

Università di Pisa

Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Corso di Laurea Specialistica in Scienze Fisiche

Anno Accademico 2006/2007

Tesi di Laurea Specialistica

Spin drag e separazione spin-carica in sistemi fermionici unidimensionali

Candidato

Diego Rainis

Relatori

Chiarissimo Prof. Mario Tosi

Dott. Marco Polini

Introduzione

I sistemi di fermioni interagenti, e tra questi in particolare il liquido di elettroni, sono sempre stati uno degli oggetti di studio principali in fisica della materia condensata, tanto a livello teorico quanto a livello sperimentale. La non banalità del problema interagente rispetto a quello noninteragente ha costituito motivo di continui sforzi, tesi al miglioramento delle soluzioni approssimate al problema. In particolare si è cercato di tener conto e modellizzare nel modo più accurato possibile la presenza di effetti a molti corpi, quali quelli di scambio e correlazione (e.g. si veda [1, 3]).

Nel caso unidimensionale, su cui ci focalizziamo in questa tesi, l'effetto delle interazioni a molti corpi è particolarmente vistoso e lo spettro di eccitazione presenta caratteristiche peculiari [4]. A causa di ciò, contrariamente a quanto accade in dimensionalità $D=2$ o $D=3$, i sistemi unidimensionali non possono essere descritti utilizzando la teoria di Landau per i liquidi di Fermi normali [2]. Il paradigma appropriato per il caso 1D è costituito invece dal cosiddetto *liquido di Luttinger*, concetto introdotto da Haldane nei primi anni '80 [5]. La caratteristica distintiva di un liquido di Luttinger è il fatto che le eccitazioni di bassa energia sono oscillazioni collettive della densità di carica o di spin, contrariamente a quanto accade per un liquido di Fermi, dove le eccitazioni elementari sono singole quasiparticelle che portano carica e spin in maniera inseparabile. Tale proprietà conduce immediatamente al fenomeno della *separazione spin-carica* [4], cioè al fatto che le eccitazioni di bassa energia nel canale di carica e quelle nel canale di spin sono completamente disaccoppiate e propagano con velocità diverse, producendo appunto una separazione osservabile [67]. A livello teorico il disaccoppiamento dei gradi di libertà di carica e spin è stato previsto da tempo, e può ad esempio essere ottenuto agevolmente con la tecnica della bosonizzazione [4]. Il primo capitolo della tesi è dedicato alla presentazione ed analisi delle varie teorie attualmente utilizzate per trattare gli effetti a molti corpi in materia condensata; è inclusa anche una breve presentazione della teoria del funzionale di densità (DFT) e della teoria del funzionale di densità di corrente (CDFT), che sarà usata più avanti nella tesi. La presentazione del formalismo della Hamiltoniana di Luttinger e della bosonizzazione per il caso unidimensionale è posposta al capitolo 3.

Nel Capitolo 2 affrontiamo la questione del trasporto in sistemi spin-polarizzati, ovvero il problema della realizzazione e mantenimento di correnti di spin. Negli ultimi anni l'interesse per tale argomento è cresciuto notevolmente, sia per la sua potenziale applicazione al settore emergente della "spintronica", sia per la stretta relazione che esso ha con il mondo della computazione quantistica. In particolare, descriviamo un meccanismo intrinseco che genera una sorta di "attrito" a molti corpi tra elettroni con spin opposto, meccanismo definito *spin drag* [50, 51]. Tale meccanismo è attivo ogniqualvolta le velocità medie degli elettroni con spin \uparrow e di quelli con spin \downarrow sono diverse: lo scattering coulombiano trasferisce impulso dalla componente più veloce a quella più lenta, tendendo così in definitiva a "frenare" la prima delle due.

In particolare, nel Capitolo 2 ci siamo occupati del calcolo del coefficiente di spin drag γ per sistemi unidimensionali omogenei; l'inverso di γ , ovvero il tempo di rilassamento di spin drag τ_{sd} , governa lo smorzamento delle eccitazioni di spin. Per il calcolo abbiamo considerato un sistema

con polarizzazione di spin arbitraria, procedendo prima in maniera analitica, cosa possibile solo nei limiti di temperatura $T \rightarrow 0$ e di $T \rightarrow \infty$, e poi numericamente, anche a temperature intermedie.

Nel Capitolo 3 presentiamo in dettaglio il paradigma del liquido di Luttinger e il procedimento della bosonizzazione che permette di prevedere formalmente la separazione spin-carica. Quindi passiamo a presentare sistemi di interesse sperimentale dove poter osservare comportamenti di tipo Luttinger: gas di Fermi atomici in geometrie quasi-unidimensionali e liquidi di elettroni in fili quantici. Sono questi ultimi che hanno permesso la recente osservazione sperimentale della separazione spin-carica.

A questo punto, facendo riferimento ai contenuti del Capitolo 2, chiariamo il ruolo dello spin drag in $D=1$ e la sua relazione con la separazione spin-carica. A temperatura finita lo spin drag introduce un'ulteriore differenza tra i due gradi di libertà di carica e di spin: non solo le velocità, ma anche i coefficienti di smorzamento sono diversi per i due tipi di eccitazioni collettive; mentre la propagazione delle eccitazioni di carica di grandi lunghezze d'onda è essenzialmente di tipo balistico, la propagazione di spin è intrinsecamente smorzata e di tipo diffusivo. In un gas di Fermi atomico confinato in una trappola quasi-unidimensionale, pacchetti di "spin" (per gli atomi il ruolo dello spin è giocato da un grado di libertà atomico interno) possono essere preparati mediante l'utilizzo di fasci laser focalizzati. Lo studio della dinamica di questi pacchetti di spin deve tenere conto della presenza di due effetti fisici importanti: la disomogeneità indotta dalla trappola e l'azione fortemente perturbante dei fasci laser. Nel Capitolo 3 mi sono occupato di descrivere la dinamica di spin mediante CDFT dipendente dal tempo, che permette di tenere conto di entrambi questi effetti. Il contributo di spin drag al potenziale di scambio e correlazione, necessario per le equazioni di Kohn-Sham dipendenti dal tempo, è stato calcolato mediante un'approssimazione di densità locale basata sui risultati ottenuti nel Capitolo 2.

Una eventuale verifica sperimentale dei risultati ottenuti in questo lavoro di tesi sarebbe attualmente praticabile: gas di atomi freddi in geometrie quasi-unidimensionali [66] sono sistemi particolarmente adatti alla creazione di pacchetti di spin, dalla cui propagazione smorzata e diffusiva ottenere una misura del tempo di rilassamento τ_{sd} .

Indice

1	Introduzione a risultati teorici e sperimentali rilevanti	1
1.1	Gas ideale e liquido normale di Fermi	1
1.1.1	Teoria di Hartree-Fock del liquido elettronico degenere	2
1.1.2	Stati polarizzati di spin	6
1.1.3	Schermo dielettrico statico e oscillazioni di plasma nel liquido elettronico	7
1.1.4	Energia di correlazione e diagramma di fase del liquido elettronico	9
1.2	Teoria della Risposta Lineare e funzione dielettrica	11
1.2.1	Funzione di risposta densità-densità	11
1.2.2	Funzione di risposta risolta nello spin	15
1.2.3	Suscettività di Lindhard a $T = 0$	17
1.2.4	Suscettività di Lindhard a $T \neq 0$	24
1.2.5	Fenomeni di trasporto e relazioni di Kubo	26
1.2.6	Funzione dielettrica e RPA	27
1.2.7	Fattori di campo locale per effetti di scambio e correlazione	32
1.3	Teoria del Funzionale di Densità a temperatura zero	39
1.3.1	Teoria del Funzionale di Densità di Spin	42
1.3.2	Correlazioni dinamiche	42
1.3.3	Funzioni di risposta in corrente	44
1.3.4	Teoria del Funzionale di Densità Dipendente dal Tempo	46
1.3.5	Teoria del Funzionale di Densità di Corrente	48
2	Teoria del coefficiente di spin drag	51
2.1	Introduzione e definizioni	51
2.2	Spin drag in sistemi unidimensionali	54
2.2.1	Sistemi non polarizzati	55
2.2.2	Sistemi polarizzati nello spin	57
3	Connessione tra spin drag e separazione spin-carica	63
3.1	Il paradigma del liquido di Luttinger	63
3.1.1	Aggiunta del grado di libertà di spin-1/2: la separazione spin-carica	69
3.2	Sistemi di interesse sperimentale	71
3.2.1	Gas di Fermi atomici in geometria quasi-unidimensionale	71
3.2.2	Liquidi elettronici in fili quantici quasi-unidimensionali	73
3.3	Studio dell'effetto dello spin drag sulla separazione spin-carica: approccio tramite Teoria della Risposta Lineare	74
3.4	Approccio tramite Teoria del Funzionale di Densità di Corrente	79

Appendici	87
A Interazione coulombiana in 1D	89
B Calcolo di $\tau_{\text{sd}}^{-1}(T \rightarrow 0)$ per sistemi polarizzati nello spin	91
Bibliografia	94

Capitolo 1

Introduzione a risultati teorici e sperimentali rilevanti

Il primo capitolo costituisce un'introduzione generale alla fisica del liquido di elettroni. Nella prima sezione viene presa in considerazione la teoria di Hartree-Fock e il problema del calcolo dell'energia di stato fondamentale. Nella seconda sezione si passa alla trattazione della teoria della risposta lineare e sono presentati alcuni modelli per le funzioni di risposta. Per motivi di utilità futura, nelle sezioni finali sono esposte anche la teoria del funzionale di densità (DFT) e la teoria del funzionale di densità di corrente (CDFT). Come principale riferimento per il Capitolo 1 sono stati usati i testi [1], [2] e [3].

1.1 Gas ideale e liquido normale di Fermi

Il punto di partenza per la descrizione di un liquido di elettroni è il *gas di Fermi ideale*, cioè un sistema (non-relativistico) D -dimensionale di N fermioni non-interagenti posti in un volume V_D , sistema del quale consideriamo il limite termodinamico $V_D \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$, a fissata densità $n = N/V_D$. Gli autostati del sistema sono antisimmetrici per scambio di particelle e sono scritti come determinanti di Slater costruiti a partire da stati di singola particella $u_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r})$. Questi sono dati dal prodotto di (a) un'onda piana ($V_D^{-1/2}$) $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ di vettore d'onda \mathbf{k} , impulso $\hbar\mathbf{k}$ ed energia $e_{\mathbf{k}} = \hbar^2\mathbf{k}^2/(2m)$, e (b) un'opportuna funzione di spin. In particolare, lo stato fondamentale è costituito dalle onde piane di energia più bassa, corrispondenti a valori di $|\mathbf{k}|$ che vanno da 0 a k_F , detto numero d'onda di Fermi. Per fermioni di spin $1/2$ nello stato paramagnetico (egual numero di spin up e spin down) k_F è determinato dalla condizione:

$$N = \sum_{\mathbf{k}(k \leq k_F), \sigma} 1 = 2 \frac{V_D}{(2\pi)^D} \int_{(k \leq k_F)} d^D\mathbf{k} = 2 \frac{V_D}{(2\pi)^D} \frac{\Omega_D k_F^D}{D}, \quad (1.1)$$

dove Ω_D è l'angolo solido in D dimensioni (4π in 3D, 2π in 2D e 2 in 1D). Tale condizione si traduce nella relazione fondamentale tra numero d'onda di Fermi e densità del sistema

$$k_F = \begin{cases} (3\pi^2 n)^{1/3} & 3D, \\ (2\pi n)^{1/2} & 2D, \\ \pi n/2 & 1D. \end{cases} \quad (1.2)$$

Le onde piane che entrano a far parte del determinante di Slater di stato fondamentale riempiono dunque nello spazio \mathbf{k} una sfera D -dimensionale di raggio k_F , detta *sfera di Fermi*. Mentre in 3D si ha una sfera vera e propria, in 2D essa si riduce ad un cerchio e in 1D ad un semplice segmento che va da $-k_F$ a k_F . Più avanti vedremo che le proprietà topologiche della sfera di Fermi hanno grande rilevanza e determinano in ultimo il comportamento fisico del sistema.

La distribuzione degli impulsi $n(\mathbf{k})$ è il numero d'occupazione *medio* di ogni stato di singola particella, e nello stato fondamentale del gas ideale passa con discontinuità da 1 a 0 quando \mathbf{k} attraversa la superficie S_F della sfera di Fermi. (Qui e in tutta la tesi, spesso si parlerà indistintamente di vettore d'onda o di impulso, dal momento che il passaggio da una grandezza all'altra è immediato: $\mathbf{k} \rightarrow \hbar\mathbf{k}$). Uno stato eccitato del gas ideale di Fermi è ottenuto promuovendo un certo numero di fermioni attraverso S_F , producendo così degli stati di particella fuori dalla sfera di Fermi, e lasciando un egual numero di buche all'interno. Dunque l'introduzione di coppie particella-buca costituisce il meccanismo di base per la creazione di eccitazioni elementari in un gas ideale. In assenza di interazioni, la particella e la buca non sono correlate, e si può considerare la cosa da un punto di vista gran-canonico: le eccitazioni elementari del gas sono di due tipi indipendenti, cioè una particella aggiunta in uno stato fuori dalla sfera di Fermi, con energia di eccitazione $e_{\mathbf{k}} - \mu$ (μ potenziale chimico), e una buca aggiunta in uno stato dentro alla sfera di Fermi, con energia $\mu - e_{\mathbf{k}}$.

