_{pp'}^{\uparrow\downarrow}=f_{pp'}^{s}-f_{pp'}^{a} \tag{6.4.7}$$

şeklinde gösterebiliriz. Burada $f_{pp'}^{s}$ ve $f_{pp'}^{a}$ sırası ile quasiparçacıkları spinlerinin simetrik ve antisimetrik etkileşimlerini belirtir. $f_{pp'}^{a}$ terimini, "Exchange" (değiş tokuş) etkileşme enerjisinden kaynaklandığı düşünülebilir. $2f_{qq'}^{a}$ terimi spinler birbirine paralel ise oluşur. Sistem izotropik ise (6.4.7) bağıntısı daha da basitleştirilebilir, bu durumda $\vec{p}$ ve $\overrightarrow{p'}$ Fermi yüzeyinde olduğu için $f_{pp'}^{a}$ ve $f_{pp'}^{s}$ yalnızca $\vec{p}$ ve $\overrightarrow{p'}$ arasındaki θ açısına bağlıdır. Bu terimler Legendre Polinomları cinsinden seriye açılabilirler.

$$f_{pp'}^{s(a)} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l^{s(a)} P_l(cos\theta) \tag{6.4.8}$$

f, f_l^a ve f_l^s katsayıları tarafından belirlenir. Burada indirgenmiş "redused" bir birim tanımı yapmak uygun olacaktır. Buna göre

$$v(0) f_l^{s(a)} = \frac{\Omega m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} f_l^{s(a)} = F_l^{s(a)} \tag{6.4.9}$$

Tanımlanır ise boyutsuz F_l^s ve F_l^a büyüklükleri kinetik enerji ile karşılaştırılacak olan etkileşmelerin büyüklüklerini verir.

Kuasi Parçacıkların Lokal (Yerel) Enerjileri

Belli bir dağılıma sahip $\delta_{np'}$ uyarılmış kuasi parçacıkların oluştuğu sistemi göz önüne alalım. Bu sisteme fazladan bir $\vec{p}$ kuasi parçacığı eklensin. Denklem (6.4.4) ya göre bu fazladan kuasiparçacığın serbest enerjisi

$$\bar{\varepsilon_p} - \mu = (\varepsilon_p - \mu) + \sum_{p'} f_{p\,p'} \delta_{np'} \tag{6.4.10}$$

şeklindedir. Eğer $\vec{p}$ Fermi yüzeyine yeteri kadar yakın ise (6.4.10) bağıntısındaki iki terimin büyüklüğü aynı mertebedendir. Böylece kuasiparçacığın enerjisi, sistemin içinde bulunduğu duruma göre, diğer kuasiparçacıklarla etkileşmesine bağlıdır. Bu fiziksel etki, diğer etkileşmeyen sistemlerde yoktur. Bu terim (6.4.4) bağıntısındaki kuadratik terimden gelmektedir. $\overline{\varepsilon_p}$ büyüklüğü Landau teorisinde merkezi bir rol oynar. Bu terin anlamını daha iyi anlamak için sistemin birazcık inhomojen olduğunu düşünelim. Sistemin denge durumundan uzaklaşması uyarılmış kuasi-parçacıkların konuma bağlı $\delta_{p'}(\vec{r})$ dağılımı ile karakterize edilebilir. Sonuç olarak $\bar{\varepsilon_p}$, $\vec{r}$ ye bağlı, bu nedenle "local energy" yerel enerji olarak isimlendirilebir. Bu yerel enerji $\vec{r}$ noktasında ki ortamın değişiminin "distorsiyonunun" sonucu olarak düşünülebilir. Konum uzayında $\bar{\varepsilon_p}$ nın gradyanı

$$\Delta_r \bar{\varepsilon}_p = \Delta_r \{\sum_{p'} f_{pp'} \delta_{np'}\} \tag{6.4.11}$$

ifadesi $\vec{r}$ noktasında $\vec{p}$ kuasi parçacığa ortam tarafından uygulanan ortalama kuvvet olarak yorumlanabilir. Matematiksel olarak dağılım fonksiyonunu şu şekilde tanımlamak uygundur

$$\bar{n}_p^0 = n^0(\bar{\varepsilon}_p - \mu) \tag{6.4.12}$$

Burada n^0 bilinen Fermi-Dirac basamak fonksiyonudur.

$$n^0(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \tag{6.4.13}$$

Gerçek denge durumunu $n_p^0 = n^0(\varepsilon_p - \mu)$ temsil ediyor ise $\bar{n}_p^0$ birazcık inhomojen olmuş kuasi parçacıkların yerel denge durumuna karşılık gelir.

Bu denge durumundan ayrılmanın ölçüsü

$$\delta \bar{n}_p = n_p^0 - \bar{n}_p^0 \tag{6.4.14}$$

ile ölçülür. δn_p ve $\delta \bar{n}_p$ yi karşılaştıracak olursak

$$\delta n_p = \delta\bar{n}_p + \frac{\partial n_p^0(\varepsilon_p-\mu)}{\partial \varepsilon_p}(\varepsilon_p - \mu) \quad (6.4.15)$$

Olduğunu görürüz. (6.4.10) bağıntısını kullanacak olursak,

$$\delta\bar{n}_p = \delta n_p - \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_p}\sum_{p'} f_{pp'}\,\delta_{np'} \quad (6.4.16)$$

Elde ederiz. Pratikte δn_p her zaman $\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_p}$ terimini içerecektir. Sıfır sıcaklıkta

$$\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_p} = -\delta(\varepsilon_p - \mu) \quad (6.4.17)$$

Şeklindedir, buna göre hem δn hem de $\delta\bar{n}$ Fermi yüzeyi S_F ile sınırlandırılmışlardır.

Sıfır sıcaklıkta izotropik sistemler için δn_p ile $\delta\bar{n}_p$ arasındaki ilişki daha da basitleştirilebilir.

δn_p ve $\delta\bar{n}_p$ durumlarını spin simetrik ve spin antisimetrik olarak ayrılır ise

$$\delta n_{p_\pm} = \delta n_p^a \pm \delta n_p^s \quad (6.4.18)$$

Ayrıca bu büyüklükler normalize edilmiş küresel harmonikler cinsinden seriye açılabilir.

$$\delta n_p^s = \sum_{l,m} \delta(\varepsilon_p - \mu)\delta n_{lm}^0\, Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad (6.4.19)$$

Burada (θ,φ) $\vec{p}$ nin kutupsal açılarıdır. δn_p $\delta\bar{n}_p$ ve $f_{pp'}$ ifadesi, küresel harmoniklerin toplanması teoremini de kullanarak yerlerine yazılırsa,

$$\delta\bar{n}_{lm}^s = (1 + \frac{F_l^s}{2l+1})\delta n_{lm}^s$$

$$\delta\bar{n}_{lm}^a = (1 + \frac{F_l^a}{2l+1})\delta n_{lm}^a \quad (6.4.20)$$

Bulunur. F_l^s ve F_l^a (6.4.9) bağıntısı ile verilmişti. Buradan da δn_p ve $\delta\bar{n}_p$ ye geçmek artık kolaydır. $\delta\bar{n}_p$ ifadesi daha sonraki bölümlerde sıkça kullanılacaktır.

6.5 Kuasiparçacıkların Sonlu Sıcaklıktaki Dağılımı

T sıcaklığında, μ kimyasal potansiyeline sahip bir sistemi göz önüne alalım. Kimyasal potansiyel aynı zamanda

$$\mu = (\frac{\partial E}{\partial N})_s \quad (6.5.1)$$

Şeklinde de ifade edilebilir. Temel termodinamik kullanılarak

$$\mu = (\frac{\partial E}{\partial N})_T - T(\frac{\partial S}{\partial N})_T \quad (6.5.2)$$

Olduğu gösterilebilir. Çok düşük sıcaklıklarda (6.5.2) daki ikinci terim 1.terim ile kıyaslandığında ihmal edilebilir. Bu durumda kimyasal potansiyel E'nin N'ye göre izotermal durum için türevine eşit olacaktır ve bu işlem kolayca yapılabilir.

Denge durumu için kuasiparçacıkların dağılımını bilinen yöntemlerle yapılır. Bir n_p dağılımı için kuasi parçacıkların çeşitli işgal etme durumlarına W tane değişik yolla dağılacağını, serbest enerjiyi sabit tutarak ve W'yı maksimize ederek n_p dağılımının

$$n_p^0(T,\mu) = \frac{1}{1+\exp[\frac{\bar{\varepsilon}_p - \mu}{kT}]} \quad (6.5.3)$$

Olduğunu bulunur. Burada $\bar{\varepsilon}_p$, $n_p^0(T,\mu)$ dağılımına uyan quasiparçacığın yerel enerjisidir. W_{max} değerinden $S = klogW_{max}$ ifadesi ile entropi elde edilir. Böylece sistemin istenilen makroskobik termodinamik büyüklüklerine geçiş sağlanır. Lokal (yerel) enerji $\bar{\varepsilon}_p$ (6.4.8) bağıntısı ile verilir. δn_p ise burada

$$\delta n_p = n_p^0(T,\mu) - n_p^0(0,\mu) \quad (6.5.4)$$

Şeklindedir. Çok düşük sıcaklıklarda $\int \delta n_p p^2 dP$ ifadesi momentum uzayında herhangi bir yönde T^2 ile orantılıdır. Uyarılmış quasiparçacıklar arası etkileşmelerin yok olması da aynı mertebededir, bu yüzden bu etkileşme terimleri, T ile orantılı olan $(\varepsilon_p - \mu)$ ile kıyaslandığında ihmal edilebilirler. Böylece düşük sıcaklık limitinde (6.4.3) deki dağılım ifadesinde $\bar{\varepsilon}_p$ ile $\varepsilon_p$yi yer değiştirebiliriz. Bu yapıldığında sabit μ için, T^2 mertebesine kadar, parçacık sayısı da sabit kalır. Termal hareketler yalnızca Fermi yüzeyinden kT kadar uzakta quasiparçacıkları uyaracaktır.

Landau Teorisinde yalnızca T'li terimleri göz önüne almalıyız. Daha yüksek mertebeli terimlere gerek yoktur. Spesifik ısı

$$C_v = (\frac{\partial E}{\partial T})_N \quad (6.5.5)$$

Veya daha uygun bir ifade olarak

$$C_v = (\frac{\partial F}{\partial T})_\mu \quad (6.5.6)$$

C_v 'yi hesaplamak için (6.4.4) da verilen serbest enerjiyi yazmalıyız.

$$F - F_0 = \sum_p (\epsilon_p - \mu)\delta n_p + \frac{1}{2}\sum_{pp'} f_{pp'}\delta n_p\, \delta n_{p'} + O(\delta n^3)$$

(6.4.4) ile verilen bu terimde δn_p li terimin katkısı T^2 ile orantılı, (6.4.4) daki etkileşme enerjisi T^4 ile orantılı bu yüzden esas terim olan T^2 yanında ihmal edilebilir. Buna göre

$$F(T) - F_0 = \frac{\pi^2}{6}\upsilon(0)(kT)^2 \qquad (6.5.7)$$

Burada $\upsilon(0)$ durum yoğunluğu (6.3.12) ile verilmişti. İzotropik sistem için

$$\upsilon(0) = \frac{\Omega\mu P_F}{\pi^2\hbar^2} \qquad (6.5.8)$$

Şeklindedir, bu değer kullanılarak buradan

$$C_v = \frac{m^* P_F}{3\hbar^3}k^2 T \qquad (6.5.9)$$

bulunur. Böylece spesifik ısının deneysel olarak ölçülmesi ile elde edilen sıcaklığa bağlı lineer eğimden quasiparçacıkların etkin m^* kütlesi bulunabilir. C_v quasiparçacıklar arası etkileşmeye bağlı değildir. Bu sonuçlar ise Landau teorisinin başarısını gösterir.

6.6 Sıvı Helyum ile İlgili Diğer Çalışmalar

Önceki bölümlerde anlatıldığı gibi maddenin gaz, sıvı, katı faz değişimlerini belli koşullar altında sıcaklık düşürülerek elde edileceği ile ilgili klasik fizik yasalarının uymadığı örneklerden birisi sıvı helyumdur. Helyumun ^3_2He , ^4_2He gibi iki izotopu vardır ve bu iki izotop düşük sıcaklıklarda tamamen kendilerine özgü farklı davranış gösterirler. ^4_2He düşük sıcaklıklarda Bozon sıvısı davranışı gösterir ve sıvılaşma sıcaklığı $T_\lambda = 2.172\ K$ dir. Bu durumda parçacıklar arasında güçlü etkileşmeler vardır ve Bose-Einstein yoğuşmasına benzer süperakışkanlık özelliği gösterir. Bunun yanında ^3_2He te düşük sıcaklıklarda Fermiyonik sıvı özelliği gösterir fakat süperakışkanlık özelliği farklı olarak metallerdeki elektronların süperiletken özelliğine benzer. Fakat bu olay nötral bir sistemde gerçekleştiği için süperiletkenlerdeki gibi çit oluşumu (pairing) olmasına rağmen, metallerdeki *Meisner olayı* yoktur. Bu çift oluşturma olayının da kendine özgü karakteri vardır. Metallerde olduğu gibi zıt yönlü birbirine paralel singlet(tekli) durumların yerine , triplet (üçlü) durumlar çift oluşturur. Bu ise faz diyagramında çeşitliliğe sebep olur. Sıvı helyum sisteminin incelenmesi için Green fonksiyonları yöntemi iyi sonuçlar vermez. Bu nedenle sıvı helyum sistemi gibi kuvvetli

etkileşen çok parçacıklı sistemler için eskiye dayanan ve oldukça zengin bir teoriler literatürü mevcuttur. Bu çalışmaların başlangıcında Pairing (çift oluşumu) teorisi (PT) yaygın olarak kullanılmıştır. Bu teori problemin incelenmesinde basitliği nedeni ile kullanılan ilk yaklaşımlardan biridir. Buna göre sistemdeki etkileşmeler ikili etkileşmelerin toplamı olarak ifade edilir. Ayrıca bu varsayım ikili etkileşmelere sahip ikililerin başka parçacıklarla etkileşmeyeceğini de varsayar. Bu yaklaşımın seyrek gazlar gibi zayıf etkileşen sistemlerde iyi sonuçlar vereceği fakat güçlü etkileşmelere sahip sıvı helyumda iyi sonuçlar vermeyeceği açıktır. Fakat yine de PT çok parçacık fiziği teorisinde önemli bir yer tutar. Fikir 1947 yılında Bogoliubov tarafından ortaya atılmış ve süperiletkenlere uygulanmıştır. Süperiletkenlerin BCS teorisinde etkileşmeler görece zayıf olduğu için teori iyi sonuçlar vermiştir. Benzer kavramlar Helyumun süperakışkanlık özelliklerin açıklamak için kullanılmış fakat bu durum için uygun olmadığı uzun süren çalışmalar sonunda anlaşılmıştır. PT yaklaşımında sistemin Hamiltomiyeni

$$H = \sum_j \frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i,j} V(r_i, r_j) \qquad (6.6.1)$$

Şeklinde yazılabilir. Etkileme terimi için helyum atomları küresel alınabilir ve elektronların uyarımları ihmal edilebilir. Çünkü $E_{atom}^{Kinetik} \sim 15\ K$ çivarı iken, elektronik uyarımlar için gerekli enerji $\sim 20K$ civarıdır. Bu durumda . ^4_2He atomları kendi aralarında $V(r)$ potansiyeli ile etkileşen Bozon gazı gibi davranır. ^3_2He ise nükleer sipinden kaynaklanan fazladan bir serbestlik derecesi vardır ve bu sisteme Fermiyonik karakter kazandırır. Bu yaklaşımlara göre atomlar arası etkileşme potansiyel terimi

$$V(r) = 4\epsilon[(\frac{\sigma}{r})^{12} - (\frac{\sigma}{r})^{6}] \qquad (6.6.2)$$

şeklinde $Lennard - Jones\ (L-J)$ veya $(6-12)$ olarak adlandırılan çift potansiyel olarak alınır. Bu çift potansiyeli sistemi gerçek olarak temsil etmekten çok matematiksel olarak basit olduğu için yaygın olarak kullanılmaktadır. Fakat günümüzde daha iyi potansiyeller kullanılmaktadır. PT yaklaşımında sistemin Hamiltoniyeni

$$H = H_0 + V \qquad (6.6.3)$$

Şeklinde alınırsa H_0 terimi etkileşmenin olmadığı kinetik enerji terimidir. H_0 özdurumları olan serbest parçacık durumlarının oluşturduğu alana göre ikinci kuantizasyon (veya parçacık sayısı) gösteriminde H şu şekildedir.

$$H = \sum_p \varepsilon_p C_p^\dagger C_p + \frac{1}{2}\sum_{k'kq} V(q)\, C_{k-q}^\dagger C_{k'+q}^\dagger C_{k'} C_k \qquad (6.6.4)$$

$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m} - \mu$ dür. (6.6.4) Hamiltoniyeni ^3_2He için yazıldığında ayrıca sipin indisi de eklenmelidir. $V(q)$ terimi $V(r)$ nin Fourier dönüşümüdür. Burada problemlerden birisi $V(r)$ nin Fourier dönüşümünün alınabilmesi problemidir ($L-J$ için alınamaz) fakat bu problem etkileşme terimi saçılma matrisi ($T\ matrisi$) cinsinden yazılabileceği için sorun yaratmaz. Bu durumda Helyum sıvısında Hartree ve Değiştokuş (Exchange) terimleri , daha önce tanımlanan self-enerji teriminin S matrisi cinsinden ifadesindeki yalnızca birinci terim oluşturulabilir. Bu ise etkileşmelerin zayıf olduğu duruma karşılık gelir. Bu durum her ne kadar sıvı helyum için doğru değilse de PT için uygun bir yaklaşımdır. Buna göre

$$\Sigma(k) = n_0 V(q=0) \mp \frac{1}{V}\sum_q n(\varepsilon_{k+q}) V(q) \qquad (6.6.5)$$

olacaktır. Burada $(-)\ ^3_2He$, $(+)\ ^4_2He$ ü belirtmektedir. Bozonik ^4_2He için simetrik dalga fonksiyonu

$$\Psi_{k_1k_2}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_{k_1}(r_1)\Phi_{k_2}(r_2) + \Phi_{k_1}(r_2)\Phi_{k_2}(r_1)] \qquad (6.6.6)$$

Burada $\Phi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik.r}$ şeklinde serbest parçacık düzlem dalgalardır. Bu şekilde tanımlanan dalga fonksiyonu için

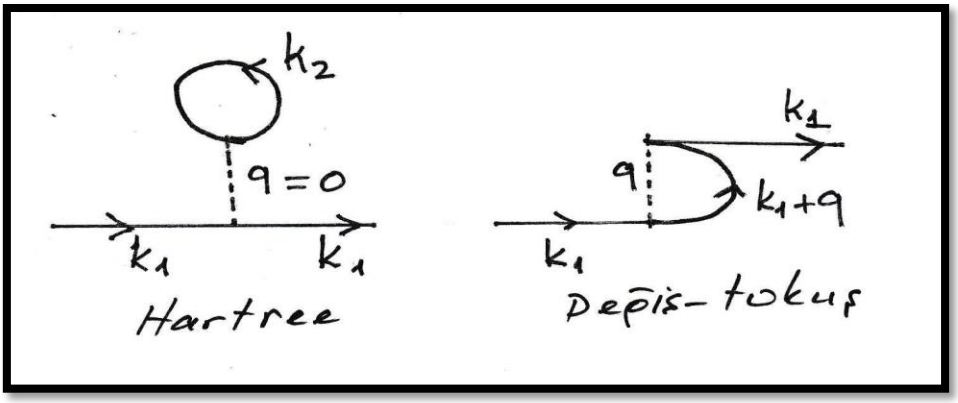
$$< V > = \sum_{k_1k_2} n(\varepsilon_{k_1}) n(\varepsilon_{k_2}) \int d^3r_1 \int d^3r_2 \left|\Psi_{k_1k_2}(r_1, r_2)\right|^2 V(r_1 - r_2)$$

$$= \sum_{k_1k_2} n(\varepsilon_{k_1}) n(\varepsilon_{k_2}) \int \frac{d^3r_1}{V} \int \frac{d^3r_2}{V} V(r_1 - r_2)(1 + e^{i(r_1 - r_2)(k_1 - k_2)}) \qquad (6.6.7)$$

Burada $R = \frac{1}{2}(r_1 + r_2)$ ve $r = (r_1 - r_2)$ şeklinde kütle merkezi ve bağıl koordinat dönşümleri uygulanıp integral alınırsa

$$< V > = \sum_{k_1} n(\varepsilon_{k_1}) \left[\frac{V(q=0)}{V} \sum_{k_2} n(\varepsilon_{k_2}) + \frac{1}{V}\sum_{k_2} n(\varepsilon_{k_2}) V(k_1 - k_2)\right] \qquad (6.6.8)$$

Elde edilir. Burada ilk terim $q = 0$ olan doğrudan etkileşme terimi olan Hartree terimidir. İkinci terim ise değiş-tokuş terimidir. Bu iki terimin Feynman diyagramı çizimleri aşağıdaki şekilde gibidir.



