ODDELEK ZA FIZIKO
Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

Kvantni modeli v fiziki trdne snovi

A. R.

Ljubljana 2001

Pri predelavi zapiskov v LaTeX so sodelovali študenti podiplomskega študija fizike: Z. Arsov, M. Conradi, A. Jeromen, M. Praprotnik, T. Rejec, D. Svenšek, M. Vraničar in J. Zupan (1999/2000) ter D. Dvoršek, B. Markun, A. Mihelič in S. Shawish (2001/2002), za kar se jim zahvaljujem.

Kazalo

1

Uvod

Formalizem Greenovih funkcij, znanih iz podiplomske 'višje kvantne mehanike', tukaj posplošimo na $T > 0$. Nato retardirano komutatorsko Greenovo funkcijo povežemo s posplošeno susceptibilnostjo in Kubovo formulo v teoriji lenearnega odziva. Transport v nanostrukturah se pogosto obravnava v balističnem režimu (Landauerjeva formula) oz. v primeru interagirajočih elektronov z Wingreenovim pristopom, kar bo predstavljeno v naslednjem poglavju. Nato bomo predstavili različne modele za opis interagirajočih elektronov, kot se danes standardno uporabljajo v teoriji trdne snovi. Pri tem bomo uporabili orodje iz prvih poglavij. Delo je še v nastajanju, zato so nadvse dobrodošle pripombe in sugestije.

V enačbah so še napake, ki pa se periodično odpravljajo... in se priporočam za na novo odkrite.

1.1 Osnove

1.1.1 Druga kvantizacija

1.1.2 Gostotna matrika

QM: Naj $|\phi_m\rangle$ sestavljajo poln sistem lastnih stanj, E_m pa naj bodo pripadajoče lastne energije Hamiltonovega operatorja H,

$$H |\phi_m\rangle = E_m |\phi_m\rangle \,. \tag{1.1}$$

Za poljuben operator A je pričakovana vrednost

$$\langle A\rangle = \langle \Psi| A |\Psi\rangle \,, \tag{1.2}$$

kjer je $|\Psi\rangle$ čisto stanje,

$$|\Psi\rangle = \sum_m a_m |\phi_m\rangle \,. \tag{1.3}$$

Tako je

$$
\begin{aligned}
\langle A\rangle &= \sum_{m,n} a_n^* a_m \langle\phi_n| A |\phi_m\rangle = \\
&= \sum_{m,n} a_n^* a_m A_{nm} = \sum_m (\rho A)_{mm} = \\
&= \mathrm{Tr}(\rho A),
\end{aligned}
\tag{1.4}
$$

kjer je

$$
\rho = \sum_{mn} |\phi_m\rangle \rho_{mn} \langle\phi_n|\,, \qquad \rho_{mn} = a_n^* a_m. \tag{1.5}
$$

Tu je ρ gostotna matrika (operator), Tr(...) pa označuje sled operatorja (...). Nekaj pomembnejših lastnosti sledi je

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}\, A = \sum_m A_{mm} \\
&\mathrm{Tr}\, AB = \mathrm{Tr}\, BA \\
&\mathrm{Tr}\, ABC = \mathrm{Tr}\, CAB = \mathrm{Tr}\, BCA
\end{aligned}
\tag{1.6}
$$

Če je $S^\dagger S = SS^\dagger = 1$ in $A' = S^{-1}AS$, potem je

$$
\mathrm{Tr}\, A' = \mathrm{Tr}\, A. \tag{1.7}
$$

Velja tudi

$$
\mathrm{Tr}\, \rho = \sum_m \rho_{mm} = \sum_m a_m^* a_m = 1; \qquad \rho_{mm} \geq 0. \tag{1.8}
$$

1.1.3 Časovna odvisnost gostotne matrike

$$
\frac{\partial}{\partial t}\rho_{mn} = \frac{\partial}{\partial t} a_n^* a_m \tag{1.9}
$$

in

$$
a_m(t) = e^{-\frac{iE_m}{\hbar}t} a_m(0), \tag{1.10}
$$

saj

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi_m\rangle = E_m |\phi_m\rangle\,. \tag{1.11}
$$

$$
\frac{\partial}{\partial t}\rho_{mn} = \frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)\rho_{mn}. \tag{1.12}
$$

V bazi $|\phi_n\rangle$ je H diagonalen, tako da velja

$$E_n = H_{nn}, \tag{1.13}$$

$$E_n \rho_{mn} = \sum_l \rho_{ml} H_{ln} = (\rho H)_{mn}, \tag{1.14}$$

$$\dot{\rho}_{mn} = \frac{i}{\hbar}[(\rho H)_{mn} - (\rho H)_{nm}] \tag{1.15}$$

in končno

$$-i\hbar\dot{\rho} = [\rho, H]. \tag{1.16}$$

To je časovni razvoj gostotne matrike v Schrödingerjevi sliki (ne v Heisenbergovi!). Enačba (1.16) je kvantnomehanski analog Liouville-ovi enačbi v klasični mehaniki.

1.1.4 Gostotna matrika pri končnih temperaturah, $T > 0$

Prejšnja definicija gostotne matrike velja kvantnomehansko pri $T = 0$ in to za čista kvantnomehanska stanja. Naš pristop bi radi posplošili za temperature nad absolutno ničlo, torej $T > 0$.

Naj bo ρ diagonalna,

$$\rho = \sum_m |m\rangle\, p_m \,\langle m|\,;$$

vidimo, da je $p_m = \langle m|\,\rho\,|m\rangle = \rho_{mm}$. Za povprečje (uteženo povprečje pričakovanih vrednosti) operatorja potem velja

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_m p_m A_{mm},$$

pri čemer je p_m verjetnost, da bomo izmerili A_{mm}. Za kanonični ansambel je

$$p_m \propto e^{-\beta E_m}; \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

Iz pogoja $\sum_m p_m = 1$ sledi, da je matrični element gostotne matrike ravno obratno sorazmeren statistični vsoti $Z = \sum_m e^{-\beta E_m}$:

$$p_m = \frac{e^{-\beta E_m}}{Z}.$$

Statistično vsoto kanoničnega ansambla lahko zapišemo tudi s sledjo $Z = \mathrm{Tr}(e^{-\beta\hat{H}})$. Za velekanonični ansambel je $Z_G = \mathrm{Tr}(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})})$, kjer je $\hat{N}$ operator števila delcev. Gostotno matriko lahko sedaj izrazimo operatorsko

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z} \qquad \text{oziroma} \qquad \hat{\rho}_G = \frac{e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}}{Z_G}, \tag{1.7}$$

po vrsti za kanonični in velekanonični ansambel. Izraza seveda veljata za poljubno bazo in nista omejena le na primer, ko je ρ diagonalna.

Tudi za povprečje zapišimo splošnejši operatorski izraz

$$\langle \hat{A} \rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}).$$

S takim pristopom lahko obravnavamo tudi nepolarizirane (nečiste) sisteme.

1.1.5 Korelacijske funkcije

Oblika korelacijske funkcije (operatorskih znakov ne bomo pisali):

$$\begin{aligned} C(t,t') &= \langle A(t)B(t') \rangle = \mathrm{Tr}(\rho A(t)B(t')) \\ &= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}(e^{-\beta H} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} e^{\frac{i}{\hbar}Ht'} B e^{-\frac{i}{\hbar}Ht'}) \\ &= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}(e^{-\beta H} A e^{\frac{i}{\hbar}H(t'-t)} B e^{-\frac{i}{\hbar}H(t'-t)}) \\ &= \langle A(0)B(t'-t) \rangle = \langle A(t-t')B(0) \rangle = \tilde{C}(t-t') \end{aligned} \tag{1.8}$$

Operatorje smo zapisali v Heisenbergovi sliki. Pri izpeljavi smo uporabili ciklično pravilo za sled. Poudariti je še potrebno, da je običajno ravno korelacijska funkcija tista količina, ki jo merijo eksperimenti.

1.2 Greenove funkcije

Posplošena susceptibilnost (gl. dalje...) je poseben primer Greenovih funkcij. **Retardirana** Greenova funkcija je definirana kot

$$G_r(t,t') = -\frac{i}{\hbar}\,\theta(t-t')\;\langle\,[A(t),B(t')]\,\rangle \tag{1.9}$$

in je povezana s posplošeno susceptibilnostjo $\chi_{BA}(\omega)$, kar bomo pokazali kasneje. **Avansirano** Greenovo funkcijo definiramo takole:

$$G_a(t,t') = +\frac{i}{\hbar}\,\theta(t'-t)\;\langle\,[A(t),B(t')]\,\rangle\,. \tag{1.10}$$

Včasih komutator [,] zamenjamo z antikomutatorjem { , }. Pogosto je izraz 'Greenova funkcija' rezerviran za primer $A^\dagger = B$ in je A kreacijski (anihilacijski) operator, vendar bomo tukaj do nadaljnega uporabljali splošnejši definiciji (1.9, 1.10).