Per un sistema di fermioni interagenti (detto *liquido di Fermi* o sistema *reale*, in quanto contrapposto al gas ideale), gli effetti dell'interazione inter-particella diventano importanti e si aggiungono a quelli della statistica. In alcuni casi, l'interazione modifica in maniera drastica e sostanziale la fisica del sistema, rispetto a quella del gas non-interagente (superconduttori, stati con ordine magnetico, liquidi di Luttinger).

Più spesso invece, il liquido interagente mantiene alcune delle caratteristiche fondamentali del gas non-interagente; in tal caso il sistema è detto liquido di Fermi *normale*, definito come un fluido di fermioni il cui stato fondamentale può essere ottenuto in maniera continua da quello del gas ideale tramite accensione adiabatica delle interazioni. Per un liquido normale a $T = 0$ si ha che: (a) esiste ancora una superficie di Fermi nello spazio \mathbf{k} attraverso la quale la distribuzione degli impulsi $n(\mathbf{k})$ dello stato fondamentale ha una discontinuità. Tuttavia, tale discontinuità non vale più 1 ma ha un valore $Z < 1$ determinato dalle interazioni, e $n(\mathbf{k})$ ha una coda a grandi impulsi dovuta alla promozione di particelle al di fuori della sfera di Fermi: con la presenza delle interazioni le particelle correlano i loro moti e l'energia cinetica necessariamente aumenta, mentre c'è una diminuzione dell'energia potenziale e dell'energia totale. (b) Le eccitazioni elementari del sistema sono coppie di *quasiparticelle* e *quasibuca*, analoghe alle eccitazioni particella-buca del gas ideale, ma sono ben definite solo in prossimità della superficie di Fermi.

1.1.1 Teoria di Hartree-Fock del liquido elettronico degenere

Adottiamo la notazione $|\dots n_{\mathbf{k}} \dots\rangle$ per ognuna delle funzioni d'onda a molti corpi del gas di Fermi ideale, con $n_{\mathbf{k}}$ numero di particelle nello stato di singola particella $u_{\mathbf{k}}$ (l'indice di spin è incluso nell'indicazione \mathbf{k}). L'insieme di tutte le possibili funzioni d'onda di tale forma costituisce una base completa di stati ortonormali e si può pensare che la vera funzione d'onda Ψ del fluido interagente a N particelle sia espandibile in questa base:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \sum_{\{n_{\mathbf{k}}\}} A(\dots n_{\mathbf{k}} \dots; t) |\dots n_{\mathbf{k}} \dots\rangle, \quad (1.3)$$

con $|A(\dots n_{\mathbf{k}} \dots; t)|^2 = \text{probabilità che ci siano } \{\dots n_{\mathbf{k}} \dots\}$ particelle nei relativi stati di singola particella al tempo t . Con questa rappresentazione di Ψ è chiaro che, per valutare gli elementi di matrice di qualsiasi operatore che agisca sulle coordinate delle particelle, è sufficiente conoscere gli elementi di matrice di tale operatore tra funzioni d'onda del gas ideale. Questi ultimi possono a loro volta essere espressi in termini di elementi di matrice di operatori agenti sui numeri di occupazione $n_{\mathbf{k}}$. Coerentemente con questa rappresentazione, si costruisce il formalismo della seconda quantizzazione introducendo operatori $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ di distruzione e operatori $\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger$ di costruzione di particelle, con le definizioni

$$\begin{cases} \hat{c}_{\mathbf{k}} |\dots n_{\mathbf{k}} \dots\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}}} |\dots n_{\mathbf{k}} - 1 \dots\rangle \\ \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger |\dots n_{\mathbf{k}} \dots\rangle = \sqrt{1 - n_{\mathbf{k}}} |\dots n_{\mathbf{k}} + 1 \dots\rangle. \end{cases} \quad (1.4)$$

Notiamo che tali equazioni soddisfano il principio di esclusione di Pauli: $\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger |\dots n_{\mathbf{k}} \dots\rangle = 0$ se $n_{\mathbf{k}} = 1$. Dalle stesse equazioni si deduce che l'autovalore dell'operatore $\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}$ è $n_{\mathbf{k}}$, o in altri termini la distribuzione degli impulsi è il valore di aspettazione di $\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}$; inoltre si ricava la regola di anticommutazione $\hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} = 1$.

Si riscrivono ora tutti gli operatori in seconda quantizzazione, utilizzando gli operatori di costruzione e distruzione. Per l'Hamiltoniana di un fluido di particelle con interazione di coppia $v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ e poste in un potenziale esterno $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ si ha la riscrittura:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_i V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \\ &\rightarrow \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{V_D} \sum_{\mathbf{q}} V_{\text{ext}}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V_D} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (1.5)$$

dove $V_{\text{ext}}(\mathbf{q})$ e $v_{\mathbf{q}}$ sono le trasformate di Fourier del potenziale esterno e del potenziale inter-particella rispettivamente (assumendo che tali potenziali siano Fourier-trasformabili). L'interpretazione fisica della nuova riscrittura è immediata: il processo elementare di interazione tra particelle è lo scattering fermione-fermione con trasferimento di impulso $\hbar \mathbf{q}$, mentre il processo elementare associato all'azione del potenziale esterno è lo scattering di una particella con trasferimento di impulso $\hbar \mathbf{q}$.

Mentre gli operatori $\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger$ e $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ creano e distruggono una particella di dato impulso, è anche possibile introdurre operatori di campo che creano e distruggono una particella in un dato punto dello spazio:

$$\begin{cases} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \\ \hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \hat{c}_{\mathbf{k}} \end{cases} \quad (1.6)$$

Infatti, dal momento che $\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger$ crea una particella nello stato $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, l'operatore $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')$ crea una particella nello stato $\sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, grazie alla completezza del set di funzioni d'onda di singola particella.

L'operatore $\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ descrive la densità di particelle nello spazio reale. In seconda quantizzazione assume la forma $\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r})$: infatti si ha che

$$\int d^D \mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'} \int d^D \mathbf{r} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}, \quad (1.7)$$

(nell'ultimo passaggio si è usata l'ortonormalità), con autovalore pari al numero di particelle, come doveva essere. Nella base delle onde piane, la trasformata di Fourier di $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ è un operatore $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$ che descrive fluttuazioni di densità di vettore d'onda \mathbf{q} : $\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. L'operatore densità $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ è il termine diagonale della matrice densità a un corpo $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}')$, il cui valore medio nello stato fondamentale fornisce informazioni sulle correlazioni a lungo raggio e in trasformata di Fourier dà la distribuzione degli impulsi.

Infine, consideriamo l'operatore $\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}}$, che descrive fluttuazioni nella densità di corrente di dato vettore d'onda \mathbf{q} . La densità di corrente al punto \mathbf{r} è data da $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \sum_i [\hat{\mathbf{p}}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \hat{\mathbf{p}}_i] / (2m)$ e la sua trasformata di Fourier è $\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}} = \sum_i [\hat{\mathbf{p}}_i \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i) + \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i) \hat{\mathbf{p}}_i] / (2m)$. In seconda quantizzazione questa si scrive $\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}} = (\hbar/m) \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. L'operatore di impulso totale del sistema è $\hat{\mathbf{P}} = m \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}=0} = \hbar \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}$ (in un sistema invariante per traslazioni); questo mostra che la densità di corrente totale associata ad una particella di impulso $\hbar \mathbf{k}$ aggiunta al fluido è $\hbar \mathbf{k} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} / m$.

Nell'approssimazione di Hartree-Fock per lo stato fondamentale di un sistema di fermioni interagenti si assume che la funzione d'onda a molti corpi sia un determinante di Slater costruito a partire da orbitali di singola particella, i quali sono da determinare in maniera auto-consistente tramite minimizzazione del valore di aspettazione dell'Hamiltoniana. Mentre per sistemi non omogenei la soluzione del problema auto-consistente di Hartree-Fock può solitamente essere ottenuta solo in forma numerica e con l'utilizzo di ulteriori approssimazioni, la soluzione esatta di Hartree-Fock si ottiene agevolmente nel caso di fluidi omogenei ($V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = 0$): gli orbitali di singola particella auto-consistenti sono necessariamente onde piane, come impone l'invarianza traslazionale del sistema. Quindi la funzione d'onda di Hartree-Fock per lo stato fondamentale di un fluido omogeneo è la stessa del gas ideale di Fermi: in altri termini, calcolare l'energia di stato fondamentale in approssimazione di Hartree-Fock è equivalente in questo caso ad applicare la teoria delle perturbazioni al primo ordine.

Scrivendo esplicitamente gli indici di spin, abbiamo per l'energia di stato fondamentale:

$$E_g^{\text{HF}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} e_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}, \sigma}^0 + \frac{1}{2V_D} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} \langle 0 | \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} | 0 \rangle \quad (1.8)$$

dove $n_{\mathbf{k}, \sigma}^0$ è la distribuzione ideale di Fermi-Dirac e $|0\rangle$ è lo stato fondamentale del gas ideale di Fermi. L'elemento di matrice presente nella Eq. (1.8) è non-nullo solo in due casi: (1) $\mathbf{q} = 0$, e (2) $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{q}$, con $\sigma' = \sigma$ (questi sono conosciuti rispettivamente come termine diretto o di Hartree, e termine di scambio o di Fock). L'energia può anche essere scritta nella forma (poniamo $v_0 = v_{\mathbf{q}=0}$)

$$\left\{ \begin{array}{l} E_g^{\text{HF}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} n_{\mathbf{k}, \sigma}^0 \left[e_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k}) \right] \\ \Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V_D} \left(N v_0 - \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^0 \right) \end{array} \right. \quad (1.9)$$

Vediamo che, come conseguenza dell'introduzione delle interazioni, ora l'energia di una particella di impulso \mathbf{k} è diventata $e_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = e_{\mathbf{k}} + \Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k})$ (il fattore 1/2 evita il doppio conteggio nella sommatoria). Il contributo $\Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k})$ è l'*auto-energia* di Hartree-Fock di un fermione; i due termini che la compongono derivano dal fatto che ogni fermione (a) sente la media spaziale v_0 del potenziale di interazione, e (b) è tenuto distante da fermioni aventi spin parallelo al proprio, per azione dell'antisimmetria della funzione d'onda a molti corpi, e in tal modo la loro energia di mutua interazione viene ridotta.

Per calcolare esplicitamente l'auto-energia e quindi l'energia di Hartree-Fock, è ora necessario scegliere il tipo di interazione. Noi ci occupiamo di fluidi elettronici, per i quali il potenziale di interazione è quello coulombiano e^2/r , e utilizziamo il cosiddetto modello *a gellio*, nel quale è presente un substrato omogeneo di carica positiva, necessario a rendere il sistema complessivamente neutro. Tale substrato ha densità pari alla densità media del liquido elettronico, e in questo modo il contributo delle cariche positive all'energia di un fermione si annulla esattamente con il termine v_0 .