Şekil (6.1) (6.6.8) bağıntısı ile verilen Hartree ve Değiş-tokuş terimlerinin gösterimi.

Bundan sonraki adım Hartree ve değiş-tokuş terimlerinde $V(q)$ ifadesini uygun T saçılma matrisi ile yer değiştirmektir. T saçılma matrisi

$$T_{k'k} = \int d^3r \Phi_{k'}(r) V(r) \Phi_k(r) \tag{6.6.9}$$

Şeklinde tanımlanır. $V(r)$ potansiyel engelinde saçılan düzlem dalgalar göz önüne alındığında

$$T_l(k',k) = \int_0^\infty d^3r J_l(k'r) V(r) R_l(kr) \tag{6.6.10}$$

Yazılabilir. Burada $J_l(k'r)$,$R_l(kr)$ fonksiyonları Bessel fonksiyonları ve radyal dalga fonksiyonlarıdır. δ_l faz kayması olmak üzere saçılma tesir kesiti

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) sin^2(\delta_l) = -\frac{2}{V_k} Im T_{k'k} \quad , \text{ veya} \tag{6.6.11}$$

$$-2Im T_{k'k} = 2\pi \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |T_{k'k}|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) \tag{6.6.12}$$

Şeklinde elde edilir. Böylece $V(q)$ terimini hesaplanması yapılır. Fakat bu yöntemin Helyumun süperakışkanlık özelliklerini vermeyeceğini daha önce belirtmiştik çünkü ^4_2He sisteminde süperakışkan durumunda atomlar arasında güçlü etkileşmeler söz konusudur. Bu nedenle atomlar arasında yüksek korelasyonlar mevcuttur ve bu korelasyon etkileri hesaba katılmalıdır. Buna göre parçacıklara ait dalga fonksiyonlarını düzlem dalga şeklinde almak iyi bir yaklaşım değildir. Çift oluşumu ve BEC yoğuşması olayında parçacıklar sıfır momentumlu durumları işgal edip etmemelerine göre tanımlanırlar bu nedenle düzlem dalgalar dışında farklı bir dalga fonksiyonu setine ihtiyaç vardır. Bu durum Yang, Penrose ve Onsager tarafından tartışılmış ve $of-diagonal\ long-range\ order$ (ODLRO) yöntemi geliştirilmiştir. Bu yöntem kristallerde olduğu gibi düzenli yapıya sahip "diyagonal long range order " (DLRO) (köşegen

uzun mesafa düzen) dan farklıdır. ^4_2He atomları yüksek basınç altında sıkıştırıldığında kristal yapı yani DLRO oluşur halbuki süperakışkan durumunda ise ODLRO mevcuttur. Bu iki düzen arasındaki temel fark her iki duruma karşılık gelen yoğunluk matrislerinin farklı olmasıdır.

İncelen ^4_2He sisteminde yaklaşık Avagadro sayısı ($\sim 10^{23}$) kadar parçacık vardır. Bu sistemin taban durumu göz önüne alındığında , taban durumu dalga fonksiyonu $\Psi_0(r_1, r_2, \dots, r_N)$ olsun BEC veya süperakışkan durumda bütün bu parçacıkların sürekli $k = 0$ durumunda olacağı düşünülmemelidir. Sistemdeki parçacıklar güçlü etkileşme ve korelasyonlara sahip olmalarına rağmen kısa sürede olsa $k = 0$ durumunda bulunurlar. Çünkü sistem durgun değildir ve kuantum mekanik yasalara uygun davrandığı için sıfır nokta enerjisi vardır, bu nedenle en düşük enerji seviyesi taban durumuna karşılık gelir. ^4_2He te $T = 1\ K$ için parçacık başına ortalama kinetik enerji $15\ K$, ortalama potansiyel enerji $-22\ K$ dır. Bu nedenle ortalama bağlanma enerjisi $-7\ K$ dır. Kinetik enerjinin büyüklüğü sıfır nokta enerjisinden kaynaklanmaktadır. Bu nedenle klasik kinetik teoriden elde edilen

$$< E_{Kin} > = \frac{3}{2} k_B T \tag{6.6.13}$$

Bağıntısı geçerli değildir. Buna göre ^4_2He sisteminin taban durumu $\Psi_0(r_1, r_2, \dots, r_N)$ önemli miktarda sıfır nokta enerjisine sahiptir. Bu dalga fonksiyonuna göre bir parçacığın r_j de bulunma olasılığı

$$\rho_N(r_1, r_2, \dots, r_N) = |\Psi_0(r_1, r_2, \dots, r_N)|^2 \tag{6.6.14}$$

Şeklindedir ve $diyagonal\ yoğunluk\ matrisi$ olarak adlandırılır. N parçacık sayısı olmak üzere yoğunluk matrisi normalize bir büyüklüktür, buna göre

$$\int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_N\, \rho_N(r_1, r_2, \dots, r_N) = 1 \tag{6.6.15}$$

dir. Buna göre bir parçacık yoğunluk matrisi $\rho(r_1)$, r_1 dışında diğer tüm koordinatlar üzerinden integral alınarak

$$\rho_1(r_1) = \int d^3r_2 \dots d^3r_N\, \rho_N(r_1, r_2, \dots, r_N) \tag{6.6.16}$$

Şeklinde elde edilir. Buna göre

$$\int d^3r_1\, \rho_1(r_1) = 1 \tag{6.6.17}$$

olacağı açıktır. Burada $\rho(r_1)$, 1 parçacığının olasılığı değil de N parçacıktan herhangi bir parçacığın r_1 de bulunma olasılığıdır. Bütün parçacıklar özdeş olduğu için açısal dağılım göz

önüne alınmazsa $\rho_1 = \frac{1}{V}$ dir. Diğer kullanışlı bir yoğunluk matrisi iki parçacık yoğunluk matrisidir, bunun içinde göz önüne alınan ikili dışındaki bütün koordinatlar üzerinden integral alınarak iki parçacık yoğunluk matrisi

$$\rho_2(r_1, r_2) = \int d^3r_3 d^3r_4 \dots d^3r_N \, \rho_N(r_1, r_2, \dots, r_N) \tag{6.6.18}$$

dir. Benzer şekilde $\int d^3r_2 \, \rho_2(r_1, r_2) = \frac{1}{V^2}$ dir. $\rho_2(r_1, r_2)$ şu anlamı taşır. Bozon sisteminde herhangi bir parçacık r_1 de iken ikinci bozonun r_2 de bulunma olasılığıdır. Sistem homojen ise bu olasılık $(r_1 - r_2)$ farkına bağlı olacaktır. Buna göre $g(r_1 - r_2)$ çift dağılım fonksiyonu ise

$$\rho_2(r_1, r_2) = \frac{1}{V^2} g(r_1 - r_2) \tag{6.6.19}$$

Şeklinde yazılabilir. $g(r_1 - r_2)$ çift dağılım fonksiyonu klasik plazma sistemlerinde de yaygın olarak kullanılan bir fonksiyondur. $r = (r_1 - r_2)$ için

$\lim_{r \to 0} g(r) \to 0$ ve $\lim_{r \to \infty} g(r) \to 1$ asimptotik özelliklere sahiptir. Buna göre $\lim_{r \to \infty} g(r) \to 1$ olduğunda $\rho_2 \to \frac{1}{V^2}$ ve $\int d^3r \rho_2(r) = \frac{1}{V}$ olur. Kristal yapıya sahip katılar düzenli periyodik sistemler oldukları için DLRO özelliğine sahiptirler. Bu durumda $g(r)$ örgü noktalarında keskin maksimum piklere sahip olacaklardır. $g(r)$ aslında , deneysel olarak doğrudan ölçülebilen yapı faktörlerinin Fourier dönüşümünden elde edilebilir, buna göre $S(q)$ yapı faktörü olmak üzere

$$S(q) = 1 + \rho \int d^3r e^{iq.r} [g(r) - 1] \tag{6.6.20}$$

Şeklinde yazılabilir. Böylece ikili etkileşmelerin sistem için yeterli bilgiyi verdiği sistemlerin deneysel sonuçları ile kuram arasında köprü kurulmuş olur. Bu bilgiler ışığında Penrose iki dalga fonksiyonunu çarpımından elde edilen genel yoğunluk matrisini şu şekilde tanımladı

$$\tilde{\rho}_N(r_1, r_2, \dots, r_N ; r'_1, r'_2, \dots, r'_N) = \Psi_0^*(r_1, r_2, \dots, r_N)\Psi_0(r'_1, r'_2, \dots, r'_N) \tag{6.6.21}$$

Bu şekilde tanımlanan yoğunluk matrisi ODLRO özeliği gösterir. Bu durumda da bir parçacık ve iki parçacık dağım fonksiyonları tanımlanır. Bu durumda hangi dalga fonksiyonlarının seçileceği ve korelasyon fonksiyonlarının nasıl tanımlanacağı günümüzde hala inceleme konusudur. Bu konuda oldukça geniş bir literatür mevcuttur.

BÖLÜM 7

7.1 Bose-Einstein Yoğuşması (BEC) Genel Kavramlar

Helyum atom gazının ^3_2He , ^4_2He iki izotopu $T = 0$ civarında farklı kuantum davranışı gösterirler, bu durum Bölüm 6 da daha detaylı olarak incelenmiştir. 1938 yılında Kapitza ^4_2He te 2.18 K dan düşük sıcaklıkta süper-akışkan fazın oluştuğunu deneysel olarak gözlemledi. Bu olayın nasıl oluştuğu ile ilgili yapılan çalışmaların devamında Bose-Einstein yoğuşması (Bose-Einstein condensation)(BEC) çalışmaları ortaya çıktı. He atomları arasındaki etkileşmeler kuvvetli etkileşmeler olduğu için bu süperakışkan durumu atomik ölçekte açıklayan tam bir teori günümüz çalışmalarının konusudur. Süperakışkanlık ile BEC arasındaki ilişki de hala araştırılan bir problemdir. ^3_2He ün bir çift oluşturarak tuzaklama yöntemleri ile 3 μK civarında süperakışkan hale geldiği 1972 de gözlendi. 1995 yılında 1 μK gibi çok düşük sıcaklıklarda alkali atomların belli geometrilerde tuzaklanması sonucu BEC oluştuğu gözlendi. 2006 da 100 nK civarında ^6_3Li izotopunun da BEC özelliği gösterdiği gözlendi.

Bozonlardan oluşmuş bir sistemde tuzaklama yolu ile Bose-Einstein yoğuşmasının nasıl oluştuğuna bakalım. $V = L^3$ hacminde ideal N tane Bozondan oluşmuş bir sistemi ele alalım. Her bir parçacık durumu $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ enerjisine sahiptir. Bu sistemde T sıcaklığında ideal gazın tipik dalga boyu olan deBroglie dalgaboyu $\lambda_T = (\frac{2\pi\hbar^2}{2mk_BT})^{1/2}$, $n^{-1/3}$ ten büyük olduğunda kuantum etkilerden dolayı Bose-Einstein istatistiği önemli olmaya başlar. $\lambda_T \approx n^{-1/3}$ koşulu aynı zamanda BEC için kritik geçiş sıcaklığının bulunmasını da sağlar.

Buna göre ^4_2He için $n = 2{,}186.10^{-22}\, cm^{-3}$ ve $m = 6{,}646.10^{-24} gr$ değerleri için $T = 3.13\, K$ elde edilir. Bu sıcaklık tek parçacık durumlarından yola çıkılarak elde edilmiştir ve ^4_2He te λ-sıcaklığı olarak bilinen Süperakışkanlık sıcaklığı ile uyum içerisindedir. $T < T_C$ olduğunda uniform olarak dağılmış olan ideal Bose gazı, makroskobik olarak gözlenebilecek kısmı tek parçacık enerji durumunun minimumu olan $\varepsilon_{k=0}$ durumunda bulunur ve $T = 0$ için $k = 0$ durumuna yoğuşur. Bu konuda yapılan deneysel çalışmalarda uniform dağılmış atomik gaz bir dış etki ile (potansiyel ile) hapsedilerek (sınırlandırılarak) uniform olmayan bir durum elde edilir. Bu homojen olmayan yeni durumda parçacık sayıları tipik olarak $10^4 - 10^7$ atom aralığı civarındadır. Bu hapsetme (tuzaklama) olayına biraz daha detaylı bakmak için atomik sistemi hapsedecek dış potansiyel

$$V(r) = \frac{1}{2} m w^2 r^2 \tag{7.1.1}$$

şeklinde harmonik bir potansiyel olsun. Bu durumda m kütleli bir atomun taban durumu

$d_0 = (\frac{\hbar}{m w_0})^{1/2}$ olmak üzere

$$\psi_0(r) = \frac{1}{\pi^{3/2} d_0^{3/2}} \exp(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{d_0^2}) \tag{7.1.2}$$

şeklindedir. Eğer parçacıklar arasında etkileşme yoksa tuzaklama(hapsedilme)(confinement) N tane Bozon parçacığın bu $\psi_0(r)$ durumuna yerleştirilmesi ile elde edilir. Buna göre toplam dalga fonksiyonu (sipinler göz önüne alınmaz ise) konum uzayında normalize edilmiş simetrik toplam dalga fonksiyonu

$\psi(1,2,3, \dots N) = \psi_0(r_1)\psi_0(r_2) \dots \psi_0(r_N)$ şeklindedir.

Basamak operatörleri cinsinden $|\psi_0>$

$$|\psi_0> = \frac{(a_0^+)^N}{\sqrt{N!}} |0> \tag{7.1.3}$$

dir. $\rho(r_i) = \sum_{i=1}^{N} \delta(r - r_i)$ şeklinde tanımlanan bir parçacık yoğunluk operatörünün taban durumuna yoğuşmuş durumu şöyledir,

$$\rho_{taban} = \int dr_1 \dots \int dr_N \, \psi^*(1,2, \dots, N) \sum_{i=1}^{N} \delta(r - r_i) \, \psi(1,2, \dots, N)$$

$$= \int dr_1 \dots \int dr_N \sum_{i=1}^{N} \delta(r - r_i) |\psi_0(r_1)\psi_0(r_2) \dots \psi_0(r_N)|^2 = N|\psi_0(r)|^2$$

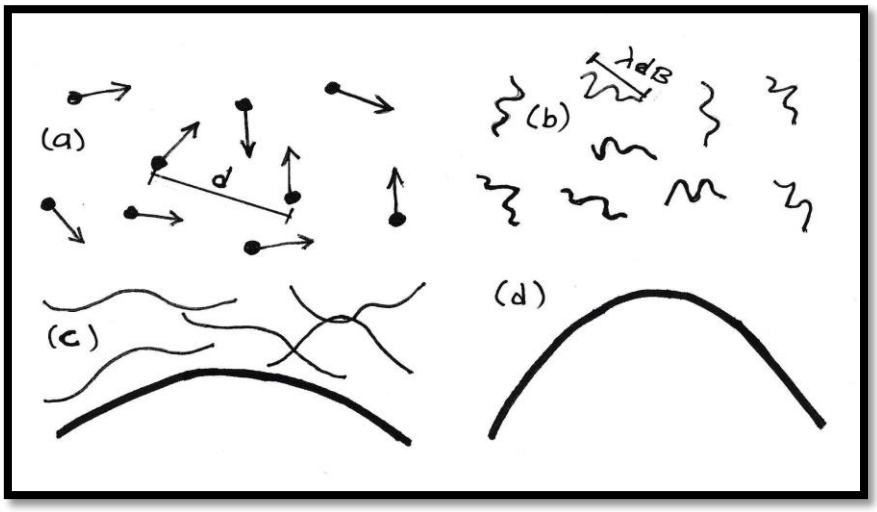
$$= \frac{N}{\pi^{3/2} d_0^{3/2}} \exp(-\frac{r^2}{d_0^2})$$

dir. Bu ifade $T = 0$ sıcaklığında d_0^3 etkin hacmini belirler. Yoğuşma durumunun hız dağılımı Fourier dönüşümü ile elde edilebilir.

$$\psi_0(k) = F[\psi_0(r)] \sim \exp(-\frac{d_0^2}{2}|k|^2) \tag{7.1.4}$$

buna göre hız dağılımı $Nexp(-d_0^2|k|^2)$ şeklinde bir Gauss dağılımına sahiptir. Anizotropik tuzaklar için yoğunluk ve hız dağılımları da bir anizotropiye sahiptir. Yapılan deneysel çalışmalarda küresel, silindirik ve disk şeklinde yoğunluk profilleri elde edilmiştir. Bu profiller

sıcaklığa çok bağlıdırlar. Bir sistem $T = T_C$ de yoğuşmaya geçtiğinde bu profiller belirgin bir şekilde keskin değişime uğrarlar.



Şekil 7.1 BEC oluşumunun şematik gösterimi. (a) Yüksek sıcaklıklarda Bose gazını oluşturan atomlar klasik parçacıklar davranışı gösterirler, bilardo topları gibi hareket ederler. T sıcaklığında belli bir $\boldsymbol{v}$ hızları vardır. d atomlar arası mesafe olmak üzere d^3 hacmi içinde serbest parçacık gibi hareket ederler. (b) Sıcaklık düşürüldüğünde atomlar kuantum mekanik dalga özelliği gösterirler, dalga boyları deBroglie dalga boyu λ_{dB} civarındadırlar. (c) Sıcaklık $T = T_C$ olduğunda $\lambda_{dB} = d$ civarı olur dalga boyları üst üste gelir, böylece yoğuşma başlar. (d) Tam BEC oluşması sırasında sisteme göre makroskobik (iri ölçekte) gözlenebilen madde dalgası oluşur. Bu tek bir duruma oluşan yoğuşmayı temsil eder.

$T > T_C$ olduğunda oluşan yoğuşma, genişliği $\sqrt{mk_BT}$ olan Maxwell tipi bir dağılıma sahiptir.

Örnek olarak $N = 10^6$ atom , $d = 10^{-3}cm$ olan Na atomları için $n \approx Nd_0^{-3} \approx 10^{15}cm^{-3}$, $m \cong 3{,}8.10^{-23}g$ T_C~$7\mu K$ olur.