Greenove funkcije imajo obliko korelacijskih funkcij, zato zanje po enačbi (1.8) velja:

$$G_{r(a)}(t,t') = G_{r(a)}(t-t'). \tag{1.11}$$

Po notaciji Zubareva lahko retardirano Greenovo funkcijo zapišemo na krajši način:

$$G_r(t-t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_r\,. \tag{1.12}$$

1.2.1 Enačba gibanja za retardirano Greenovo funkcijo

V nekaterih primerih lahko Greenovo funkcijo izračunamo iz enačbe gibanja:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}&\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle = \\ =&\delta(t-t')\langle\,[A,B]\,\rangle + \frac{-i}{\hbar}\theta(t-t')\,\big\langle\,[A(t),H]B(t')-B(t')[A(t),H]\,\big\rangle = \\ =&\delta(t-t')\langle\,[A,B]\,\rangle + \langle\langle [A(t),H];B(t')\rangle\rangle. \end{aligned} \tag{1.13}$$

V frekvenčnem prostoru:

$$G_r(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G_r(\tau)e^{i\omega\tau}d\tau \equiv \langle\langle A;B\rangle\rangle_\omega, \tag{1.14}$$

$$G_r(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} G_r(\omega)e^{-i\omega\tau}d\omega. \tag{1.15}$$

Enačbo (1.15) vstavimo v enačbo (1.13) in dobimo enačbo gibanja za Greenove funkcije v frekvenčnem prostoru:

$$\hbar\omega\langle\langle A;B\rangle\rangle_\omega = \langle\,[A,B]\,\rangle + \langle\langle [A,H];B\rangle\rangle_\omega. \tag{1.16}$$

Ta enačba generira set algebraičnih enačb za $\langle\langle\cdots\rangle\rangle_\omega$. Če primerjamo enačbo (1.14) z definicijo posplošene susceptibilnosti, pridemo do obljubljene zveze:

$$\langle\langle A;B\rangle\rangle_\omega = -\chi_{AB}(\omega). \tag{1.17}$$

1.2.2 Spektralna reprezentacija Greenove funkcije

Definirajmo $J(\omega)$ kot

$$J_{BA}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\langle B(t')A(t)\rangle\, e^{i\omega\tau}d\tau; \tau = t-t', \tag{1.18}$$

kjer je

$$\langle B(t')A(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J_{BA}(\omega)e^{-i\omega\tau}d\omega \tag{1.19}$$

in

$$\langle A(t)B(t')\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\beta\hbar\omega}J_{BA}(\omega)e^{-i\omega\tau}d\omega. \tag{1.20}$$

Greenova funkcija je potem

$$G_r(\omega) = -\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}(e^{\beta\hbar\omega'}-1)J_{BA}(\omega')d\omega'\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\tau-i\omega'\tau}\Theta(\tau)d\tau. \tag{1.21}$$

Če upoštevamo

$$\Theta(\tau) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iz\tau}}{z + i\varepsilon} dz; \varepsilon \to 0^+, \tag{1.22}$$

$$\delta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ix\tau} dx, \tag{1.23}$$

in

$$\frac{1}{i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega' - \omega)\tau} \Theta(\tau) d\tau = \frac{1}{\omega - \omega' + i\varepsilon}; \varepsilon \to 0^+, \tag{1.24}$$

dobimo retardirano in avansirano Greenovo funkcijo v obliki

$$G_r(\omega) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(e^{\beta\hbar\omega'} - 1) J_{BA}(\omega') d\omega'}{\omega - \omega' + i\varepsilon} \tag{1.25}$$

$$G_a(\omega) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(e^{\beta\hbar\omega'} - 1) J_{BA}(\omega') d\omega'}{\omega - \omega' - i\varepsilon}. \tag{1.26}$$

Enačbi (1.25) in (1.26) lahko zapišemo kot funkcijo kompleksne spremenljivke z

$$G(z) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(e^{\beta\hbar\omega'} - 1) J_{BA}(\omega') d\omega'}{z - \omega'}. \tag{1.27}$$

Velja

$$G(z) = \left\{ \begin{array}{ll} G_r(\omega) & \text{če } z \to \omega \text{ in } \Im z \to 0^+ \\ G_a(\omega) & \text{če } z \to \omega \text{ in } \Im z \to 0^- \end{array} \right. . \tag{1.28}$$

Če upoštevamo še (dokaži in razloži)

$$\frac{1}{\omega - \omega' \pm i\varepsilon} = P \frac{1}{\omega - \omega'} \mp i\pi\delta(\omega - \omega') \tag{1.29}$$

dobimo

$$G(\omega - i\varepsilon) - G(\omega + i\varepsilon) = G_a(\omega) - G_r(\omega) = \frac{2\pi i}{\hbar} J_{BA}(\omega)(e^{\beta\hbar\omega} - 1). \tag{1.30}$$

$G(z)$ ima pole pri $z = \omega$.

1.2.3 Greenova funkcija v dani bazi, spektralna funkcija

Vzemimo bazo $|\varphi_m\rangle = |m\rangle$ in naj velja

$$H\,|m\rangle = E_m\,|m\rangle\,. \tag{1.31}$$

Potem lahko $J_{BA}(\omega)$ zapišemo kot

$$\begin{aligned} J_{BA}(\omega) = \;& \tfrac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{m,n}\tfrac{e^{-\beta E_m}}{Z}\langle m|\,B\,|n\rangle\langle n|\,e^{i\frac{E_n}{\hbar}t}Ae^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}\,|m\rangle e^{i\omega t}dt = \\ & \sum_{m,n}\tfrac{e^{-\beta E_m}}{Z}\langle m|\,B\,|n\rangle\,\langle n|\,A\,|m\rangle\,\delta(\tfrac{E_n-E_m}{\hbar}+\omega) \end{aligned} \tag{1.32}$$

ter G_r kot

$$G_r(z) = \sum_{m,n}\frac{1}{Z}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{\hbar z-(E_m-E_n)}\langle m|\,B\,|n\rangle\,\langle n|\,A\,|m\rangle\,. \tag{1.33}$$

V posebnem primeru, ko je $A^+ = B$, je $J_{BA}(\omega)$ realna funkcija. V tem primeru sledi iz enačb (1.25) in (1.29)

$$G(z^*) = G^*(z) \tag{1.34}$$

in

$$G(\omega\mp i\varepsilon) - G(\omega\pm i\varepsilon) = \pm 2i\Im G(\omega\mp i\varepsilon). \tag{1.35}$$

Če velja $A^+ = B$, potem dobimo sledečo enakost

$$-\frac{1}{\pi}\Im G_r(\omega) = (e^{\beta\hbar\omega}-1)J_{BA}(\omega) = A(\omega), \tag{1.36}$$

kjer je $A(\omega)$ spektralna funkcija in

$$G_r(\omega) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{G''(\omega')d\omega'}{\omega-\omega'} = G' + iG''. \tag{1.37}$$

G' in G'' tako ustrezata Kramers-Kronigovi enačbi (**??**; gl. dalje ...)

$$G_r'(\omega) = -\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{G''(\omega')d\omega'}{\omega-\omega'} = G' + iG'', \tag{1.38}$$

kar dobimo, če upoštevamo enačbi (1.38) in (1.29).

1.2.4 Primeri

(i) Izračunaj $\ll A; B \gg_\omega$ za primer, ko velja

$$[A, H] = \Omega A;\ \Omega \in C. \tag{1.39}$$

Enačba gibanja je

$$h\omega \ll A; B \gg_\omega = \underbrace{\langle [A, B] \rangle}_{\gamma} + \Omega \ll A; B \gg_\omega, \tag{1.40}$$

tako da

$$G(\omega) = \frac{\gamma}{\hbar\omega - \Omega}. \tag{1.41}$$

Velja še

$$G(\omega - i\varepsilon) - G(\omega + i\varepsilon) = 2iG(\omega - i\varepsilon). \tag{1.42}$$

Od tod sledi spektralna funkcija

$$J_{BA}(\omega) = \frac{\gamma\delta(\hbar\omega - \Omega)}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \gamma n(\omega)\delta(\hbar\omega - \Omega), \tag{1.43}$$

pri čemer je

$$n(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \tag{1.44}$$

Bose-Einsteinova porazdelitvena funkcija. Naprej velja še

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \gamma n(\Omega) e^{i\Omega(t-t')} \tag{1.45}$$

in

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \frac{\gamma e^{\beta\hbar\Omega}}{e^{\beta\hbar\Omega} - 1} e^{i\Omega(t-t')}. \tag{1.46}$$

(ii) Naj bo $H = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k$, kjer a_k in a_k^+ zadoščata relaciji $[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{kk'}$. Zapiši Greeonvo funkcijo za primer, ko velja:

$$A = a_k, B = a_{k'}^+.$$

Rezultat:

$[A, H] = \varepsilon_k A$ (bralec naj dokaže sam)

$\gamma = \delta_{kk'}$ (glej primer (i)).

