Függelék

I. függelék

A (2.6.5) összefüggés bizonyítása

A (2.6.5) állítás szerint

$$e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}} \cdot e^{\frac{1}{2}\cdot[\hat{A},\hat{B}]} \tag{I.1}$$

igaz, amennyiben teljesül a

$$\left[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]\right] = \left[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]\right] = 0 \tag{I.2}$$

feltétel.

Bizonyítás

1. Messiah a következő eljárást taglalja:
Képezzünk egy x változótól függő

$$\hat{f}(x) = e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x} \tag{I.3}$$

operátort, amelyet az x változó szerint differenciálunk. Kapjuk, hogy

$$\frac{d\hat{f}(x)}{dx} = \hat{A}e^{\hat{A}x}e^{\hat{B}x} + e^{\hat{A}x}\hat{B}e^{\hat{B}x} = (\hat{A} + e^{\hat{A}x}\hat{B}e^{-\hat{A}x})\hat{f}(x). \tag{I.4}$$

Mivel $[\hat{B},\hat{A}]$ kommutál az $\hat{A}$ operátorral, ezért

$$\left[\hat{B},\hat{A}^n\right] = n\hat{A}^{(n-1)}\left[\hat{B},\hat{A}\right]. \tag{I.5}$$

Következésképpen írhatjuk, hogy

$$\left[\hat{B},e^{-\hat{A}x}\right] = \sum_n \frac{(-x)^n}{n!}\left[\hat{B},\hat{A}^n\right] = \sum_n \frac{(-x)^n}{(n-1)!}\hat{A}^n\left[\hat{B},\hat{A}\right] = \\ = -e^{-\hat{A}x}\left[\hat{B},\hat{A}\right]x. \tag{I.6}$$

(Ehelyütt az exponenciális kitevőjében szereplő operátorok értelmezéséhez az exponenciális függvény sorbafejtését alkalmaztuk.)

Ebből könnyen belátható, hogy

$$e^{\hat{A}x}\hat{B}e^{-\hat{A}x} = \hat{B} - \left[\hat{B}, \hat{A}\right] x, \tag{I.7}$$

aminek alapján a (I.4) egyenlet a

$$\frac{d\hat{f}}{dx}(\hat{A} + \hat{B} + \left[\hat{A}, \hat{B}\right] x)\hat{f}(x) \tag{I.8}$$

alakot veszi fel. Mivel az $\hat{A}+\hat{B}$ operátor kommutál a $[\hat{B}, \hat{A}]$ operátorral, ezért a (I.8) differenciálegyenlet a szokásos módon integrálható. Az eredmény:

$$\hat{f}(x) = e^{(\hat{A}+\hat{B})x} e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]x^2}. \tag{I.9}$$

Az x változónak 1 értéket adva megkapjuk a (I.1) bizonyítandó összefüggést.

2. Turchin más eljárást javasol a II.1 tétel igazolására:

Bevezeti a

$$\hat{\alpha} = 1 + \frac{\hat{A}}{n} \text{ és a } \hat{\beta} = 1 + \frac{\hat{B}}{n} \tag{I.10}$$

jelöléseket, majd képezi a $\hat{\alpha}^n\hat{\beta}^n$ szorzatot. Ha $n \to \infty$, akkor

$$\hat{\alpha}^n\hat{\beta}^n \to e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}. \tag{I.11}$$

A II.10-ből következik, hogy

$$\left[\hat{\alpha}, \hat{\beta}\right] = \frac{1}{n^2}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]. \tag{I.12}$$

Cseréljük fel az $\hat{\alpha}^n\hat{\beta}^n$ szorzatban $\hat{\beta}^n$-t $\hat{\alpha}^n\hat{\beta}^n\hat{\alpha}^n$-nel $(n-1)$-szer. Kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}^n\hat{\beta}^n &= \left(\hat{\alpha}\hat{\beta} + \frac{n-1}{n^2}\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right)\hat{\alpha}^{n-1}\hat{\beta}^{n-1} = \\ &= \prod_{k=1}^{n}\left(1 + \frac{\hat{A}+\hat{B}}{n} + \frac{\hat{A}\hat{B}}{n^2} + \frac{k-1}{n^2}[\hat{A}, \hat{B}]\right).\end{aligned} \tag{I.13}$$