Atomik gazlarda atomlar arası etkileşmeler genellikle zayıftır. Fakat bu zayıf etkileşmeler yinede önemlidirler. Örneğin Süperakışkanlık hiç etkileşmeyen ideal Bose gazında oluşmaz. Fakat zayıf etkileşen Bose gazında oluşur. Bu durum için $V = L^3$ hacmi içinde bulunan N tane zayıf etkileşen Boze gazı sistemini inceleyelim. Basit olması için sipinler göz önüne alınmasın. Atomlar, tek parçacık düzlem dalga durumlarına sahip olsun, bu durumda sistemin Hamiltoniyeni ikinci kuantizasyonda momentum uzayında

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2V}\sum_{kk'q} V(q) a_k^+ a_{k'}^+ a_{k'+q} a_{k-q} \qquad (7.1.5)$$

Şeklindedir. Burada $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ dır. Nötral atomlar için iki parçacık etkileşmeleri kısa mesafeli ve itici olmalıdırlar. Seyrek sistemler için mutlak sıfır sıcaklıkta tüm parçacıklar sıfır momentumlu duruma sahip olurlar. Bu durumda sadece küçük momentum transferleri söz konusudur. Bu nedenle bu durumda $V(q) = g = V(0)$ alınabilir. Sistemde etkileşme yok ise yalnızca $k = 0$ tek parçacık durumları işgal edilir. $k \neq 0$ ise $n_k = 0$ ve $n_0 = N$ dir. Zayıf etkileşmeler içinde bu durum yaklaşık olarak geçerlidir. Bu durumda $|N - n_0| \ll N$ koşulu geçerlidir. Bu koşul ise $[a_0, a_0^+] = 1$ komütasyon bağıntısının etkisini $a_0^+ a_0 \approx n_0$ ile kıyaslandığında ihmal edilebileceğini, a_0^+ ve a_0 ın basit sayı gibi alınıp $a_0^+ \cong a_0 \cong \sqrt{n_0}$ seçmemizi sağlar. Bu yaklaşım altında sistemin Hamiltoniyeni etkileşmelerin n_0 a göre en yüksek mertebesini içerecek şekilde

$$H \cong \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k + \frac{g}{2V}\{n_0^2 + n_0 \sum_{k\neq 0}(4a_k^+ a_k + a_{-k} a_k + a_k^+ a_{-k}^+)\} \qquad (7.1.6)$$

Şeklinde yazılabilir. $|N - n_0| \ll N$ yaklaşımına göre

$|N - (N - n_0)|^2 \approx N^2 - 2N(N - n_0) = N^2 - 2N \sum_{k\neq 0} a_k^+ a_k$ yazılabilir. Aynı zamanda N ye lineer bağlı terimlerde N yerine n_0 yazılarak Hamiltoniyen, $n = N/V$ olmak üzere,

$$H \cong N\frac{ng}{2} + \sum_{k\neq 0}\{(\varepsilon_k + ng)a_k^+ a_k + \frac{ng}{2}(a_{-k} a_k + a_k^+ a_{-k}^+) \qquad (7.1.7)$$

Haline gelir. Bu Hamiltoniyen artık a_k^+ ve a_k cinsinden kuadratik yapıdadır. Bu kuadratik sistem u_k ve v_k gerçel katsayılar olmak üzere $\alpha_k = u_k a_k - v_k a_{-k}^+$ şeklinde Bogoliubov dönüşümleri yardımı ile diyagonalize (köşegen hale getirme) edilebilir. Bu α_k dönüşümlerinin cebri ise,

$[\alpha_k, \alpha_{k'}] = [\alpha_k^+ \alpha_{k'}^+] = 0$, $[\alpha_k, \alpha_{k'}^+] = \delta_{kk'}$

Şeklindedir. Buna göre u_k ve v_k katsayıları ${u_k}^2 - {v_k}^2 = 1$ bağıntısını sağlarlar.

$u_k = u_{-k}$ ve $v_k = v_{-k}$ seçildiğinde

$\alpha_k^+ = u_k a_{-k}^+ - v_k a_k$ yazılabilir buna göre $a_k = u_k \alpha_k + v_k \alpha_{-k}^+$ ters bağıntıları sağlanır. Buna göre Hamiltoniyeni Bogoliubov dönüşümleri cinsinden

$H \cong N\frac{ng}{2} + \sum_{k\neq 0}[(\varepsilon_k + ng)v_k^2 + ngu_k v_k] + \sum_{k\neq 0}[(\varepsilon_k + ng)({u_k}^2 + {v_k}^2) +$
$2ngu_k v_k]\ \alpha_k^+ \alpha_k$

$$+\sum_{k\neq 0}[(\varepsilon_k + ng)u_k v_k + \frac{ng}{2}({u_k}^2 + {v_k}^2)][\,\alpha_{-k}\alpha_k + \alpha_k^+\alpha_{-k}^+] \qquad (7.1.8)$$

Bu ifadede eğer son terim ihmal edilir ise , Hamiltoniyen titreşim kiplerine ayrışmış Bozon sisteminin Hamiltoniyeni olarak düşünülebilir. Son terimin ihmal edilmesi için parantez içindeki katsayıların

$$(\,\varepsilon_k + ng)u_k v_k + \frac{ng}{2}({u_k}^2 + {v_k}^2) = 0$$

Şeklinde seçimi ile mümkündür. Bu seçime göre $2u_k v_k = -\frac{ng}{E_k}$ $E_k = \sqrt{\varepsilon_k(\varepsilon_k + ng)}$ olmak üzere

${u_k}^2 + {v_k}^2 = \frac{(\varepsilon_k + ng)}{E_k}$ olur. $E_0 = N\frac{ng}{2} + \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}(\,E_k - \varepsilon_k - ng)$ denirse

$$H \cong E_0 + \sum_{k\neq 0} E_k \alpha_k^+\,\alpha_k \qquad (7.1.9)$$

Olur. Uzun dalga boyu limitinde spektrum ses dalgası davranışını gösterir.

$s = \sqrt{\frac{ng}{m}}$ olmak üzere, $k \to 0$ limitinde ses dalgasının $E_k = \hbar s|k|$davranışı deneysel olarak sıvı helyumda gözlenmiştir. Bu doğrusal davranış hidrodinamik teoriden de elde edilebilir ve Landau'nun Süperakışkanlık teorisinde önemli bir yer alır. BEC geçişi esnasında bu davranış gözlenmelidir.

Sıfır sıcaklıkta yoğuşan parçacık sayısı

$$n_0 = N - \sum_{k\neq 0} < \psi_0|a_k^+ a_k|\psi_0 > \qquad (7.1.10)$$

Eşitliği ile verilir. Burada $|\psi_0 >$, $a_k|\psi_0 > = 0$ olan taban durumunu tanımlar. Kuasi (sanki) parçacıklar için bu vakum durumudur.

$k \neq 0$ durumları için momentum dağılımları Bogoliubov dönüşümleri yardımı ile

$$< \psi_0|a_k^+ a_k|\psi_0 >= v_k^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon_k + ng}{E_k} - 1\right) \qquad (7.1.11)$$

İfadesi ile elde edilir. k üzerinde toplam integralle yer değiştirdiğinde $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ olmak üzere

$$\sum_{k\neq 0} < \psi_0|a_k^+ a_k|\psi_0 > = \frac{V}{2(2\pi)^3}\int d^3k\left(\frac{\varepsilon_k + ng}{E_k} - 1\right)$$

$$= \frac{V}{4\pi^2}\sqrt{2}(\frac{m}{\hbar^2})^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty d\varepsilon\left(\frac{\varepsilon-ng}{\sqrt{\varepsilon-ng}}-\sqrt{\varepsilon}\right) = \frac{V}{4\pi^2}(\frac{m}{\hbar^2})^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}\frac{1}{3}(ng)^{3/2} \quad (7.1.12)$$

Elde edilir. $V(r) = g\delta(r)$ kontak potansiyeli için iki parçacık arasındaki elastik saçılmada toplam tesir kesiti

$\sigma = 4\pi(\frac{mg}{4\pi\hbar^2})^2$ ile verilir. Bunu $\sigma = 4\pi a^2$ ye eşitlersek $a = \frac{mg}{4\pi\hbar^2}$ elde edilir. Bu denklem (7.1.12) de yerine yazılır ise,

$$n_0 = N(1-\frac{8}{3\sqrt{\pi}}(na^3)^{\frac{1}{2}} \quad (7.1.13)$$

Şeklinde yoğuşan parçacıklar için basit bir sonuç elde edilir. Bu ifade taban durumundaki ideal Bozon sistemi ile karşılaştırıldığında etkileşmelerin yoğuşmayı azalttığı görülür. Sistemde $n_0 \approx N$ olduğu varsayılır ise $na^3 \ll 1$ olması gerektiği açıkça anlaşılır. Bu ise sistemin seyrek (dilute) olduğunu ve etkileşmenin bağlantı sabiti g nin küçük değerlerine karşılık gelen zayıf etkileşmeler olduğunu belirtir.

7.2 Gross-Pitaevskii Denklemi (GPD)

Bir yere hapsedilmiş soğuk Bozonik atomlar için parçacıklar arası ikili etkileşmelerin yanında tuzaklayıcının (veya hapsetme koşullarının) parçacıklara uyguladığı dış potansiyelde göz önüne alınmalıdır. V_t tuzak potansiyeli basitçe harmonik salınıcı potansiyeli olan . $V_t(r) = \frac{1}{2}mw^2r^2$ şeklinde, parçacıklar arası kısa mesafeli etkileşmeler ise $V(r_i - r_j) = g\delta(r_i - r_j)$ şeklinde olsun. Bu durumda ikinci kuantizasyonda sistemin Hamiltoniyeni

$$H = \int dr\{\psi^+(r)(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_t(r))\psi(r) + \frac{g}{2}|\psi^+(r)|^2|\psi(r)|^2\} \quad (7.2.1)$$

Şeklinde yazılabilir. Bu ifadede $\psi(r)$ ve $\psi^+(r)$ alan operatörleri Bozon alanlarını temsil eder. $V_t = 0$ olan homojen durum için Bogoliubov'un yöntemi uygulandığında Homojen durum için alan operatörü

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{n_0}{V}} + \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{k\neq 0} e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}\, a_k \quad (7.2.2)$$

Şeklinde yazılacak olursa eşitliğin sağ tarafındaki birinci terim klasik kısım, ikinci terim kuantum kısmını olarak düşünülebilir. Kuantum kısmı temsil eden alan kısmı

$K = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k \neq 0} e^{ik.r} a_k$ olmak üzere $\int dr K^+ K = (N - n_0) \ll N$ koşulunu sağladığı için etkisi zayıftır.

Homojen olmayan durum için ise Bogoliubov'un yöntemi $\psi(r) = Ø(r) + K(r)$ şeklinde uygulanır ise $Ø(r)$ klasik alanı, K(r) kuantum alanını temsil eder. Klasik alan $|Ø(r)|^2$ şeklinde yoğunluk profili makroskobik olarak gözlenebilen yoğuşmanın dalga fonksiyonunu temsil eder. $K(r)$ kuantum kısmı ise etkisi zayıf olduğu için klasik kısmın pertürbasyonu(tedirgemesi) olarak düşünülebilir. Eğer BEC yoğuşmasının taban durumu ile ilgileniliyor ise $\psi(r)$ yerine $Ø(r)$ alınabilir. Bu durumda

$$E[Ø(r)] = \int dr\{Ø^+(r)(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_t(r))Ø(r) + \frac{g}{2}|Ø(r)|^4\} \quad (7.2.3)$$

Şeklinde enerji fonksiyoneli elde edilir. Yoğuşma durumu bu fonksiyonelin $\int Ø^* Ø d^3r = N$ koşulunu sağlayacak şekilde $Ø(r)$ ye göre minimize edilmesi ile elde edilir. Bunun için μ kimyasal potansiyel olmak üzere

$\frac{\delta}{\delta Ø^*}\{ E[Ø(r)] - \mu \int Ø^* Ø \, d^3r\} = 0$ işlemi sonucunda

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_t(r) - \mu\right) Ø(r) + g|Ø(r)|^2 Ø(r) = 0 \quad (7.2.4)$$

Denklemi elde edilir. Bu denklem BEC için Gross-Pitaevski denklemi olarak adlandırılır. Eşitlikteki g ile başlayan ikinci terimin doğrusal olmadığı göz önüne alındığında bu tür denklemler, çok parçacık sistemlerinin $coherent$ eş fazlı davranışlarını veren doğrusal olmayan Shrödinger dalga denklemi olarak ta adlandırılır.

Kaynaklar[16,17,18,19,20].

1- Many-Particle Physics, G.D. Mahan, Plenum Press, 1986.
2- Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, H. Bruus, K. Flensberg, Oxford Press, 2005.
3- Introductory to Many Body Physics, Piers Coleman, Cambridge University Press 2016.
4- Introduction to many body problem, Dionys Baeriswyl, 2010

BÖLÜM 8

Çözümlü Örnekler.

Örnek 1.1

Dirac gösterimi

a) $\Phi_k(r)$ düzlem dalga serbest parçacık durumları Dirac gösteriminde

$< \boldsymbol{r}|\boldsymbol{k} > = |\boldsymbol{k} > = \Phi_k(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$ şeklinde ifade edilir.

b) Hidrojen atomunda elektrona ait dalga fonksiyonu (elektronik dalga fonksiyonu) konum ve sipin dalga fonksiyonu , elektronun sipini $s = \frac{1}{2}$ olduğu göz önüne alınarak $\Psi_{nlm_l\frac{1}{2}m_s}(r,\theta,\emptyset,s) = \Psi_{nlm_l}(r,\theta,\emptyset)\chi(s)_{\frac{1}{2}m_s}$ şeklinde yazılabilir. Buna göre elektronun konum dalga fonksiyonu $\Psi_{nlm_l}(r,\theta,\emptyset)$ Dirac gösteriminde şu şekilde ifade edilir.

$< \boldsymbol{r}|nlm > = |nlm > = \Psi_{nlm_l}(r,\theta,\emptyset)$

Benzer şekilde sipin dalga fonksiyonu

$< s|\frac{1}{2}m_s > = |\frac{1}{2}m_s > = \chi(\frac{1}{2}m_s)$

şeklinde yazılabilir. Buna göre

$\int \Psi^*_{n'l'm'_l}(r,\theta,\emptyset)\,\Psi_{nlm_l}(r,\theta,\emptyset)dV = \delta_{n'l'm'_lnlm_l} = \delta_{n'n}\delta_{l'l}\delta_{m_lm'_l}$

ifadesi Dirac gösteriminde

$< n'l'm'_l|\, nlm_l > = \delta_{n'n}\delta_{l'l}\delta_{m_lm'_l}$

şeklinde ifade edilir.

c) Fermiyonlardan oluşmuş bir sistemin taban durumu (veya vakum durumu) Dirac gösterimi kullanıldığında $|0>$ ile gösterilsin. Bu durumda $\forall q$ için $c_q|0> = 0$ dır. Buna göre bir parçacık durumu $|q> = c_q^+|0>$ olarak tanımlanır. Bu durum için

$< q|\, c_i^+ c_j|q > = \begin{cases} 1 & i = j = q \\ 0 & diğer\ durumlarda \end{cases}$, aynı zamanda

$< q|\rho(r)|q > = \psi_q^+(r)\psi_q(r) = |\psi_i(r)|^2$ olduğu açıktır.

Örnek 1.2

Bozon türü parçacıklar:

π mezonu ($S = 0$), foton ($S = 1$) , fonon ($S = 0$), magnon ($S = 1$), ${}_2^4He$, vb.

Fermiyon türü parçacıklar,

$S = 1/2$, elektron, proton, nötron, pozitron, ${}_2^3He$,..

Örnek **1.3**

İki özdeş parçacık $V(x) = \begin{cases} 0 & , \ 0 \le x \le L \\ \infty , & x < 0 \, , x > L \end{cases}$ şeklinde bir boyutlu bir sonsuz kuyu içinde hareket etmektedir. Buna göre;

a) Parçacıkların Bozon ve Fermiyon olamaları durumunda , parçacıkların oluşturduğu sisteme ait dalga fonksiyonu ve enerjiyi bulunuz.
b) $N \gg 1$ olduğunda Fermiyon ve Bozon sisteminin enerjisi ne olur?

Çözüm:

Sonsuz kuyu içindeki iki parçacık sisteminin Hamiltoniyeni

$H = H_1 + H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}({\nabla_1}^2 + {\nabla_1}^2) + V(x_1) + V(x_2)$ şeklindedir. Hamiltoniyen değişkenlerin toplamı şeklinde olduğu için iki parçacık sistemine ait dalga fonksiyonu iki parçacığa ait tek parçacık dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde yazılabilir. Buna göre

$H_i\Psi_i = E_i\Psi_i \quad (i = 1,2)$ ise $\Psi(r_1, r_2) = \Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)$ olacaktır.

Burada $\Psi_i(r_i) = \sqrt{\frac{2}{L}}\, sink_i x \ \ (k_i = \frac{n_i\pi}{L})$ ve $E_i = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n_i^2$, $n = 1,2,3$ ... dir. Parçacıların sipinleride göz önüne alındığında dalga fonksiyonları

$\Psi(r_1, r_2, S_1, S_2) = \Psi(r_1, S_1)\Psi(r_1, S_1) = \Phi_1(r_1)\chi(S_1, m_{S_1})\Phi_2(r_2)\chi(S_2, m_{S_2})$ şeklinde olur. Aynı zamanda parçacıklar ayırt edilemez parçacıklar olduğu için $\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)$ durumu H Hamiltoniyeninin bir öz durumu olduğu gibi $\Psi_1(r_2)\Psi_2(r_1)$ durumuda H nın bir özdurumudur.

Bu nedenle sistemin toplam dalga fonksiyonu bu iki durumun lineer süperpozisyonu olmalıdır. Ayrıca dalga fonksiyonu için Simetrileştirme ilkesi de göz önüne alındığında

Bozonlar için toplam dalga fonksiyonu simetrik , Pauli dışarlama ilkesine uyması için fermiyonlara ait toplam dalga fonksiyonu Antisimetrik olmalıdır. Buna göre;

a) Bozonlar için iki parçacık sisteminin dalga fonksiyonu

$$\Psi_{Toplam}^{Bozon} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\Phi_1(r_1)\chi(S_1, m_{S_1})\Phi_2(r_2)\chi(S_2, m_{S_2}) + \Phi_1(r_2)\chi(S_2, m_{S_2})\Phi_2(r_1)\chi(S_1, m_{S_1})\}$$

$$E = E_i + E_j = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_i^2 + n_j^2) \quad i, j = 1,2,3,..$$

b) Fermiyonlar için

$$\Psi_T^F = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\Phi_1(r_1)\chi(S_1, m_{S_1})\Phi_2(r_2)\chi(S_2, m_{S_2}) - \Phi_1(r_2)\chi(S_2, m_{S_2})\Phi_2(r_1)\chi(S_1, m_{S_1})\}$$

Olacaktır. Fermiyonlar için $(i, m_s) \neq (j, m_s)$ dir. Enerji ise

$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_i^2 + n_j^2)$ dir.

c) Kuyu içindeki parçacık sayısı $N \gg 1$ ise taban durumu için $n = 1$ için Bozon enerjisi

$E_0 = N\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$,

Fermiyonlar için $E_0 = 2\sum_{n=1}^{N/2}\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$ olacaktır.

d) $N = 3$ için benzer işlemleri yapınız.

Örnek 1.4

N tane parçacıktan oluşmuş bir sistemi göz önüne alalım.

a) Sistemin toplam dalga fonksiyonunun genel formunu Fermiyon ve Bozon durumları için yazınız. b) $N = 3$ için bir parçacık durumlarını kullanarak daha açık bir ifade yazınız.

Fermiyonlardan oluşmuş bir sistemin toplam dalga fonksiyonu Pauli dışarlama ilkesini sağlayabilmesi için antisimetrik olmalıdır. Bu durum Slater detarminantı yolu ile elde edilebilir. Bozonların Pauli prensibine uyması sözkonusu değildir, bu nedenle toplam dalga fonksiyonu simetrik olmalıdır. Buna göre Fermiyonlar için toplam antisimetrik dalga fonksiyonu $\psi_{AS}(1,2,3,..,N)$ olmak üzere

$$\Psi_{AS}(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \emptyset_\alpha(1) & \emptyset_\alpha(2) \dots & \emptyset_\alpha(N) \\ \emptyset_\beta(1) & \emptyset_\beta(2) \dots & \emptyset_\beta(N) \\ & \vdots & \\ \emptyset_\gamma(1) & \emptyset_\gamma(2) \dots & \emptyset_\gamma(N) \end{vmatrix}$$ şeklinde yazılabilir.

Bozonlardan oluşmuş sistem için ise

$\psi_S(1,2,3,..,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum P(\prod_{i=1}^{N} \emptyset_i)$ Burada P permütasyon operatörüdür.

b) $N = 3$ olan Fermion sistemi için (örneğin üç elektrona sahip Lityum atomu veya üç elektronlu iyonik atomların elektronik dalga fonksiyonu) antisimetrik olan toplam dalga fonksiyonu.

$$\Psi_{AS}(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \emptyset_\alpha(1) & \emptyset_\alpha(2) & \emptyset_\alpha(3) \\ \emptyset_\beta(1) & \emptyset_\beta(2) & \emptyset_\beta(3) \\ \emptyset_\gamma(1) & \emptyset_\gamma(2) & \emptyset_\gamma(3) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3!}} \{ \emptyset_\alpha(1) * [\ \emptyset_\beta(2) * \emptyset_\gamma(3) - \emptyset_\beta(3) * \emptyset_\gamma(2)]$$

$$- \emptyset_\alpha(2) * [\emptyset_\beta(1) * \emptyset_\gamma(3) - \emptyset_\beta(3) * \emptyset_\gamma(1)]$$

$$+ \emptyset_\alpha(3) * [\emptyset_\beta(1) * \emptyset_\gamma(2) - \ \emptyset_\beta(2) * \emptyset_\gamma(1)]\}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\emptyset_i$ bir parçacık normalize durum fonksiyonlarıdır. Parçacıklar elektronlardan oluşmuş ise $\emptyset_i = \psi_{n_i l_i m_{li,} m_{si}}(r_i, \theta_{i,} \varphi_i, \frac{1}{2}, m_{si})$ şeklindedir.

