עד כה עסקנו באלקטרונים מבלי להתייחס ליונים המהווים את שלד השריג של הגז נוזל האלקטרונים.
ליונים שני אפקטים בסיסיים על האלקטרונים:

א. הפוטנציאל היוני הסטטי מהווה פוטנציאל מחזורי הגורם לפונקציות הגל האלקטרוניות להפוך מגלים חופשיים לפונקציות בלוך ולהופעת פערי אנרגיה בספקטרום האלקטרוני.

ב. פיזור אלקטרונים מתנודות שריג (פונונים) והשפעת פונוני השריג כתוצאה מתנועת האלקטרונים.
אנו נגלה שהאפקט הראשון משמעותי שעושים ביסודה הארוכי גל ארוכים (יחסית לקבוע השריג) בהם ההבדלים העיקריים משמעותיים בפונקציות של חלקיקים חופשיים ופונקציות בלוך, קטנים ונזניח. להזניחם.

הצימוד בין אלקטרונים ופונונים אחראי למספר תופעות ובהשען על-מוליכות בה נטפל בהרחבה בהמשך.
נבחן תחילה נושא אחר הקשור לתופעות הסינון בה טיפלנו. מתוך מדוע אנו יודעים כי בשריגים (בהם האלקטרונים חופשיים לנוע) יש אולם אנו כבר גם מנדה קיימים שלושה ענפי פונונים אקוסטיים $\omega(k) \xrightarrow{k\to 0} 0$. תופעה זאת כאשר כוללים את האינטראקציות הקולומביות בין היונים ומזניחים את צימוד אלקטרון-פונון מוצאים כי האופן האקוסטי האורכי הופך להיות gapped עם $\omega(k) \rightarrow \omega_p^{ion} = \left(\frac{4\pi Z^2 e^2 n}{M}\right)^{1/2}$ כאשר Ze מטען היון ו-M מסתו, n צפיפות היונים. נראה זאת ואחר כך נראה כיצד הצימוד לאלקטרונים משנה את התמונה חזרה להתנהגות האקוסטית - שוב כתוצאה מתופעת הסינון.

נתבונן בשריג עם N תאי יחידה נניח לשם פשטות. יון אחד בכל תא יחידה שנפחו a^3.
נסמן ב-$\vec{u}_i$ את ההתקה של היון ה-i בזמן לאחר שינוי המיקום שלו בוקטור השריג $\vec{R}_i$
כך שההמילטוניאן המתאר את הגביש הינו

$$H = \sum_i \frac{\vec{P}_i^2}{2M} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V\left(\vec{R}_i + \vec{u}_i - \vec{R}_j - \vec{u}_j\right)$$

נניח כי V הינו הפוטנציאל הקולומבי בין היונים בשריג.
נניח כי ההעתקות $\vec{u}_i$ קטנות ונפתח

$$V(\vec{R}_i - \vec{R}_j + \vec{u}_i - \vec{u}_j) = V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) + (\vec{u}_i - \vec{u}_j)\cdot\vec{\nabla}_{R_i} V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) + \frac{1}{2}\left[(\vec{u}_i - \vec{u}_j)\vec{\nabla}_{R_i}\right]^2 V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) + \cdots$$

כשנציב כמו זה לתוך ההמילטוניאן האיבר הראשון מייצג לנו את האנרגיה הפוטנציאלית של הגביש

כשהיונים מסודרים בנקודות שיווי המשקל. זהו קבוע שאינו תלוי ב $\vec{u}$ ולכן נתעלם ממנו בהמשך.

האיבר השני מתאפס

$$\frac{1}{2}\left[\sum_i \vec{u}_i \sum_j \vec{\nabla}_{R_i} V(\vec{R}_i-\vec{R}_j) - \sum_j \vec{u}_j \sum_i \vec{\nabla}_{R_i} V(\vec{R}_i-\vec{R}_j)\right] \xrightarrow[i\leftrightarrow j]{} = \underbrace{\sum_i \vec{u}_i \sum_j \vec{\nabla}_{R_i} V(\vec{R}_i-\vec{R}_j)}$$

(מינוס) הכח הפועל על היון ה i כתוצאה מכל היונים כאשר הללו מסודרים במצב שיווי המשקל, אך במצב זה הכח הנ"ל מתאפס - נתון מהגדרת המצב.