Mivel $n \to \infty$, ezért a fenti szorzat minden tagját exponenciális alakba írhatjuk át:

$$\hat{\alpha}^n \hat{\beta}^n = \prod_{k=1}^{n} \exp\left(\frac{\hat{A}+\hat{B}}{n} + \frac{\hat{A}\hat{B}}{n^2}\frac{k-1}{n^2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right). \qquad \text{(I.14)}$$

Az exponenciális kifejezés kitevői csak az $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ kommutátorral arányos tényezőben különböznek egymástól. Ez a kommutátor viszont kommutál a kitevő minden egyéb tagjával. Következésképpen, minden egyes kitevő kommutál egymással. Ennek következménye, hogy az exponenciális tagok szorzata átírható:

$$\hat{\alpha}^n \hat{\beta}^n = \exp\left\{\left(\hat{A}+\hat{B}\right) + \frac{\hat{A}\hat{B}}{n} + \frac{n-1}{2n}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\}. \qquad \text{(I.15)}$$

Ha most kielégítjük az $n \to \infty$ feltételt, akkor (I.11)-ből kapjuk, hogy

$$\exp(\hat{A})\exp(\hat{B}) = \exp\left(\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right) \qquad \text{(I.16)}$$

amelyet átrendezve megkapjuk a bizonyítandó összefüggést, azaz (I.1)-et:

$$e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}} \cdot e^{\frac{1}{2}\cdot[\hat{A},\hat{B}]}. \qquad \text{(I.17)}$$

II. függelék

A fononokról

Emlékeztetőül tekintsük át a fononfogalom bevezetésének gondolatmenetét. Gondoljunk el egy m tömegű egymástól d távolságra elhelyezkedő atomokból képzett, N atomból álló egydimenziós láncot, amely láncban a szomszédos atomok között a harmonikus oszcillátor potenciáljából deriválható k erő képezi a kölcsönhatást. Ezt a rendszert az alábbi klasszikus mozgásegyenlet írja le:

$$-2k_c u_n + k_c(u_{n+1} + u_{n-1}) = m\frac{d^2 u_n}{dt^2}, \tag{II.1}$$

ahol u_n az n-edik atom elmozdulása az egyensúlyi helyzetből, m az atom tömege, k_c a rugalmassági állandó.

Vessük alá u_n-et az alábbi Fourier-transzformációnak:

$$u_n = \sum_k U_k \exp(-iknd), \tag{II.2}$$

és helyettesítsük be azt a (II.1) egyenletbe.

A behelyettesítés eredményeként U_k-ra csatolásmentes egyenletrendszert kapunk

$$2k_c(\cos kd - 1)U_k = m\frac{d^2 U_k}{dt^2}, \tag{II.3}$$

amely egyenlet megoldása

$$U_k = A_k \exp(i\omega_k t), \tag{II.4}$$

ahol

$$\omega_k = \sqrt{\frac{2k_c}{m}(1 - \cos kd)}. \tag{II.5}$$

Az atomi lánc kvantummechanikai leírására az u_n és p_n (p_n az egyes atomok impulzusa) változókat operátorként kell felfogni, amelyek között az alábbi kommutációs relációk teljesülnek:

$$\lfloor u_n, p_m \rfloor = i\hbar\delta_{nm}, \lfloor u_n u_m \rfloor = 0. \; [p_n, p_m] = 0 \tag{II.6}$$

Továbbá definiálnunk kell a megfelelő Hamilton-operátort:

$$H = \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{p_n^2}{2m} \right) + k_c u_n^2 - \frac{k_c}{2} \sum_{n=1}^{N} (u_n u_{n+1} + u_n u_{n-1}) =$$
$$= \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{p_n^2}{2m} \right) + k_c u_n^2 - k_c \sum_{n=1}^{N} u_n u_{n+1}. \qquad \text{(II.7)}$$

Ehhez a megfelelő Lagrange-függvényt és a (II.6) kommutációk szabályait szükséges igénybe venni. A (II.7) kifejezés első tagja az n-edik pontban lévő független harmonikus oszcillátorok leírásával ekvivalens, míg a második tag az egyes atomoknak a közvetlen szomszédjukkal való kölcsönhatását adja meg.