Bozonlar için $\psi_S(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum P(\prod_{i=1}^{3} \emptyset_i)$ olmak üzere $\psi_S(1,2,3)$ daha açık olarak şöyle yazılabilir.

$$\psi_S(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} (\emptyset_1(1)\emptyset_2(2)\emptyset_3(3) + \emptyset_1(1)\emptyset_3(2)\emptyset_2(3) + \emptyset_3(1)\emptyset_1(2)\emptyset_2(3) + \emptyset_3(1)\emptyset_2(2)\emptyset_1(3) + \emptyset_2(1)\emptyset_1(2)\emptyset_3(3) + \emptyset_2(1)\emptyset_3(2)\emptyset_1(3))$$

Burada $\emptyset_i(j)$ bir parçacık durum fonksiyonunda i Bozon parçacığının dalga sayısı, polarizasyonu gibi kuantum sayılarını, j ise uzaysal kısmını ifade eder. Bozonlar Pauli prensibine uymadıkları için , $1 \neq 2 \neq 3$ durumları yanında, $1 = 2 = 3$ durumları da mümkündür. Buna göre 3 bozonun aynı uzaysal konumda aynı kuantum durumlarında bulunma olasılıkları $\sqrt{3!} = 6$ dır. Böylece

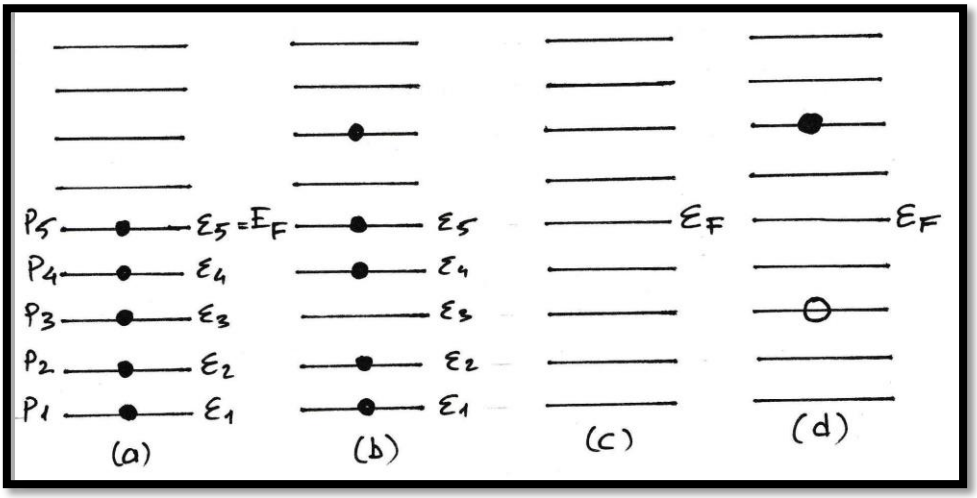
$\psi_S(1,2,3) = \frac{\sqrt{3!}}{\sqrt{3!}} (\emptyset_1(1)\emptyset_2(2)\emptyset_3(3)) = \emptyset_1(1)\emptyset_2(2)\emptyset_3(3)$ şeklindedir.

Dikkat: N parçacık Bozon veya Fermiyon dalga fonksiyonu $\sqrt{N!}$ Terimini içerir. N birkaç parçacıktan oluşuyor ise problem genellikle analitik veya yarı analitik olarak incelenir. Fakat

parçacık sayısı N artıkça problem sayısal olarak çeşitli modeller yardımı ile çözülür. Bu durumda sayısal olarak bilgisayarda çözülen problemde büyük N değerleri için her seferinde $\sqrt{N!}$ Terimini hesaplamak ve değer olarak saklamak bilgisayar zamanı ve alanı için problem yaratır. Bu nedenle büyük N değerleri için $N!$ İfadesinin Stirling yaklaşımını olan $lnN! \approx NlnN - N$ yaklaşımını kullanmak uygundur.

Örnek 1.5

5 tane fermiyondan oluşmuş bir sistemi göz önüne alalım, bu fermiyonlar Pauli ilkesini sağlayacak şekilde mümkün enerji düzeylerine dağılırlar. Her bir fermiyonun kuantum sayıları p_i , enerjisi ε_i olmak üzere, (a) sistemin taban durumu dizilişini gösterir.Dolu en üst seviye ($\varepsilon_5 = E_F$) Fermi seviyesi olarak adlandırılır. (b) sistemin uyarılmış durumunu gösterir.



Bu sistem metallerde etkileşmeyen elektronlar için düşünüldüğünde elektron-boşluk gösterimi denilen bir gösterim de kullanılabilir. Buna göre taban durumunda $E = \varepsilon_F$ ye kadar bütün seviyeler dolu $E > \varepsilon_F$ olan bütün seviyeler boştur. (d) ise uyarılmış durumu belirtmektedir. Buna göre taban durumunda (Fermi denizi) bulunan bir elektron Fermi denizi dışına uyarıldığında, buna karşılık Fermi denizinde bir boşluk (deşik, oyuk, hole) oluşur.

Örnek 1.6

A, B, C gibi üç operatör aşağıdaki komütasyonu bağıntıların sağlar.

$$[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA$$

$$[A, BC] = [A, B]\, C + B\, [A, C]\,,$$

$\{A,B\} = AB + BA$ antikomütasyon ifadesi olmak üzere, $[A,BC] = \{A,B\}\,C - B\,\{A,C\}$ dir.

Örnek 2.1

N tane Fermiyon ve Bozon baz durumlarının alacağı değerler aşağıdaki tabloda Dirac gösteriminde verilmiştir.

N	Fermiyon durumları. $\lvert n_{q1}, n_{q2}, n_{q3}, \ldots\ldots >$
0	$\lvert 0,0,0,0, \ldots\ldots >$
1	$\lvert 1,0,0,0, \ldots\ldots >, \lvert 0,1,0,0, \ldots\ldots >, \lvert 0,0,1,0, \ldots\ldots >, \ldots$
2	$\lvert 1,1,0,0, \ldots\ldots >, \lvert 0,1,1,0, \ldots\ldots >, \lvert 1,0,1,0 \ldots\ldots >, \lvert 1,0,0,1, \ldots >, \ldots$
. .	. .
N	Bozon durumları. $\lvert n_{q1}, n_{q2}, n_{q3}, \ldots\ldots >$
0	$\lvert 0,0,0,0, \ldots\ldots >$
1	$\lvert 1,0,0,0, \ldots\ldots > \lvert 0,1,0,0, \ldots\ldots > \lvert 0,0,1,0, \ldots\ldots >, \ldots,$
2	$\lvert 2,0,0,0, \ldots\ldots > \lvert 0,2,0,0, \ldots\ldots > \lvert 0,0,2,0, \ldots\ldots >, \ldots,$
..	..

Örnek 2.2 N tane sipinsiz özdeş parçacıktan oluşmuş bir sistemde parçacıklar arası etkileşmeler ikili etkileşmeler şeklinde ise $V_{ij} = V(\lvert r_i - r_j \rvert)$ olmak üzere sistemin Hamiltoniyeni 1. kuantizasyonda

$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{ij} V(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)$ şeklindedir. Bu Hamiltoniyenin 2. Kuantizasyondaki temsilinin düzlem dalga çözümleri için

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}\sum_{kpq} V(q)\, a_{k+q}^\dagger a_{k-q}^\dagger a_p^\dagger a_k$$

Olduğunu gösteriniz.

2. Kuantizasyon için alan operatörleri

$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_\lambda a_\lambda(t)\,\Phi_\lambda(\boldsymbol{r})$ ve $\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)=\sum_\lambda a_\lambda{}^\dagger(t)\,\Phi_\lambda{}^\dagger(\boldsymbol{r})$

Olmak üzere bu operatörler $\Phi_k(r)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$ düzlem dalgaları için

$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_k a_k e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$, $\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_{k'} a_{k'}^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}}$

şeklini alır. Buna göre

$H=\int\psi^\dagger H\,\psi\,d^3r=\int\psi^\dagger(\sum_i\frac{p_i^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j))\psi d^3r$

$H=\int(d^3r\sum_{k'}a_{k'}^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}}(\frac{p_i^2}{2m})\sum_k a_k e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}+$

$\frac{1}{2}d^3r_1d^3r_2\sum_{k_1}\sum_{k_2}\sum_{k_1'}\sum_{k_2'}e^{-i\boldsymbol{k}'_1.\boldsymbol{r}_1}.e^{-i\boldsymbol{k}'_2.\boldsymbol{r}_2}V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)e^{i\boldsymbol{k}_1.\boldsymbol{r}_1}e^{i\boldsymbol{k}_2.\boldsymbol{r}_2}a_{k_2'}^\dagger a_{k_1'}^\dagger a_{k_2}a_{k_1})$

Burada birinci terimin 2. Kuantizasyondaki ifadesi kolaydır ve $\varepsilon_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ olmak üzere $\sum_k\varepsilon_k a_k^\dagger a_k$ ye eşittir. Bu terim daha önce (2.2.10) bağıntısında elde edilmişti. İkili etkileşmeleri içeren ikinci terim biraz işlem gerektiren terimdir. İkinci terimi ikili etkileşmelerde momentum korunumunu göz önüne alarak $\boldsymbol{k_1}+\boldsymbol{k_2}=\boldsymbol{k'_1}+\boldsymbol{k'_2}$ koşulunu sağlayacak şekilde

$$\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^6}\int d^3r_1d^3r_2\sum_{k_1}\sum_{k_2}\sum_{k_1'}\sum_{k_2'}e^{-i(\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'_1}).\boldsymbol{r_1}}.e^{-i(\boldsymbol{k_2}-\boldsymbol{k'_2}).\boldsymbol{r_2}}V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)a_{k_2'}^\dagger a_{k_1'}^\dagger a_{k_2}a_{k_1})$$

Şeklinde tekrar yazılabilir. Bu durumda

$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}$, $\boldsymbol{R}=\frac{\boldsymbol{r_1}+\boldsymbol{r_2}}{2}$ şeklinde bir dönüşüm yapıldığında

$\boldsymbol{r_1}=\frac{1}{2}\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}$ ve $\boldsymbol{r_2}=\boldsymbol{R}-\frac{1}{2}\boldsymbol{r}$ olacaktır. Buna göre yukarıdaki ifade şu şekilde yazılar.

$$\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^6}\int d^3rd^3R\sum_{k_1}\sum_{k_2}\sum_{k_1'}\sum_{k_2'}e^{-i(\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'_1}+\boldsymbol{k_2}-\boldsymbol{k'_2}).\boldsymbol{R}}.e^{-\frac{1}{2}i(\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'_1}-\boldsymbol{k_2}+\boldsymbol{k'_2}).\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})a_{k_2'}^\dagger a_{k_1'}^\dagger a_{k_2}a_{k_1})$$

Burada $\boldsymbol{R}$ li terim için delta fonksiyonunun

$\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3re^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}').\boldsymbol{r}}$

Şeklindeki özelliği kullanıldığında

$\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^3}\delta(\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'_1}+\boldsymbol{k_2}-\boldsymbol{k'_2})$ *

$\int d^3r \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_1'} \sum_{k_2'} e^{-\frac{1}{2}i(\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'}_1-\boldsymbol{k_2}+\boldsymbol{k'}_2).\boldsymbol{r}} V(\boldsymbol{r}) a^\dagger_{k_2'} a^\dagger_{k_1'} a_{k_2} a_{k_1}$

Şeklinde yazılabilir. Üstel terimde $\boldsymbol{k_1}+\boldsymbol{k_2}=\boldsymbol{k'}_1+\boldsymbol{k'}_2$ koşulu göz önüne alınır ise bu ifade

$\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^3}\delta(\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'}_1+\boldsymbol{k_2}-\boldsymbol{k'}_2)\int d^3r \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_1'} \sum_{k_2'} e^{-i(\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'}_1).\boldsymbol{r}} V(\boldsymbol{r}) a^\dagger_{k_2'} a^\dagger_{k_1'} a_{k_2} a_{k_1}$

Şeklinde yazılır. Bu ise yine δ fonksiyonundan dolayı

$\frac{1}{2}\delta(\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'}_1+\boldsymbol{k_2}-\boldsymbol{k'}_2)\sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_1'} \sum_{k_2'} V(\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'}_1) a^\dagger_{k_2'} a^\dagger_{k_1'} a_{k_2} a_{k_1}$

İfadesine eşittir. δ fonksiyonu için $\boldsymbol{k_1}-\boldsymbol{k'}_1=\boldsymbol{q}$ diyecek olursak $\boldsymbol{k_1}+\boldsymbol{k_2}=\boldsymbol{k'}_1+\boldsymbol{k'}_2$ korunum yasasına göre $\boldsymbol{k_2}-\boldsymbol{k'}_2=-\boldsymbol{q}$ olur. Bu ise toplamların dört bağımsız değişken yerine üç bağımsız değişken üzerinde yapılmasına indirger. Buna göre

$\boldsymbol{k_1}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$, $\boldsymbol{k_2}=\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}$, $\boldsymbol{k'}_1=\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k'}_2=\boldsymbol{p}$ toplama indisleri değişimi yapıldığında

$\frac{1}{2}\sum_{kpq} V(q)\, a^\dagger_{k+q} a^\dagger_{k-q} a^\dagger_p a_k$ ifadesi elde edilir. Böylece istenilen

$H=\sum_k \varepsilon_k a^\dagger_k a_k + \frac{1}{2}\sum_{kpq} V(q)\, a^\dagger_{k+q} a^\dagger_{k-q} a^\dagger_p a_k$

Hamiltoniyen ifadesi elde edilir.

Örnek 2.3

$\hat{\rho}=\sum_{i=1}^{N}\delta(r-\hat{r})$ şeklinde verilen elektron yoğunluk operatörünün ikinci kuantizasyondaki gösterimini alan operatörleri cinsinden yazınız.

$\rho(r)=\sum_{\sigma'\sigma''}\iint d^3r'\, d^3r'' < r'\sigma'|\delta(r-\hat{r})|r''\sigma'' > \Psi^+_{\sigma'}(r')\Psi_{\sigma''}(r'')$

$=\sum_{\sigma'\sigma''}\iint d^3r'\, d^3r''\delta(r-r'') < r'\sigma'|r''\sigma'' > \Psi^+_{\sigma'}(r')\Psi_{\sigma''}(r'')$

$=\sum_{\sigma'\sigma''}\iint d^3r'\, d^3r''\delta(r-r'')\delta(r'-r'')\delta_{\sigma'\sigma''}\Psi^+_{\sigma'}(r')\Psi_{\sigma''}(r'')$

$\rho(r)=\sum_\sigma \Psi^+_\sigma(r)\Psi_\sigma(r)$ Bulunur.

Örnek 2.4

a) Bir Boyutlu Ising Modeli.

Sipin sistemleri içinde yaygın olarak kullanılan sistemlerden birisi Ising sipin sistemidir. (2.3) bölümünde sipin sistemleri konusunda kısaca bahsedilmiştir. Buna göre bir kristal örgüyü ele alalım , her örgü noktasında sipin S_i olsun , sistemin Hamiltoniyeni

$$H = \sum_{\{i,j\}} \varepsilon_{ij} S_i S_j - \mu B \sum_i S_i \quad (1)$$

Şeklindedir. Burada ε_{ij} sipinlerarası etkileşme enerjisi, μ dipol momenti sabiti, B dış manyetik alandır. Ising sisteminin bir boyutlu ve iki boyutlu analitik çözümleri mevcuttur fakat üç boyutlu çözümleri nümerik olarak yapılmaktadır. Bu sistem 1 boyutta sonlu sıcaklıkta faz geçişi göstermez, 2 boyutta faz geçişi gösterdiği Onsager tarafından gösterilmiştir.

Ising sipin sisteminin bir boyutlu analitik çözümleri şu şekilde yapılır. N tane örgü noktasından oluşmuş peryodik yapıya sahip bir boyutlu sistemi ele alalım. En yakın komşu etkileşmelerinin aynı enerjiye sahip olduğunu varsayalım bu etkileşmeler enerjileri için $\varepsilon_{ij} = -\epsilon$ olsun. Böylece sistemde en düşük enerjili konfügürasyon sipinlerin hepsinin aynı yönlü olması durumudur. Peryodiklik koşulu $\{S_i\}$ durumlarının $S_{i+1} = S_i$ olması ile ifade edilir. Buna göre verilen bir konfügürasyon için sistemin toplam enerjisi

$$E\{S_i\} = -\epsilon \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} - \mu B \sum_{i=1}^{N} S_i \quad (2)$$

Şeklinde yazılır. Buna göre $Z = \sum e^{-\beta H}$ şeklindeki bölüşüm fonksiyonu

$$Z_N(T,B) = \sum_{S_i=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp[\beta \sum_{i=1}^{N} (\epsilon S_i S_{i+1} + \frac{1}{2}\mu B(S_i + S_{i+1}) \quad (3)$$

şeklindedir. Son terimde

$$\sum_{i=1}^{N} S_i = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} (S_i + S_{i+1})$$

eşitliği kullanılmıştır. Şimdi $2x2$ boyutlu bir matris tanımlayalım

$$\tilde{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(\epsilon+\mu B)} & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon-\mu B)} \end{pmatrix} \quad (4)$$

$\tilde{P}$ nin matris elemenları

$$< S_i | \tilde{P} | S_{i+1} > = e^{\beta(S_i S_{i+1} + \frac{1}{2}\mu B(S_i + S_{i+1})} \text{ veya } < S | \tilde{P} | S' > = e^{\beta(\epsilon S S' + \frac{1}{2}\mu B(S+S')}$$

ifadesinde $\{S_i, S_{i+1}\} = \pm 1$ veya $\{S, S'\} = \pm 1$ değerleri aldığı için , (4) matrisinin yapısı kolayca elde edilir. Bu durumda (3) bölüşüm fonksiyonu

$$Z_N(T,B) = \sum_{S_1} \cdots \sum_N < S_1 | \tilde{P} | S_2 >< S_2 | \tilde{P} | S_3 > \cdots < S_N | \tilde{P} | S_1 > \quad (5)$$

Olacaktır. $|S_2 >< S_2| = 1$ olduğuna göre bölüşüm fonksiyonu

$$Z_N(T,B) = < S_1 | \tilde{P}^N | S_1 > = Tr[\tilde{P}^N] = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N [1 + (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^N] \quad (6)$$

Şeklinde ifade edilebilir. Burada λ_+ ,λ_- $\tilde{P}$ matrisinin özdeğerleridir ve şu şekildedirler.

$$\lambda_\pm = e^{\beta\epsilon}[\mathrm{Cosh}(\beta\mu B) \pm \sqrt{Cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta\epsilon} Sinh(2\beta\epsilon)}] \quad (7)$$

$\lambda_+ > \lambda_-$ olduğunu varsayalım $N \to \infty$ limitinde $\lim_{N\to\infty} (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^N \to 0$olacağından yalnızca λ_+ özdeğeri termodinamik büyüklüklere katkıda bulunur. Buna göre örgü sisteminde her örgü noktası başına düşen Gibss serbest enerjisi

$$g(T,B) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} G_N(T,B) = -k_B T \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln[Z_N(T,B)] = -k_B T ln(\lambda_+) \quad (8)$$

Şeklinde elde edilir. Buna göre

$$g(T,B) = -\epsilon - k_B \ln\{\mathrm{Cosh}(\beta\mu B) + \sqrt{Cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta\epsilon} Sinh(2\beta\epsilon)}\} \quad (9)$$

olur. Bu sistemin düzen parametresi

$$< S > = -\left(\frac{\partial g}{\partial \mu B}\right)_T = \frac{Sinh(\beta\mu B)}{\sqrt{Cosh^2(\beta\mu B) - 2e^{-2\beta\epsilon} Sinh(2\beta\epsilon)}} \quad (10)$$

şeklindedir. Bu sonuçta açıkça görüleceği gibi bu şekilde tanımlanan bir boyutlu Ising modelinde kendiliğinden bir faz geçişi gözlenmez. Çünkü $B = 0$ alındığında (10) eşitliği ile verilen düzen parametresinde paydadaki $Sinh(\beta\mu B)$ ifadesi sıfır olacağı için, düzen parametresi de sıfır olacaktır. Bu sonucun elde edilmesi bir boyutta en yakın komşu etkileşme enerjilerinin termal enerjiyi bastıracak kadar yeterli olmamasıdır.

b) d-Boyutlu örgü için ortalama alan yöntemi.

d-boyutlu Ising latisi için Weiss tarafından ortaya atılan ortalama alan teorisi kullanılarak, termodinamik büyüklükler için yaklaşık çözümler elde edilebilir. Buna göre d-boyutlu sipin latisi için Hamiltoniyen B dış alan olmak üzere,

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N v\epsilon < S > S_i - \mu B \sum_{i=1}^N S_i \quad (1)$$

Şeklindedir, burada ϵ bağlantı sabiti, v en yakın komşu sayısıdır.