לכן בקירוב ההרמוני נקבל

$$H = \frac{1}{2M}\sum_i \vec{P}_i^{\,2} + \frac{1}{4}\sum_{ij}(u_i^\mu - u_j^\mu)\frac{\partial^2 V(\vec{R}_i-\vec{R}_j)}{\partial R_i^\mu \partial R_i^\nu}(u_i^\nu - u_j^\nu)$$

~~נעבור לבסיס [illegible]~~ ונעבור למשתני פוריה

$$\vec{u}_j = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k u_k e^{i\vec{k}\vec{R}_j}$$

$$\vec{P}_j = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k P_k e^{i\vec{k}\vec{R}_j}$$

הטרנספורמציה ההפוכה:

$$\vec{u}_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j u_j e^{-i\vec{k}\vec{R}_j}$$

$$\vec{P}_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j P_j e^{-i\vec{k}\vec{R}_j}$$

כאשר k נסכם על ה 1^{st} BZ.

נשתמש בפירוק של האינטראקציה הקולונית

$$V(\vec{R}) = \frac{1}{V}\sum_k \frac{4\pi(ze)^2}{k^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$$

ובנוסף $\sum_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} = N\delta_{\vec{k},0}$ נקבל

$$H = \frac{1}{2M}\sum_k \vec{P}_k \vec{P}_{-k} + \frac{2\pi(ze)^2 N}{V}\sum_{k} \frac{k^\mu k^\nu}{k^2} u_k^\mu u_{-k}^\nu$$

$\mu\nu = x,y,z$

(כשהצבנו את התרומות מהאיברים הבאים N $u_i^\mu u_i^\nu$ - הללו מרכיבים את $V(q=0)$ המבוטלות כתוצאה מהרקע האלקטרוני האחיד).

U_j ו P_j צמודים קנוניים

$$[U_i^\mu, P_j^\nu] = i\hbar\,\delta_{\mu\nu}\,\delta_{ij}$$

$\Leftarrow$

$$[U_k^\mu, P_{k'}^\nu] = \frac{1}{N}\sum_{ij} e^{-i(\vec k \vec R_i + \vec k' \vec R_j)} \cdot i\hbar\,\delta_{\mu\nu}\,\delta_{ij}$$

$$= i\hbar\,\delta_{\mu\nu}\,\delta_{\vec k, -\vec k'}$$

נחשב משוואות התנועה הקלאסיות ל U_k ו P_k:

$$\dot U_k^\mu = \frac{\partial H}{\partial P_{-k}^\mu} = \frac{1}{M} P_k^\mu$$

$$\dot P_k^\mu = -\frac{\partial H}{\partial U_{-k}^\mu} = -4\pi (ze)^2 n \sum_\nu \frac{k^\mu k^\nu}{k^2} U_k^\nu$$

$\Leftarrow$

$$\ddot U_k^\mu = -\omega_p^{ion\,2} \sum_\nu \frac{k^\mu k^\nu}{k^2} U_k^\nu$$

ננסה פתרון מהצורה $\vec U_k(t) = \vec U_k e^{i\omega t}$ ונקבל

$$-\omega^2 \vec U_k = -\omega_p^{ion\,2} \frac{\vec k}{k^2}\, \vec k \cdot \vec U_k$$

אם נניח כי עבור $\vec U_k = \frac{\vec k}{k}$ נקבל $\omega = \omega_p^{ion}$ אבל מעבר זה היה נכון אילו האנליזה להתמודדות האלקטרונים שלאו דווקא לכן ומסתבר מהשוואה ארוכה של גל היונים דומה לגל האלקטרונים. התנודות הרוחביות עבורן $\vec u \perp \vec k$ הן גלים תנודות יונים קוהרנטיים זה. אם נכלול באנליזה בעיות קצרי טווח בין היונים נקבל כי אלו הן גלים עם דיספרסיה ליניארית אקוסטית $\omega = ck$.