Scriviamo qui di seguito le espressioni per le trasformate di Fourier del potenziale coulombiano nelle varie dimensionalità. Il caso unidimensionale richiede particolare attenzione in quanto è necessario introdurre un cutoff a alle corte distanze per evitare la divergenza non integrabile dell'interazione in $r = 0$; ciò è realizzabile modellizzando il sistema 1D come un cilindro 3D infinitamente lungo e di raggio a , con a piccolo a sufficienza da limitare il moto trasverso degli elettroni allo stato di più bassa energia (per i dettagli vedere l'Appendice A). Con questa prescrizione, abbiamo:

$$v_{\mathbf{q}} = \begin{cases} \frac{4\pi e^2}{q^2} & 3\text{D}, \\ \frac{2\pi e^2}{q} & 2\text{D}, \\ -e^2 e^{q^2 a^2} \text{Ei}(-q^2 a^2) & 1\text{D}, \end{cases} \quad (1.10)$$

dove $\text{Ei}(x)$ è la funzione esponenziale-integrale, definita da $\text{Ei}(x) = \int_{-\infty}^x e^{-t}/t dt$. Ora resta da valutare la sommatoria presente nella seconda delle Eq. (1.9). Qui di seguito riportiamo i risultati:

$$\begin{cases} \Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = -\frac{2e^2 k_{\text{F}}}{\pi} f_{3\text{D}}\left(\frac{k}{k_{\text{F}}}\right), & f_{3\text{D}}(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| & 3\text{D}, \\ \Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = -\frac{2e^2 k_{\text{F}}}{\pi} f_{2\text{D}}\left(\frac{k}{k_{\text{F}}}\right), & f_{2\text{D}}(x) = \begin{cases} \mathbf{E}(x) & x \leq 1 \\ x [\mathbf{E}(1/x) - (1-x^{-2})\mathbf{K}(1/x)] & x \geq 1 \end{cases} & 2\text{D}. \end{cases} \quad (1.11)$$

In queste equazioni $\mathbf{E}(x)$ e $\mathbf{K}(x)$ sono gli integrali ellittici completi del primo e secondo tipo rispettivamente. Integrando l'energia di singola particella (energia cinetica più auto-energia) sulla sfera di Fermi otteniamo l'energia totale di stato fondamentale di Hartree-Fock, che in genere viene data come energia media per particella ed espressa in Rydberg:

$$\frac{E_g^{\text{HF}}}{N} = \left(\frac{A_D}{r_s^2} - \frac{B_D}{r_s} \right) \text{Ry} \simeq \begin{cases} \left(\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right) \text{Ry} & 3\text{D}, \\ \left(\frac{1}{r_s^2} - \frac{1.200}{r_s} \right) \text{Ry} & 2\text{D}. \end{cases} \quad (1.12)$$

Tale scrittura fa uso del parametro adimensionale r_s , detto parametro di Wigner-Seitz, il cui valore è completamente determinato dalla densità del sistema tramite la relazione:

$$\frac{1}{n} = \begin{cases} \frac{4\pi}{3} (r_s a_B)^3 & 3\text{D}, \\ \pi (r_s a_B)^2 & 2\text{D}, \\ 2r_s a_B & 1\text{D}. \end{cases} \quad (1.13)$$

Il significato di tale parametro è quello di distanza media tra due elettroni: le (1.13) richiedono che ci sia in media un elettrone in una sfera D -dimensionale di raggio $r_s a_B$. Il termine di energia cinetica è sempre proporzionale a r_s^{-2} , con opportuno coefficiente A_D dipendente dalla dimensionalità, mentre il termine di energia potenziale, nel nostro caso il termine di scambio, è proporzionale a r_s^{-1} , con coefficiente B_D (in particolare si ha $A_D = (3/5)(9\pi/4)^{2/3}$ e $B_D = (3/2\pi)(9\pi/4)^{1/3}$ in 3D, $A_D = 1$ e $B_D = 8\sqrt{2}/(3\pi)$ in 2D). Come si osserva, il segno del termine di scambio è sempre negativo, perchè, come già detto, il principio di esclusione tiene distanti elettroni con spin paralleli e in tal modo abbassa mediamente la loro energia di interazione repulsiva. Notiamo inoltre che il rapporto tra energia potenziale ed energia cinetica è proporzionale a r_s , *i.e.* questa lunghezza adimensionale dà una misura della forza di accoppiamento, che cresce al decrescere della densità. Il calcolo dell'energia di Hartree-Fock per il caso 1D è reso complicato dall'espressione di v_q , la cui forma non omogenea impedisce inoltre di scrivere l'energia riscaltata in unità di r_s .

Per il caso 3D possiamo trarre le seguenti conclusioni: l'espressione di $\Sigma_{\text{HF}}(\mathbf{k})$ data nella (1.11) prevede per la derivata di $e_{\text{HF}}(\mathbf{k})$ una divergenza logaritmica a $k = \pm k_F$: nella teoria di Hartree-Fock la velocità di un elettrone sulla superficie di Fermi (definita da $\hbar \mathbf{v}_F = \nabla_{\mathbf{k}} e_{\text{HF}}(\mathbf{k})|_{k=k_F}$) diverge e quindi la massa efficace m^* (definita ponendo $\mathbf{v}_F = \hbar \mathbf{k}_F / m^*$) e la corrispondente densità di stati di singola particella (proporzionale a m^*) si annullano sulla superficie di Fermi. Questo risultato è in disaccordo con gli esperimenti: *e.g.* esso comporterebbe una forma $T/\ln T$ per quanto riguarda la dipendenza dalla temperatura del contributo elettronico al calore specifico, al posto dell'andamento lineare in T osservato nei normali metalli. La principale limitazione della teoria di Hartree-Fock è che, trascurando le correlazioni dovute alla repulsione Coulombiana (che sono rilevanti soprattutto per gli elettroni a spin antiparalleli), essa non include nè gli effetti di schermo dielettrico nè le eccitazioni collettive di plasma.

1.1.2 Stati polarizzati di spin

Tutti gli stati di una Hamiltoniana spin-indipendente sono classificati secondo l'autovalore S_z della proiezione dello spin totale lungo l'asse di quantizzazione scelto. I valori ammessi di S_z vanno da 0 in un liquido di Fermi nello stato paramagnetico (cioè non polarizzato nello spin), a $\pm N/2$ nel caso in cui tutti gli spin puntano nella stessa direzione, detto stato ferromagnetico. Uno stato parzialmente polarizzato ha N_\uparrow elettroni a spin-up e N_\downarrow elettroni a spin-down, con $N_\uparrow + N_\downarrow = N$. La polarizzazione frazionaria di spin è definita da $\zeta = (N_\uparrow - N_\downarrow)/N$, e assume valori da 0 a 1 (stiamo assumendo $N_\uparrow > N_\downarrow$).

Per un gas di Fermi con $\zeta \neq 0$ definiamo due sfere di Fermi distinte, una per ogni popolazione di spin, aventi raggi $k_{F\uparrow,\downarrow} = k_F(1 \pm \zeta)^{1/D}$, e otteniamo l'energia cinetica in funzione di ζ scritta come

$$\frac{E_0(r_s, \zeta)}{N} = \frac{A_D}{2r_s^2} \left[(1 + \zeta)^{\frac{D+2}{D}} + (1 - \zeta)^{\frac{D+2}{D}} \right] \text{Ry}. \quad (1.14)$$

Si osserva immediatamente dalla Eq. (1.12) che una polarizzazione di spin aumenta l'energia del gas di Fermi non-interagente, cosicchè lo stato fondamentale di tale sistema ha $\zeta = 0$.

Tuttavia, le interazioni possono favorire uno stato fondamentale con polarizzazione di spin parziale o completa. Questo è evidente per il liquido di elettroni nell'approssimazione di Hartree-Fock; ogni popolazione di spin contribuisce indipendentemente all'energia di scambio, che, usando

le Eq. (1.11), risulta essere

$$\frac{E_x^{\text{HF}}(r_s, \zeta)}{N} = -\frac{B_D}{2r_s} \left[(1 + \zeta)^{\frac{D+1}{D}} + (1 - \zeta)^{\frac{D+1}{D}} \right] \text{Ry}. \quad (1.15)$$

É facile mostrare che in approssimazione di Hartree-Fock uno stato completamente ferromagnetico ($\zeta = 1$) per il liquido elettronico diventa energeticamente favorito rispetto allo stato paramagnetico ($\zeta = 0$) ad un valore critico di r_s dato da (transizione di Bloch):

$$r_s^{\text{crit}} = \frac{(2^{2/D} - 1)}{(2^{1/D} - 1)} \simeq \begin{cases} 5.45 & 3\text{D}, \\ 2.01 & 2\text{D}. \end{cases} \quad (1.16)$$

Tali risultati vanno confrontati con quelli delle simulazioni quantistiche (QMC), che forniscono valori di r_s^{crit} completamente diversi: si veda a tal proposito la figura 1.1.

1.1.3 Schermo dielettrico statico e oscillazioni di plasma nel liquido elettronico

Lo schermo statico trae origine dal fatto che in presenza di una perturbazione statica di carica esterna gli elettroni si ridispongono in modo tale da annullarne l'effetto a lunga distanza, schermando il campo da essa prodotto. Da qui in poi indicheremo la densità di particelle con $\rho(\mathbf{r}, t)$, per seguire la notazione convenzionale, ma continueremo a denotare densità medie o densità di sistemi omogenei con n . Indichiamo dunque con $e\rho_e(\mathbf{r})$ la densità di carica esterna, $\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - n$ la densità indotta sul sistema omogeneo di densità n , e $V(\mathbf{r})$ il potenziale elettrostatico generato da carica esterna e carica indotta. L'equazione di Poisson ci fornisce:

$$-\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 4\pi e [\rho_e(\mathbf{r}) + \rho_{\text{ind}}(\mathbf{r})]. \quad (1.17)$$

La disomogeneità nella densità di carica elettronica origina un gradiente di potenziale chimico $\nabla\mu(\mathbf{r})$. Una soluzione esatta all'equazione di Poisson può essere ottenuta nel caso di debole disomogeneità, per la quale si può sostituire il potenziale chimico in un punto \mathbf{r} con quello di un fluido omogeneo di densità $n = \rho(\mathbf{r})$, ottenendo $\nabla\mu(\mathbf{r}) = \frac{\partial\mu(n)}{\partial n} \nabla\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r})$. L'equilibrio viene raggiunto all'annullarsi delle forze agenti all'interno del sistema:

$$0 = -e\nabla V(\mathbf{r}) - \nabla\mu(\mathbf{r}) = -e\nabla V(\mathbf{r}) - \frac{\partial\mu(n)}{\partial n} \nabla\rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}). \quad (1.18)$$

Utilizzando la trasformata di Fourier per tale equazione e per l'equazione di Poisson (1.17), in seguito a semplificazioni otteniamo:

$$0 = e\tilde{V}(\mathbf{k}) + \frac{\partial\mu(n)}{\partial n} \tilde{\rho}_{\text{ind}}(\mathbf{k}); \quad (1.19)$$

$$\tilde{V}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e}{k^2} [\tilde{\rho}_e(\mathbf{k}) + \tilde{\rho}_{\text{ind}}(\mathbf{k})]. \quad (1.20)$$

Inserendo ora nella (1.20) il valore di $\tilde{\rho}_{\text{ind}}(\mathbf{k})$ ricavato dalla (1.19), e riconoscendo in $4\pi e^2/k^2$ la trasformata di Fourier tridimensionale $v_{\mathbf{k}}$ del potenziale coulombiano, abbiamo un'equazione per $\tilde{V}(\mathbf{k})$, che risolta fornisce (in 3D)

$$e\tilde{V}(\mathbf{k}) = \frac{v_{\mathbf{k}}}{(1 + v_{\mathbf{k}} n^2 K_T)} \tilde{\rho}_e(\mathbf{k}), \quad (1.21)$$

dove si è usata la relazione termodinamica che lega $\partial\mu(n)/\partial n$ alla compressibilità isoterma K_T tramite $K_T^{-1} = n^2(\partial\mu/\partial n)$. Osserviamo che il potenziale $\tilde{V}(\mathbf{k})$ ottenuto è regolare in $\mathbf{k} = 0$, e questo equivale all'assenza di carattere a lungo raggio. Se ora per esempio consideriamo come carica esterna una impurezza di carica Ze posta nell'origine, $\rho_e(\mathbf{r}) = Z\delta(\mathbf{r})$, e ritrasformiamo l'Eq. (1.21) nello spazio delle coordinate, otteniamo

$$V(\mathbf{r}) = \frac{Ze}{r} e^{-\kappa_s r}, \quad \kappa_s = \sqrt{4\pi e^2 (\partial n / \partial \mu)}. \quad (1.22)$$

Tale espressione per $V(\mathbf{r})$, di tipo Yukawa (assumendo $\partial\mu/\partial n > 0$), ne esplicita il carattere localizzato, con κ_s^{-1} che assume il significato di *lunghezza di schermo*: misura la distanza entro la quale il potenziale elettrico auto-consistente associato all'impurezza penetra nel liquido elettronico. Se nella (1.22) si sostituisce a $\partial n / \partial \mu$ il suo valore in un gas di Fermi non-interagente (operazione legittima ad accoppiamento debole), si ottiene la lunghezza di schermo di Thomas-Fermi: $\mu = e_F \propto n^{2/3}$ e quindi si ha $\kappa_{\text{TF}} = \sqrt{6\pi n e^2 / e_F}$. Similmente, il valore della lunghezza di schermo di Debye in un plasma classico può essere ottenuto dal valore di μ in un gas perfetto monoatomico.

Nel caso bidimensionale il comportamento del potenziale schermato risulta qualitativamente analogo a quello ottenuto ora, ma la forma funzionale è più complicata.

Il concetto di schermo è cruciale anche nella dinamica di un plasma elettronico: nel caso di perturbazione esterna dipendente dal tempo il fenomeno più rilevante è l'*oscillazione di plasma*, che è la controparte dinamica dello schermo dielettrico statico. Qui ne diamo una derivazione classica, il cui risultato coincide con quello del calcolo quantistico.