$E(\epsilon, B) = \frac{1}{2} v\epsilon < S > + \mu B$ olmak üzere

$H = \sum_{i=1}^N E(\epsilon, B) S_i$

şeklinde yazılabilir. Burada $< S > = < S_i >$ dir, her örgü noktasındaki ortalama sipin değeridir.

$v\epsilon < S > S_i$, i örgü noktası ile en yakın komşular arasında ortalama manyetik etkileşme enerjisidir. Burada bütün komşuların $< S >$ sipin değerine sahip oldukları varsayılmıştır. Örgü başına sipin $< S >$ öz uyumlu olarak belirlenir. Bu sistemin Bölüşüm fonksiyonu

$$Z_N = (\sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta E S_i})^N = (2Cosh(\beta E))^N \quad (2)$$

dir. Örgü noktası başına Gibss serbest enerjisi

$$g(\epsilon,\beta) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} G_N(\epsilon,\beta) = -k_B T \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln[Z_N] = -k_B T ln[2Cosh(\beta E)] \quad (3)$$

i örgü noktasındaki sipinin S_i olma olasılığı

$$P(S_i) = \frac{e^{\beta E S_i}}{\sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta E S_i}} = \frac{e^{\beta E S_i}}{2Cosh\,(\beta E)}$$

dir. Burada kullanılan ortalama alan yönteminde en yakın komşu uzaklıkları seçildiği için $P(S_i)$ ifadesi bu şekilde basit bir yapıya sahiptir. Katıyı oluşturan örgünün(latisin) ortalama manyetizasyonu aynı zamanda manyetik geçişler için düzen parametresidir.

$$< S > = \frac{\sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta E S_i}}{\sum_{S_j=\pm 1} e^{\beta E S_j}} = \tanh[\beta E] = \tanh[\beta(\frac{1}{2} v\epsilon < S > + \mu B)] \quad (4)$$

Olmak üzere,

$$< M > = N\mu < S > \quad (5)$$

Şeklinde tanımlanır. Buna göre sipin latis sistemi için $B = 0$ durumunda yüksek sıcaklıklarda ortalama manyetizma sıfır olacaktır. Bu durum Paramanyetik düzen olarak adlandırılır. Düşük sıcaklıklarda ise ortalama manyetizasyon sıfırdan farklı olacaktır. Paramanyetik düzenden başlayarak sıcaklık düşürüldüğünde belli bir kritik sıcaklıkta (Curie sıcaklığı) sipinler kendiliğinden aynı yöne yöneleceklerdir ve ortalama mıknatıslığın sıfırdan farklı olduğu Ferromanyetik düzen oluşacaktır.

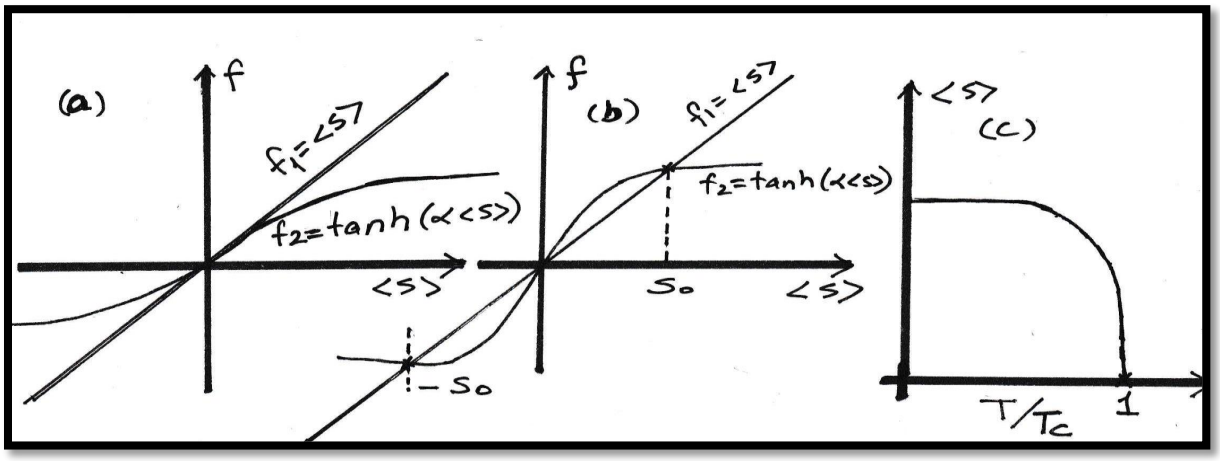
$B = 0$ için $< S >$ ifadesi (4) denkleminden bulunur.

$$< S > = \tanh\left[\beta \frac{1}{2} v\epsilon < S >\right] = \tanh[\frac{v\epsilon < S >}{2k_B T}] \quad (6)$$

Bu (6) denklemi $< S >$ için grafik yöntemi ile çözülebilir. Bunun için

$f_1 =< S >$ ve $f_2 = \tanh(\alpha < S >)$ olmak üzere f_1 ve f_2 , $< S >$ ye göre grafikleri çizildiğinde denklem (6) nın çözümleri iki eğrinin kesiştiği yerdir. Kesişme noktasında $f_1 = f_2$ dir. Bu durum $\alpha > 1$ ve $\alpha < 1$ için aşağıdaki şekilde gösterilmiştir. $\alpha > 1$ için yalnızca bir kesişim noktası var ve bu $< S > = 0$ noktasıdır. Bu durumda mıknatıslanma sıfırdır. $\alpha < 1$ için $< S > = 0$ ve $< S >= \pm S_0$ noktalarında kesişim noktaları vardır. Bu değişik durumlar için örgü noktası başına serbest enerji

$$g(\epsilon, 0) = \begin{cases} -k_B T ln(2) & , \quad < S > = 0 \\ -k_B T ln\left[2Cosh\left(\frac{1}{2}\beta v \epsilon S_0\right)\right], & < S >= \pm S_0 \end{cases} \qquad (7)$$



Böylece $< S >= \pm S_0$ durumları mümkün termodinamik denge durumlarını belirler. Çünkü serbest enerjiyi minimize ederler. Geçiş noktası kritik nokta $\alpha = 1$ de oluşur. Bu ise geçiş sıcaklığını belirler. Buna göre

$\alpha = \frac{\epsilon v}{2k_B T_C} = 1$ ise $T_C = \frac{\epsilon v}{2k_B}$ bulunur. Buna göre $< S >$ düzen parametresi ile T/T_C arasındaki bağıntı şekilde son (c) de gösterilmiştir.

Bu örnekte kullanılan ortalama alan yöntemi bir önceki örnekte bulduğumuz sonuç ile uyumlu değil, Weiss ortalama alan yaklaşımı $d \leq 3$ boyutları için kritik sıcaklığı çok yüksek vermektedir. $d \geq 4$ için daha iyi sonuçlar vermektedir. Fakat bu ise fiziksel bir duruma karşılık gelmemektedir. Bunun niçin böyle olduğu açıktır. Düşük boyutlarda yapılan yaklaşım gereği en yakın komşu sayısı küçüktür bu ise sistemde etkileşmelerden kaynaklana ortalama alındığında gerçek değeri ile aynı şey değildir. Bu durumda ya birinci komşuluk dışındaki etkileşmeler de hesaba katılmalıdır (bu yapıldığında hesaplar kolay olmayacaktır) yada boyut sayısını arttırmak gerekecektir. Bu örnek için sistemin kritik sıcaklık civarında ısı kapasitesi

ve alınganlığı gibi termodinamik özelliklerde hesaplanabilir. $B = 0$ durumu için ısı kapasitesi, sistemin iç enerjisi

$$U = -\frac{1}{Z_N}\frac{\partial Z_N}{\partial \beta} = -\frac{1}{2}Nv\epsilon < S >^2 \qquad (8)$$

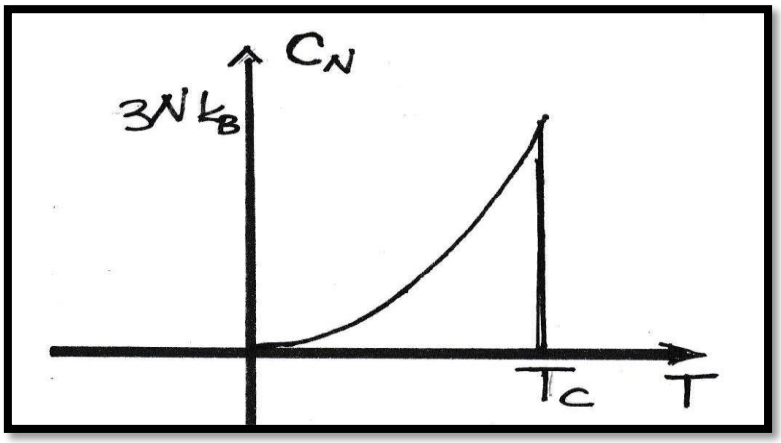
olmak üzere

$$C_N = (\frac{\partial U}{\partial T})_N = -k_B\beta^2 \left(\frac{\partial U}{\partial \beta}\right)_N = Nk_B v\epsilon\beta^2 < S > (\frac{\partial <S>}{\partial \beta})_N \qquad (9)$$

$(\frac{\partial <S>}{\partial \beta})_N = sech^2\left(\beta\frac{v\epsilon}{2} < S >\right)[\frac{v\epsilon}{2} < S > +\beta\frac{v\epsilon}{2} < S > (\frac{\partial <S>}{\partial \beta})_N$ olduğu için

$(\frac{\partial <S>}{\partial \beta})_N = \frac{v\epsilon <S>}{3Cosh\left(\beta\frac{v\epsilon}{2}<S>\right)-\beta v\epsilon} = \frac{2N k_B <S>^2 (T_C/T)^2}{[Cosh^2(<S>\left(\frac{T_C}{T}\right)-\frac{T_C}{T})}$

şeklinde elde edilir. Buna göre ısı kapasitesinin sıcaklığa göre değişimi aşağıdaki şekilde gösterilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi ısı kapasitesi $T = T_C$ kritik sıcaklığında sonlu keskin bir değişime (jump) sahiptir. C_N nin $T = T_C$ deki değeri $3Nk_B$ dir.



Bu sistem için manyetik suseptibilite (alınganlık) $\chi_{T,N}(B)$ de hesaplanabilir.

$$\chi_{T,N}(B) = (\frac{\partial <M>}{\partial B})_{T,N} = N\mu(\frac{\partial <S>}{\partial B})_{T,N}$$

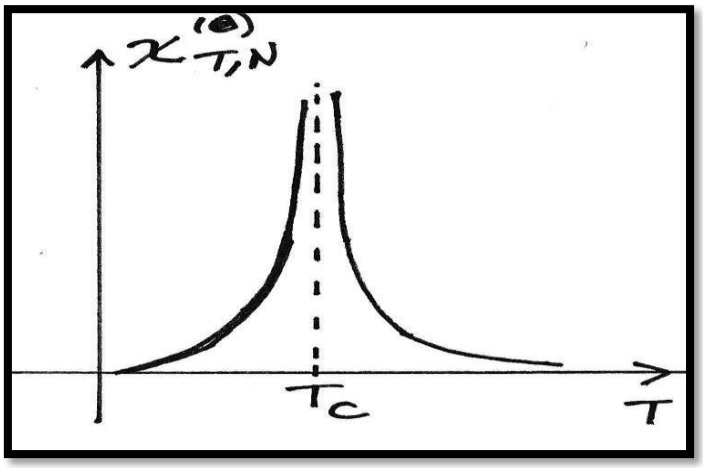
(4) denkleminden

$$(\frac{\partial <S>}{\partial B})_{T,N} = \frac{2\beta\mu^2}{2Cosh^2[\beta(\frac{1}{2}v\epsilon <S> + \mu B) - \beta v\epsilon}$$

Bulunur. $B = 0$ limit durumu için $< S >$ nin (6) bağıntısındaki tanımı kullanılarak

$$\chi_{T,N}(0) = \frac{2\beta\mu^2}{2Cosh^2[\beta\frac{1}{2}v\epsilon<S>]-\beta v\epsilon} = \frac{2N\mu^2}{v\epsilon}\frac{\frac{T_C}{T}}{Cosh^2(<S>\frac{T_C}{T}-\frac{T_C}{T}}$$

Elde edilir. Bu şekilde elde edilen manyetik alınganlık aşağıdaki şekilde gösterildiği gibi $T = T_C$ sonsuz bir atlama (jump) davranışı gösterir.



Örnek 2.5

Serbest elektron gaz sisteminde, elektronlara ait dalga fonksiyonlarının serbest parçacık düzlem dalgalar olduğunu göz önüne alarak, bu sistemde taban durumu için N parçacık sayısı, K kinetik enerji olmak üzere $\frac{<K>}{N} \propto (\frac{N}{V})^{2/3}$ olduğunu gösteriniz.

Elektronlar, Fermiyon türü parçacık oldukları için, Pauli dışarlama ilkesini sağlayacak şekilde Fermi küresini doldururlar. Buna göre taban durumu (ground state) $|TD>$ şöyledir.

$|TD> = \prod_{|k|<k_F} c^+_{k\uparrow}c^+_{k\downarrow}|0>$. Buna göre $< TD|c^+_{k\sigma}c_{k'\sigma'}|TD> = \begin{cases}\delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} & ,|k| < k_F \\ 0 \quad diğer\ durumlar\end{cases}$

$< N >= 2\sum_{|k|<k_F} 1 = N$ (2 faktörü sipinin iki farklı yöneliminden gelmektedir.) $N \to \infty$ için toplam işlemi integral işlemine dönüşür. Buna göre,

$\frac{1}{V}\sum_k(\dots) \to \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}(\dots)$ olur. Böylece , $\frac{N}{V} = 2\int_{|k|<k_F}\frac{d^3k}{(2\pi)^3} = 2\int\frac{dk_xdk_ydk_z}{(2\pi)^3}$ Küresel koordinatlarda bu integral alınırsa

$\frac{N}{V} = 2\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^{k_F}k^2dk = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$ elde edilir. Buna göre $k_F = (\frac{3\pi^2N}{V})^{1/3}$ şeklindedir. Aynı zamanda kinetik enerji

$K =< K >= 2\sum_{|k|<k_F} \frac{k^2}{2m} = 2\frac{V}{(2\pi)^2}\frac{1}{2m}\int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{V}{(2\pi)^2}\frac{k_F^5}{5}$ dir. k_F değeri burada yerine yazılırsa,

$\frac{<K>}{N} \propto (\frac{N}{V})^{2/3}$ olduğu görülür.

Örnek 3.1

Birbiri ile etkileşmeyen homojen Fermiyon sisteminde sistemin taban durumu Fermi denizi olarak adlandırılır. Fermi denizinden uyarılan bir parçacık geride bir boşluk (deşik, hole) bırakır. Bu durumda sistemin Hamiltoniyeni Fermi denizi , deşik ve uyarılmış durumu içerecek şekilde yazılabilir.

Bunun için Fermiyonlardan oluşmuş alan operatörü 2. Kuantizasyonda

$\psi(r) = \sum_{k\lambda} \psi_{k\lambda}(r) c_{k\lambda}$

şeklindedir. Buna göre $c_{k\lambda}$ Fermiyon operatörünü

$$c_{k\lambda} = \begin{cases} a_{k\lambda} & k > k_F \quad parçacık \\ b_{-k\lambda}^{+} & k < k_F \quad deşik \end{cases}$$

Şeklinde tanımlanabilir. Burada parçacık Fermi denizini $+\boldsymbol{k}$ momentumu ile terk ettiğinde momentum korunumu gereği Fermi denizi içindeki deşiğin (boşluğun) momentumu $-\boldsymbol{k}$ olacaktır. a_k, b_k operatörleri ise $\{a_k, a_{k'}^{+}\} = \{b_k, b_{k'}^{+}\} = \delta_{kk'}$ antikomütasyon bağıntılarına sahiptir. a_k, a_k^{+} operatörleri Fermi denizi dışında bir parçacık yok etme ve yaratma operatörleridir. b_k, b_k^{+} operatörleri ise Fermi denizi içinde deşik yok etme ve yaratma operatörleridir. Bu yeni operatörler cinsinden $\psi(r)$ ve $\psi^{+}(r)$ alanları

$\psi(r) = \sum_{k\lambda>k_F} \emptyset_{k\lambda}(r) a_{k\lambda} + \sum_{k\lambda<k_F} \emptyset_{k\lambda}(r) b_{-k\lambda}^{+}$

$\psi^{+}(r) = \sum_{k\lambda>k_F} \emptyset_{k\lambda}(r) a_{k\lambda}^{+} + \sum_{k\lambda<k_F} \emptyset_{k\lambda}(r) b_{-k\lambda}$

Şeklinde ifade edilir. Bu alanlara uygun Hamiltoniyen ikinci kuantizasyonda ,

$H_0 = \sum_{k\lambda}(\hbar w_k c_{k\lambda}^{+} c_{k\lambda})$

$$= \sum_{\substack{k\lambda>k_F \\ parçacık}} (\hbar w_k a_{k\lambda}^{+} a_{k\lambda}) - \sum_{\substack{k\lambda<k_F \\ boşluk}} (\hbar w_k b_{k\lambda}^{+} b_{k\lambda}) + \sum_{\substack{k\lambda<k_F \\ Dolu\ Fermi \\ denizi}} (\hbar w_k)$$

Bu Hamiltoniyen ifadesine göre parçacık yaratmak enerjiyi artırır, deşik yaratmak ise enerjiyi azaltır. Fakat parçacık ve deşik korunum yasaları gereği aynı anda çiftler halinde oluşturulmalıdır. Parçacık ve deşik olmaması durumunda Fermi denizi pozitif terim olan eşitlikteki üçüncü terim ile doludur.

Örnek 3.2 $Na\,, K\,, Mg\,, Cu$ gibi basit metallerde valans elektronların davranışı, $V = L^3$ hacmi içinde sabit bir potansiyele sahip etkileşmeyen, periyodik sınır şartlarını sağlayan N tane elektronun davranışı gibi ele alınabilir. Bu model Sommerfeld modeli olarak ta adlandırılır. Bu modele göre basit metallerin birçok elektronik özelliği elde edilebilir. Bu durumda bu sistemin

a) Öz durumlarını ve öz enerjilerini bulunuz.
b) $n = \frac{N}{V}$ cinsinden Fermi enerjisini ve Fermi dalga vektörünü yazınız
c) Elektron başına ortalama enerjiyi Fermi enerjisi cinsinden yazınız.
d) $\rho_0(E)$ elektronik durum yoğunluğunu bulunuz.
e) Boyutsuz r_s büyüklüğü tanımlayarak sistemin taban durumu enerjisini

$E_0 = N\frac{2.21}{r_s}\,(Ryd)$ olduğunu gösteriniz.

f) Bir parçacık işgal etme durumlarının sıcaklığa bağlılığını gösterin
g) Toplam parçacık sayısı N ve iç enerji $U(T)$, $\rho_0(E)$ ye nasıl bağlıdır?
h) Kimyasal potansiyel $\mu = \varepsilon_F[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2]$ olduğunu gösteriniz
i) $\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^4$ terimini ihmal edecek düzeyde $U(T)$ yi yazarak C_V spesifik ısısını hesaplayınız.
j) Sistemin entropisini hesaplayarak $T \to 0$ limitini tartışınız.