Iz prejšnjega primera, (i), sledi:

$$G(\omega) = \frac{\delta_{kk'}}{\hbar\omega - \varepsilon_k} \tag{1.47}$$

in

$$\langle B(t)A(t) \rangle = \langle a_k^+ a_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k} - 1}. \tag{1.48}$$

Opomba:

Če namesto komutatorske relacije [] uporabimo antikomutatorsko {}, dobimo prek antikomutatorske Greenove funkcije rezultat za fermione – Fermi-Diracovo porazdelitev

$$\langle a_k^+ a_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k} + 1} \; a_k, a_{k'}^+ = \delta_{kk'}. \tag{1.49}$$

1.3 Neinteragirajoči elektroni: model tesne vezi

1.3.1 Spektralna funkcija $A_{\mathbf{k}}(\omega)$ in gostota stanj $\mathcal{N}(\omega)$

1.3.2 Porazdelitev gibalnih količin $n_{\mathbf{k}}$

1.3.3 Fermijeva površina

2

Teorija linearnega odziva

2.1 Kubova formula

Naj bo $\hat{H}_0$ Hamiltonov operator sistema v ravnovesju, ustrezna gostotna matrika pa $\hat{\rho}_0 = e^{-\beta\hat{H}_0}/Z$ (oz. $\hat{H}_0 \to \hat{H}_0 - \mu\hat{N}$ za velekanonični ansambel). Sistem zmotimo z dodatkom $\hat{H}' = \hat{H}'(t)$ k hamiltonianu, ki se tako v prisotnosti motnje glasi

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t).$$

R. Kubo (1957) je za moten sistem vpeljal nastavek za gostotno matriko

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 + \Delta\hat{\rho}(t). \tag{2.1}$$

Odslej bomo operatorske znake opuščali. Iz enačbe (1.16), ki ima zdaj obliko

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t) = [H_0 + H^{'}(t), \rho(t)] \tag{2.2}$$

dobimo z nastavkom (2.1)

$$i\hbar\frac{d}{dt}\Delta\rho(t) = \underbrace{[H_0, \rho_0]}_{\equiv 0\ (ravnovesje)} + [H_0, \Delta\rho(t)] + [H^{'}(t), \rho_0] + \underbrace{[H^{'}(t), \Delta\rho(t)]}_{zanemarimo}.$$

Bistvo Kubovega pristopa je, da zadnjega člena v enačbi ne upoštevamo. $H^{'}$ in $\Delta\rho$ sta 'majhna' (karkoli že to pomeni), zato lahko zadnji člen zanemarimo, saj gre za popravek višjega reda.

Of zgornje enačbe ostane torej (izpuščali bomo oznake za odvisnost od časa)

$$i\hbar\frac{d}{dt}\Delta\rho - [H_0, \Delta\rho] = [H^{'}, \rho_0]. \tag{2.3}$$

H_0, $H^{'}$ in ρ_0 so znani, iščemo pa $\Delta\rho$. Pred nadaljevanjem pokažimo, da velja

$$i\hbar\frac{d}{dt}(U^+\Delta\rho\, U) = U^+(i\hbar\frac{d}{dt}\Delta\rho + [\Delta\rho, H_0])\, U, \tag{2.4}$$

kjer je $U = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$ operator časovnega razvoja. Če izpišemo odvod po času na levi strani enačbe (2.4):

$$i\hbar(\frac{i}{\hbar}H_0\,U^+\Delta\rho\,U + U^+\frac{d}{dt}\Delta\rho\,U - \frac{i}{\hbar}U^+\Delta\rho\,H_0\,U) = U^+(i\hbar\frac{d}{dt}\Delta\rho + [\Delta\rho, H_0])\,U,$$

vidimo, da identiteta (2.4) res velja. Iz enačbe (2.4) ob upoštevanju (2.3) sledi

$$\begin{aligned} U^+(i\hbar\frac{d}{dt}\Delta\rho + [\Delta\rho, H_0])\,U = \\ = U^+[H', \rho_0]\,U = i\hbar\frac{d}{dt}(U^+\Delta\rho\,U). \end{aligned} \tag{2.5}$$

Iz zadnje vrstice (2.5) sledi rešitev za $\Delta\rho$

$$i\hbar\,U^+(t)\Delta\rho(t)\,U(t) = \int U^+(t')\,[H'(t'), \rho_0]\,U(t')\,dt' + C. \tag{2.6}$$

Konstanto C določimo iz začetnega pogoja pri $t = t_0$ ali $t \to -\infty$. Iz enačbe (2.6) sledi **Kubova formula**

$$\Delta\rho(t) = \Delta\rho(t_0) - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t')}\,[H'(t'), \rho_0]\,e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t')}\,dt'. \tag{2.7}$$

Daleč nazaj, ko motnja v sistemu še ni bila prisotna, tudi gostotna matrika ni bila spremenjena, torej $\Delta\rho(t_0 \to -\infty) \to 0$.

Kubovo formulo za $\Delta\rho$ lahko uporabimo na primer pri izračunu razlike povprečij operatorja v motenem in ravnovesnem stanju sistema:

$$\langle A\rangle - \langle A\rangle_0 = \mathrm{Tr}(\Delta\rho A).$$

2.2 Odzivna funkcija

Oglejmo si poseben primer, kjer ima motnja obliko

$$\hat{H}'(t) = -\hat{A}\,F(t)\,. \tag{2.8}$$

$\hat{A}$ je od časa neodvisen operator, ki sklaplja sistem z zunanjim poljem $F(t)$. Nekaj primerov:

sistem	operator	polje	$\hat{H}'$
dielektrik	dipolni moment	električno polje	$-\hat{\mathbf{p}}_\mathbf{e}\cdot\mathbf{E}$
magnetni	magnetni moment	magnetno polje	$-\hat{\mathbf{p}}_\mathbf{m}\cdot\mathbf{B}$
	magnetizacija	magnetno polje	$-\hat{\mathbf{M}}\cdot\mathbf{H}$
	tok	vektorski potencial	$-\hat{\mathbf{j}}\cdot\mathbf{A}$

"Merimo" neko fizikalno količino, ki jo predstavlja operator $\hat{B}$,

$$\langle\hat{B}\rangle = \langle\hat{B}\rangle_0 + \Delta B. \tag{2.9}$$

Slika 2.1: Adiabatni vklop zunanjega polja.

$\langle\hat{B}\rangle_0$ je povprečna vrednost operatorja v ravnovesju, $\Delta B = \Delta B\,(t)$ pa odmik od $\langle\hat{B}\rangle_0$,

$$\Delta B\,(t) = \langle\hat{B}\rangle - \langle\hat{B}\rangle_0 = \mathrm{Tr}\left(\Delta\hat{\rho}\,(t)\,\hat{B}\right). \tag{2.10}$$

Naprej sledi (brez operatorskih znakov):

$$\begin{aligned}
\Delta B\,(t) &= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{Tr}\left\{e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t')}\left[A,\rho_0\right]F\,(t')\,e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t')}B\right\}\mathrm{d}t' = \\
&= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{Tr}\left\{\left[A,\rho_0\right]\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t')}Be^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t')}}_{B(t-t')}\right\}F\,(t')\,\mathrm{d}t' = \\
&= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{Tr}\left\{\rho_0\left[B\,(t-t')\,,A\right]\right\}F\,(t')\,\mathrm{d}t'.
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Rezultat je

$$\Delta B\,(t) = \int_{-\infty}^{t}\phi_{BA}\,(t-t')\,F\,(t')\,\mathrm{d}t', \tag{2.12}$$

kjer je $\phi_{BA}\,(t)$ **odzivna funkcija**,

$$\phi_{BA}\,(t) = \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}\left\{\rho_0\left[B\,(t)\,,A\right]\right\} = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[B\,(t)\,,A\right]\right\rangle. \tag{2.13}$$

Poseben primer:

$$F\,(t) = F_0\,\tau\,\delta\,(t-t_0)\,, \tag{2.14}$$

$$\Delta B\,(t) = \begin{cases} F_0\tau\phi_{BA}\,(t) & \text{if } t \geq t_0, \\ 0 & \text{if } t < t_0. \end{cases} \tag{2.15}$$

2.3 Posplošena susceptibilnost

Kot posebni primer motnje $F(t)$ si oglejmo sinusno nihajoče zunanje polje

$$F\,(t) = F_0\cos\omega t\,e^{\epsilon t};\ \ \epsilon \to 0^+. \tag{2.16}$$

Zunanje polje narašča adiabatno. Na koncu računa se poslužimo limite $\epsilon \to 0^+$. Pripravno je, če vzamemo

$$F\,(t) = F_0 e^{-i\omega t+\epsilon t} \tag{2.17}$$

in nazadnje obdržimo samo realni del.

$$
\begin{aligned}
\Delta B(t) &= \int_{-\infty}^{t} \phi_{BA}(t-t') F_0 e^{-i\omega t'+\epsilon t'} \mathrm{d}t' = \\
&= \int_{0}^{\infty} \phi_{BA}(\tau) F_0 e^{-i\omega t+\epsilon t} e^{i\omega\tau-\epsilon\tau} \mathrm{d}\tau, \\
& \quad \tau = t-t', \ \mathrm{d}\tau = -dt',
\end{aligned}
\tag{2.18}
$$

$$
\begin{aligned}
\Delta B(t) &= \left[\int_{0}^{\infty} \phi_{BA}(\tau) F_0 e^{-i\omega t+\epsilon t} e^{i\omega\tau-\epsilon\tau} \mathrm{d}\tau\right] = \\
&= \left[\chi_{BA}(\omega) F_0 e^{-i\omega t+\epsilon t}\right].
\end{aligned}
\tag{2.19}
$$

Oglati oklepaji pomenijo, da nas zanima realni del limite $\epsilon \to 0^+$ ustreznega izraza. $\chi_{BA}(\omega)$ je posplošena susceptibilnost,

$$
\begin{aligned}
\chi_{BA}(\omega) &= \lim_{\epsilon\to 0^+} \int_{0}^{\infty} \phi_{BA}(\tau) e^{i(\omega+i\epsilon)\tau} \mathrm{d}\tau = \\
&= \lim_{\epsilon\to 0^+} \int_{0}^{\infty} \frac{i}{\hbar}\theta(\tau) \langle [B(\tau), A] \rangle e^{i(\omega+i\epsilon)\tau} \mathrm{d}\tau,
\end{aligned}
\tag{2.20}
$$

kjer je $\theta(t)$

$$
\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{if } t \geq 0, \\ 0 & \text{if } t < 0. \end{cases}
\tag{2.21}
$$

Včasih bomo pisali ω^+ namesto $\omega + i\epsilon$.