Nel limite di grandi lunghezze d'onda e frequenze finite il fluido elettronico è in regime non-collisionale e vale

$$\frac{m}{n} \frac{\partial \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = e^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -e^2 \nabla V(\mathbf{r}, t), \quad (1.23)$$

avendo indicato con \mathbf{j} la densità di corrente e con \mathbf{E} e V il campo ed il potenziale elettrico rispettivamente. Utilizzando l'equazione di continuità in trasformata di Fourier, $\omega e \rho - \mathbf{k} \cdot \mathbf{j} = 0$, e riscrivendo anche la (1.23) in trasformata, si ottiene

$$\frac{m}{n} \omega^2 \rho(\mathbf{k}, \omega) = e k^2 V(\mathbf{k}, \omega) = k^2 v_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{k}, \omega), \quad (1.24)$$

dove si è fatto nuovamente uso dell'equazione di Poisson per legare V a ρ . Da quest'ultima equazione si vede che la densità di carica compie delle oscillazioni longitudinali non smorzate (plasmoni) di frequenza

$$\omega_p(k) = \sqrt{\frac{nk^2 v_{\mathbf{k}}}{m}} = \begin{cases} \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}} & 3\text{D}, \\ \sqrt{\frac{2\pi n e^2 k}{m}} & 2\text{D}, \end{cases} \quad (1.25)$$

detta *frequenza di plasma*. Nel caso tridimensionale l'oscillazione di plasma ha frequenza finita a $k = 0$; questo risultato è ben noto sia per quanto riguarda i plasmi classici che per il gas di elettroni di conduzione nei metalli. La differenza sostanziale nel caso bidimensionale è che la frequenza del plasmone si annulla come $k^{1/2}$ per $k \rightarrow 0$. Tale differenza è dovuta unicamente alla diversa forma del potenziale $v_{\mathbf{k}}$ e può essere compresa se si pensa di traslare rigidamente gli elettroni rispetto al

substrato uniforme: nel caso 3D il campo di richiamo prodotto è quello costante all'interno di un condensatore, mentre nel caso 2D il campo è lo stesso di quello dovuto a due fili carichi paralleli, che producono un campo non costante.

Un campo elettrico esterno oscillante alla frequenza ω_p entra in risonanza con il plasma elettronico: i plasmoni sono infatti osservati in esperimenti di scattering inelastico da raggi di elettroni veloci o raggi X incidenti su fogli metallici. Aggiungiamo inoltre che il risultato di Thomas-Fermi per la lunghezza di schermo può essere riscritta come $\kappa_{\text{TF}} = \sqrt{3}\omega_p/v_F$, con v_F velocità di un elettrone sulla superficie di Fermi: in essenza, la lunghezza di schermo è il rapporto tra la velocità caratteristica v_F e la frequenza caratteristica ω_p .

1.1.4 Energia di correlazione e diagramma di fase del liquido elettronico

L'energia ottenuta in approssimazione di Hartree-Fock differisce dall'energia dello stato fondamentale E_g per una quantità definita *energia di correlazione*; l'energia di correlazione per particella è data da

$$e_c \equiv \frac{E_g - E_g^{\text{HF}}}{N}. \quad (1.26)$$

L'energia di correlazione è sempre negativa: al primo ordine perturbativo infatti il termine di repulsione coulombiana agisce solo su elettroni a spin paralleli; gli ordini perturbativi più alti includono la repulsione fra elettroni a spin antiparalleli dando quindi origine ad un ulteriore abbassamento dell'energia del sistema.

Il valore esatto dell'energia di correlazione non è conosciuto; tuttavia, data la sua importanza, esistono diversi approcci per ottenerne una stima. Se si prosegue nella teoria delle perturbazioni oltre il primo ordine (cioè oltre HF), si incontrano divergenze causate dalla natura a lungo raggio dell'interazione coulombiana. Il modo naturale per regolarizzare queste divergenze consiste nell'introdurre negli integrali un cutoff a piccoli vettori d'onda, che corrisponde a sostituire al potenziale coulombiano un potenziale schermato. Tali effetti di schermo possono essere trattati in ambito diagrammatico sommando ad ogni ordine i termini più fortemente divergenti (analogamente a quanto viene fatto nella RPA, vedi la sez.(1.2.4)). Riportiamo qui sotto i risultati, che costituiscono un'espansione a piccoli r_s dell'energia di correlazione:

$$e_c(r_s) = \begin{cases} \left[0.0622 \ln r_s - 0.096 + \mathcal{O}(r_s \ln r_s) \right] \text{Ry} & 3\text{D}, \\ \left[-0.38 - 0.1726 r_s \ln r_s + \mathcal{O}(r_s) \right] \text{Ry} & 2\text{D}. \end{cases} \quad (1.27)$$

L'espansione per il caso 3D è stata trovata per la prima volta da Gell-Mann e Brückner [8], ed è ragionevolmente accurata solo fino a $r_s \approx 1$, mentre nella fisica dei normali metalli i valori importanti di r_s si trovano in altri range ($2 < r_s < 6$). Osserviamo che termini del tipo $\ln r_s$ rendono l'energia una funzione non analitica di r_s per $r_s \rightarrow 0$, e questo mostra l'inadeguatezza della semplice teoria perturbativa. Il risultato relativo al caso 2D è stato ottenuto da Rajagopal e Kimball [9] e presenta gli stessi problemi di applicabilità.

A grandi r_s le espansioni (1.27) sono del tutto inadatte. Già negli anni '30 Wigner [10] si accorse che si ottiene un valore ottimale per l'energia potenziale $E_{\text{pot}} \approx -(1.8/r_s) \text{Ry}$ se in 3D si dispongono gli elettroni sui siti di un reticolo cristallino avente struttura cubica a corpo centrato (bcc). Il guadagno di un fattore circa 2 rispetto all'energia potenziale di Hartree-Fock ($-0.916/r_s$)

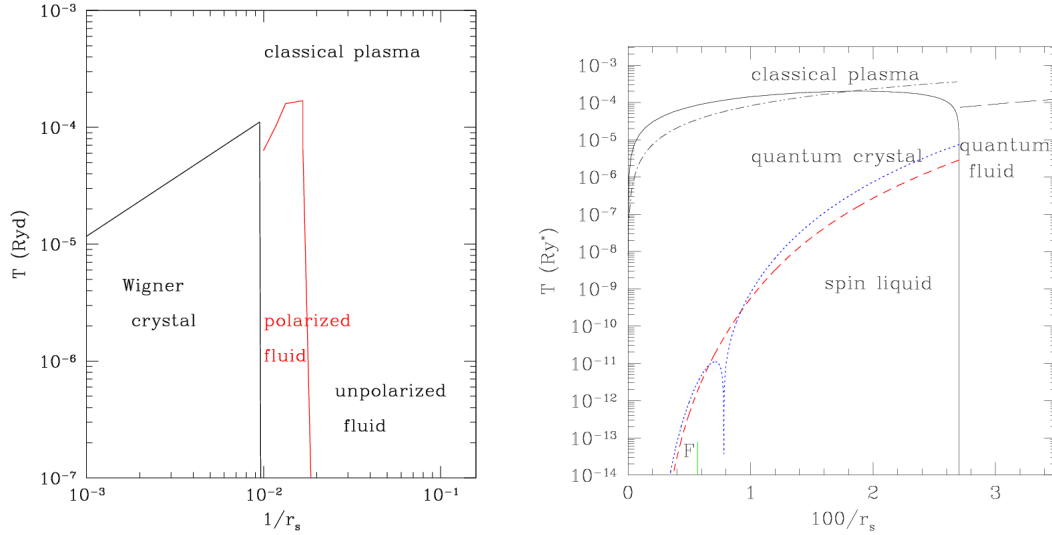


Figura 1.1: Diagrammi di fase nel piano $T - 1/r_s$ per il liquido elettronico nel caso tridimensionale (sinistra) e bidimensionale (destra), da studi di Quantum Monte Carlo di Ceperley e collaboratori.

è chiaramente legato al fatto che nel cristallo tutti gli elettroni sono tenuti tra loro distanti, indipendentemente dall'orientazione relativa di spin. (Con un calcolo analogo a quello di Wigner si mostra che in 2D la disposizione ordinata porta ad un'energia potenziale di $\approx -(2.3/r_s)$ Ry). Usando i valori di energia del cristallo a grandi r_s e una stima dell'energia di correlazione a bassi r_s , Wigner propose la seguente formula di interpolazione, approssimativamente valida nel range di densità metalliche:

$$\frac{E_g^W(r_s)}{N} = \left[\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} - \frac{0.88}{(7.8 + r_s)} \right] \text{Ry} \quad (1.28)$$

La localizzazione degli elettroni sui siti del reticolo causa, per il principio di indeterminazione, un'aumento dell'energia cinetica; perciò lo stato cristallino diventa favorito solo a grandi r_s , quando l'energia potenziale domina su quella cinetica. Chiaramente, gli elettroni non sono completamente localizzati sui siti di reticolo, bensì eseguono moti vibrazionali attorno ad essi. Utilizzando il modello di Einstein per le vibrazioni di reticolo, possiamo derivare l'andamento dell'energia cinetica a grandi r_s : consideriamo un elettrone situato al centro di una sfera omogenea di raggio $r_s a_B$ e carica totale $|e|$: se l'elettrone è spostato ad una distanza r dal centro, esso viene richiamato da una carica $|e|[r/(r_s a_B)]^3$ e sente quindi un potenziale di richiamo proporzionale a r^2 . Si ottiene dunque un oscillatore armonico 3D con una energia di punto-zero data da $3r_s^{-3/2}$ Ry, metà della quale è energia cinetica.

Nel 1980 Ceperley e Alder [11], usando metodi di simulazione quantistica, riuscirono a mostrare che lo stato fondamentale ferromagnetico diventa energeticamente favorito su quello paramagnetico a $r_s \approx 75$, e che a sua volta il cristallo di Wigner a struttura bcc diventa favorito sullo stato ferromagnetico a $r_s \approx 100$. L'espressione per l'energia di stato fondamentale del liquido paramagnetico come funzione di r_s ottenuta con un fit dei loro dati [12] mostra che la formula di interpolazione (1.28) di Wigner è una ragionevole approssimazione. Per un plasma elettronico 2D è prevista similmente una cristallizzazione di Wigner a $r_s \approx 37$ [13] (al diminuire della dimensionalità aumen-

ta l'importanza e l'efficacia dell'interazione e quindi la struttura cristallina diventa favorita prima, a densità non troppo basse). La figura 1.1 riporta il diagramma di fase del liquido di elettroni 3D e 2D, così come sono conosciuti attualmente dai lavori di Ceperley [14] e di Bernu *et al.* [15], rispettivamente.

Sperimentalmente la cristallizzazione di Wigner fu osservata in maniera non ambigua per la prima volta in un fluido elettronico quasi-classico quasi-bidimensionale, depositato sulla superficie di un substrato di ^4He liquido [16]. Tali sistemi elettronici quasi-2D sono attualmente realizzati in laboratorio in diverse strutture a semiconduttore, ma è comunque difficile raggiungere le basse densità e temperature necessarie per la cristallizzazione di Wigner in regime quantistico, cioè senza perdere la coerenza fra le particelle. Un metodo molto efficace per ridurre l'energia cinetica traslazionale in un fluido elettronico quasi-2D in strutture a semiconduttore, senza la necessità di raggiungere densità troppo basse, è fornito dall'applicazione di un forte campo magnetico. Yoon *et al.* [17] hanno riportato una transizione metallo-isolante a $r_s \approx 35$ in un campione estremamente pulito di portatori di tipo buca di altissima mobilità. In una matrice di materiale semiconduttore in presenza di disordine si verifica una transizione da comportamento metallico a comportamento isolante a valori significativamente più bassi della forza di accoppiamento [18].

1.2 Teoria della Risposta Lineare e funzione dielettrica

In questa sezione esponiamo la teoria della risposta lineare, presentando il concetto di funzione di risposta e quello di funzione dielettrica; dedicheremo particolare attenzione alla funzione di risposta del gas non-interagente, detta anche suscettività di Lindhard, e passeremo poi ad una teoria più raffinata, la teoria della RPA. Introdurremo infine i cosiddetti fattori di campo locale, che permettono di includere gli effetti di correlazione nella descrizione della risposta del liquido di elettroni.

In condizioni ordinarie un fluido di elettroni risponde a piccole perturbazioni esterne con piccole variazioni della propria configurazione interna e delle grandezze fisiche che la caratterizzano. Questo si traduce nella possibilità di elaborare, in maniera consistente, una teoria perturbativa linearizzata: nella teoria della risposta lineare (LRT) le variazioni dei valori medi delle osservabili sono al primo ordine nelle perturbazioni esterne. Tratteremo qui in dettaglio la funzione di risposta densità-densità, ma la derivazione è del tutto generale e può essere ripetuta per lo studio di altre funzioni di risposta.