Vezessük be az alábbi sorba fejtést:

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \left(u_q \cos qnd - \frac{1}{m\omega_q} P_q \sin qnd \right) \qquad \text{(II.8)}$$

$$P_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \left(m\omega_q U_q \sin qnd + P_n \cos qnd \right), \qquad \text{(II.9)}$$

ahol

$$\omega_q = \sqrt{\frac{2k_c}{m}(1 - \cos qd)}. \qquad \text{(II.10)}$$

Könnyen belátható a (II.6) kifejezés segítségével, hogy az U_q és P_q mennyiségekre az alábbi kommutációs relációk állnak fenn:

$$\lfloor U_q, P_{q'} \rfloor = i\hbar\delta_{qq}, \ \lfloor U_q U_{q'} \rfloor = 0, \ \lfloor P_{qn}, P_{q'} \rfloor = 0. \qquad \text{(II.11)}$$

A (II.8), (II.9) és (II.11) összefüggések révén a (II.7) egyenlet átalakítható

$$H' = \sum_q \left[\frac{P_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2}{2} U_q^2 \right] \qquad \text{(II.12)}$$

alakba.

Ez azt jelenti, hogy a (II.12)-ben kapott Hamilton-operátor szétesik különböző q értékhez tartozó harmonikus oszcillátorokat leíró Hamiltonian összegére. Az egyes q értékekhez tartozó Schrödinger-egyenlet:

$$H'_q \Psi_q^1 = \left(\frac{P_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q}{2} U_q^2 \right) \Psi'_q = E'_q \Psi'_q. \qquad \text{(II.13)}$$

Ez tulajdonképpen a harmonikus oszcillátor Schrödinger-egyenlete, amelynek energiaspektruma

$$E'_q = \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2}\right), \ n_q = 0, 1, 2, 3 \ldots\ldots \tag{II.14}$$

A rendszer teljes energiája és hullámfüggvénye pedig

$$E = \sum_q \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2}\right) \tag{II.15a}$$

$$\Psi = \Psi'_{q1}\Psi'_{q2} \ldots \Psi'_{qn} \ldots \tag{II.15b}$$

lesz. A (II.13) egyenlet q hullámszámmal jellemzett harmonikus oszcillátort ír le. A különféle q értékekhez független hullámfüggvények tartoznak. Egy-egy hullámfüggvény így független, adott impulzusú és energiájú részecskét leíró függvénynek tűnik. Valójában ez a részecske fiktív. Éppen ezért kvázirészecskének nevezik. A P_q és U_q operátorokból az alábbi összefüggések segítségével képezzünk újabb a és $a+$ operátorokat:

$$a_q = \left(\frac{1}{2m\hbar\omega_q}\right)^{\frac{1}{2}} P_q - i\left(\frac{m\omega_q}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} U_q \tag{II.16}$$

$$a_q^+ = \left(\frac{1}{2m\hbar\omega_q}\right)^{\frac{1}{2}} P_q - i\left(\frac{m\omega_q}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} U_q \tag{II.17}$$

A (II.11) kommutációs relációkból egyszerű módon belátható, hogy

$$\lfloor a_q, a_{q'}^+ \rfloor = i\hbar\delta_{qq}, \ \lfloor a_q, a_{q'} \rfloor = 0, \ \lfloor a_q^+, a_{q'}^+ \rfloor = 0. \tag{II.18}$$

Elvégezve a (II.16) és (II.17) átalakítások inverz műveletét, kapjuk a Hamilton-operátort, és a megfelelő Schrödinger-egyenlet:

$$H"_q = \hbar\omega_q \left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2}\right), \quad H'_q\Psi'_q = \left(\frac{P_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q}{2}U_q^2\right)\Psi'_q = E'_q\Psi'_q. \tag{II.19}$$

A (II.18) kommutációs szabályok segítségével megmutatható, hogy ha Ψ_{0q} a H''_q operátor sajátfüggvénye, akkor minden más sajátfüggvény megkapható, mint

$$\Psi_{nq} = \sqrt{\frac{1}{n_q!}}(a_q^+)^{nq}\Psi_{0q}, \tag{II.20}$$

amelyhez

$$E'_q = \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2}\right) \tag{II.21}$$

energia-sajátérték tartozik. Ez a kifejezés megegyezik a (II.14) összefüggésben találhatóval.