אם נרשום

$$\vec U_{k\lambda} = \hat\epsilon_{k\lambda}\, u_{k\lambda}$$

אינדקס אופן התנודה

וקטור הפולריזציה - וקטור יחידה

ונגדיר

$$u_{k\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{k\lambda}}}\,(a_{k\lambda} + a^+_{-k\lambda})$$

$$P_{k\lambda} = -i\sqrt{\frac{\hbar M \omega_{k\lambda}}{2}}\,(a_{k\lambda} - a^+_{-k\lambda})$$

כאשר $\omega_{k\lambda}$ היא היא הדיספרסיה של האופן ה λ

כך לגבי e

$$a_{k\lambda}=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{M\omega_{k\lambda}}\,u_{k\lambda}+\frac{i}{\sqrt{M\omega_{k\lambda}}}P_{k\lambda}\right]$$

$$a^{+}_{k\lambda}=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{M\omega_{k\lambda}}\,u_{-k\lambda}-\frac{i}{\sqrt{M\omega_{k\lambda}}}P_{-k\lambda}\right]$$

מקיימים את יחסי החילוף הבוזוניים:

$$[a_{k\lambda},a_{k'\lambda'}]=0$$

$$[a_{k\lambda},a^{+}_{k'\lambda'}]=\delta_{kk'}\delta_{\lambda\lambda'}$$

$$H=\sum_{k,\lambda}\hbar\omega_{k\lambda}\left[a^{+}_{k\lambda}a_{k\lambda}+\frac{1}{2}\right]$$!

נחשוב כעת על האינטראקציה בין האלקטרון לגביש. כאשר זה נובע מהפוטנציאל הנוצר ע"י היונים ונשאל כיצד הוא משפיע על האלקטרון. הפוטנציאל זה מתאים לתנועת האלקטרון

$$H_{int}=\int d^3r\,(e)\,\Psi^{+}(r)\Psi(r)\sum_i V(\vec{r}-\vec{R}_i-\vec{u}_i)$$

$$\simeq(-e)\int d^3r\,\Psi^{+}(r)\Psi(r)\left[\underbrace{\sum_i V(\vec{r}-\vec{R}_i)}_{\text{פוטנציאל השריג הסטטי}}+\sum_i\vec{u}_i\,\nabla_{R_i}V(\vec{r}-\vec{R}_i)+\cdots\right]$$

הגורם להיווצרות פונקציות בלוך.

נוכל לפתור הרבה על jellium model בו נחליף את השריג הבדיד בתווך אחיד רצוף

$$R_i\to r'$$

$$\sum_i\to\int\frac{d^3r'}{a^3}=n\int d^3r'$$

$$H_{int}=-ze^2n\int d^3r\,d^3r'\,\Psi^{+}(r)\Psi(r)\,\vec{\nabla}_{r'}\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\cdot\vec{u}(r')$$

$$=ze^2n\int d^3r\,d^3r'\,\Psi^{+}(r)\Psi(r)\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\,\vec{\nabla}_{r'}\cdot\vec{u}(r')$$

$$=4\pi ze^2n\sum_{\lambda}\sum_{\substack{kk'\\qq'}}\int d^3r\,d^3r'\,\frac{1}{V}e^{i(k-k')r}\,C^{+}_{k'}C_k\,\frac{1}{Vq'^2}e^{iq'(r-r')}\,i\vec{q}\cdot\hat{\epsilon}_{\lambda q}\,e^{iq\cdot r'}\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\lambda q}}}\,(a_{q\lambda}+a^{+}_{-q\lambda})$$

$$=\sum_{k,q}\sum_{\lambda}g_{q\lambda}\,C^{+}_{k+q}C_k\,(a_{q\lambda}+a^{+}_{-q\lambda})$$