1.2.1 Funzione di risposta densità-densità

Consideriamo un fluido di elettroni governato da una Hamiltoniana \mathcal{H} , e facciamo agire su di esso un potenziale scalare esterno $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$. Questo deve essere sufficientemente debole da rendere applicabile la teoria delle perturbazioni agli ordini più bassi. Tale potenziale si accoppia alla densità di particelle $\rho(\mathbf{r}, t)$ mediante il termine

$$\mathcal{H}'(t) = \int d^D \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) e V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) \quad (1.29)$$

e vogliamo sapere qual è la variazione indotta $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$ nella densità. In un punto dato tale variazione sarà funzione del valore del campo in quel punto e delle variazioni di densità in tutti gli altri punti; se il potenziale è debole, possiamo supporre che esista una relazione lineare tra risposta in densità

e potenziale esterno:

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d^D r' \chi_{\rho\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') eV_{\text{ext}}(\mathbf{r}', t') \quad (1.30)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d^D r' \chi_{\rho\rho}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, t - t') eV_{\text{ext}}(\mathbf{r}', t') \quad (1.31)$$

(la seconda riscrittura è valida per sistemi omogenei, isotropi e invarianti per traslazioni temporali). La funzione introdotta $\chi_{\rho\rho}$ è detta *funzione di risposta densità-densità* (o anche *polarizzabilità*), in quanto descrive la risposta in densità a un potenziale che si accoppia alla densità stessa. Per variazione di densità $\delta\rho$ si intende il cambiamento nei valori di aspettazione:

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = \langle \Phi(t) | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Phi(t) \rangle - \langle \Phi^0(t) | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Phi^0(t) \rangle, \quad (1.32)$$

dove Φ^0 e Φ sono rispettivamente lo stato fondamentale imperturbato e lo stato evoluto con Hamiltoniana $(\mathcal{H} + \mathcal{H}')$. Si dimostra tramite la teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo (si veda ad esempio il cap. 5 del libro di Fetter e Walecka [19]) che la funzione di risposta $\chi_{\rho\rho}$ risulta essere data da ($\hbar = 1$)

$$\chi_{\rho\rho}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, t - t') = -i\Theta(t - t') \langle \Phi^0(t) | [\hat{\rho}(\mathbf{r}, t), \hat{\rho}(\mathbf{r}', t')] | \Phi^0(t) \rangle, \quad (1.33)$$

dove gli operatori t -dipendenti sono intesi in rappresentazione di Heisenberg: $\hat{\mathcal{O}}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{\mathcal{O}} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}$. L'espressione appena scritta per $\chi_{\rho\rho}$ contiene due fattori: (a) la funzione scalino Θ , che assicura la causalità della risposta (*i.e.* $\delta\rho$ ad ogni istante t è determinato solo dai valori assunti dal potenziale a tempi antecedenti); e (b) il valore di aspettazione del commutatore di $\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)$ e $\hat{\rho}(\mathbf{0}, 0)$ (per omogeneità). Mostriamo che le *relazioni di Kramers-Kronig* discendono da (a) e che invece da (b) si deriva il *teorema di fluttuazione-dissipazione*. Si osservi inoltre che gli operatori della (1.33) evolvono con l'Hamiltoniana imperturbata, e il valore di aspettazione è calcolato sullo stato fondamentale imperturbato: quindi la funzione di risposta densità-densità, pur descrivendo la reazione del fluido elettronico a perturbazioni esterne, dipende esclusivamente dalle proprietà del liquido omogeneo imperturbato.

Relazioni di Kramers-Kronig e rappresentazioni spettrali

Come anticipato, mostriamo qui che dalla proprietà di causalità della $\chi_{\rho\rho}$ discende il fatto che essa soddisfa le relazioni di Kramers-Kronig. Prima di tutto definiamo le trasformate di Fourier della $\chi_{\rho\rho}$ (che da ora sarà indicata semplicemente con χ):

$$\chi(\mathbf{k}, t) = \int d^D \mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi(\mathbf{r}, t) = -i\Theta(t) \langle [\hat{\rho}_{\mathbf{k}}(t), \hat{\rho}_{-\mathbf{k}}(0)] \rangle V_D^{-1} \quad (1.34)$$

$$\chi(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \chi(\mathbf{k}, t) \quad (1.35)$$

L'omogeneità e isotropia rendono χ una funzione dipendente solo dal modulo di \mathbf{k} , e fanno sì che l'impulso totale all'interno del valore di aspettazione della (1.34) venga conservato. Con queste definizioni la (1.31) diventa di lettura più immediata: $\delta\rho(\mathbf{k}, \omega) = \chi(\mathbf{k}, \omega) eV_{\text{ext}}(\mathbf{k}, \omega)$.

Definiamo ora inoltre

$$\tilde{\chi}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{2} \int d^D \mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle [\hat{\rho}(\mathbf{r}, t), \hat{\rho}(\mathbf{0}, 0)] \rangle \quad (1.36)$$

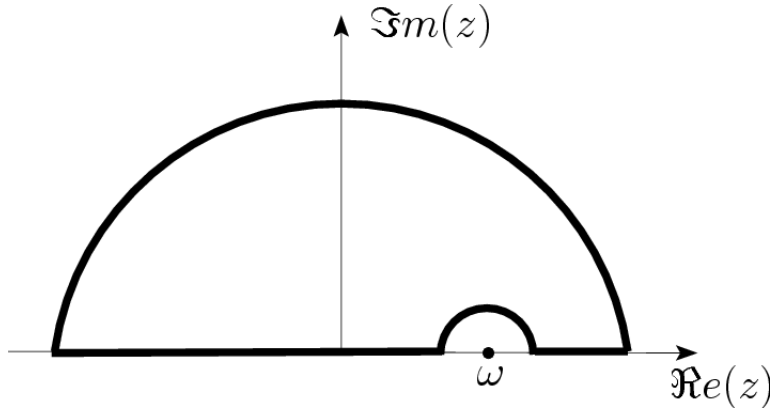


Figura 1.2: Illustrazione schematica del contorno di integrazione da scegliere per ottenere le relazioni di Kramers-Kronig.

e consideriamo la sua trasformata di Fourier $\tilde{\chi}(\mathbf{k}, \omega)$. Dall'Eq. (1.33) si ha che $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ è data dall'integrale di convoluzione di $\tilde{\chi}(\mathbf{k}, \omega)$ con la trasformata di Fourier della $\Theta(t)$:

$$\chi(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\tilde{\chi}(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta}, \quad (1.37)$$

con η infinitesimo positivo. Quella appena scritta è la *rappresentazione spettrale* della $\chi(\mathbf{k}, \omega)$. Per come è definita, $\tilde{\chi}(\mathbf{k}, \omega)$ è una funzione reale, dal momento che l'operatore densità è hermitiano. Dunque l'Eq. (1.37) implica che $\Im\chi(\mathbf{k}, \omega) = \tilde{\chi}(\mathbf{k}, \omega)$: la funzione spettrale della risposta in densità è $\Im\chi(\mathbf{k}, \omega)$ ed è data dalla trasformata spazio-temporale del commutatore $(1/2)\langle[\hat{\rho}(\mathbf{r}, t), \hat{\rho}(\mathbf{0}, 0)]\rangle$.

La rappresentazione spettrale della $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ nell'Eq. (1.37) assicura che $\chi(\mathbf{k}, z)$, considerata come funzione di z nel piano complesso delle frequenze, è una funzione analitica per $\Im m(z) \geq 0$. Tale proprietà è intimamente legata alla causalità ($\chi(\mathbf{k}, t) = 0$ for $t < 0$). Infatti, eseguendo l'antitrasformata di Fourier per ottenere $\chi(\mathbf{k}, t)$ a $t < 0$, il contorno di integrazione può essere chiuso nel semipiano superiore, dove, non essendoci poli, si ottiene contributo nullo. Da qui, si ha che $\int dz [\chi(\mathbf{k}, z)/(\omega - z)] = 0$, con percorso di integrazione scelto come in Fig. 1.2. Esprimendo questo integrale come somma di parte principale sull'asse reale e integrali sui semicerchi, e anticipando inoltre il risultato (1.42) secondo il quale la funzione di risposta si comporta come $1/\omega^2$ a grandi frequenze, otteniamo:

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\chi(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega'} + i\pi\chi(\mathbf{k}, \omega) = 0 \quad (1.38)$$

dove \mathcal{P} denota la parte principale dell'integrale nel senso di Cauchy. Infine, usando $\chi(\mathbf{k}, \omega) = \Re\chi(\mathbf{k}, \omega) + i\Im\chi(\mathbf{k}, \omega)$ e separando le parti reali ed immaginarie, otteniamo le relazioni di Kramers-Kronig:

$$\begin{cases} \Im\chi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\Re\chi(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega'} \\ \Re\chi(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\Im\chi(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega'} \end{cases} \quad (1.39)$$

Quando una delle due parti di $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ è conosciuta su di un intervallo di frequenze significativo, l'altra può essere determinata utilizzando le (1.39) (che costituiscono delle trasformate di Hilbert).

Se ora sviluppiamo il termine $1/(\omega - \omega')$ nella seconda delle (1.39) in serie di $\frac{\omega'}{\omega}$, e cioè guardando l'espansione a grandi frequenze della $\Re e \chi$, si ottiene:

$$\Re e \chi(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\Im m \chi(\mathbf{k}, \omega')}{\omega} \sum_n \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^n \equiv \sum_n \frac{M_n(\mathbf{k})}{\omega^{n+1}}. \quad (1.40)$$

Gli M_n sono detti *momenti spettrali* e sono dati da:

$$M_n(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \omega^n \Im m \chi(\mathbf{k}, \omega). \quad (1.41)$$

Dal momento che $\Im m \chi(\mathbf{k}, \omega)$ è una funzione dispari di ω (fatto dimostrato nel paragrafo seguente), i momenti spettrali di ordine pari sono nulli; inoltre si dimostra che per il gas di elettroni i momenti di ordine superiore al terzo divergono, e dunque l'espansione in potenze di ω^{-1} è applicabile solo fino a $n = 4$:

$$\Re e \chi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{M_1(\mathbf{k})}{\omega^2} + \frac{M_3(\mathbf{k})}{\omega^4} + \mathcal{O}(\omega^{-6}) \quad (1.42)$$

In particolare si ha che

$$M_1(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \omega \Im m \chi(\mathbf{k}, \omega) = -2i \left. \frac{\partial \tilde{\chi}(\mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = -\langle [[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}_{\mathbf{k}}], \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger] \rangle = \frac{nk^2}{2m}. \quad (1.43)$$

Questa espressione è analoga alla *f-sum rule* in fisica atomica: il primo momento spettrale conta il numero di particelle che possono prendere parte nel processo di eccitazione. Da ciò concludiamo che la risposta del liquido elettronico si riduce ad alte frequenze a quella del gas di particelle non-interagenti.

Teorema di fluttuazione e dissipazione

Mostriamo ora che $\Im m \chi(\mathbf{k}, \omega)$ fornisce lo spettro di dissipazione di potenza causata da un potenziale esterno sul sistema. Scrivendo $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = (V_{\text{ext}}(\mathbf{k}, \omega) \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] + \text{c.c.})$, la forza applicata è data da $F(\mathbf{r}, t) = (-i\mathbf{k} V_{\text{ext}}(\mathbf{k}, \omega) \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] + \text{c.c.})$.

Sia poi $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = (\mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega) \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] + \text{c.c.})$ la densità di corrente indotta. L'equazione di continuità in trasformata ci dà $\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega) = \omega \delta \rho(\mathbf{k}, \omega) = \omega \chi(\mathbf{k}, \omega) e V_{\text{ext}}(\mathbf{k}, \omega)$. La potenza media dissipata su un periodo della forza esterna è allora

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}, \omega) &= (2\pi/\omega)^{-1} \int_0^{2\pi/\omega} dt \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \\ &= i\omega [\chi(\mathbf{k}, \omega) - \chi^*(\mathbf{k}, \omega)] |V_{\text{ext}}(\mathbf{k}, \omega)|^2 = -2\omega \Im m \chi(\mathbf{k}, \omega) |V_{\text{ext}}(\mathbf{k}, \omega)|^2. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Da qui deduciamo che deve valere la disuguaglianza $\omega \Im m(\mathbf{k}, \omega) \leq 0$, dato che la potenza media dissipata non può essere negativa in uno stato di equilibrio stabile. Abbiamo così dimostrato che $\Im m(\mathbf{k}, \omega)$ è una funzione dispari di ω .

Sia ora $\{\Phi^n\}$ un insieme completo di autostati dell'operatore $\hat{\mathcal{H}}$; è immediato allora, usando le definizioni (1.34) e (1.35), riscrivere $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ in rappresentazione spettrale a $T = 0$:

$$\chi(\mathbf{k}, \omega) = (V_D^{-1}) \sum_n |\langle \Phi^n | \hat{\rho}_{\mathbf{k}} | \Phi^0 \rangle|^2 \left[\frac{1}{\omega - (\omega_n - \omega_0) + i\eta} - \frac{1}{\omega + (\omega_n - \omega_0) - i\eta} \right]. \quad (1.45)$$

Sapendo che $1/(x \pm i\eta) = \mathcal{P}(1/x) \mp i\pi\delta(\omega)$ si ottiene la parte immaginaria della funzione di risposta (si pone $\omega_{n0} \equiv \omega_n - \omega_0$, con ω_n e ω_0 energia dello stato $|\Phi^n\rangle$ e $|\Phi^0\rangle$ rispettivamente):

$$\Im\chi(\mathbf{k}, \omega) = \pi(V_D^{-1}) \sum_n |\langle \Phi^n | \hat{\rho}_{\mathbf{k}} | \Phi^0 \rangle|^2 [\delta(\omega - \omega_{n0}) - \delta(\omega + \omega_{n0})]. \quad (1.46)$$

Il *fattore di struttura dinamico* $S(\mathbf{k}, \omega)$ è definito come la trasformata di Fourier della funzione di correlazione $(1/n)\langle \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) \hat{\rho}(\mathbf{0}, 0) \rangle$, e in rappresentazione spettrale si scrive:

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_n |\langle \Phi^n | \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger | \Phi^0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \quad (1.47)$$

Confrontando le ultime due equazioni, e usando $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^\dagger = \hat{\rho}_{-\mathbf{k}}$, ricaviamo l'importante relazione

$$\Im\chi(\mathbf{k}, \omega) = -\pi n [S(\mathbf{k}, \omega) - S(-\mathbf{k}, -\omega)] \quad (1.48)$$

(da qui si ha un'altra riprova per sistemi con simmetria di inversione del fatto che $\Im\chi(\mathbf{k}, \omega)$ è una funzione dispari di ω). La relazione appena trovata è la forma del teorema di fluttuazione e dissipazione relativa al caso di fluttuazioni di densità: $S(\mathbf{k}, \omega)$ fornisce lo spettro delle correlazioni spazio-temporali tra *fluttuazioni* spontanee di densità, mentre $\Im\chi(\mathbf{k}, \omega)$ descrive lo spettro di potenza che può essere *dissipata* nel sistema a causa di perturbazioni esterne accoppiate alla densità. Lo spettro di dissipazione è determinato direttamente dalle correlazioni delle fluttuazioni nel fluido all'equilibrio. Perciò, da esperimenti di diffusione (che danno il fattore di struttura) si può risalire alla parte immaginaria della funzione di risposta, e da questa, tramite le relazioni di Kramers-Kronig, alla sua parte reale.