Çözüm:

(a) dan (e) şıkkına kadar olan işlemler kitapta 3.2 konusunda, (3.16)-(3.35) bağıntıları ile verilmiştir.

f) Sommerfeld modelinde serbest elektron kuantum sayıları $(k\sigma)$ olduğuna göre Fermi Dirac istatistiği sonucu $< n_{k\sigma} > = f_e = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(k)-\mu)}+1}$ dir.

Bu fonksiyonun E ye göre davranışı şekilde (6.1) gibidir.

$\mu = \mu(T)$, $\mu(T=0) = \varepsilon_F$ dir.

$T = 0$ da $f_e = \frac{1}{2}$ dir. $T \neq 0$ da Fermi yüzeyi biraz deforme olacaktır.

$T = 0$ da Fermi düzeyinden büyük olan ve tamamen boş olan seviyelere bazı elektronlar yerleşecektir. Fermi yüzeyinin sıcaklığa bağlı genişlemesi tamamen simetriktir. Bu nedenle $f_e(\mu + \Delta E) = 1 - f_e(\mu - \Delta E)$ olur. Buna göre

$\frac{df_e(E)}{dE} = -\beta \frac{e^{\beta(E-\mu)}}{\left(e^{(E-\mu)}+1\right)^2}$ olur.$E \to \mu$ olduğunda $\frac{df_e(E)}{dE} \to -\frac{1}{4k_BT}$ olur. Buna göre Fermi yüzeyinin deforme olma (genişleme) miktarı yaklaşık $4k_BT$ kadardır.

Bunun sayısal değeri için $k_BT[eV] = \frac{T}{11065}$ ifadesi kullanılırsa $T = 290\ K$ için

$\frac{k_BT}{\varepsilon_F} \geq \frac{1}{40}$ değerindedir. Bu ise Fermi yüzeyinin dar bir bölgesinin deforme olduğunu belirtmektedir.

$E - \mu \gg k_BT$ ise $f_e = \exp[-\beta(E-\mu)]$ şeklinde klasik Boltzmann dağılımı olacaktır.

g) , h), i) , j) :

Genel olarak

$N = \sum_{k\sigma} < n_{k\sigma} > = 2\sum f_e(\varepsilon(k))$,

$U(T) =< H > = \sum_{k\sigma} \varepsilon(k) < n_{k\sigma} > = 2\sum_k \varepsilon(k) f_e(\varepsilon(k))$ dır. Fakat bu sistem için toplam yerine integral kullanmak uygundur, buna göre $f_e\big(\varepsilon(k)\big)\rho_0(E)$ =işgal edilen gurumların yoğunluğu olmak üzere ,

$N = 2\int_{-\infty}^{\infty} dE\, f_e\big(\varepsilon(k)\big)\rho_0(E)$

$U(T) = 2\int_{-\infty}^{\infty} dE(E)\, f_e\big(\varepsilon(k)\big)\rho_0(E)$ şeklinde tanımlanır. Bu tanımlara göre,

$N \approx \int_{-\infty}^{\infty} dE\rho_0(E) + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\rho'_0(\mu) + \ \ldots$

$= \frac{3N}{2\,\varepsilon_F^{2/3}}\left(\frac{2}{3}\mu^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{1}{2}\,\mu^{-\frac{1}{2}} + \cdots\right.$

$1 \approx \left(\frac{\mu}{\varepsilon_F}\right)^{\frac{3}{2}}\left[1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2\right]$ ise $\mu \approx \varepsilon_F\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2\right]$ bulunur.

$\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2 \approx 10^{-4}$ olduğu için sıcaklığın etkisi çok az.

$U(T) = \int_0^{\mu} dEE\,\rho_0(E)\frac{\pi^2}{6}(k_BT)\left[\mu\rho'_0(\mu) + \rho_0(\mu)\right]$

$= \frac{2}{5}\mu^2\rho_0(\mu) + \frac{\pi^2}{4}(k_BT)\rho_0(\mu) = \frac{3N}{2\,\varepsilon_F^{\frac{3}{2}}}[\frac{2}{5}\mu^{\frac{5}{2}} + \frac{\pi^2}{4}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2\mu^{\frac{1}{2}}]$

$= \frac{3}{5}N\varepsilon_F[(\frac{\mu}{\varepsilon_F})^{\frac{5}{2}} + \frac{5\pi^2}{8}(\frac{k_BT}{\varepsilon_F})^2\left(\frac{\mu}{\varepsilon_F}\right)^2]$ $\quad \left(\frac{\mu}{\varepsilon_F}\right)^n \approx 1 - n\frac{\pi^2}{12}(\frac{k_BT}{\varepsilon_F})^2$ ise

$U(T) = U(0)[1 + \frac{5\pi^2}{8}(\frac{k_BT}{\varepsilon_F})^2 - \frac{5\pi^2}{8}(\frac{k_BT}{\varepsilon_F})^2 + \cdots$

$U(T) - U(0) = U(0)[\frac{5\pi^2}{12}(\frac{k_BT}{\varepsilon_F})^2 + O(\frac{k_BT}{\varepsilon_F})^4]$ bulunur. Buna göre;

$C_V = (\frac{dU}{dT})_V = \alpha T$ şeklinde sıcaklığa doğrusal olarak bağlıdır. Burada

$\alpha = U(0)\frac{5\pi^2}{6}(\frac{k_B}{\varepsilon_F})^2 = \frac{1}{2}N\pi^2\frac{\mu^2}{\varepsilon_F} = \frac{1}{3}\pi^2k_B^2\rho_0(\varepsilon_F)$ şeklinde orantı sabitidir.

Sistemde kimyasal potansiyel olduğu için büyük kanonik topluluk için büyük bölüşüm fonksiyonu Ξ kullanılarak entropi

$S = k_B\frac{\partial}{\partial T}[Tln\Xi]$ ifadesi ile hesaplanır. Buna göre

$S = \frac{\partial}{\partial T}[k_BT\sum_{k\sigma}\ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(k)-\mu)}\right] = k_B\sum_{k\sigma}\ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon(k)-\mu)} +$

$k_BT\frac{1}{k_BT^2}\sum_{k\sigma}\frac{e^{-\beta(\varepsilon(k)-\mu)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon(k)-\mu)}}(\varepsilon(k) - \mu)$ $\quad \frac{\partial\mu}{\partial T} \approx 0$ olduğundan

$S = \sum_{k\sigma}\{k_B\ln\left(\frac{1}{1-<n_{k\sigma}>}\right) + k_B\beta(\varepsilon(k) - \mu) < n_{k\sigma} >$,

$-\beta(\varepsilon(k) - \mu) = ln < n_{k\sigma} > + \ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(k)-\mu)}\right) = ln < n_{k\sigma} > - \ln(1- < n_{k\sigma} >)$
olduğundan,

$S = -k_B\sum_{k\sigma}[ln(1- < n_{k\sigma} >) + < n_{k\sigma} > ln < n_{k\sigma} > - < n_{k\sigma} > ln(1- < n_{k\sigma} >)]$

$S = -k_B\sum_{k\sigma}[< n_{k\sigma} > ln < n_{k\sigma} > + (1- < n_{k\sigma} >)ln(1- < n_{k\sigma} >)]$ Burada köşeli parantez içindeki birinci terim elektronların entropiye katkısı, ikinci terim ise deşikleri (boşlukların) entropiye katkısıdır.

$T = 0$ davranışına bakacak olursak

1) $\varepsilon(k) > \mu$ durumunda $< n_{k\sigma} >_{\lim T\to 0} \to 0$ olur.

Buna göre $T \to 0$ için $\ln(1- < n_{k\sigma} >) \to 0$ olur.

2) $\varepsilon(k) < \mu$ durumu için $< n_{k\sigma} >_{\lim T\to 0} \to 1$ olur, $ln < n_{k\sigma} > \to 0$ olur.

Böylece termodinamiğin 3 yasası olan $\lim T \to 0\ için\ S \to 0$ olduğu görülür.

Örnek 4.1

(4.3.2) bağıntısında $\varepsilon_k^{HF} = \varepsilon_k + V(0)N - \sum_{k'\sigma'} V(k-k')n_{k'\sigma'}$ olarak verilmişti. Burada ε_k terimi kinetik enerjiden gelen katkı, $V(0)N$ terimi doğrudan Coulomb etkileşmesinden gelen terim, bu terim pozitif arkaplan etkileşmeleri ile birbirini yok edecektir. $\sum_{k'\sigma'} V(k-k')n_{k'\sigma'}$ terimi ise kimyasal bağ oluşumunda sorumlu terimdir bu nedenle özel öneme sahiptir. Bu terimin neyi ifade ettiği biraz daha detaylı incelenebilir. Bu terimin Fourier dönüşümü

$(F\{n_{k'\sigma'}\} = \sum_q c^+_{k-q,\sigma}\, c_{k-q,\sigma})$ olmak üzere,

$F\{\ \sum_{k'\sigma'} V(k-k')n_{k'\sigma'}\} = \varepsilon_{HF}^{etki}(k) = \sum_q V(q) c^+_{k-q,\sigma}\, c_{k-q,\sigma}$

Şeklindedir. $q \to k-q$ indis değişimi ile $F\{\ \sum_{k'\sigma'} V(k-k')n_{k'\sigma'}\} = \sum_{q\neq 0} V(k-q)c^+_{q,\sigma}\, c_{q,\sigma}$ yazılabilir.

$< c^+_{q,\sigma} c_{q,\sigma} > = 1$ olduğu için

$\sum_{q\neq 0} V(k-q)c^+_{q,\sigma}\, c_{q,\sigma} = \varepsilon_{HF}^{etki}(k) = \frac{1}{V} \int_{|q|<k_F} \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{|k-q|^2}$

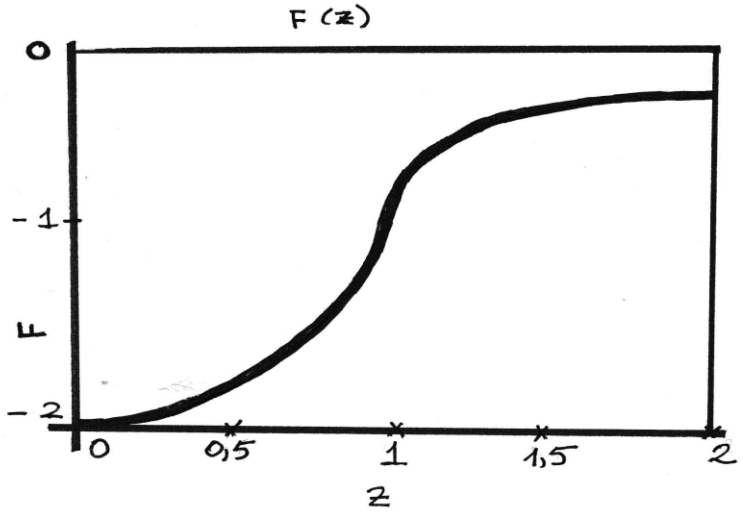
$= -\frac{e^2}{\pi} \int_0^{k_F} dq \int_{-1}^{1} d(cos\theta) \frac{q^2}{q^2+k^2-2qkcos\theta} = -\frac{e^2}{\pi k} \int_0^{k_F} qdq \ln\left|\frac{k+q}{k-q}\right|$

$= -\frac{e^2 k_F}{\pi}\left(1 + \frac{1-z^2}{2z} \ln\left|\frac{1+z}{1-z}\right|\right)$, $\left(z = \frac{k}{k_F}\right)$

Daha uygun bir ifade için

$\varepsilon_{HF}^{etki}(k) = \frac{e^2 k_F}{\pi}\ F(\frac{|k|}{k_F})$

yazılabilir. Burada $F(z) = -(1 + \frac{1-z^2}{2z} \ln\left|\frac{1+z}{1-z}\right|)$ fonksiyonunun genel davranışı basitçe $F(0) = -2$ ve $F(1) = -1$ dir. Fakat $\frac{dF}{dz}|_{z=0} \to \infty$ olur. Buna göre renormalize edilmiş enerji $z = 1$ de yada $k = k_F$ de sonsuz eğime sahiptir. Elektron gaz sisteminde Fermi enerjisinin $\frac{d\epsilon}{dk}$ olduğu hatırlanır ise Hartree- Fock yaklaşımında $k = k_F$ de fermi hızı sonsuza gider. Bu durumda elektronun etkin kütlesi m^* sıfır olmalıdır. Bu ise fiziksel bir durum değildir. Daha gerçekçi (fiziksel) bir sonuç için 2. derece pertürbasyon yaklaşımına ihtiyaç vardır. $F(z)$ Fonksiyonunun davranışı aşağıdaki şekilde verilmiştir.



Örnek 5.1

$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^{N} \delta(r - \hat{r})$ olarak verilen elektron yoğunluk operatörü kullanılarak yoğunluk korelasyon fonksiyonu

$G(\vec{r}, t) = \frac{1}{N} \int d^3r' < \rho(r' - r, 0)\rho(r', t) >$

şeklinde tanımlanır Buna göre $dinamik\ yapı\ faktörü$ nün tanımı

$S(q, w) = \int d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt G(\vec{r}, t) e^{i(\boldsymbol{q}.\boldsymbol{r} - wt)}$

Şeklindedir. Ayrıca $statik\ yapı\ faktörü$ $S(q) = \int dw\, S(q, w)$ şeklindedir. Buna göre

$g(r)$ çift dağılım fonksiyonu ve $n = \frac{N}{V}$ olmak üzere , $G(r, 0) = \delta(r) + ng(r)$ bağıntısı yazılabilir. Bu tanımlara göre

a) $G(r, t) = \frac{1}{NV} \sum_q < \rho_q \rho_{-q}(t) > e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}$ olduğunu gösteriniz.

b) $ng(r) = \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} < \rho\big(r + r_i(0) - r_j(0)\big) >$ eşitliğini gösteriniz.

c) Dinamik ve statik yapı faktörleri için $S(q, w) = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iwt} < \rho_q \rho_{-q}(t) >$

ve $S(q) = \frac{2\pi}{N} < \rho_q \rho_{-q} >$ olduğunu gösteriniz

d) $T = 0$ da $|E_0 >$ taban durumunu, $|E_n >$ Hamiltoniyenin öz durumunu belirtmek üzere,

$S(q, w) = \frac{2\pi}{N} \sum_n < E_n|\rho_n^+|E_0 >^2 \delta[w - \frac{1}{\hbar}(E_n - E_0)]$ olduğunu gösteriniz.

a) $\rho(r) = \frac{1}{V}\sum_q \rho_q e^{\boldsymbol{iqr}}$ tanımlanır ise

$G(r,t) = \frac{1}{N}\frac{1}{V^2}\sum_{qq'} <\rho_q \rho_{q'}(t)> \int d^3r' e^{iq(r'-r)} e^{iq'r'}$

$= \frac{1}{NV}\sum_{qq'} <\rho_q \rho_{q'}(t)> e^{-\boldsymbol{iqr}} \delta_{qq'} = \frac{1}{NV}\sum_q <\rho_q \rho_{-q}(t)> e^{-\boldsymbol{iqr}}$

Bu ise $t = 0$ da $r = 0$ da olan bir parçacığın bir t anında r de bulunma koşullu olasılığıdır.

b) Homojen bir sistemde

$<\rho(r'-r,0)\rho(r',t)> = <\rho(-r,0)\rho(0,t)> = <\rho(0,0)\rho(r,t)>$ ise

$G(r,t) = \frac{V}{N} <\rho(0,0)\rho(r,t)>$ dir. $G(r,0) = \frac{1}{N}\int d^3r' \sum_{i,j} <\delta(r'-r-r_i)\delta(r'-r_j)>$

$= \frac{1}{N}\sum_{i,j} <\rho(r+r_i-r_j)> = \frac{1}{N}\sum_i \delta(r) + \frac{1}{N}\sum_{i\neq j} <\rho(r+r_i-r_j)>$

karşılaştırma yapılır ise

$ng(r) = \frac{1}{N}\sum_{i\neq j} <\rho(r+r_i(0)-r_j(0))>$

olduğu görülür. Burada $g(r)$ çift dağılım fonksiyonudur ve bir parçacık orjinde iken ikinci bir parçacığın r de bulunma olasılığıdır.

c) Dinamik yapı faktörü

$$S(q,w) = \int d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt G(r,t) e^{i(q.r-wt)} = \frac{1}{NV}\sum_{q'} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(q-q')r} e^{-iwt} <\rho_{q'}\rho_{-q'}(t)>$$

$= \frac{1}{N}\sum_{q'} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-iwt} \delta_{qq'} <\rho_{q'}\rho_{-q'}(t)>$, $\delta(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dw e^{iwt}$ olduğu hatırlanır ise,

$S(q,w) = \frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iwt} <\rho_q \rho_{-q}(t)>$ elde edilir.

Statik yapı faktörü $S(q) = \frac{2\pi}{N} <\rho_q \rho_{-q}>$ dır.

d) $T = 0$ da $|E_0>$ üzerinde ortalama alınacak olursa

$S(q,w) = \frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iwt} <E_0|\rho_q \rho_{-q}(t)|E_0>$ olur. $\rho_{-q}(t)$ nin zamana bağlılığı,

$\rho_{-q}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \rho_{-q} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ şeklindedir, aynı zamanda $1 = \sum_n |E_n><E_n|$ olan tamlık bağıntısı kullanılırsa,

$S(q,w) = \frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iwt} <E_0|\rho_q|E_n><E_n|\rho_{-q}(t)|E_0>$

$= \frac{1}{N} < E_0|\rho_q|E_n >< E_n|\rho_{-q}(t)|E_0 > \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-iwt}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_0)t}$

$= \frac{2\pi}{N} \sum_n < E_0|\rho_q|E_n >< E_n|\rho_{-q}(t)|E_0 > \delta([w - \frac{1}{\hbar}(E_n - E_0)]$

$\rho_{-q} = (\rho_q)^+$ olduğu göz önüne alınır ise

$S(q,w) = \frac{2\pi}{N} \sum_n \ < E_n|\rho_n^+|E_0 >^2 \delta[w - \frac{1}{\hbar}(E_n - E_0)]$

elde edilir.

Örnek 5.2

Çok parçacıklı sistemlerin incelenmesinde bir çok durumda parçacıklar arası korelasyon (ilişki) fonksiyonları kullanılır. Bu korelasyon fonksiyonları yardımı ile sistemdeki parçacıkların dağılım fonksiyonları elde edilir. Buna göre tek parçacık korelasyon fonksiyonu alan operatörleri cinsinden

$G_{\sigma\sigma'}(r_1 - r_2) =< \psi_\sigma^+(r_1)\psi_{\sigma'}(r_2) >$

Şeklinde tanımlanır. Bu fonksiyon çoğu zaman eş zamanlı Green fonksiyonu veya eş zamanlı propagatör olarak ta adlandırılır. Bu korelasyon fonksiyonunu bir önceki örnekte verilen serbest elektron gaz sisteminin taban durumu için elde edelim.