2.3.1 Nekaj lastnosti posplošene susceptibilnosti $\chi(\omega)$

Vsotno pravilo

$$
\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \chi_{BA}(\omega) d\omega = \frac{i}{\hbar}\langle [B, A] \rangle = \phi_{BA}(0).
\tag{2.22}
$$

Vsotno pravilo dokažemo s funkcijo delta kot Fourierovo transformacijo konstante:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \chi_{BA}(\omega) d\omega = & \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \lim_{\varepsilon\to 0^+} \int_{0}^{\infty} d\tau\ \phi_{BA}(\tau) e^{i(\omega+i\varepsilon)\tau} = \\
= & \int_{0}^{\infty} \phi_{BA}(\tau)\delta(\tau) d\tau = \phi_{BA}(0).
\end{aligned}
\tag{2.23}
$$

Momenti

Časovni odvod odzivne funkcije je:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\phi_{BA}(t) =& \frac{d}{dt}\frac{i}{\hbar}\left\langle [B(t), A] \right\rangle = \\ =& \frac{d}{dt}\frac{i}{\hbar}\sum_m \left\langle \varphi_m \right| \rho_0[B(t), A] \left| \varphi_m \right\rangle = \\ =& \frac{i}{\hbar}\frac{i}{\hbar}\left\langle [[H, B], A] \right\rangle .\end{aligned} \tag{2.24}$$

V limiti $t \to 0^+$ iz zgornjih enačb sledi naslednja zveza za n-ti moment posplošene susceptibilnosti $\chi_{BA}(\omega)$:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \omega^n \chi_{BA}(\omega) d\omega =& (-i)^n \frac{\partial^n}{\partial t^n}\phi_{BA}(t)\bigg|_{t\to 0^+} = \\ =& \frac{i}{\hbar}\left\langle [[H, [H, [H, \ldots [H, B(t)]]] \ldots], A] \right\rangle .\end{aligned} \tag{2.25}$$

Kramers–Kronigovi relaciji

Posplošeno susceptibilnost $\chi_{BA}(\omega)$ zapišemo kot vsoto realnega in imaginarnega dela:

$$\chi_{BA}(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega). \tag{2.26}$$

Ker sta tako χ' kot χ'' določeni z isto odzivno funkcijo, zanju vedno veljata Kramers–Kronigovi relaciji:

$$\begin{aligned}\chi'(\omega) =& -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi''(\omega')d\omega}{\omega - \omega'}, \\ \chi''(\omega) =& \quad \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi'(\omega')d\omega}{\omega - \omega'}.\end{aligned} \tag{2.27}$$

Dokaz gornjih relacij glej na primer v [1, str. 381-2].

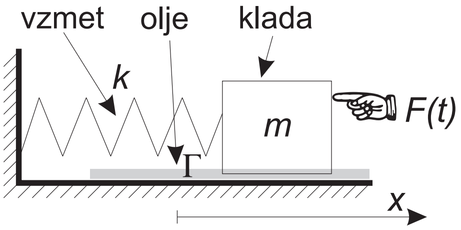
Trivialen primer klasične $\chi(\omega)$

Gibalna enačba za sistem na sliki 2.2 je enačba dušenega nihala:

$$m\ddot{x} + 2\Gamma\dot{x} + kx = F(t). \tag{2.28}$$

'Klasično polje' $F(t)$, s katerim vzbujamo nihalo, lahko zapišemo kot obratno Fourierovo transformacijo:

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F_\omega e^{-i\omega t} d\omega. \tag{2.29}$$



Slika 2.2: Primer vsiljenega sinusnega nihanja naj služi za ilustracijo posplošene susceptibilnosti.

Gibalno enačbo brez težav rešimo v frekvenčnem prostoru. Za časovni potek posamezne frekvenčne komponente dobimo:

$$x_\omega(t) = \chi(\omega) F_\omega \, e^{-i\omega t}, \tag{2.30}$$

odvisnost koordinate klade od časa pa je:

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) F_\omega \, e^{-i\omega t} d\omega. \tag{2.31}$$

Tu je posplošena susceptibilnost $\chi(\omega)$ enaka:

$$\chi(\omega) = \frac{1/m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\,\omega/\tau}, \tag{2.32}$$

kjer je $\tau^{-1} = \frac{2\Gamma}{m}$ in $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$. Bralec naj sam izpelje gornje enačbe in nariše $\chi'(\omega)$ in $\chi''(\omega)$.

2.3.2 Kubova formula za (vele)kanonični ansambel

Komutator $\left[\hat{A}, \rho_0\right]$ se da v primeru, ko izhajamo iz termičnega ravnovesja $\rho_0 = e^{-\beta H_0}/Z$, nekoliko predelati s sledečim trikom. Vpeljemo pomožno spremenljivko λ in pogledamo odvod

$$\begin{aligned} \tfrac{d}{d\lambda}\left\{e^{\lambda H_0}\left[\hat{A}, e^{-\lambda H_0}\right]\right\} &= \tfrac{d}{d\lambda}\left\{e^{\lambda H_0}\hat{A}e^{-\lambda H_0} - e^{\lambda H_0 - \lambda H_0}\hat{A}\right\} \\ &= H_0 e^{\lambda H_0}\hat{A}e^{-\lambda H_0} - e^{\lambda H_0}\hat{A}e^{-\lambda H_0} H_0 = \\ = \left[H_0, e^{\lambda H_0}\hat{A}e^{-\lambda H_0}\right] &= \left[H_0, \hat{A}_{H_0}(-i\hbar\lambda)\right] = -i\hbar\tfrac{\partial}{\partial t}\hat{A}_{H_0} \quad , \end{aligned}$$

kjer smo pri zadnjem enačaju upoštevali Heisenbergovo enačbo in identificirali $\lambda = it/\hbar$. Gornji izraz lahko sedaj še integriramo od 0 do λ, kar nas pripelje do identitete

$$e^{\lambda H_0}\left[\hat{A}, e^{-\lambda H_0}\right] = -i\hbar \int\limits_0^\lambda \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_{H_0}(-i\hbar\lambda')d\lambda' \quad . \tag{2.33}$$

Z upoštevanjem identitete (2.33) lahko zapišem komutator $\left[\hat{A},\rho_0\right]$ nekoliko drugače

$$\left[\hat{A},\rho_0\right] = -i\hbar\rho_0 \int_0^\beta \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_{H_0}(-i\hbar\lambda')d\lambda' \quad ,$$

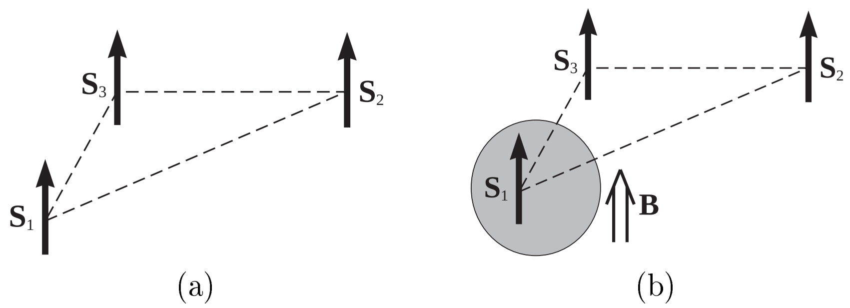
od koder sledi

$$\Delta B(t) = \int_{-\infty}^{t} dt'\, Tr\left(\rho_0 \left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_{H_0}(-i\,\hbar\lambda')\right) B_{H_0}(t-t')\right) F(t')dt' \quad .$$

2.4 Primeri susceptibilnosti

2.4.1 Primer linerarnega odziva molekule

Kot zgled teorije linearnega odziva si oglejmo trikotno molekulo, ki sestoji iz treh medsebojno sklopljenih spinov $\frac{1}{2}$ (slika 2.4.1a). Hamiltonian sistema podaja enačba



Slika 2.3: (a) trikotna molekula kot sistem treh sklopljenih spinov; (b) na sistem deluje zunanja motnja.

$$H_0 = J_1\,\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 + J_2\,\mathbf{S}_2\cdot\mathbf{S}_3 + J_2\,\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_3. \tag{2.34}$$

Eno od oglišč molekule postavimo v (časovno odvisno) magnetno polje $\mathbf{B}$ (slika 2.4.1b) in opazujemo njeno obnašanje; sistem tako podvržemo zunanji motnji oblike

$$H'(t) = -\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{B}(t). \tag{2.35}$$

Najprej poiščimo lastna stanja in lastne energije operatorja H_0. Opazimo, da ostane Hamiltonov operator nespremenjen pri poljubni rotaciji oblike

$$\mathcal{D}(\phi,\hat{\mathbf{n}}) = e^{-\mathrm{i}\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}\,\phi}, \tag{2.36}$$

kjer smo z $\mathbf{S}$ označili celotni spin sistema,

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^{3}\mathbf{S}_i, \tag{2.37}$$

z $\hat{\mathbf{n}}$ in ϕ pa rotacijsko os in kot, za katerega zasučemo sistem. V izrazu (2.34) namreč nastopajo skalarni produkti $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, ki pa so neodvisni od zavrtitve sistema v spinskem prostoru. Sledi torej, da je S dobro kvatno število,

$$[H_0, \mathbf{S}^2] = 0. \tag{2.38}$$

Iz zadnje enačbe vidimo, da bodo lastna stanja H_0 tista z dobro določenim spinom S *in* njegovo projekcijo na eno od koordinatnih osi, na primer os z, saj vemo, da operatorja $\mathbf{S}^2$ in S^z komutirata.