1.2.2 Funzione di risposta risolta nello spin

Passiamo ora alla risposta degli spin ad un campo magnetico dipendente dalla posizione e dal tempo $\mathbf{b}(\mathbf{r}, t)$. L'unico accoppiamento possibile per il campo magnetico è quello con l'operatore densità di spin $\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{r})$, che può essere scritto come $\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{s}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ per un insieme di elettroni con spin \mathbf{s}_i situati nei punti \mathbf{r}_i . Le componenti di $\hat{\mathbf{s}}$ sono descritte per ogni elettrone dalle usuali matrici di Pauli (in una rappresentazione dove σ_z è diagonale e gli operatori $\sigma_\pm \equiv (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ invertono lo spin); ovvero si ha

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.49)$$

La suscettività di spin è un tensore $\chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega)$, dato (in trasformata di Fourier) dalle correlazioni tra $\hat{\sigma}_i(\mathbf{r}, t)$ e $\hat{\sigma}_j(\mathbf{r}', t')$. Nel caso di un fluido omogeneo ed isotropo, le componenti rilevanti di tale tensore sono:

- (a) la componente longitudinale $\chi_{zz}(\mathbf{q}, \omega)$ che lega la magnetizzazione di spin indotta al campo magnetico applicato;
- (b) le componenti trasverse $\chi_{\mp\pm}(\mathbf{q}, \omega)$ che descrivono i processi di spin-flip tramite le correlazioni tra $\hat{\sigma}_-(\mathbf{r}, t)$ e $\hat{\sigma}_+(\mathbf{r}', t')$. In uno stato paramagnetico si ha che $\chi_{\mp\pm} = \frac{1}{2}\chi_{zz}$, dal momento che in tal caso i tre assi cartesiani sono equivalenti.

Consideriamo qui [20] un liquido elettronico il cui stato fondamentale imperturbato è caratterizzato da una polarizzazione di spin netta $\zeta = (n_\uparrow - n_\downarrow)/n$: questa può venire indotta dalle interazioni (vedi Sez. 1.1.2) o essere dovuta a un campo costante $\mathcal{H}_1(t)$ che aggiunge un termine di tipo Zeeman all'Hamiltoniana di base dell'EL. Il sistema è soggetto a un'Hamiltoniana esterna di perturbazione $\mathcal{H}_1(t)$ che si scrive in termini degli operatori di campo $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ e $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ nella forma

$$\mathcal{H}_1(t) = \sum_\sigma \int d^D \mathbf{r} \left[W_\sigma(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) + W_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}) \right] \quad (1.50)$$

dove $\bar{\sigma}$ indica lo spin opposto a σ . In maniera generale includiamo in \mathcal{H}_1 sia un potenziale elettrico $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$ che un campo magnetico esterno $\mathbf{b}(\mathbf{r}, t)$, utilizzando la scrittura

$$\begin{cases} W_\sigma(\mathbf{r}, t) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) - \gamma \text{sgn}(\sigma) b_z(\mathbf{r}, t); \\ W_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}, t) = -\gamma b_+(\mathbf{r}, t) \\ W_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}, t) = -\gamma b_-(\mathbf{r}, t); \end{cases} \quad (1.51)$$

qui si è posto $b_\pm = b_x \pm i b_y$ e $\gamma = g\mu_B/2$ (g fattore di Landé e μ_B magnetone di Bohr). La teoria della risposta lineare fornisce le variazioni di densità delle due popolazioni di spin dovute al termine longitudinale W_σ secondo l'equazione

$$\delta\rho_\sigma(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma'} \int d^D \mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\infty} dt' K_{\sigma\sigma'}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, t - t') W_{\sigma'}(\mathbf{r}', t'), \quad (1.52)$$

mentre le variazioni di densità dovute ai processi di spin-flip sono date da

$$\delta\rho_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, t) = \int d^D \mathbf{r}' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \tilde{K}_{\sigma\bar{\sigma}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, t - t') W_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{r}', t'). \quad (1.53)$$

Nelle due equazioni si è posto ($\hbar = 1$)

$$\begin{cases} K_{\sigma\sigma'}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, t - t') = -i \Theta(t - t') \langle [\hat{\rho}_\sigma(\mathbf{r}, t), \hat{\rho}_{\sigma'}(\mathbf{r}', t')] \rangle \\ \tilde{K}_{\sigma\bar{\sigma}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, t - t') = -i \Theta(t - t') \langle [\hat{\rho}_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{r}, t), \hat{\rho}_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{r}', t')] \rangle, \end{cases} \quad (1.54)$$

con la notazione $\hat{\rho}_\sigma(\mathbf{r}) = \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ e $\hat{\rho}_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r})$.

In trasformata di Fourier, la risposta lineare del liquido elettronico consiste di quattro variazioni indotte di densità:

- la variazione di densità di carica $\delta\rho(\mathbf{q}, \omega)$;
- la variazione di magnetizzazione di spin longitudinale $\delta m_z(\mathbf{q}, \omega)$;
- le variazioni $\delta m_\pm(\mathbf{q}, \omega)$ nella magnetizzazione di spin dovuta ai processi di spin-flip.

Omettendo ora le variabili (\mathbf{q}, ω) , le variazioni indotte nella densità sono legate ai campi esterni da

$$\begin{pmatrix} \delta n \\ \delta m_z \\ \delta m_+ \\ \delta m_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{nn} & \chi_{nm} & 0 & 0 \\ \chi_{mn} & \chi_{mm} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \chi_m^+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \chi_m^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{\text{ext}} \\ b_z \\ b_+ \\ b_- \end{pmatrix}, \quad (1.55)$$

dove le suscettività sono combinazioni lineari delle trasformate di Fourier di quelle definite dall'Eq. (1.54). I valori asintotici a grandi impulsi dei fattori di campo locale che entrano in queste suscettività sono determinati dal valore di $g(0)$, come sarà mostrato nella sezione 1.2.7 (la definizione della funzione di distribuzione radiale $g(r)$ è data nella stessa sezione).

1.2.3 Suscettività di Lindhard a $T = 0$

Il calcolo della funzione di risposta densità-densità $\chi_{\rho\rho}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)$ per un gas omogeneo di elettroni non-interagenti può essere eseguito analiticamente per temperatura $T = 0$. Prima tuttavia scriveremo l'espressione per la χ in forma generica, partendo dalla formula (1.45) e utilizzando la rappresentazione in seconda quantizzazione di $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}$. La trattazione e parte della notazione sono prese dal libro di Giuliani e Vignale [1].

Riprendiamo quindi la formula di partenza, scritta in forma leggermente più generale, applicabile anche al caso $T \neq 0$, con le probabilità di occupazione P_n per lo stato $|\Phi^n\rangle$:

$$\chi(\mathbf{k}, \omega) = (V_D^{-1}) \sum_{n,m} |\langle \Phi^n | \hat{\rho}_{\mathbf{k}} | \Phi^m \rangle|^2 \frac{P_m - P_n}{\omega - (\omega_n - \omega_m) + i\eta}. \quad (1.56)$$

In seconda quantizzazione abbiamo che $\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}$, per cui i suoi elementi di matrice nella base di stati di singola particella labellati da (\mathbf{k}, σ) sono dati da $(\hat{\rho}_{\mathbf{q}})_{\mathbf{k}, \sigma; \mathbf{k}', \sigma'} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' - \mathbf{q}} \delta_{\sigma, \sigma'}$. Sostituendo nella Eq. (1.45) si ottiene:

$$\chi_{\rho\rho}^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \chi_0(q, \omega) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{n_{\mathbf{k}, \sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}}{\omega + e_{\mathbf{k}, \sigma} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} + i\eta}, \quad (1.57)$$

che è funzione di $q = |\mathbf{q}|$ soltanto. Gli $n_{\mathbf{k}, \sigma}$ sono i numeri di occupazione degli stati (\mathbf{k}, σ) , e corrispondentemente le $e_{\mathbf{k}, \sigma}$ sono le energie degli stati di singola particella che entrano nei determinanti di Slater con cui sono rappresentati $|\Phi^n\rangle$ e $|\Phi^m\rangle$. Abbiamo così ottenuto la funzione di risposta nota come *suscettività di Lindhard*, che da qui in avanti verrà indicata con $\chi_0(q, \omega)$. Esplicitamente si ha:

$$\begin{cases} \Re \chi_0(q, \omega) = \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{n_{\mathbf{k}, \sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}}{\omega + e_{\mathbf{k}, \sigma} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}}, \\ \Im \chi_0(q, \omega) = -\pi \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (n_{\mathbf{k}, \sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}) \delta(\omega + e_{\mathbf{k}, \sigma} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}) \end{cases}. \quad (1.58)$$

Ci dedichiamo ora al calcolo esplicito nel caso $T = 0$. Osserviamo che il risultato può essere scritto come somma di due termini, uno per orientazione di spin: $\chi_0(q, \omega) = \chi_{0,\uparrow}(q, \omega) + \chi_{0,\downarrow}(q, \omega)$; per cui sarà sufficiente focalizzarci sul calcolo della funzione di Lindhard risolta nello spin

$$\chi_{0,\sigma}(q, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}, \sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}}{(\omega + e_{\mathbf{k}, \sigma} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} + i\eta)}. \quad (1.59)$$

Notiamo ora che, con il cambio di variabili $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k} - \mathbf{q}$, l'Eq. (1.59) si scrive come somma sugli stati occupati:

$$\chi_{0,\sigma}(q, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}, \sigma}}{(\omega + e_{\mathbf{k}, \sigma} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} + i\eta)} + \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}, \sigma}}{(-\omega + e_{\mathbf{k}, \sigma} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} - i\eta)}, \quad (1.60)$$

dove il secondo addendo risulta essere uguale al primo se operiamo la sostituzione $\omega + i\eta$ in $-\omega - i\eta$. Se ora inseriamo l'espressione per le energie di elettroni liberi, otteniamo

$$\chi_{0,\sigma}(q, \omega) = \frac{m}{k_{F\sigma} q} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}, \sigma}}{\left(\frac{\omega}{qv_{F\sigma}} - \frac{q}{2k_{F\sigma}} - \frac{k}{k_{F\sigma}} \cos \theta + i\eta \right)} + (\omega + i\eta \rightarrow -\omega - i\eta), \quad (1.61)$$

dove θ è l'angolo tra \mathbf{k} e \mathbf{q} , $k_{F\sigma}$ è il numero d'onda di Fermi relativo allo spin σ , e $v_{F\sigma} = \frac{k_{F\sigma}}{m}$ è la corrispondente velocità di Fermi. Convertendo la somma sugli stati in integrali di variabili adimensionali, abbiamo l'espressione finale ($n_{\mathbf{k},\sigma} = \Theta(k_{F\sigma} - |\mathbf{k}|)$)

$$\chi_{0,\sigma}(q, \omega) = \frac{mk_{F\sigma}^{D-1}}{q(2\pi)^D} \int_0^1 dx x^{D-1} \int d\Omega_D \frac{1}{\left(\frac{\omega}{qv_{F\sigma}} - \frac{q}{2k_{F\sigma}} - x \cos \theta + i\eta\right)}, \quad (1.62)$$

dove si è posto $x = k/k_{F\sigma}$. A questo punto, per alleggerire la notazione, definiamo una funzione complessa $\Psi_D(z)$ di variabile complessa z nel seguente modo:

$$\Psi_D(z) \equiv \int_0^1 dx x^{D-1} \int \frac{d\Omega_D}{\Omega_D} \frac{1}{(z - x \cos \theta)} \quad (1.63)$$