$G_{\sigma\sigma'}(r_1 - r_2) =< TD|\psi_\sigma^+(r_1)\psi_{\sigma'}(r_2)|TD >$,

Burada $\psi_\sigma^+(r_1) = \sum_{k_1} e^{-ik_1 r_1} c_{k_1\sigma}^+$, $\psi_{\sigma'}(r_2) = \sum_{k_2} e^{ik_2 r_2} c_{k_2\sigma'}$ ise,

$G_{\sigma\sigma'}(r_1 - r_2) = \frac{1}{V} \sum_{k_1,k_2} e^{-ik_1 r_1}\, e^{ik_2 r_2} < c_{k_1\sigma}^+ c_{k_2\sigma'} >$

$< c_{k_1\sigma}^+ c_{k_2\sigma'} >= \begin{cases} \delta_{k_1,k_2}\delta_{\sigma\sigma'} & |k| < k_F \\ 0 \quad diğer\ durumlar \end{cases}$ olduğuna göre

$G_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{r_1 - r_2}) = \delta_{\sigma\sigma'} \left(\frac{1}{V}\right) \sum_{|k|<k_F} \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} e^{i(\boldsymbol{r_2 - r_1})}$, $\boldsymbol{r_2 - r_1} = \boldsymbol{r}$ alıp integrasyon için küresel koordinatlar kullanılacak olursa,

$G_{\sigma\sigma'}(r_1 - r_2) = \delta_{\sigma\sigma'} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_{-1}^{1} d(cos\theta) e^{ikrcos\theta}$

$= \delta_{\sigma\sigma'} \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \int_0^{k_F} ksin(kr)dk$

$$= \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{(2\pi)} \frac{\sin(k_F r) - k_F r \cos(k_F r)}{r^3} = \delta_{\sigma\sigma'} \frac{1}{(2\pi)^2} k_F^3 \frac{J_1(k_F r)}{k_F r} \qquad , \qquad \left(k_F^3 = 3\pi^2 \left(\frac{N}{V}\right)\right)$$

olduğundan,

$= \delta_{\sigma\sigma'} \frac{3}{2} \frac{N}{V} \frac{J_1(k_F r)}{k_F r}$ bulunur. Burada J_1 Bessel fonksiyonudur.

Örnek 5.3

Bir önceki örnekte verilen bir parçacık korelasyon fonksiyonunu serbest parçacık durumları değil de genel bir $|\lambda >= c_\lambda^+ |0 >$ durumları için hesaplayınız.

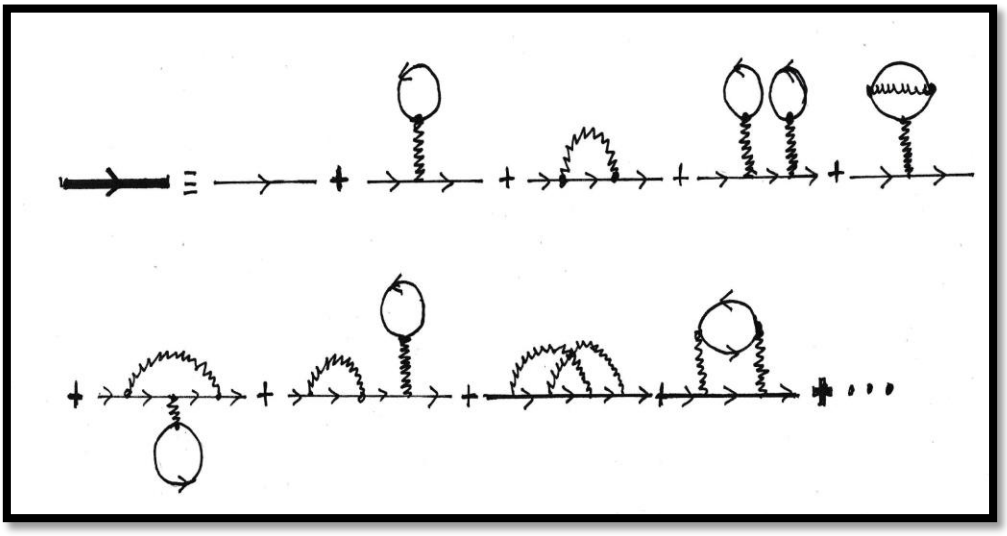
$G(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2}) =< \lambda|\psi^+(\boldsymbol{r_1})\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r_2})|\lambda >= \sum_{\boldsymbol{\mu\lambda}} \emptyset_{\boldsymbol{\mu}}^*(\boldsymbol{r_1})\emptyset_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{r_2}) < \boldsymbol{\lambda}|\, c_\mu^+ c_\gamma|\lambda >$

$(< \boldsymbol{\lambda}|c_\mu^+ c_\gamma|\lambda >= \delta_{\gamma\mu})$

$= \sum_{\boldsymbol{\mu\lambda}} \emptyset_{\boldsymbol{\mu}}^*(\boldsymbol{r_1})\emptyset_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{r_2})\delta_{\gamma\mu} = \sum_{\boldsymbol{\mu\lambda}} \emptyset_{\boldsymbol{\mu}}^*(\boldsymbol{r_1})\emptyset_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{r_2})$

elde edilir. Buradan da kolayca görüleceği gibi $\boldsymbol{r_1} = \boldsymbol{r_2}$ olduğunda $G(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2}) = 1$ olacaktır. $\boldsymbol{r_2} \to \infty$ olduğunda $G(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2}) = 0$ olmalıdır. Bu nedenle bu bir parçacık korelasyon fonksiyonu λ durumunun $\boldsymbol{r_1}$ bulunmasının ölçülmesi ile ilgilidir. Aynı zamanda t_1 anında $\boldsymbol{r_1}$ konumundaλ durumunda bulunan sistemin (parçacığın) t_2 anında $\boldsymbol{r_2}$ konumuna ne kadar taşındığı ile ilgilidir. Bu nedenle bir parçacık propagatörü (ileticisi) olarak ta adlandırılır.

Örnek 5.4 Aşağıdaki şekil Green fonksiyonunun perürbasyon açılımının bağlantılı (connected) Feynman diyagramları cinsinden gösterimi. Eşitliğin sağ tarafındaki toplamda ilk terim sıfırıncı mertebe, ikinci ve üçüncü terim birinci mertebe, diğer terimler ikinci mertebe Feynman diyagramlarıdır. $(G = G_C^0 + 2G_C^1 + 6G_C^2 + \cdots)$



Örnek 5.4 Lineer response teoriye göre metallerde Farklı dış etkilere (alana, tedirgemeye) sistemin yanıtı tabloda verilmiştir.

Sistem	Pertürbasyon (dış etki)	Sistemin Yanıtı	Orantılılık Katsayısı
Metal	Elektrik alan $\vec{E}$	Akım yoğunluğu $\vec{J}$	İletkenlik σ
	Sıcaklık değişimi $\vec{\nabla}T$	Isı akısı $\vec{J}_Q$	Termal iletkenlik K
	Nokta yük q	Yoğunluk dalgalanması δn	Yoğunluk korelasyon fonksiyonu χ_C
	Manyetik alan $\vec{B}$	Manyetizasyon	Alınganlık χ_S

Örnek 5.5 N parçacıktan oluşmuş, enerjisi E , entropisi S, kimyasal potansiyeli μ olan bir sistemin serbest enerjisi $F = E - TS - \mu N$ şeklindedir. Buna göre aşağıdaki tabloda verilen termodinamik eşitlikler yazılabilir.

Bölüşüm Fonksiyonu	$Z = Tr[e^{-\beta(H-\mu N)}]$
Serbest Enerji	$F = -k_B T ln Z$
Durum yoğunluk matrisi	$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H-\mu N)}$
Parçacık sayısı	$N = Tr(N\rho) = -\frac{\partial F}{\partial \mu}$
Entropi	$S = -k_B Tr[\rho ln \rho] = -\frac{\partial F}{\partial T}$
Basınç	$P = -\frac{\partial F}{\partial V}$

EK

(Okuma Parçası)

EK-a) Kuantum mekaniğinin ortaya çıkması esnasında yapılan bazı tartışmalar.

Birinci bölümde verilen, kuantum mekaniğine kısa bir bakış kısmında kuantum mekaniğinin ortaya çıkışı ve genel özellikleri üzerinde kısaca duruldu. Kuantum mekaniğinin bilim dünyasında kabulü çok kolay olmamıştır. 1910 lu yılların başlarında ve devamında günümüze kadar kuantum mekaniği klasik mekanik ile karşılaştırılırak birtakım tartışmalar süregelmektedir. Bu tartışmalardan biriside kuantum mekaniğinin matematiksel yapısının Hilbert Uzayına dayandığı bu nedenle lineer bir teori olmasından kaynaklanmaktadır. Halbuki Makroskobik ölçekte Lineer denklemlerle ifade edilen olaylar genellikle ideal sistemlere karşılık gelmektedir. Doğada pek çok olay lineer (doğrusal) davranış göstermez, bu nedenle doğrusal olmayan matematiksel denklemlerle ifade edilir. Bu konuda son yıllarda dinamik sistemlerin kaotik ve karmaşık davranışı, veya geometrilerin fraktal karakteri gibi doğrusal olmayan sistemler için birçok araştırma yapılmıştır. Benzer davranışın kuantum mekaniğinde de olması gerektiğini savunanlar, Lineer olmayan kuantum mekaniğinden bahsetmektedirler. Burada bu tartışmalarla ile ilgili kısa bir özet verilmiştir.

Heisenberg, Schrödinger, Bohn, Dirac ve diğerleri tarafından mikroskopik parçacıkların özelliklerini açıklayan lineer kuantum teorisi, temelde dış potansiyel alan varlığında, mikroskopik parçacıkların hareketlerinin, göreli olmayan lineer Schrodinger denklemi kullanarak hesaplanmasına dayanır. Aynı şeklide göreli hareketlerde ise Dirac ve Klein-Gordon denklemleri kullanılır. Kuantum mekanik teorinin kullanıldığı alanlar, atomlar, moleküller, atomaltı parçacıklar, elektronik, optik sistemler, katıhal durumunda bant yapıları gibi alanlardır. Teori, dış alan varlığında mikroskopik parçacıkların özelliklerini, optik-akustik dalgaları ve ısıl radyasyonu da tanımlar. Hatta makroskopik davranış gösteren optik, mekanik ve elektriksel sistemlerin incelenmesinde de kullanılır. Kısaca lineer kuantum mekaniği mikroskopik davranış gösteren parçacıkların hareket kanunlarını tanımlar. Lineer kuantum mekaniği, elektron, foton, fonon, eksiton, atom, molekül, çekirdek, temel parçacıklar gibi mikroskopik parçacıklar ve kuasi parçacıkların hareketlerinin tanımlanması gibi olaylarda da çok başarılıdır. Bu teori atomlarda, moleküllerde ve alaşım spektrumlarında, yoğun maddelerin elektriksel, optik ve manyetik özellikleri için yapılan deney sonuçlarıyla örtüşür.

Modern bilimin inşasında kuantum mekaniğin çok büyük etkisi olduğu gibi, bu teori, kuantum istatistiği, kuantum alan teorisi, kuantum kimyası, kuantum biyolojisi gibi diğer bilim dallarına da ilham kaynağı olmuştur. Lineer teorinin en önemli başarılarından biri de hidrojen,

helyum gibi atomların enerji spektrumlarını çok iyi açıklamasıdır. Öyle ki hesaplanan enerji değerleri deney sonuçlarıyla tamamen örtüşmektedir. Lineer kuantum teorisinin bu büyük başarısına rağmen yetersiz olduğu, tartışmaya açık yanları da vardır. Bu durum, Bohr ve Einstein'i uzun sürecek bir bilimsel tartışmanın içine çekmiştir. Bu tartışmalar günümüzde de devam etmektedir. Lineer kuantum mekaniğinin kurucularından biri olan Dirac, 1975 de Avustralya'da New South Wales Üniversitesi'ni ziyareti sırasında bir konuşma yapmış ve kuantum mekaniğin büyük zorluklarından söz etmiştir. Dirac'a göre büyük zorluklardan biri yüklü parçacıklar ve elektrik alan arasındaki etkileşmenin çok hassas bir dengeye dayanmasıdır. Eğer parçacık yükünün bir noktada yoğunlaştığı düşünülürse, noktasal yükün özenerjisi sonsuz olur. Öyle ki bu problem fizikçileri 40 yıl uğraştırmıştır. Renormalizasyon teorisinin bulunmasından sonra bile problem tam olarak ortadan kalkmamıştır. Yine benzer bir durum da Einstein' in tüm hayatı boyunca uğraştığı birleşik alan teorisi olmuştur.

Peki neden lineer kuantum teorisi fizikçiler arasında böylesi bir tartışmanın kaynağı olmuştur? Fizik biliminin tarihine bakılırsa, hiçbir teoride lineer kuantum teorisindeki kadar çok varsayım kullanmamıştır. Öyleyse bu varsayımları üretme ihtiyacı teorinin tamamlanmamış ve sınırlı uygulanır olmasından kaynaklanıyor olabilirmi? Genel olarak lineer kuantum mekaniğinin temeli Heisenberg matris mekaniği, Schrödinger dalga mekaniği, Born'un dalga fonksiyonunun istatistiksel yorumu ve Heisenberg'in belirsizlik ilkesine dayanmaktadır. Muhtemel tartışmalar da dalga fonksiyonunun tanımı, ölçülen ve ölçen arasındaki kontrol edilemeyen etkileşme, Heisenberg belirsizlik ilkesi, Bohr'un uygunluk ilkesi, tek parçacığa karşılık çok parçacıklı sistemler, mikroskopik alanda nedensellik ve olasılık, kuantum durumlarının ölçümü gibi noktalarda olmuştur. Bütün bu tartışmalardan sonra genel kabül gören yorum daha sonraları $Copenhagen\ Ekol$ü olarak adlandırılan ve Bohr'un temsil ettiği grubun fikirlerini benimseyen ve lineer kuantum mekaniğinin temel teorisini bu çerçevede kabul edenlerden oluşan yorumdur.

1920'lerin erken dönemlerinde Bohr , Einstein, de Broglie , Schrödinger ve Lorentz 'in başını çektiği tartışmalarda öne çıkan noktalar, dalga fonksiyonun doğası ve istatistik tanımı ile ilgili olmuştur. Bu tartışma konuları kısaca şunlardı.

i) Acaba lineer kuantum mekaniği doğru mu? Kendi kendisi ile uyumlu mu? Mikroskopik parçacıkların özelliklerini tamamen açıklayabilir mi? Temel hipotezleri birbirini çürütüyor mu?

ii) Lineer kuantum mekanik dinamik mi yoksa istatistiksel bir teori mi? Tek paracığın mı yoksa çoklu sistemin hareketini mi açıklar? Çünkü dinamik eşitlik tek parçacıklı sistemler için yazılmış görünse de mekanik eşitlikler, olasılık ve istatistiksel eşitlikler kullanılarak hesaplanır. Bu da teorinin doğasıyla ilgili kafa karışıklığı yaratmaktadır.

iii) Mikroskopik parçacıkların dalga-parçacık ikiliği nasıl tanımlanır? Lineer kuantum mekaniğin varsayımlarına göre bir parçacığın doğası nasıl tanımlanır? Öyle ki dalga-parçacık ikiliği, de Broglie ilişkisiyle tanımlanmıştır. Acaba dalga fonksiyonun istatistiksel tanımı, bu ilişkiyi tanımlayabilir mi? Dalga paketini kullanarak mikroskopik parçacıkları tanımlamanın bazı zorlukları olduğundan dalga-parçacık ikiliğinin tanımı da önemli bir sorun olarak ortaya çıkmaktadır.

iv) Belirsizlik ilkesi acaba mikroskopik parçacıkların bir iç özelliğinden mi yoksa ölçen ve ölçülen arasındaki kontrol edilemeyen ilişkiden mi kaynaklanmaktadır?

v) Parçacık, uzayda dalga formunda bulunur ve belli bir noktada bulunmasının yine belli bir olasılığı vardır. Peki bu durum nasıl açıklanacaktır? Acaba deney ölçümlerinde bu problemin açıklanması, dalga paketinin çökmesi veya daralması olarak düşünülebilir mi?

Yukarıdaki bu sorular lineer kuantum mekaniğinin temel varsayımlarını içeren önemli konular olduğu için, birçok bilim insanı bu tartışmanın içinde olmuştur. Nerdeyse bir yüzyıldır bu tartışma devam ediyorsa da, hala bu soruların çoğuna kesin bir yanıt bulunamamıştır. 1932 yılında Von Neumann, lineer kuantum mekaniğin tam bir teori olmadığını öne sürerek bu sorunla ilgili başka tartışma sürecini başlatmıştır. Buna göre von Neumann, Hilbert uzayında gözlenebilir büyüklükleri temsil eden bir kümeyi ele almıştır. Öyle ki A operatörü ile gösterilen bir durum, yine bu durumu temsil eden operatörün $< A >$ ortalama değeri bulunarak hesaplanır. Eğer ortalama değer $< 1 > = 1$ ise r'nin herhangi bir gerçek değeri için $\langle rA \rangle = r \langle A \rangle$'dır. Eğer $A, B, C,$ keyfi seçilen gözlenebilir büyüklüklerse, o zaman $A + B + C$ ...'da gözlenebilir bir büyüklük olur. Bu durum, $\langle A + B + C \rangle = \langle A \rangle + \langle B \rangle + \langle C \rangle$ şeklinde gösterilebilir. Von Neuman Q Hilbert uzayında öylesi bir self-adjoint A operatörünün bulunacağını ve bu operator için $< A^a > \neq < A >^a$ olacağını göstermiştir. Buna göre A tüm özellikleri kesin olarak tanımlanamayan veya bilinemez bir fiziksel sistem olabilir. Yani ortalama olarak elde edilen veya ölçülen fiziksel sistem, bir dağılıma sahiptir.

1957'de Gleason bu teorem üzerinde iki ayrı düzeltme yaptı. Buna göre kullanılan Hilbert uzayı iki boyuttan büyük olmalı ve bu uzayda kullanılan operatörler de komütasyon koşullarını sağlamalıydı. Bu yaklaşımlar altında operatörler Von Neumann eşitsizliğini de sağlamış olurlar. Bu durumda ele alınan büyüklükler gerçek olduğundan artık sıra değiştirebilir ve lineer toplama özelliği de ortalama şeklinde bulunabilir. Ayrıca bu büyüklükler, yapılan ölçümlerin sırasından da bağımsız oldukları için ölçüm sırasında bir belirsizliğe rastlanmaz. Bu açıdan bu operatörler, von Neumann eşitliğini de sağlarlar.

1966 yılında Bell, Gleason'un teorisinin, deneysel ölçüm öncesi ve sonrası etkileşmeleri içeren gizli değişkenleri ihmal ettiğini, bu şekilde, teorideki belirsizliklerin ortadan kalkacağını ve deneysel ölçüm sonuçlarının uyumlu olacağını öne sürmüştür. Böylelikle ölçüm öncesi ve sonrasını içeren, koşullara bağlı gizli değişkenler teorisi de ortaya atılmıştır. Ayrıca Bell, teoride, kuantum mekaniğinde olduğundan daha çok değişken olduğunu, deneylerle bu görüş desteklenirse kuantum mekaniğindeki belirsizliğin kalkacağını savunmuştur.

Bohr ve Einstein Arasındaki Tartışma

Lineer kuantum mekaniği ile ilgili tartışmalarda başını Bohr ve arkadaşlarının çektiği Copenagen Okulu ve buna karşılık birçok fizikçinin otorite saydığı Einstein'ın fikirleri öne çıkar. Öyleki artık Bohr ve Einstein arasında uzun yıllar sürecek bir tartışma başlayacaktır.

Bu süreç üç ana döneme ayrılırsa, birincisi kuantum mekaniğin ilk ortaya çıktığı 1924-1927 tarihleri arasındadır. Einstein felsefi inancı ve bilimsel amaçları doğrultusunda ilerleyip fiziksel dünyayı kapsayan kesin bir tanımlama arayışındaydı ve lineer kuantum mekaniğin yorumu ile ilgili sürekli bir kaygı taşıyordu. 1926 yılında Einstein Born'a yazdığı mektupta, lineer kuantum mekaniği kesinlikle muhteşem ama içimden bir ses gerçeğin bu olmadığını söylüyor diyordu. Aslında teorinin çok şey söylediğini ama eski klasik teori hakkında hiçbir şey söylemediğini, Kuantum mekaniğindeki dalga fonksiyonunun olasılıkçı yapısına dayanarak her ne olursa olsun Tanrının zar atmayacağını belirtmişti. 1927-1930 yılları ikinci dönemi oluşturur, Bohr ünlü tamamlayıcılık ilkesini ortaya koyduktan sonra kendine ait yorumunu yayınladı. Öyle ki Bohr'un bu yaklaşımı ana akımlardan birini oluşturacaktı. Einstein ise bu durumdan fazlasıyla mutsuzdu. Asıl dert ettiği nokta Bohr'un tamamlayıcılık ilkesi üzerine geliştirilen, belirsizlik bağıntısıydı. 1927-30 yılları arasında gerçekleşen fizik kongresinde Einstein iki tane deney önerdi. Bunlar belirsizlik ilkesinin ve kuantum formalizminin ortaya atılmasını sağlayan, çift yarık deneyi ve foton kutusuydu. Amaç ise Bohr'un tamamlayıcılık ilkesini çürütmekti. Fakat Bohr'un yaratıcı cevapları Einstein'in moralini bozuyordu. Bu yüzden Einstein lineer kuantum mekaniğini belli ölçüde kabul etmek zorunda kaldı.