Stanje sistema opišemo s projekcijami vseh treh spinov na os z. Bazo $\mathcal{B}$,

$$\mathcal{B} = \{|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle\}, \tag{2.39}$$

si izberemo tako, da imata prvi dve stanji projekciji celotnega spina $+\frac{3}{2}$ ter $-\frac{3}{2}$, naslednje tri $+\frac{1}{2}$ in zadnje tri $-\frac{1}{2}$. Stanja z različnimi projekcijami se ne bodo mešala med seboj; naj bodo $b_i \in \mathcal{B}$ bazni vektorji ($S^z b_i = S^z_i b_i$) in

$$y = \sum_i a_i b_i \tag{2.40}$$

lastno stanje operatorja S^z. Velja:

$$S^z y = \lambda\, y = \lambda \sum_i a_i b_i = \sum_i a_i S^z_i b_i. \tag{2.41}$$

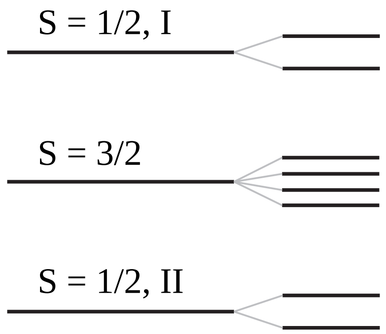
Enakost (2.41) je izpoljnjena, če sestavljajo y le bazni vektorji z enakimi lastnimi vrednostmi S^z_i. Hamiltonov operator v bazi $\mathcal{B}$ bo imel zato bločno diagonalno obliko,

$$H_0 = \begin{pmatrix} \frac{A}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{A}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{B}{4} & \frac{J_1}{2} & \frac{J_2}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{J_1}{2} & \frac{C}{4} & \frac{J_3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{J_2}{2} & \frac{J_3}{2} & \frac{D}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{B}{4} & \frac{J_1}{2} & \frac{J_2}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J_1}{2} & \frac{C}{4} & \frac{J_3}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J_2}{2} & \frac{J_3}{2} & \frac{D}{4} \end{pmatrix}. \tag{2.42}$$

Vpeljali smo oznake

$$\begin{aligned} A &= J_1 + J_2 + J_3, && (2.43)\\ B &= -J_1 - J_2 + J_3, && (2.44)\\ C &= -J_1 + J_2 - J_3, && (2.45)\\ D &= J_1 - J_2 - J_3. && (2.46) \end{aligned}$$

Lastni pari operatorja H_0 s celotnim spinom $\frac{3}{2}$ so



Slika 2.4: Lastne energije nemotenega sistema. Na desni je prikazan razcep za primer, ko odpravimo degeneracijo.

$$E_1 = \frac{J_1 + J_2 + J_3}{4} \iff y_1^{\mathrm{T}} = (1,0,0,0,0,0,0,0), \tag{2.47}$$
$$E_2 = E_1 \iff y_2^{\mathrm{T}} = (0,1,0,0,0,0,0,0), \tag{2.48}$$
$$E_3 = E_1 \iff y_3^{\mathrm{T}} = (0,0,1,1,1,0,0,0), \tag{2.49}$$
$$E_4 = E_1 \iff y_3^{\mathrm{T}} = (0,0,0,0,0,1,1,1), \tag{2.50}$$

pari s spinom $\frac{1}{2}$ pa

$$\begin{aligned} E_{5,6} &= \frac{1}{4}\left(-J_1 - J_2 - J_3 \mp 2\sqrt{F}\right) \\ &\iff y_{5,6}^{\mathrm{T}} = \left(0,0,\frac{-J_1 + J_3 \mp \sqrt{F}}{J_2 - J_3}, \frac{J_1 - J_2 \pm \sqrt{F}}{J_2 - J_3},1,0,0,0\right), \end{aligned} \tag{2.51}$$
$$\begin{aligned} E_{7,8} &= E_{5,6} \\ &\iff y_{7,8}^{\mathrm{T}} = \left(0,0,0,0,0,\frac{-J_1 + J_3 \mp \sqrt{F}}{J_2 - J_3}, \frac{J_1 - J_2 \pm \sqrt{F}}{J_2 - J_3},1\right). \end{aligned} \tag{2.52}$$

Pisali smo

$$F = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 - J_1 J_2 - J_2 J_3 - J_1 J_3. \tag{2.53}$$

Lastne energije prikazuje slika 2.4. Stanja s spinom $S = \frac{3}{2}$ imajo vsa enako energijo. To si razložimo z razmislekom. Predstavljamo si, da se dva spina najprej sklopita v stanje z vrtilno količino 1 (triplet), temu sklopu pa se priključi še tretji spin. Druge možnosti, ki bi dala $S = \frac{3}{2}$, ni. Energija je zato pri teh stanjih enolično odvisna od skupnega spina S. Nasprotno pa nastanejo stanja s spinom $\frac{1}{2}$ z mešanjem sklopitev $1 + \frac{1}{2}$ in $0 + \frac{1}{2}$, torej iz tripletnih in singletne sklopitve dveh spinov. Obe komponenti se mešata v zapletenih razmerjih, ki so odvisna od jakosti sklopitev J_1, J_2 in J_3. Nastala nivoja smo na sliki oštevilčili z I in II.

Magnetizacija in susceptibilnost pri končni temperaturi

S pomočjo teorije linearnega odziva bomo izračunali pričakovano vrednost magnetizacije prvega spina, $\mathbf{M}_1 \equiv \mathbf{S}_1$, pri temperaturi $\beta = \frac{1}{k_B T}$,

$$\langle \mathbf{M}_1(t) \rangle = \langle \mathbf{M}_1(t) \rangle_0 + \Delta \mathbf{M}_1(t). \tag{2.54}$$

Pričakujemo, da bo magnetizacija v odsotnosti zunanjega polja enaka nič, saj v sistemu nimamo preferenčne smeri, torej

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{M}_1(t)\rangle_0 &= \mathrm{Tr}(\rho_0 \mathbf{S}_1(t)) \\
&= \sum_m \langle m|\, \frac{e^{-\beta H_0}}{Z} e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_0 t}\mathbf{S}_1 e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_0 t}\,|m\rangle \\
&= \sum_m \frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\,\langle m|\,\mathbf{S}_1\,|m\rangle \\
&= 0. \qquad (2.55)
\end{aligned}$$

Pri tem smo z $|m\rangle$ označili lastna stanja nemotenega sistema $H_0\,|m\rangle = E_m\,|m\rangle$. Prispevek zunanje motnje $H'(t) = -S_1^z B^z(t)$ k magnetizaciji izračunamo s pomočjo Kubove formule

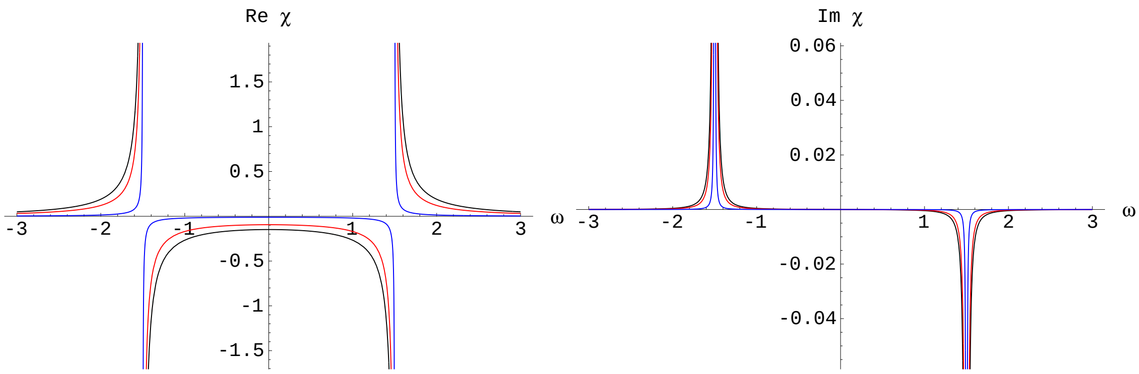
$$\begin{aligned}
\Delta\mathbf{M}_1(t) &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{Tr}(\rho_0[\mathbf{S}_1(t-t'), S_1^z(0)])B^z(t')\;dt' \\
&= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\sum_m \frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\,\langle m|\,[e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_0(t-t')}\mathbf{S}_1 e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_0(t-t')}, S_1^z]\,|m\rangle\;\times \\
&\quad \times B^z(t')\;dt' \\
&= -\frac{2}{\hbar}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\,|\langle m|\,\mathbf{S}_1\,|n\rangle|^2 \int_0^{\infty}\sin\left(\frac{E_m-E_n}{\hbar}\tau\right)\;\times \\
&\quad \times B^z(t-\tau)d\tau. \qquad (2.56)
\end{aligned}$$

Odziv magnetizacije na zunanjo motnjo je realen in neničeln le v smeri osi z. V primeru, ko je motnja $B^z(t) = B_0^z\tau\delta(t-t_0)$, ima magnetizacija za $t > t_0$ obliko sinusne funkcije.