Si noti che $\Psi_D(z)$ è una funzione antisimmetrica di z . Allora, in dimensionalità generica D , la suscettività di Lindhard spin-risolta è data da

$$\chi_{0,\sigma}(q, \omega) = N_\sigma(0) \frac{k_{F\sigma}}{q} \left[\Psi_D \left(\frac{\omega + i\eta}{qv_{F\sigma}} - \frac{q}{2k_{F\sigma}} \right) - \Psi_D \left(\frac{\omega + i\eta}{qv_{F\sigma}} + \frac{q}{2k_{F\sigma}} \right) \right], \quad (1.64)$$

dove $N_\sigma(0)$ è la densità di stati a spin σ sulla superficie di Fermi, per unità di volume:

$$N_\sigma(0) = \frac{Dn_\sigma}{2e_{F\sigma}} = \begin{cases} \frac{mk_{F\sigma}}{2\pi^2} & 3D, \\ \frac{m}{2\pi} & 2D, \\ \frac{m}{\pi k_{F\sigma}} & 1D. \end{cases} \quad (1.65)$$

Rimangono ora da valutare gli integrali doppi presenti nella Eq. (1.62), in tre, due e una dimensione. In tutti e tre i casi il calcolo può essere fatto analiticamente. Riportiamo qui di seguito i risultati, separati per parte reale e parte immaginaria, ed espressi in termini delle variabili adimensionali

$$\bar{q}_\sigma \equiv \frac{q}{k_{F\sigma}}; \quad \nu_{\pm\sigma} \equiv \frac{\omega}{qv_{F\sigma}} \pm \frac{q}{2k_{F\sigma}}.$$

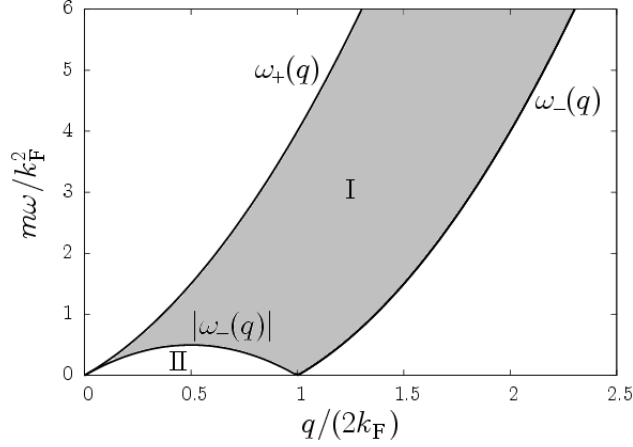


Figura 1.3: Il continuo elettrone-buca. La zona ombreggiata in figura, compresa tra le curve ω_- e ω_+ , rappresenta il dominio (q, ω) nel quale la parte immaginaria della χ_0 è diversa da zero. In 2D e 3D il continuo elettrone-buca è costituito dall'unione delle regioni I e II, mentre nel caso unidimensionale la regione II è assente. Nella regione I valgono le disuguaglianze $|\nu_-| < 1$, $|\nu_+| > 1$, mentre nella regione II si ha $|\nu_-| < 1$, $|\nu_+| < 1$.

Si ha dunque:

$$\frac{\Re \chi_{0\sigma}(q, \omega)}{N_\sigma(0)} = - \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{1 - \nu_{-\sigma}^2}{4\bar{q}_\sigma} \ln \left| \frac{\nu_{-\sigma} - 1}{\nu_{-\sigma} + 1} \right| - \frac{1 - \nu_{+\sigma}^2}{4\bar{q}_\sigma} \ln \left| \frac{\nu_{+\sigma} - 1}{\nu_{+\sigma} + 1} \right| & 3D, \\ 1 + \frac{1}{\bar{q}_\sigma} \left[\text{sgn}(\nu_{-\sigma}) \Theta(\nu_{-\sigma}^2 - 1) \sqrt{\nu_{-\sigma}^2 - 1} - \text{sgn}(\nu_{+\sigma}) \Theta(\nu_{+\sigma}^2 - 1) \sqrt{\nu_{+\sigma}^2 - 1} \right] & 2D, \\ \frac{1}{2\bar{q}_\sigma} \ln \left| \frac{\nu_{-\sigma} - 1}{\nu_{-\sigma} + 1} \right| - \frac{1}{2\bar{q}_\sigma} \ln \left| \frac{\nu_{+\sigma} - 1}{\nu_{+\sigma} + 1} \right| & 1D, \end{cases} \quad (1.66)$$

$$\frac{\Im \chi_{0\sigma}(q, \omega)}{N_\sigma(0)} = - \begin{cases} \frac{\pi}{4\bar{q}_\sigma} \left[(1 - \nu_{-\sigma}^2) \Theta(1 - \nu_{-\sigma}^2) - (1 - \nu_{+\sigma}^2) \Theta(1 - \nu_{+\sigma}^2) \right] & 3D, \\ \frac{1}{\bar{q}_\sigma} \left[\Theta(1 - \nu_{-\sigma}^2) \sqrt{1 - \nu_{-\sigma}^2} - \Theta(1 - \nu_{+\sigma}^2) \sqrt{1 - \nu_{+\sigma}^2} \right] & 2D, \\ \frac{\pi}{2\bar{q}_\sigma} \left[\Theta(1 - \nu_{-\sigma}^2) - \Theta(1 - \nu_{+\sigma}^2) \right] & 1D. \end{cases} \quad (1.66b)$$

Le regioni del piano (q, ω) nelle quali $|\nu_{-\sigma}|$ e $|\nu_{+\sigma}|$ sono minori o maggiori di 1 sono mostrate in Fig. 1.3.

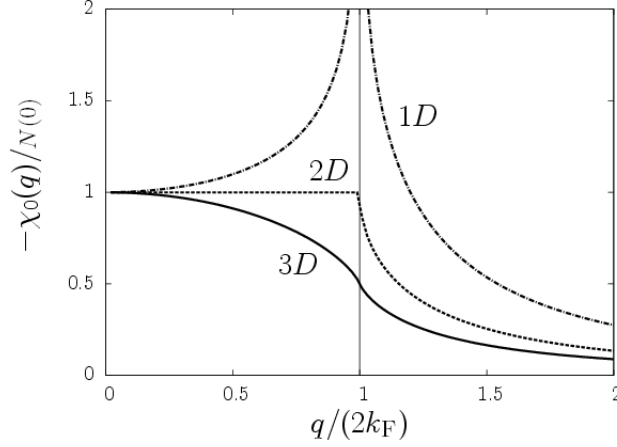


Figura 1.4: Comportamento della funzione $\chi_0(q, 0) = \sum_{\sigma} \chi_{0\sigma}(q, 0)$, come ottenuto dalle formule (1.68) per il caso paramagnetico, in dimensionalità $D = 1, 2, 3$.

Il limite statico

Discutiamo ora il caso particolare della suscettività di Lindhard statica $\chi_{0\sigma}(q, 0)$. Nel limite in questione di $\omega = 0$ la funzione di Lindhard è puramente reale ed è data da

$$\chi_{0\sigma}(q, 0) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k},\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}}{e_{\mathbf{k},\sigma} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}}. \quad (1.67)$$

Si noti che la prescrizione di parte principale, apparentemente richiesta per via dell'infinitesimo η presente nell'espressione per $\chi_{0\sigma}(q, \omega)$, qui non è necessaria perchè il denominatore della (1.67) può annullarsi solo simultaneamente al numeratore. A $T = 0$ la suscettività di Lindhard statica può essere ottenuta analiticamente valutando direttamente la (1.67), oppure dedotta prendendo il limite $\omega \rightarrow 0$ nella (1.66). La risultante funzione è plottata in Fig. 1.4, ed ha l'espressione

$$\frac{\chi_{0\sigma}(q, 0)}{N_{\sigma}(0)} = - \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{\bar{q}_{\sigma}^2 - 4}{8\bar{q}_{\sigma}} \ln \left| \frac{\bar{q}_{\sigma} - 2}{\bar{q}_{\sigma} + 2} \right| & 3D, \\ 1 - \Theta(\bar{q}_{\sigma} - 2) \frac{\sqrt{\bar{q}_{\sigma}^2 - 4}}{\bar{q}_{\sigma}} & 2D, \\ \frac{1}{\bar{q}_{\sigma}} \ln \left| \frac{\bar{q}_{\sigma} + 2}{\bar{q}_{\sigma} - 2} \right| & 1D, \end{cases} \quad (1.68)$$

dove si è posto ancora una volta $\bar{q}_{\sigma} = q/k_{F\sigma}$. La funzione $\chi_{0\sigma}(q, 0)$ gode di notevoli proprietà. Notiamo prima di tutto che il limite di grandi lunghezze d'onda è facilmente valutabile e si ha:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_{0\sigma}(q, 0) = -N_{\sigma}(0). \quad (1.69)$$

Il fatto che $\lim_{q \rightarrow 0} \chi_{0\sigma}(q, 0)$ sia finito (vedi Fig. 1.4) e pari alla densità di stati al livello di Fermi, segue semplicemente dalla catena di uguaglianze

$$\lim_{q \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k},\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}}{e_{\mathbf{k},\sigma} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial n_{\mathbf{k},\sigma}}{\partial e_{\mathbf{k},\sigma}} \stackrel{(T=0)}{=} - \sum_{\mathbf{k}} \delta(e_{F\sigma} - e_{\mathbf{k},\sigma}) = -N_{\sigma}(0). \quad (1.70)$$

Vediamo così che il limite $q \rightarrow 0$ della funzione di Lindhard statica è una misura del numero di stati eccitati disponibili al sistema con energia di eccitazione nulla. Quindi tale limite sarà pari a 0 per sistemi che hanno un gap nello spettro di eccitazione.

Una seconda proprietà conseguenza delle formule (1.68) e chiaramente mostrata dalla Fig. 1.4 è il fatto che per $q = 2k_{F\sigma}$ la suscettività di Lindhard statica è singolare. Mentre in tre e due dimensioni la singolarità appare solo nell'derivata di $\chi_{0\sigma}(q, 0)$, in una dimensione la funzione stessa ha una divergenza logaritmica. Questo comportamento singolare è responsabile di molti importanti fenomeni, quali le *oscillazioni di Friedel* (discusse in seguito) e la cosiddetta *instabilità di Peierls* in una dimensione, che consiste nella formazione spontanea di onde di densità di vettore d'onda $2k_F$.

Il continuo elettrone-buca

Una delle caratteristiche più rilevanti della suscettività di Lindhard è la struttura della sua parte immaginaria, la quale è legata al fattore di struttura dinamico, come già ricordato. Per semplicità consideriamo qui un sistema non polarizzato nello spin.

A temperatura zero $\Im m\chi_0(q, \omega)$ è in generale data da

$$\Im m\chi_{0\sigma}(q, \omega) = -\pi \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\Theta(e_{\mathbf{k}, \sigma} - e_F) - \Theta(e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} - e_F)] \delta(\omega + e_{\mathbf{k}, \sigma} - e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}). \quad (1.71)$$

Per fissato q l'espressione (1.71) è diversa da zero solo in un intervallo di frequenze ben definito. Tale intervallo è determinato in ultimo dalla geometria della superficie di Fermi ed è direttamente legato alle possibili energie di eccitazione di coppie *elettrone-buca*, i.e. gli stati ottenuti dallo stato fondamentale del gas di elettroni non-interagenti promuovendo un elettrone da uno stato occupato di vettore d'onda \mathbf{k} (che rimane vuoto ed è indicato come buca) a uno di vettore d'onda $\mathbf{k} + \mathbf{q}$. La regione del piano (q, ω) nelle quali $\Im m\chi_0(q, \omega)$ differisce da zero è solitamente denominata *continuo elettrone-buca*. Grazie alle proprietà di simmetria della funzione di risposta, è sufficiente studiare il quadrante $q > 0, \omega > 0$. Come segue dai calcoli, c'è una differenza qualitativa tra la struttura del continuo elettrone-buca in sistemi tri- e bidimensionali rispetto alla stessa del caso unidimensionale. In tre e due dimensioni la regione in questione è determinata dalle disuguaglianze

$$\max\{0, \omega_-(q)\} \leq |\omega| \leq \omega_+(q) \quad 3D, 2D, \quad (1.72)$$

dove si è posto

$$\omega_{\pm}(q) = \frac{q^2}{2m} \pm qv_F. \quad (1.73)$$

Tale regione è rappresentata in Fig. 1.3, ed è data dall'unione delle due regioni indicate con I e II. I limiti inferiore e superiore per $|\omega|$ rappresentano l'energia di eccitazione elettrone-buca minima e massima rispettivamente, a fissato q . È evidente che, per $q \leq 2k_F$, l'energia di eccitazione minima è zero perchè è possibile spostare un elettrone da uno stato \mathbf{k} infinitesimamente sotto alla superficie di Fermi a uno stato $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ infinitesimamente sopra ad essa (Fig. 1.5, immagine di sinistra). D'altra parte, la massima energia di eccitazione è ottenuta quando un elettrone di vettore d'onda \mathbf{p} sulla superficie di Fermi è portato radialmente verso l'esterno con spostamento di modulo q : questo fornisce $\omega_+(q) = qv_F + \frac{q^2}{2m}$.