Ölümüne kadarki son dönemde , Einstein klasik teoriyle ilgilenmeye devam etse de Bohr' la yaşadığı zıtlaşmaya atfen, Podolski ve Rosen'le EPR paradoksunu ortaya attılar. Buna göre paradoks mikroskopik nedensellik ve deterministik yerelleşme yaklaşımlarını desteklemek için ortaya atılmıştı ve lineer kuantum mekaniğinin bu konulardaki eksikliğini ortaya koymayı amaçlıyordu.

Bohr ile Einstein arasındaki bu tartışma üç ana maddede toplanabilir.

a) Einstein mikroskopik dünyanın makroskopik dünyadan farklı olmayacağını söylemiş ve deterministik yaklaşımın önemini vurgulamıştır.

b) Einstein lineer kuantum mekaniğin nihai ve tam bir teori olmadığını savunmuştur. Teoriyi klasik optiğe benzetmiştir. Çünkü ikisi de istatistik kurallarla çalışır. t anında konumu bilinen bir parçacığın bulunma olasılığı $\psi(r,t)$ iken gözlenebilen büyüklüklerin değeri istatistik yöntemlerle hesaplanır ve deneysel verilerle doğrulanır. O yüzden $\psi(r,t)$ mikroskopik dünyayı bütünüyle açıklayamaz.

c) Son kısım lineer kuantum teorinin fiziksel yorumuyla ilgilidir. Einstein tek bir parçacığın lineer kuantum teoriyle açıklanmasını yeterli bulmadığını açıkça söylemiştir. Makalelerinde de $\psi(r,t)$ nin sadece çok parçacıklı sistemleri açıkladığını çok defa yazmıştır. Bu nedenle kuantum teorisinin eksikliği olduğunu belirtmiştir. Çünkü tam teoriler gözlenebilen büyüklüklerle ilgili kesin değerler vermelidir. Einstein serbest elektron fikrine de pek sıcak bakmıyordu. Yani Einstein teorinin matematik istatistik kısmıyla değil, sonuçların fiziksel yorumuna karşıydı. Diğer bir sebepte teorinin görelilik teorisiyle örtüşmemesiydi. Alan teorisi kullanarak atomik yapıyı çözmeye çalışmış, bu iki teoriyi birleştirmek için çok çaba harcamıştı.

EK-b) Makroskobik Sistemlerde Lineer Olmayan Kuantum Olayları.

Atomik ölçekteki fizik olaylarını açıklamak için kuantum mekaniğinin kullanılması gerektiğini daha önce belirtmiştik. Bunun yanında kuantum mekaniğinin makroskobik ölçekte (iri ölçek) yansıması olan birçok olay vardır. Makroskopik ölçekteki kuantum davranışlar mikroskopik ölçekteki (atomik ölçekteki) kuantum olaylarından farklıdırlar. Genellikle maddeyi oluşturan bileşenlerin (atom, molekül, vb.) ortak davranışı sonucu ortaya çıkarlar. Makro ölçekteki bu davranışlar daha öncede belirtilen kuasi parçacıkların davranışı ile açıklanabilir. Bunların ait oldukları denklemler lineer olmayan denklemlerdir ve bu denklemlerin çözümleri soliton çözümleridir. Makroskopik ölçekteki bazı kuantum olayları aşağıda kısaca belirtilmiştir. Çok kısaca neyi ifade ettiklerinin açıklandığı bu olaylarların herbiri son yıllarda fizikte yapılan önemli çalışma konulardır. Bu makroskobik fizik durumları maddenin koherent (eş-fazlı) davranışı olarak tanımlanabilir. Örneğin lazerler işığın eş-fazlı (koherent) davranışının iyi bir örneğidirler.

Böyle durumlarda fiziksel sistemi tanımlayan denklemler doğrusal olmayan denklemlerdir. Sistemin durum fonksiyonu $\psi(\boldsymbol{r},t) = \emptyset(\boldsymbol{r},t)e^{i\theta(\boldsymbol{r},t)}$ şeklindedir. Burada dalga fonksiyonunun hem $\emptyset(\boldsymbol{r},t)$ genliği hem de $e^{i\theta(\boldsymbol{r},t)}$ faz kısmı konuma ve zamana bağlıdır. Sistemin zaman içindeki davranışı ise genelleştirilmiş Schrödinger dalga denklemi ile verilir ve şu şekildedir.

$$\hbar\frac{\partial\emptyset}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\emptyset \pm b|\emptyset|^2 + V(r,t)\emptyset + A$$

veya

$$\mu\frac{\partial\emptyset}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\emptyset \pm b|\emptyset|^2 + V(r,t)\emptyset + A(\emptyset)$$

Burada μ kompleks bir sayı, V dış potansiyel alan , A $\emptyset$ nin bir fonksiyonu, b ise lineer olmayan etkileşme uzaklığını belirtir. Relativistik durumlar için de lineer olmayan $Sine - Gordon$ denklemi yazılabilir. Aşağıda kısaca belirtilen makroskobik kuantum olayları bu genelleştirilmiş Schrödinger dalga denklemi ile ifade edilebilir.

Süperiletkenlik.

Süperiletken malzemeler, kendilerine ait kritik sıcaklığın altına inildiğinde elektrik akımına direnç göstermeyen malzemelerdir. Doğada birçok element, birçok bileşik ve alaşım süperiletkenlik özelliği gösterir. Eğer bu malzemelerin sıcaklığı, kendine özel kritik değerin altına düşürülürse malzeme süperiletkenlik gösterir. Buna göre üzerinden geçen elektrik akımını mükemmel bir iletkenlikle sürekli olarak iletir. Yapılan deneylerde malzeme süperiletken durumunda iken, malzemenin içindeki manyetik alan malzemenin dışına çıktığı, ayrıca uygulanan manyetik alandan kaynaklanan manyetik akının da malzemenin içine girmediği gözlenmiştir. Bu tür malzemelere gerçek antimanyetik malzemeler denir. Gözlenen bu olay antimanyetizma ya da Meissner etkisi olarak bilinir. 1957 yılında Bardeen, Cooper ve Schreiffier, süperiletkenliğin mikroskopik teorisini (BCS) yayınladılar. Bu teoriye göre elektronların ve fononların etkileşmesi sonucu oluşan etkiyle, malzemede zıt yönlü spin ve momentumlu elektronlar arasında bir bağ oluşur. Cooper çifti olarak bilinen bu bağ elektronlar arasındaki Coulomb kuvvetini yenecek kadar kuvvetlidir. Gözlenen bu olay, minimum enerji durumunda bu Cooper çiftlerinden oluşan taneciklerin yoğunlaşmasıdır. Çiftler arasında çarpışma ya da enerji alışverişi olmadığı gibi çiftler malzeme örgüsüyle de bu tür bir etkileşime girmezler. Dolayısıyla elektron çiftleri malzemede kolaylıkla akarlar. Herhangi bir dirençle karşılaşmaz. Bu olay süperiletkenlik olarak adlandırılır. Aslında normalde elektronlar çekirdek çevresindeki yörüngelere Pauli dışlama ilkesine uyarak yerleşir. Bu durumda, elektronlar Fermi–Dirac istatistiğine uyarlar. Ama süperiletkendeki çiftlerin Bose-Einstein istatistiğine uyarlar. Bu durum parçacıkların çiftler halinde, enerji alışverişi olmaksızın temel enerji seviyelerinde yoğunlaşmasından kaynaklanmaktadır.

Helyumda Makroskopik Kuantum Etki

Helyum (He) durgun ve sıradan bir gazdır. Ayrıca sıvılaştırılması çok zordur. İki tür izotopu vardır. Bunlar, ${}^3_2He$ ve ${}^4_2He$ dür. Sırayla kaynama noktaları 3.19 ve 4.2 $Kelvin(K)$'dir. ${}^4_2He$ için kritik basınç değeri 1,15 atmosfer(atm)'dir. Küçük kütlelerinden dolayı da sıfır nokta enerjileri oldukça yüksektir. Oda sıcaklığındaki He, mutlak sıfır dereceye düşürülüp dış basınç

yeterince şiddetli uygulandığında atomlar arasındaki mesafe anlamlı bir şekilde azalır ve sistem katı forma geçer. Örneğin ^3_2He için kritik basınç değeri 25-34 $atm.$ aralığındadır. ^4_2He için kristalleşme derecesi $4K$'dir. Bu sıcaklıkta maddede ısı alımı ya da yayımı yoktur. Yani iki fazın entropisi eşittir. Sadece hacimleri farklıdır. Fakat ^3_2He basınç altında, sıcaklık, $T < 0.319\ K$ 'de kristal yapıya sahip olup ısı alır. Başka bir deyişle, He-3 yüksek basınç altında kristalleşirken, sıcaklığı artar. Bu endotermik olaya $Pomeranchuk$ etkisi denir. O halde sıvı ^3_2He ün entropisi kristal haldekinden daha düşüktür. Bu ilginç özellikleri ^3_2He ve ^4_2He ün iç yapısıyla ilgilidir. ^4_2He için faz geçişi $1atm$ basınç altında $2.17\ K$'dedir. Bu kritik sıcaklık değerinin üstündeki bölgede ^4_2He normal sıvı fazdadır. Buna $He-I$ densin. $2.17\ K$'in altında ise gaz tamamen farklı özellikler gösterir. Süperakışkan özelliğindeki bu faza da $He-II$ diyelim. Bu bölgede $He-II$, oldukça küçük çaplı kılcal yapılarda bile bir dirençle karşılaşmadan akabilir. Eğer bir test tüpü $He-II$ sıvısı bulunan kaba (konteyner) daldırılırsa, tüpün içindeki $He-II$ seviyesi konteynırla aynı kalır. Eğer test tüpü yukarı doğru çekilirse içindeki $He-II$ de onunla birlikte yükselir ve tüpün ağzına ulaşıp dışarı doğru konteynıra akmaya başlar. Bu akış, sıvı seviyeleri eşit olana kadar devam eder. Eğer tüp bu kez konteynırın içine daldırılırsa, içindeki tüm süper akışkan sıvı tamamen tükenene kadar konteynırın içine sızar. Bu özellik ^4_2He ün süperakışkan özelliği olarak bilinir.

Kuantum Hall Olayı

Eğer bir metale dikey yönde elektrik, yatay yönde manyetik alan uygulanırsa, yükler , düzleme paralel olarak malzeme yüzeyine birikir. Bu birikim, bir elektrik alan ve dış alana dik olacak şekilde bir elektrik akımı doğurur. Bu durum metallerde Hall olayı olarak bilinir. Hall olayı kendine özgü olarak süperiletken malzemelerin içinde de gözlenir. Buna kuantum Hall olayı denir. Çok düşük sıcaklık ve güçlü manyetik alan varlığında malzemede Hall potansiyeli ve Hall direnci denilen büyüklükler ölçülmüştür. Bu ölçümlere göre elde edilen değerler bir tamsayının katları şeklinde olmaktadır. Bu olay da bir makroskopik kuantum durumudur.

Eksitonların Bose-Einstein Yoğuşması

Silikon, germanyum, silisyum, kadmiyum sülfit gibi malzemelerinde atomik düzeyde gerçekleşen elektron boşluk birleşmesi, bilindiği gibi Coulomb etkileşmesinden doğar. Oluşan parçacıklara da eksiton denir. Eksitonların kendine ait kütlesi, momentumu ve enerjisi vardır. Parçacıklar kendi kütle merkezleri çevresinde döndüğü gibi, malzemedeki kristal örgü içinde rahatlıkla hareket ederler. Yüksek eksiton yoğunluğunda ise zıt spinli olanlar birleşerek bozon özelliği gösteren bir tür molekül oluştururlar. Sıvı helyumda belirli bir sıcaklığın altında çok sayıda eksiton, temel enerji seviyesinde yoğunlaşarak, maddeyi süper akışkan hale getirir. Bu

adı geçen yoğunlaşma olayına Bose-Einstein yoğunlaşması denir. Aynı kuantum durumunda olan bu eksitonlar çizgileri oldukça belirgin olan emisyon spektrumuna sahiptir. 1974 yılında biliminsanları AgBr malzemenin düşük enerji seviyesine ait, oldukça belirgin, keskin bir ışık spektrumu gözlemlediler. Bu olay, malzemede, temel enerji seviyesinde yoğunlaşan eksitonların ışık spektrumuydu. Bu söz konusu olay da bir makroskopik kuantum olayı olup son on yılın en popüler konularından biri olmuştur.

Çok kısa özeti verilen bu makroskopik kuantum olayların dışında, ferromagnetlerde ve nötron yıldızlarında da makroskopik ölçekte kuantum etkiler gözlenmektedir.

Kaynaklar:

1 String, Conformal Fields and Topology, M.Kaku, Springer-Verlag 1991.

2- Stanford Encyclopedia of Philosophy: Cophenhagen Interpretation of Quantum Mechanics.

7- Mathematical Methods for Physicists, G.Arfken, Academic Press, 1970.

8- Principles and Techniques of Applied Mathematics, Bernard Friedman, John Wiley, 1956.

9- Introductory Quantum Mechanics, R.L. Liboff, Addison-Wesley, 1997.

10- Physics of Atoms and Molecules, B.H. Bransden, C.J. Joachain, Prentice Hall, 2003.

11- Quantum Theory of Many-Particle Systems, A.L. Fetter, J. D. Walecka, McGraw-Hill, 1971.

12- Many-Particle Physics, G.D. Mahan, Plenum Press, 1986.

13- Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics, H. Bruus, K. Flensberg, Oxford Press, 2005.

14- Theory of Quantum Liquids, P. Nozieres, D. Pines, Westview Press, 1999.

15- Introductory to Many Body Physics, Piers Coleman, Cambridge University Press 2016.

16- A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problems. Richards D. Mattuck, McGraw-Hill, 1967.

17- Introduction to Solid State Physics, Charles Kittel, John Wiley&Sons Inc, 2005.

18- Statistical Physics of Fields, Mehran Kardar, Cambridge Univ. Press, 2007.

19- Quantum Liquids, A.J. Legged, Oxford, 2006.

20- Quantum Mechanics in Nonlinear Systems
Pang Xiao-Feng , Yuan-Ping, World Scientific, 2005.

21- Fundamentals of Many-body Physics, Wolfgang Nolting, Springer, 2009.

22- Introduction to many body problem, Dionys Baeriswyl, 2010.

23- Theoretical Physics 7, Quantum Mechanics, Wolfgang Nolting, Springer, 2009

24- Introduction to Modern Methods of Quantum Many-Body Theory and Their Applications, Adelchi Fabrocini , Stefano Fantoni, Eckhard Krotscheck., World Scientific, 2002.

25- Intermediate Quantum Mechanics, H.A. Bethe, R. Jakiv. Benjamin (1986).

26- Statistical Mechanics, Kerson Huang, John Wiley, 1987.

Dizin

Açısal momentum, 6
Adyabatik süreç, 129-132
Alanlar, 110, 118
Antisimetrik dalga fonksiyonu, 116
Atomlar, 139
Atomik yapı, 147

Bağlanma enerjisi, 40, 123
Baş kuantum sayısı, 6
Belirsizlik ilkesi, 140
Bloch teorisi, 30-32
Bogoliubov eşitliği, 27
Boltzmann, 102, 125
Bose-Einstein, 144, 146
Boşluk, 128, 146
Bölüşüm fonksiyonu, 59, 102
Brillion bölgesi, 31

Coulomb terimi, 7, 94
Copper çiftleri, 144
Curie sıcaklığı, 122

Çoklu etkileşmeler, 18
Çok parçacık , 23, 76, 102

Dağılım fonksiyonları, 127, 129, 135
De Broglie dalga boyu, 1, 140, 141
Dalga fonksiyonu, 127, 140, 141
Değiş-tokuş terimi, 38, 40
Deşik, 71, 118
Dielektrik fonksiyonu, 98
Dirac gösterimi, 112
Dirac fonksiyonu, 135
Durum yoğunluğu, 131, 137
Dyson denklemi, 85, 88, 89

Einstein, 135, 142
Eksitonlar, 139, 147
Elektronik fonksiyonu, 2, 7, 116
Elektron gazı, 2, 8, 27, 30
Elektron-fonon etkileşmesi, 30
Etkileşme gösterimi, 63, 64
Etkin kütle, 131

Fermi-Dirac dağılımı, 132, 135
Fermi sıvısı, 131, 133
Ferromanyetizma, 52
Feynman diyagramları, 80

Fononlar, 14, 139
Fourier dönüşümü, 14, 20

Gazların kinetik teorisi, 122
Gizli değişkenler, 142
Green Fonksiyonları, 59, 69
Gross-Pitaewskii denklemi, 110

Hamilton operatörü, 3, 6, 15
Harmonik salınıcı, 3, 11-14
Hartree-Fock yöntemi, 56
Heisenberg gösterimi, 63, 71
Heisenberg modeli, 23
Helyum atomu, 2, 7
Hermite polinomları, 3
Hidrojen atomu, 4, 6, 37
Hilbert uzayı, 139,140

Işık spektrumu, 146
İdeal gaz, 105, 122, 129
İkili etkileşme, 18, 20, 110
İkinci kuantizasyon, 16, 17
İmajiner zaman, 102
İndirgenmiş kütle, 4
İzotop, 145
İyonik atom, 6

Jel model, 29, 32, 36

Kimyasal potansiyel, 35, 136
Klein-Gordon eşitliği, 139
Kuantum alan teorisi, 139
Kubo bağıntısı, 102
Küresel harmonikler, 5, 136

Landau teorisi, 133, 137
Legendre polinomları, 5, 134
Lineer olmayan denklemler, 143, 144
Lineer vektör uzayı, 2, 139

Magnonlar, 26
Makroskobik ölçek, 139, 143
Manyetik alan, 24, 144, 145
Manyetik dipol, 53
Maxwell-Boltzmann dağılımı, 107
Metaller, 28, 49, 55
Meissner etkisi, 144

Nötron yıldızları, 147
Nükleon, 27

Nükleer kuanta, 26

Ohm yasası, 102
Olasılık yoğunluğu, 1, 6, 10
Operatörler, 1, 2, 11
Ortalama alan teorisi, 9, 43
Ortalama değer, 15, 51, 59
Ortalama serbest yol, 135

Örgü sabiti, 14
Özdeğerler, 2,14
Öz enerji, 140
Öz fonksiyonlar, 2, 71
Öz uyumluluk denklemi, 8, 45

Para manyetizma, 122
Pauli prensibi, 20, 40, 113
Pertürbasyon teorisi, 6,7
Planck sabiti, 2
Plazmonlar, 26
Polarizasyon, 54, 57
Polaronlar, 26
Potansiyel enerji, 3, 4, 29
Pozitron, 22

Radyal dalga fonksiyonu, 5
Relativistik durumlar, 143

Saçılma deneyleri, 73
Sanal kısım, 89
Self enerji, 73, 87, 88
Ses dalga parçacığı, 109
Schrödinger gösterimi, 140
Sıfır nokta enerjisi, 123
Simetrik dalga fonksiyonu, 106, 116
Simetrileştirme ilkesi, 8
Simetri kırılması, 50, 52
Sipin, 6, 9, 22
Siyah cisim ışıması, 1
Suseptibilite, 102, 103
Süperakışlanlık, 105
Süperiletkenlik, 144

Taban durumu, 7, 12, 29, 102
Thomas – Fermi modeli, 7
Tekillik, 98
Termodinamik limit, 41
Termodinamik potansiyel, 95
Ters uzay, 14, 30
Toplam dalga fonksiyonu, 9, 15

Uyarılmış durumlar, 7, 118, 125
Uygunluk ilkesi, 9, 140

Vakum durumu, 109, 112
Vakum polarizasyon terimleri, 83, 84
Varyasyon ilkesi, 9
Vektör potansiyel, 100

X-ışını, 1, 30
Yörüngesel açısal momentum, 6
Yük dağılımı, 7, 29
Yüksek sıcaklık, 9, 122.
Yaratma ve yok etme işlemcileri, 11, 118
Yarı iletken, 36, 72, 124