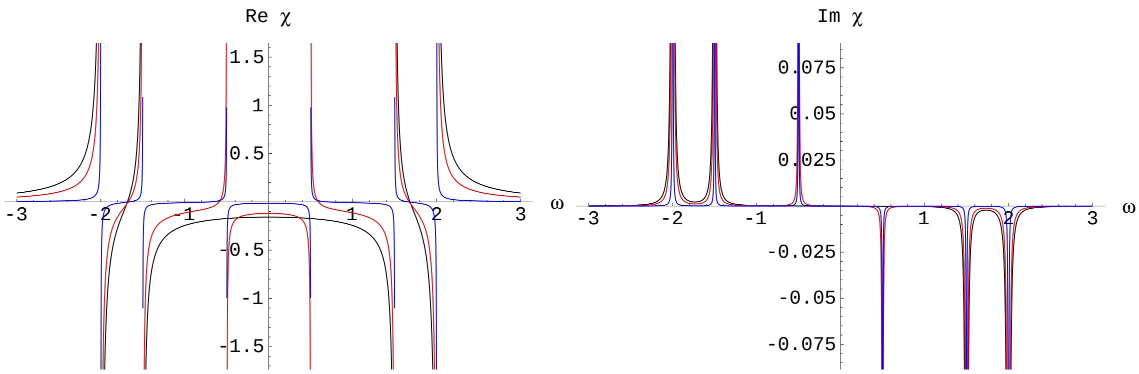
Zapišimo še izraz za susceptibilnost, ki je v splošnem kompleksna količina in opisuje elastični in neelastični odziv sistema,

$$\begin{aligned}
\chi(\omega) &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^{\infty}\mathrm{Tr}(\rho_0[\mathbf{S}_1(t), S_1^z(0)])e^{\mathrm{i}(\omega+\mathrm{i}\epsilon)t}\;dt \\
&= -\frac{2}{\hbar}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\,|\langle m|\,S_1^z\,|n\rangle|^2\int_0^{\infty}\sin\left(\frac{E_m-E_n}{\hbar}t\right)e^{\mathrm{i}(\omega+\mathrm{i}\epsilon)t}\;dt \\
&= -\frac{2}{\hbar}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\,|\langle m|\,S_1^z\,|n\rangle|^2\,\frac{E_m-E_n}{(E_m-E_n)^2-(\hbar\omega+\mathrm{i}\hbar\epsilon)^2}. \qquad (2.57)
\end{aligned}$$

V limiti $\epsilon \to 0^+$ ločimo zgornji izraz na realni in imaginarni del, ki sta soda oziroma liha



Slika 2.5: Realni in imaginarni del susceptibilnosti za $J_1 = J_2 = J_3 \equiv J$ pri treh različnih temperaturah: $k_BT/J = 0.01$ (črna), $k_BT/J = 1$ (rdeča) in $k_BT/J = 10$ (modra).



Slika 2.6: Realni in imaginarni del susceptibilnosti za $J_1 = J_2 = -J_3 \equiv J$ pri treh različnih temperaturah: $k_BT/J = 0.01$ (črna), $k_BT/J = 1$ (rdeča) in $k_BT/J = 10$ (modra).

funkcija frekvence. Za $\Delta E_{mn} = E_m - E_n$ tako dobimo

$$\begin{aligned}
\chi'(\omega) &= -\frac{2}{\hbar}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\,|\langle m|\,S_1^z\,|n\rangle|^2\,\frac{\Delta E_{mn}}{(\Delta E_{mn})^2-\hbar^2\omega^2} && (2.58)\\
\chi''(\omega) &= -\frac{\pi}{\hbar}\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_m}}{Z}\,|\langle m|\,S_1^z\,|n\rangle|^2\Big(\delta(\Delta E_{mn}-\hbar\omega)\\
&- \delta(\Delta E_{mn}+\hbar\omega)\Big). && (2.59)
\end{aligned}$$

Grafični upodobitvi realnega in imaginarnega dela susceptibilnosti za dve najpreprostejši sklopitvi prikazujeta sliki 2.5 in 2.6.

2.4.2 Kubo-Greenwoodova formula

Kot primer uporabe enačbe (**??**) izpeljimo Kubo-Greenwoodovo formulo za izračun elektične prevodnosti $\sigma_{\mu\nu}$ ($j_\mu = \sum_\nu \sigma_{\mu\nu} E_\nu$). Zanimal nas bo torej linearni odziv toka $\vec{j}$ na zunanje električno polje $\vec{E}(t) = \vec{E}^0 \cos(\omega t) e^{\varepsilon t}$. Perturbacijski del hamiltonovega operatorja ima v našem primeru obliko

$$H'(t) = -e \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{E}(t) \quad ,$$

kjer teče vsota po vseh elektronih v sistemu, elektroni pa se nahajajo na mestih $\vec{r}_i$. Povežimo količne iz enačbe (**??**) s količinami v našem primeru. Količina B, ki je sedaj vektor, ustreza toku $\vec{j}$, sila $F(t)$ usteza elektičnemu polju $\vec{E}(t)$, odvod operatorja A pa je

$$\dot{A} = -e \sum_i \dot{\vec{r}}_i = -e \sum_i v_i = \vec{j} \quad .$$

Ker imamo opravka s periodično motnjo lahko izraz (**??**) postavimo v obliko

$$\Delta B(t) = \Re(\chi^{BA}(\omega) F_0 e^{-i\omega t}) \quad ,$$

kjer je posplošena susceptibilnost $\chi^{BA}(\omega)$ za primer linearnega odziva toka na elektično polje enaka

$$\chi^{j,j}_{\mu\nu}(\omega) = \int_0^\infty d\tau \int_0^\beta d\lambda' Tr\left(\rho_0 j_\nu(-i\,\hbar\lambda') j_\mu(\tau)\right) e^{i\omega\tau} = \sigma_{\mu\nu}(\omega) \quad . \tag{2.60}$$

Predpostavimo, da pred motnjo ni bilo toka, od koder sledi

$$j_\mu(t) = \Re(\sigma_{\mu\nu}(\omega) E^0_\nu e^{-i\omega t}) \quad .$$

V "klasični limiti" $\hbar \longrightarrow 0$ se izraz za elektič ne prevodnost (2.60) še poeneostavi

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \int_0^\infty d\tau Tr\left(\rho_0 j_\nu(0) j_\mu(\tau)\right) e^{i\omega\tau} \quad .$$

2.4.3 Kramers-Heisenbergova formula

Vzemimo sistem delcev z dipolnim momentom, ki ga opišemo s hamiltonianom $\hat{H}_0$. Sistem postavimo v električno polje. Celoten hamiltonian sistema je sedaj

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t) \; , \tag{2.61}$$

kjer je

$$\hat{H}'(t) = -\int \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \mathrm{d}\mathbf{r} \; . \tag{2.62}$$

Polarizacija sistema znaša

$$\langle \mathbf{P}(\mathbf{r},t)\rangle = \langle \mathbf{P}(\mathbf{r})\rangle_0 + \Delta\mathbf{P}(\mathbf{r},t)\ , \tag{2.63}$$

kjer je $\Delta\mathbf{P}(\mathbf{r},t)$ odziv sistema na motnjo $\hat{H}'$ (električno polje):

$$\Delta\mathbf{P}(\mathbf{r},t) = \int \mathrm{d}\mathbf{r}' \int_{-\infty}^{t} \chi(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t-t')\mathbf{E}(\mathbf{r}',t')\mathrm{d}t'\ . \tag{2.64}$$

Susceptibilnost χ predstavlja odzivno funkcijo sistema. V Fourierovem prostoru se enačba (2.64) zapiše kot

$$\Delta\mathbf{P}(\omega,\mathbf{k}) = \chi(\omega,\mathbf{k})\mathbf{E}(\omega,\mathbf{k})\ . \tag{2.65}$$

V dolgovalovni limiti ($\lambda \to \infty$) je električno polje v sistemu homogeno ($\mathbf{E} = \mathbf{E}(t)$) in se enačba (2.65) reducira na

$$\Delta\mathbf{P}(\omega) = \chi(\omega)\mathbf{E}(\omega)\ . \tag{2.66}$$

Izračunajmo odzivno funkcijo χ. Z uporabo Kubove formule dobimo

$$\chi(t) = \frac{i}{\hbar}\langle\left[\hat{\mathbf{P}}(t),\hat{\mathbf{P}}\right]\rangle_0\,\theta(t) = \frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_0\left[\hat{\mathbf{P}}(t),\hat{\mathbf{P}}\right]\right)\theta(t)\ , \tag{2.67}$$

kjer je $\hat{\rho}_0 = \frac{1}{Z}\exp(-\beta\hat{H}_0)$ in $\hat{\mathbf{P}}(t) = \exp(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t)\hat{\mathbf{P}}\exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t)$. Sled računamo po lastnih stanjih nemotenega hamiltoniana $\hat{H}_0$, za katera velja $\hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle$:

$$\chi(t) = \frac{i}{\hbar}\sum_n \langle n|\frac{e^{-\beta\hat{H}_0}}{Z}\left[e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{\mathbf{P}}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar},\hat{\mathbf{P}}\right]|n\rangle\theta(t)\ . \tag{2.68}$$

Kjer je potrebno, vrinemo kompleten sistem $\sum_m |m\rangle\langle m|$ in izvrednotimo operatorje. Dobimo

$$\chi(t) = \frac{i}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle n|\hat{\mathbf{P}}|m\rangle\right|^2\left(e^{i(E_n-E_m)t/\hbar} - e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar}\right)\theta(t)\ . \tag{2.69}$$