כאשר ה electron-phonon coupling (bare) הוא

$$g_{q\lambda} = i\frac{4\pi e^2}{q}\left(\frac{\hbar Z^2 n}{2M\omega_{\lambda q}}\right)^{1/2}\hat{q}\cdot\hat{\epsilon}_{\lambda q}$$

וקטור יחידה בכיוון q

במודל הג'לי האלקטרונים מצומדים לכן רק לפונונים אורכיים עבורם $\hat{q}\cdot\hat{\epsilon}=1$ ואין מצומדים כלל לפונונים רוחביים עבורם $\hat{q}\cdot\hat{\epsilon}=0$. בפועל בסריג ביסודו הצלב מצבך הרבה ופונונים רוחביים משתתפים תהליך חשוב בתהליכי Umklapp וקיים צימוד רק לבין האלקטרונים. גם הצימוד שמצאנו במודל הג'לי בין הפונונים האורכיים והאלקטרונים הינו פשוט הרבה מהצימוד הקיים בגבישים אמיתיים.

נחשב כעת את פונקציית גרין של הפונונים החופשיים בניסוח Matsubara

$$D_0(k,\tau) = -\langle T_\tau A_k(\tau)A_k^\dagger(0)\rangle$$

כאשר $A_k = a_k + a_{-k}^\dagger$ ונשתמש ב

$$a_k(\tau) = e^{\tau H_0}a_k e^{-\tau H_0} = e^{-\omega_k\tau}a_k$$

$$a_k^\dagger(\tau) = e^{\tau H_0}a_k^\dagger e^{-\tau H_0} = e^{\omega_k\tau}a_k^\dagger$$

נקבל

$$= -\theta(\tau)\langle(a_k e^{-\omega_k\tau} + a_{-k}^\dagger e^{\omega_k\tau})(a_{-k} + a_k^\dagger)\rangle$$

$$-\theta(-\tau)\langle(a_{-k}+a_k^\dagger)(a_k e^{-\omega_k\tau} + a_{-k}^\dagger e^{\omega_k\tau})\rangle$$

כשהשתמשנו ב $\omega_k=\omega_{-k}$ וב $a_k^\dagger = a_{-k}$

מכיוון ש

$$\langle a_k^\dagger a_k\rangle = n_b(\omega_k) = \frac{1}{e^{\beta\omega_k}-1}$$

$$\langle a_k a_k^\dagger\rangle = 1 + n_b(\omega_k)$$

$$D_0(k,\tau) = -\left[e^{-|\tau|\omega_k} + 2n_b(\omega_k)\cosh(\omega_k\tau)\right]$$ נקבל

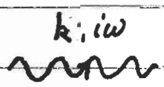
$$D_0(k,i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau} D_0(k,\tau)$$

$$= -\left(1+n_b(\omega_k)\right)\Big|_0^\beta \frac{e^{(i\omega_n-\omega_k)\tau}}{i\omega_n-\omega_k} - n_b(\omega_k)\Big|_0^\beta \frac{e^{(i\omega_n+\omega_k)\tau}}{i\omega_n+\omega_k}$$

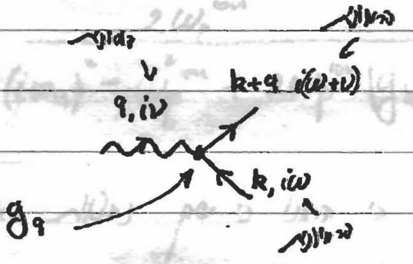
משתמשים ב $e^{i\omega_n\beta}=1$ (ω_n תדירות בוזונית)

$$D_0(k,i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n-\omega_k} - \frac{1}{i\omega_n+\omega_k}$$