Megmutathatók továbbá az alábbi relációk is:

$$a_q^+\Psi_{nq} = \sqrt{n_q + 1}\Psi_{q,n+1}, \tag{II.22}$$

$$a_q\Psi_{nq} = \sqrt{n_q}\Psi_{q,n-1}, \tag{II.23}$$

$$a_q^+a_q\Psi_{nq} = n_q\Psi_{q,n}. \tag{II.24}$$

A b_q^+ operátort keltő operátornak nevezik, mivel az n_q betöltési számmal jellemzett állapotfüggvényre hatva azt $(n_q + 1)$ betöltési számú állapotfüggvénnyé alakítja. A b_q operátor viszont n_q betöltési számú állapotfüggvényből képez $(n_q - 1)$ betöltési számhoz tartozó állapotfüggvényt, ezért ezt az operátort eltüntető operátornak hívják, azaz eggyel kevesebb részecskét hagy meg a rendszerben.

A (II.14) összefüggést formálisan tekinthetjük mint egy harmonikus oszcillátor n-edik szintjére gerjesztett állapot energiáját. Ehelyett célszerűbbnek látszik n darab $\hbar\omega_q$ energiájú részecskéről beszélni, amelyeket a jelen esetben fononoknak nevezünk, mivel erősen leegyszerűsítve a fenti eljárással tulajdonképpen akusztikus hullámok kvantumait írtuk le.

Ennek fényében a b_q^+ operátort fononkeltő operátornak nevezzük, mivel az n_q számú fonont leíró állapotfüggvényre hatva azt $(n_q + 1)$ számú fonon állapotfüggvényévé alakítja. A b_q operátor viszont n_q számú fonon-állapotfüggvényből képez $(n_q - 1)$ számú fononhoz tartozó állapotfüggvényt, ezért ezt az operátort fononeltüntető operátornak hívják. A $a_q^+a_q = n_q$ operátor pedig a részecskeszám operátora.

III. függelék

A Friedel-oszcilláció

C. Kittel *Quantum Theory of solids* 18. fejezete (Ed. John Wiley & Sons Inc. N.Y.–London 1963) szerint.

C. Kittel idézett könyvében levezeti, hogy a vezetési elektronoknak a szennyező atomon történő szórása során azok sűrűsége a szennyező atomtól R távolságban a következő módon írható le:

$$\Delta_\rho(R) = -\frac{1}{2\pi^2 R^3}\sum_L (2L+1)\sin(\eta_L)\cos(2k_F R + \eta_L - L\pi) - \\ - \cos(\eta_L - L\pi). \tag{III.1}$$

Itt L a pályamomentumot jellemző kvantumszám, k_F a Fermi-impulzus, η_L a fázistolás értéke, amelyet a Friedel-féle összegszabály,

$$Z = \frac{2}{\pi}\sum_L (2L+1)\eta_L(k_F) \tag{III.2}$$

segítségével számíthatunk ki.

Esetünkben $Z = -2$, a p-elektronokra pedig $L = 1$, így

$$\eta_1(k_F) = -\frac{\pi}{3} \tag{III.3}$$

adódik.

Az ólom esetében $k_F = 1.57\mathring{A}^{-1}$. Ezeket az adatokat felhasználva a töltéssűrűség-oszcillációt (II.1)-ből az alábbiak szerint számíthatjuk ki:

$$\Delta_\rho(R) = -\frac{27}{4\pi^2 R^3}\left(\cos\left(2k_F R - \frac{2\pi}{3}\right) + \frac{1}{2}\right). \tag{III.4}$$