Pri tem smo upoštevali relacijo $\langle n|\hat{\mathbf{P}}|m\rangle = \langle m|\hat{\mathbf{P}}|n\rangle^*$. Frekvenčno odzivno funkcijo vpeljemo kot

$$\chi(\omega) = \lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\chi(t)e^{i\omega t}e^{-\epsilon t}\mathrm{d}t\ . \tag{2.70}$$

V našem primeru dobimo

$$\chi(\omega) = \frac{i}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle n|\hat{\mathbf{P}}|m\rangle\right|^2\lim_{\epsilon\to 0^+}\int_0^{\infty}\left(e^{i(\omega+\omega_{nm}+i\epsilon)t} - e^{i(\omega-\omega_{nm}+i\epsilon)t}\right)\mathrm{d}t\ , \tag{2.71}$$

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{n,m}\frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\left|\langle n|\hat{\mathbf{P}}|m\rangle\right|^2\lim_{\epsilon\to 0^+}\left(\frac{1}{\omega+\omega_{nm}+i\epsilon} - \frac{1}{\omega-\omega_{nm}+i\epsilon}\right)\ . \tag{2.72}$$

Vpeljali smo $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$. Z uporabo relacije

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{1}{\omega - \omega' + i\epsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{\omega - \omega'} - i\pi\delta(\omega - \omega') , \tag{2.73}$$

lahko susceptibilnost razcepimo na realni in imaginarni del $\chi = \chi' + i\chi''$:

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \left|\langle n|\hat{\mathbf{P}}|m\rangle\right|^2 \left(\mathcal{P}\frac{1}{\omega + \omega_{nm}} - \mathcal{P}\frac{1}{\omega - \omega_{nm}}\right) , \tag{2.74}$$

$$\chi''(\omega) = \frac{\pi}{\hbar}\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \left|\langle n|\hat{\mathbf{P}}|m\rangle\right|^2 \left(\delta(\omega - \omega_{nm}) - \delta(\omega + \omega_{nm})\right) . \tag{2.75}$$

Še drugače lahko to zapišemo

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\hbar}\lim_{\epsilon \to 0^+}\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \left|\langle n|\hat{\mathbf{P}}|m\rangle\right|^2 \mathrm{Re}\left(\frac{2\omega_{nm}}{\omega_{nm}^2 - (\omega + i\epsilon)^2}\right) , \tag{2.76}$$

$$\chi''(\omega) = \frac{1}{\hbar}\lim_{\epsilon \to 0^+}\sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \left|\langle n|\hat{\mathbf{P}}|m\rangle\right|^2 \mathrm{Im}\left(\frac{2\omega_{nm}}{\omega_{nm}^2 - (\omega + i\epsilon)^2}\right) . \tag{2.77}$$

Za izračun je sedaj potrebno le še izvrednotiti matrične elemente $\langle n|\hat{\mathbf{P}}|m\rangle$ za dani sistem. Primer: za stanja $|n\rangle$ in $|m\rangle$ vzamemo lastna stanja vodikovega atoma.

2.4.4 Lindhardova formula

2.5 Fluktuacijsko-disipacijski teorem (FDT)

V tem razdelku želimo povezati imaginarno komponento posplošene susceptibilnosti $\chi''(\omega)$ in s tem absorpcijske lastnosti sistema (kot bomo pokazali) s fluktuacijami.

2.5.1 Fluktuacije

Začnemo s simetrizirano korelacijsko funkcijo, ki jo zapišemo kot

$$\frac{1}{2}\left\langle A(0)B(t) + B(t)A(0)\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{J}(\omega)\exp(-i\omega t)\; d\,\omega\,, \tag{2.78}$$

kjer je

$$\bar{J}(\omega) = \frac{1}{2}(1 + \exp(\beta\hbar\omega))J(\omega) \tag{2.79}$$

simetrizirana spektralna gostota (glej enačbi (1.19) in (1.20)).

Iz zgornje enačbe izrazimo $J(\omega)$ z $\bar{J}(\omega)$ in dobljen izraz vstavimo v Greenovo funkcijo

$$\begin{aligned} G(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(\beta\hbar\omega') - 1}{\hbar\omega - \hbar\omega'} J(\omega')\, d\,\omega' \\ &= \frac{2}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega'}{2}\right) \bar{J}(\omega') \frac{d\,\omega'}{\omega - \omega'} \,. \end{aligned} \tag{2.80}$$

Kadar je $B^\dagger = A$, je spektralna gostota realna funkcija. Upoštevamo *Diracovo identiteto*

$$\lim_{\epsilon\to+0} \frac{1}{\omega - \omega' + i\epsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{\omega - \omega'} - i\pi\delta(\omega - \omega')\,, \tag{2.81}$$

kjer smo s $\mathcal{P}$ označili Cauchyevo glavno vrednost integrala funkcije pred katero označba stoji. Za realne $\bar{J}$ je glavna vrednost $\mathcal{P}$ vedno realna in je imaginarni del susceptibilnosti kar

$$\begin{aligned} \chi''_{AB}(\omega) &= \mathrm{Im}[\chi_{AB}(\omega)] = -\mathrm{Im}[G(\omega)] \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \bar{J}(\omega)\,. \end{aligned} \tag{2.82}$$

Hitro se lahko prepričamo, da je $\chi''_{AB}(\omega)$ liha funkcija ω

$$\chi''_{AB}(-\omega) = -\chi''_{AB}(\omega)\,. \tag{2.83}$$

Upoštevajmo relacijo (2.82) in zapišimo simetrizirano avtokorelacijsko funkcijo

$$\frac{1}{2}\left\langle A(0)A(t) + A(t)A(0)\right\rangle = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \chi''_{AA}(\omega) \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \exp(-i\omega t)\, d\,\omega\,, \tag{2.84}$$

ki nam v limiti $t \to 0^+$ in za $\langle A\rangle = 0$ da povprečen kvadrat fluktuacij količine A

$$\langle A^2\rangle = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} \chi''_{AA}(\omega) \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\, d\,\omega\,. \tag{2.85}$$

Slednjo enačbo lahko izrazimo tudi z bozonsko porazdelitveno funkcijo. Tako zapisan izraz je

$$\langle A^2\rangle = \frac{2\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} \chi''_{AA}(\omega) \left(\frac{1}{2} + \overline{n}(\omega)\right)\, d\,\omega\,; \qquad \overline{n}(\omega) = \frac{1}{\exp(\beta\hbar\omega) - 1}\,. \tag{2.86}$$

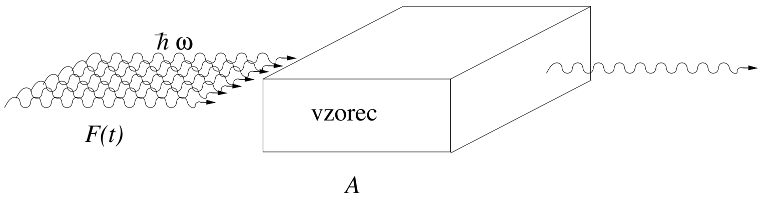
V enačbah (2.84,2.85,2.86) smo formulirali povezavo med imaginarno komponento generalizirane susceptibilnosti in fluktuacijami količine A. Na koncu tega podrazdelka zapišimo še dve zanimivi limiti izraza (2.86):

(a) Obnašanje pri nizkih temperaturah: $T \to 0 \Rightarrow \overline{n}(\omega) \to 0$

$$\langle A^2\rangle = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} \chi''_{AA}(\omega)\, d\,\omega \tag{2.87}$$

(b) Klasična limita: $\hbar \xrightarrow{\text{ef.}} 0$

$$\chi''(\omega) = \pi\beta\omega\bar{J}(\omega) \Rightarrow \langle A^2\rangle = \frac{2}{\pi\beta} \int_0^{\infty} \frac{\chi''_{AA}(\omega)}{\omega}\, d\,\omega \tag{2.88}$$



Slika 2.7: Vzorec izpostavimo sinusno nihajočemu zunanjemu polju.