$$= -\frac{2\omega_k}{\omega_n^2+\omega_k^2}$$

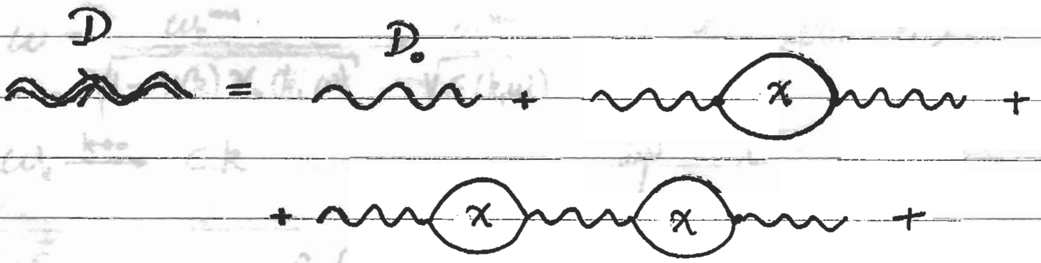
נסמנו ב 

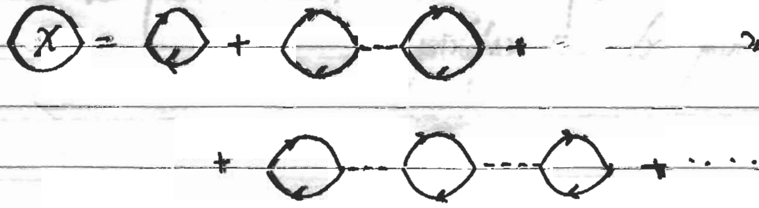
ואת הורטקס המתאר את הצימוד לאלקטרונים ב



הורטקס בו קו הפונון יוצא נכתוב g_q^*. בהמשך יש להכפיל ב -1 עבור כל קו פונון הפנימי המסתיים בורטקס כזה.

נחשב כעת תיקונים ל D כתוצאה מהצימוד של הפונונים לאלקטרונים. אנו רוצים להראות כיצד הצימוד הזה גורם להעברת הסיכון האלקטרוני לשנות התדירות הפונונית מ ω_p^{ion} לתדירות אקוסטית $\omega_k \sim ck$. מכיון שהדבר נעשה כבר כדי לקבל סוג הרעשה ה RPA ננסה קירוב דומה ל D:





נחשב את χ שמשתמש ב RPA כבעבר

(שימו לב הגדרת χ כוללת סימן − ביחס ל bubble ◯. סימן זה מגיע לסימן המתקבל מספירת הלולאות הפרמיוניות וסדר תגר והפרסט.)

$$D(k, i\omega_n) = D_0(k,i\omega_n) + |g_k|^2 D_0(k,i\omega_n)\, \chi(k,i\omega_n)\, D_0(k,i\omega_n)$$

$$+ |g_k|^4 D_0(k,i\omega_n)\, \chi(k,i\omega_n)\, D_0(k,i\omega_n)\, \chi(k,i\omega_n)\, D_0(k,i\omega_n) + \cdots$$

$$= \frac{D_0(k,i\omega_n)}{1-|g_k|^2 D_0(k,i\omega_n)\,\chi(k,i\omega_n)} = \frac{1}{D_0^{-1}(k,i\omega_n) - |g_k|^2 \chi(k,i\omega_n)}$$

משתמשים ב $\quad D_0(k,i\omega_n) = \frac{-2\omega_p^{ion}}{\omega_n^2 + \omega_p^{2\,ion}}$

ובקירוב ה RPA $\quad \chi(k,i\omega_n) = \frac{\chi_0(k,i\omega_n)}{\epsilon(k,i\omega_n)}$

נקבל

$$= \frac{2\omega_p^{ion}}{(i\omega_n)^2 - \omega_p^{2\,ion} + 2\omega_p^{ion}|g_k|^2 \frac{\chi_0(k,i\omega_n)}{\epsilon(k,i\omega_n)}}$$

נבחן היכן נמצאים הקטבים של D בפונקציה כי הרי שם נמצאות האנרגיות העצמיות של המערכת:

$$(i\omega_n)^2 = \omega_p^{2\,ion}\left(1 + \frac{2|g_k|^2}{\omega_p^{ion}} \frac{\chi_0(k,i\omega_n)}{1-V(k)\chi_0(k,i\omega_n)}\right)$$

$$\frac{2|g_k|^2}{\omega_p^{ion}} = \frac{4\pi e^2}{k^2} = V(k)$$

אני משאיר לכם לבדוק כי בגבול הגלי זה אכן מתקיים

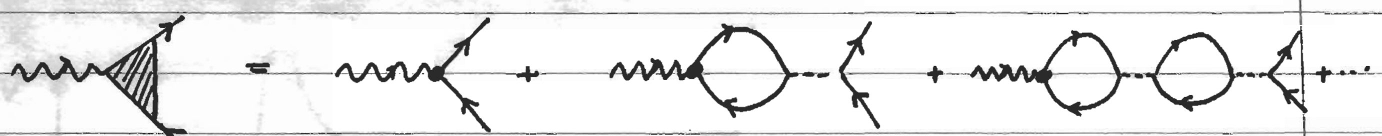
$$\omega = \frac{\omega_p^{ion}}{\sqrt{1-V(k)\chi_0(k,\omega)}} = \frac{\omega_p^{ion}}{\sqrt{\epsilon(k,\omega)}}$$

ולכן האנרגיות העצמיות של הפונונים נמצאות ב

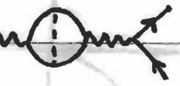
מכיוון שבגבול כאשר $k \to 0$, $\chi_0 \to -\frac{\partial n}{\partial \mu}$ נקבל $\quad \omega_k \xrightarrow{k\to 0} ck$

לסיכום ראינו את הדיספרסיה האקוסטית כנדרש. הפיזיקה שהביאה לתוצאה זו היא המיסוך של האינטראקציה הקולומבית הנגרמת בין היונים על ידי האלקטרונים.

בנוכחות אינטראקציה בין האלקטרונים גם הצימוד אלקטרון-פונון יעבור רנורמליזציה
נתון ב electron-phonon vertex



בסכום הנ"ל כללנו תהליכים בהם מצבי הביניים כוללים זוגות אלקטרון חור.
ה vertex הכולל כולל גם תהליכים מורכבים

 או 

אך מסובכים יותר ולכן אותם לא נחשב,
אלא נסתפק בסכום הנ"ל המתאר את הפולריזציה של מערכת האלקטרונים הנלווית לפונון במסגרת קירוב RPA. ה renormalized vertex מקבל גם הוא לכן

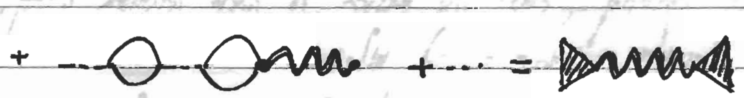
$$\bar{g}(k, i\omega_n) = g(k) + g(k)V(k)\chi_0(k, i\omega_n) + g(k)V(k)\chi_0(k, i\omega_n)V(k)V(k, i\omega_n) + \cdots$$

$$= \frac{g(k)}{1 - V(k)\chi_0(k, i\omega_n)} = \frac{g(k)}{\epsilon(k, i\omega_n)}$$

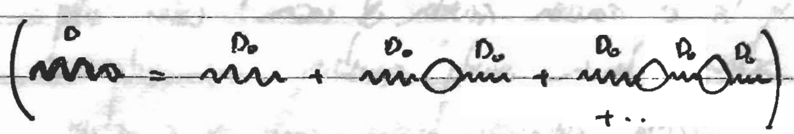
נתון כעת האינטראקציה בין שני אלקטרונים. ראינו כבר את הרנורמליזציה של ה bare coulomb int.