2.5.2 Disipacija

Tukaj nas bo zanimala absorbcija v sistemu, ki se zaradi tega pojava odmakne iz ravnovesja (slika 2.7). Motnjo opišemo z dodatkom k Hamiltonovemu operatorju

$$H^{'}(t) = -A\,F(t)\,, \tag{2.89}$$

ki spremeni tudi notranjo energijo sistema

$$E_0 = \langle H + H^{'} \rangle = E_0(t). \tag{2.90}$$

Dobro znan primer takega postopanja je dielektrik v električnem polju, kjer je

$$H^{'}(t) = -\mathbf{p}\cdot\mathbf{E}(t)\,. \tag{2.91}$$

Absorbirna moč je definirana kot

$$P(t) = \frac{\partial E_0(t)}{\partial t} = \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle H^{'} \rangle}{\partial t} = \frac{\partial \langle H^{'} \rangle}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial H^{'}(t)}{\partial t} \right\rangle, \tag{2.92}$$

upoštevajoč modelski opis (2.89) jo lahko zapišemo tudi kot

$$P(t) = -\langle A \rangle \frac{\partial F(t)}{\partial t}\,. \tag{2.93}$$

Omejimo se na harmonsko silo

$$F(t) = F_0 \cos(\omega t)\exp(\epsilon t) = \Re[F_0 \exp(-i\omega t + \epsilon t)]\,. \tag{2.94}$$

Linearni odziv količine A na harmonsko zunanjo motnjo $F(t)$ zapišemo kot

$$\langle A \rangle = \Re[\chi_{AA}(\omega) F_0 \exp(-i\omega t + \epsilon t)]\,. \tag{2.95}$$

Upoštevajmo še

$$\frac{\partial F(t)}{\partial t} \approx -\omega F_0 \sin(\omega t)\exp(\epsilon t) \tag{2.96}$$

in vstavimo (2.95) in (2.96) v enačbo (2.93) za moč. Končno dobimo izraz

$$P_\omega(t) = \omega F_0^2 (\chi^{'}_{AA}(\omega)\cos(\omega t) + \chi^{''}_{AA}(\omega)\sin(\omega t))\sin(\omega t)\exp(2\epsilon t)\,, \tag{2.97}$$

katerega časovno povprečje v limitah $T_0 \to \infty$ in $\epsilon \to 0$ je

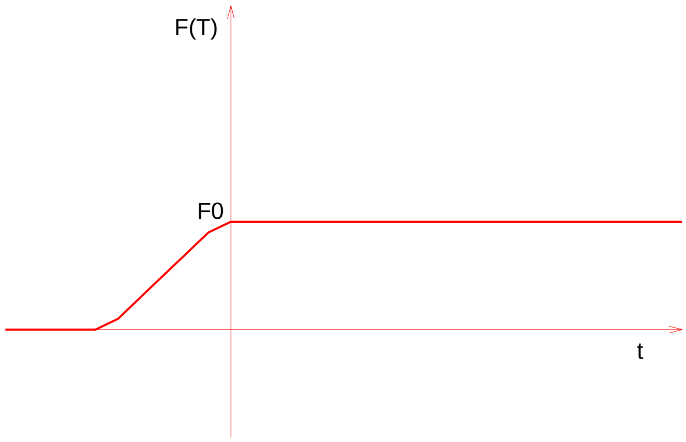
$$\overline{P}_\omega = \frac{1}{T_0}\int_0^{T_0} P_\omega(t)\, dt = \frac{1}{2}\omega F_0^2 \chi''_{AA}(\omega)\,. \tag{2.98}$$

Zgornji rezultat (2.98), ki smo ga dobili za primer monokromatske harmonske sile, lahko uporabimo tudi v splošnem primeru za poljuben $F(t)$. V tem primeru se časovno povprečena absorbirna moč izraža z integralom po vseh frekvencah

$$\overline{P} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \omega F^2(\omega)\chi''_{AA}(\omega)\, d\omega\,. \tag{2.99}$$

2.6 Izotermna susceptibilnost (linearna) χ_{BA}^{T}

V primeru "izotermnega odzivažunanje polje vključimo tako, da sistem ostane v ravnovesju pri začetni temperaturi, T=const. (slika 2.8). Gostotni operator ρ, ki podaja novo ravnove-



Slika 2.8: Adiabatna vključitev zunanjega polja.

sno stanje, zato vsebuje tudi prispevek H',

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{Z}\, e^{-\beta(H-AF_0)};\ H' = -AF_0 \\ Z &= \mathrm{Tr}(e^{(-\beta(H-AF_0))}). \end{aligned} \tag{2.100}$$

Povprečje operatorja B

$$\langle B\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-AF_0)}B\right)}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(H-AF_0)}\right)}. \tag{2.101}$$

računamo v linearnem režimu, torej zanemarimo vse člene od reda $\propto \mathcal{O}(F_0^2)$ naprej. Če komutator $[A,B]$ ni operator, lahko z upoštevanjem

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2} \tag{2.102}$$

pridemo do

$$\begin{aligned} e^{\beta(H-AF_0)} &= e^{\beta H} e^{\beta AF_0} e^{+[-\beta H, AF_0]/2} = \\ &= e^{-\beta H}\left\{1+\beta AF_0 - \frac{\beta}{2}[H,AF_0] + \mathcal{O}(F_0^2)\right\}. \end{aligned} \tag{2.103}$$

Povprečje $\langle B\rangle$ je potem

$$\langle B\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H}\left(B+\beta AF_0B - \frac{\beta}{2}[H,AF_0]B\right)\right\}}{\mathrm{Tr}\left\{e^{-\beta H}\left(1+\beta AF_0 - \frac{\beta}{2}[H,AF_0]\right)\right\}}. \tag{2.104}$$

Če je $[H,A]=0$, se rezultat (2.104) poenostavi v

$$\langle B\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\left(1+\beta AF_0\right)B\right)}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\left(1+\beta AF_0\right)\right)}. \tag{2.105}$$

To velja npr. v klasični limiti (Isingov model, $A=B=M$).

2.6.1 Primer: Isingov model

Poiščimo izotermno susceptibilnost χ_M^T.

$$\begin{aligned} H &= -J\sum_{\langle ij\rangle} s_i s_j \\ H' &= -\left(\sum_i S_i\right) h = -Mh \end{aligned}$$

Iz (2.104) sledi

$$\begin{aligned} \langle B\rangle &= \frac{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}B\right) + \mathrm{Tr}\left(e^{\beta H}\beta AB\right)F_0}{\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right) + \mathrm{Tr}\left(e^{\beta H}\beta A\right)F_0} = \\ &= \frac{\langle B\rangle_0 + \beta\langle AB\rangle_0 F_0}{1+\beta\langle A\rangle_0 F_0}, \end{aligned}$$

kjer smo z $\langle\cdots\rangle$ označili $\mathrm{Tr}(e^{-\beta(H-AF_0)}\cdots)$, z $\langle\cdots\rangle_0$ pa $\mathrm{Tr}(e^{-\beta H}\cdots)$. Uspelo nam je torej povezati povprečno vrednost operatorja B v motenem sistemu z nemotenimi povprečji. Po linearizaciji ($F_0\to 0$) dobimo

$$\langle B\rangle \cong \left(\langle B\rangle_0 + \beta\langle AB\rangle_0 F_0\right)\left(1-\beta\langle A\rangle_0 F_0\right)$$

in

$$\Delta B = \langle B\rangle - \langle B\rangle_0 = \overbrace{\beta\,[\langle AB\rangle_0 - \langle A\rangle_0\langle B\rangle_0]}^{\chi^T_{BA}}\,F_0 + \mathcal{O}(F_0^2).$$

V našem primeru, ko velja $A = B = M$, to pomeni:

$$\chi^T_M = \beta[\langle M^2\rangle - \langle M\rangle^2] = \beta[\sum_{ij}\langle s_i s_j\rangle - \sum_i \langle s_i\rangle^2].$$

2.7 Zaključki

$$H^{'} = -A\,F(t)$$

(i) $\langle B\rangle - \langle B\rangle_0 = \int_{-\infty}^{t}\Phi_{BA}(t-t^{'})F(t^{'})\,dt^{'} = -\Delta B(t).$

(ii) $F(t) = \Re\,[F_0 e^{-\omega t}]$

$\Delta B(t) = \Re\,[\chi_{BA}(\omega)F_0 e^{-i\omega t}].$

(iii) $G_r(\omega) = \langle\!\langle A;B\rangle\!\rangle_\omega = -\chi_{AB}(\omega),$

$\hbar\omega\langle\!\langle A;B\rangle\!\rangle_\omega = \langle[A,B]\rangle + \langle\!\langle [A,H];B\rangle\!\rangle_\omega$

(iv) $B^+ = A$

$$\Rightarrow G_r(\omega) = -\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{G^{''}(\omega^{'})\,d\omega^{'}}{\omega-\omega^{'}}.$$

(v) FDT:

$$\langle A^2\rangle = \frac{\hbar}{\pi}\int_0^\infty \chi^{''}_{AA}(\omega)\,d\omega;\;\;(t=0),$$

$\bar{P} = \int_0^\infty \omega\chi^{''}_{AA}(\omega)F^2(\omega)\,d\omega.$

(vi) $\chi^T_{BA} = \beta[\langle AB\rangle_0 - \langle A\rangle_0\langle B\rangle_0].$

3

Transport v nanoskopskih sistemih

3.1 Kvantizirana prevodnost

3.2 Neinteragirajoči elektroni

3.2.1 Landauerjeva formula

3.3 Vpliv interakcij med elektroni

3.3.1 Coulombska blokada

3.3.2 Wingreenova formula

3.4 Primeri

4

Modeli

4.1 Elektronski plin

4.1.1 Fermijev plin

4.1.2 Landauova Fermijeva tekočina

4.1.3 Luttingerjeva tekočina

4.1.4 Wignerjev kristal

4.2 Hubbardov model

4.2.1 Enopasovni

4.2.2 Dvopasovni

4.3 Heisenbergov model

4.3.1 Klasična limita, nelinearni model σ

4.3.2 Anizotropni model, Isingov model

4.3.3 Model $X-Y$

4.4 Andersonov model

4.4.1 Kondov model

4.4.2 Model Kondove mreže

4.5 Model $t-J$

4.6 ...

5

Zaključek

6

Literatura

Literatura

[1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, 3rd Edition, Part1, Reed Educational and Professional Publishing, Oxford (1980).

[2] K. Huang, Statistical mechanics

[3] M. Plischke, Equilibrium statistical physics

[4] S.-K. Ma, Statistical mechanics

[5] F. Schwabl, Statistische Mechanik

[6] G.D. Mahan, Many-Particle Physics

[7] A.A. Abrikosov, Methods of quantum field theory in statistical mechanics