 $= \dfrac{V(k)}{\epsilon(k,\omega)}$

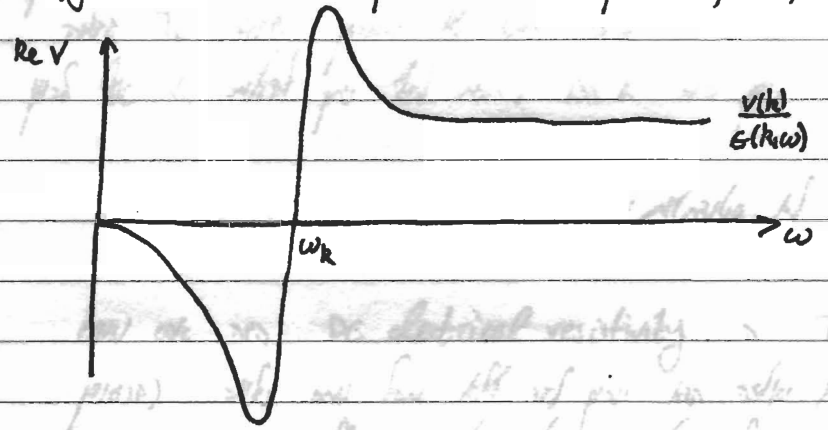
האינטראקציה המתווכת ע"י פונונים היא בקירוב ה RPA:

 $= \dfrac{|g(k)|^2}{\epsilon^2(k,\omega)} D(k,\omega)$

$$= \frac{|g(k)|^2}{\epsilon^2(k,\omega)} \frac{2\omega_p^{ion}}{\omega^2 - \omega_k^2}$$



האינטראקציה שחווים האלקטרונים היא סכום האינטראקציה הקולומבית הממוסכת והאינטראקציה המושרית על ידי הפונונים. מתוך הגרף אנו רואים כי רכיב זה הינו מושך ($V<0$) עבור $\omega < \omega_k$ (תדר קטן מ- ω_k). אם מתוך באינטראקציה הכללית כתוצאה של energy transfer ω בין האלקטרונים עבור k נתון נקבל



מה מקור משיכה אפקטיבית זו? אלקטרון הנע בסריג נוטה למשוך אליו את היונים החיוביים. בגלל שמסת היונים גדולה בהרבה ממסת האלקטרונים הם נעים לאט הרבה יותר מהאלקטרונים ואזור המטען המושרה החיובי נשאר כאשר האלקטרון הנע נמצא כבר רחוק משם.

שאלקטרון זה דחה את הסביבה. אלקטרון אחר העובר לסביבה זו ירגיש למעשה מטען שנראה מרחב אורבא כתוצאה מאינטראקציה עם הרקע החיובי. האינטראקציה המושרית הינה retarded interaction היא תלויה ב- ω כתוצאה מהזמן הנדרש ליונים להגיב לתנועתו של האלקטרון הראשון.

הזמן הנדרש ליונים להגיב לתנועת האלקטרון $\tau \sim \frac{2\pi}{\omega_D} \sim 10^{-13}\ sec$

בזמן זה האלקטרון הראשון נע $v_F\tau \sim 10^{8}\,\frac{cm}{sec}\cdot 10^{-13}\,sec \sim 1000\,Å$

מתברר כי משיכה אפקטיבית זו בין אלקטרונים, כאשר היא מתגברת על הדחייה החשמלית ביניהם, מובילה לאחת מהתופעות האלקטרוניות המעניינות ביותר - על מוליכות. על מוליכות התגלתה ב- 1911 במעבדתו של Kamerlingh Onnes בליידן כאשר תלמיד מחקר שהוטל עליו לבדוק את הנושא שם לב כי ההתנגדות החשמלית של כספית נעלמה בבת אחת כאשר הטמפרטורה הגיעה נמוכה מ- $4°K$. למרות שמדענים הגדולים פעלו במשך שנות ה- 30 ו- 40 של המאה הקודמת המנגנון המיקרוסקופי לתופעה התגלה רק ב- 1957