Per $q \geq 2k_F$, l'energia di eccitazione minima ha invece valore finito, perchè non è più possibile rimanere sulla superficie di Fermi spostandosi di \mathbf{q} . In questo caso il minimo nell'energia di

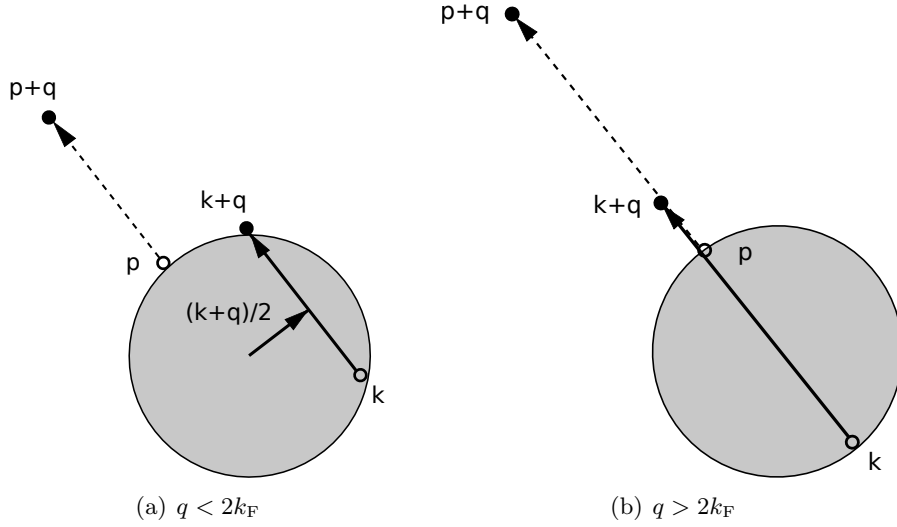


Figura 1.5: Coppie elettrone-buca di energia minima ($\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}$ - linea continua) e di energia massima ($\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \mathbf{q}$ - linea tratteggiata) per un dato vettore d'onda \mathbf{q} . Si noti che per eccitazioni di energia nulla la somma del vettore d'onda iniziale e di quello finale, cioè $2(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2})$, è ortogonale a \mathbf{q} .

eccitazione si ottiene quando un elettrone sulla superficie di Fermi è spostato radialmente per una quantità q verso l'interno della sfera di Fermi, finendo però in uno stato fuori da essa (vedi Fig. 1.5, immagine di destra): questa operazione ci dà $\omega_-(q) = \frac{q^2}{2m} - qv_F$.

Si noti che nella regione $|\omega_-(q)| \leq |\omega| \leq \omega_+(q)$ (indicata come I in Fig. 1.3) si ha che $|\nu_{-\sigma}| < 1$ e $|\nu_{+\sigma}| < 1$, e quindi entrambi gli addendi presenti nelle espressioni (1.66b) contribuiscono alla parte immaginaria della χ_0 , mentre nella regione $0 \leq |\omega| \leq |\omega_-(q)|$ (indicata con II) si ha $|\nu_{-\sigma}| < 1$ e $|\nu_{+\sigma}| > 1$, cosicchè solo il primo termine di $\Im m \chi_0$ contribuisce.

I dettagli del comportamento di $\Im m \chi_0$ dipendono dalla dimensionalità. In 3D, per $q \leq 2k_F$ vediamo dall'Eq. (1.66b) che $\Im m \chi_{0\sigma}(q, \omega)$ nella zona $0 \leq |\omega| \leq |\omega_-(q)|$ (regione II) è una funzione *lineare* della frequenza

$$\Im m \chi_{0\sigma}(q, \omega) = -\frac{\pi}{2} N_\sigma(0) \frac{\omega}{qv_{F\sigma}} \quad 3D, \quad (1.74)$$

mentre poi diventa un arco di parabola per $|\omega_-(q)| \leq |\omega| \leq \omega_+(q)$ (regione I). Per $q > 2k_F$ invece solo la parabola è presente.

In due dimensioni la situazione è solo leggermente diversa, e l'espansione a basse frequenze della $\Im m \chi_0(q, \omega)$ nella regione II, per $\omega \ll |\omega_-(q)|$ risulta essere

$$\Im m \chi_{0\sigma}(q, \omega) \simeq -\frac{N_\sigma(0)}{\sqrt{1 - \left(\frac{q}{2k_{F\sigma}}\right)^2}} \frac{\omega}{qv_{F\sigma}} \quad 2D. \quad (1.75)$$

Nella parte immaginaria della $\chi_0(q, \omega)$, presa come funzione di ω , sono presenti dei bruschi cutoff, intimamente legati ai rapidi cambi di comportamento nella parte reale della stessa funzione: a piccoli vettori d'onda $\Re e \chi_0(q, \omega)$ cambia segno da negativo a positivo, quando ω attraversa il continuo elettrone-buca e passa dalla zona II alla zona I.

In una dimensione, la struttura del continuo elettrone-buca è differente. Poichè la superficie di Fermi in questo caso consiste dei due soli punti $\pm k_F$, le uniche eccitazioni di energia nulla sono quelle a vettore d'onda 0 e $2k_F$. Quindi le disuguaglianze che determinano il continuo elettrone-buca diventano:

$$|\omega_-(q)| \leq |\omega| \leq \omega_+(q) \quad 1D. \quad (1.76)$$

Questo significa che in una dimensione il continuo elettrone-buca è costituito solamente dalla regione I nella figura 1.3: la regione II è assente. Inoltre, nella regione I, $\Im m \chi_0(q, \omega)$ è indipendente dalla frequenza ed è data da

$$\Im m \chi_0(q, \omega) = -\frac{m}{q} \text{sgn} \omega. \quad (1.77)$$

La singolarità a piccoli q e ω

L'esistenza di eccitazioni di bassa energia attraverso la superficie di Fermi rende la suscettività di Lindhard una funzione singolare delle sue variabili nella regione chiave in cui entrambe le variabili sono piccole. La presenza di una singolarità matematica si deduce dal fatto che il limite di $\chi_{0\sigma}(q, \omega)$ per $q \rightarrow 0$ e $\omega \rightarrow 0$ dipende dal valore del rapporto $\nu = \frac{\omega}{qv_{F\sigma}}$, e cioè dalla direzione del piano (q, ω) lungo la quale ci si avvicina all'origine: diversi valori di ν danno diversi limiti per la χ_0 .

Per esempio, se ci si muove lungo l'asse q a $\omega = 0$ (avendo quindi $\nu = 0$), si sta eseguendo il cosiddetto *limite statico* e, come già discusso in precedenza, la funzione di Lindhard tende a un limite finito - l'opposto della densità di stati totale al livello di Fermi.

Se invece l'origine è raggiunta lungo l'asse ω a $q = 0$, cioè a $\nu = \infty$, ci si trova nel caso del *limite dinamico di grandi lunghezze d'onda* e si può mostrare che la suscettività di Lindhard ha la forma limite

$$\chi_{0\sigma}(q, \omega) \stackrel{q \rightarrow 0}{\approx} \frac{n_\sigma q^2}{m\omega^2}. \quad (1.78)$$

Da un punto di vista fisico, la profonda differenza tra il limite statico e quello dinamico (limite finito nel primo caso, nullo nell'altro) è dovuta alla presenza di eccitazioni elettrone-buca di bassa energia che sono in grado di "seguire" il potenziale esterno nel caso statico, ma non in quello dinamico. Infatti, per poter seguire l'evoluzione di un potenziale con vettore d'onda q e frequenza ω , un'eccitazione deve poter viaggiare con una velocità superiore a ω/q ; per coppie elettrone-buca, questo è possibile solo quando $\omega/q < v_F$.

In generale, la dipendenza da ν del limite $q \rightarrow 0$ della suscettività di Lindhard è dato da

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_{0\sigma}(q, \omega = q\nu v_{F\sigma}) = -N_\sigma(0) \Psi'_D(\nu + i\eta), \quad (1.79)$$

dove $\Psi'_D(z)$ è la derivata della funzione $\Psi_D(z)$ rispetto alla variabile complessa z . Riportiamo qui

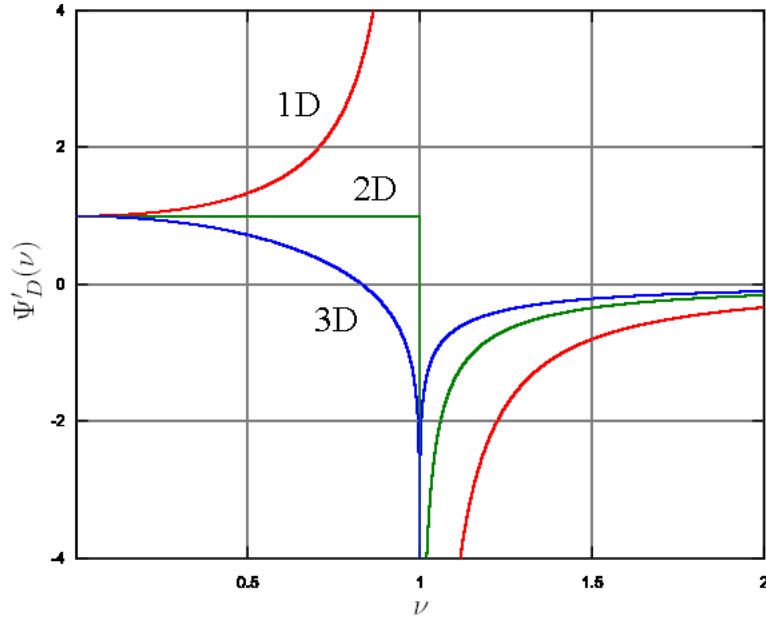


Figura 1.6: Plot della parte reale della funzione $\Psi'_D(\nu)$, che determina l'andamento della funzione di risposta non-interagente a grandi lunghezze d'onda. Si osservi il comportamento singolare per $\nu \rightarrow 1$ in tutte le dimensionalità.

di seguito le espressioni per le funzioni $\Psi'_D(z)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi'_3(z) = 1 + \frac{z}{2} \ln \frac{z-1}{z+1} \\ \Psi'_2(z) = 1 - \operatorname{sgn}(\Re z) \frac{z}{\sqrt{z^2-1}} \\ \Psi'_1(z) = \frac{1}{1-z^2}. \end{array} \right. \quad (1.80)$$

Si noti il comportamento singolare di tutte le funzioni per $z \rightarrow \pm 1$. La conoscenza dell'appropriato comportamento limite della funzione di Lindhard è cruciale nell'analisi dello spettro di eccitazione di sistemi che ammettono diversi tipi di eccitazioni collettive. Questa è una situazione in cui ν rimane finito per $q \rightarrow 0$ e quindi va prestata particolare attenzione al calcolo.

1.2.4 Suscettività di Lindhard a $T \neq 0$

A temperatura finita la suscettività di Lindhard è ancora data dalla Eq. (1.57), ma i numeri di occupazione $n_{\mathbf{k}\sigma}$ sono forniti ora dalla distribuzione di Fermi-Dirac a temperatura finita:

$$n_{\mathbf{k}\sigma}(T) = \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{k}\sigma} - \mu_\sigma)} + 1}, \quad (1.81)$$

dove si è indicato, come solito, $\beta = 1/(k_B T)$. I potenziali chimici sono determinati in maniera implicita dalla condizione $V_D^{-1} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma}(T) = n_\sigma$ che richiede la conservazione del numero totale di particelle con spin σ , e sono quindi funzioni della temperatura T , motivo per cui verranno indicati

con $\mu_\sigma(T)$ nel resto della sezione.

Diversamente dal caso di $T = 0$, la funzione di Lindhard a temperatura finita non è esprimibile interamente in termini di funzioni elementari, ma si riconduce tipicamente alla valutazione numerica di integrali unidimensionali. Utilizzando l'identità

$$\frac{1}{e^x + 1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Theta(y - x)}{4 \cosh^2(y/2)} dy \quad (1.82)$$

è possibile esprimere la χ_0 di temperatura finita come un integrale della χ_0 di $T = 0$ sui valori dell'energia di Fermi:

$$\chi_{0\sigma}(q, \omega, T) = \int_0^\infty \frac{[\chi_{0\sigma}(q, \omega, T = 0)]_{e_F=E}}{4k_B T \cosh^2\left(\frac{E - \mu_\sigma(T)}{2k_B T}\right)} dE \quad (1.83)$$

Si ha poi che in alcuni casi particolari il calcolo può essere eseguito analiticamente e conduce a espressioni in forma chiusa. Facendo uso della stessa notazione della sezione precedente, e introducendo la funzione

$$F_\sigma(x, T) = \frac{x}{e^{\beta[x^2 e_{F\sigma} - \mu_\sigma(T)]} + 1}, \quad (1.84)$$

possiamo scrivere i risultati per la $\chi_{0\sigma}(q, \omega, T)$ nella seguente forma:

$$\frac{\Re \chi_{0\sigma}(q, \omega)}{N_\sigma(0)} = - \int_0^\infty dx \frac{F_\sigma(x, T)}{\bar{q}_\sigma} \times \begin{cases} \frac{1}{2} \left(\ln \left| \frac{x - \nu_{-\sigma}}{x + \nu_{-\sigma}} \right| - \ln \left| \frac{x - \nu_{+\sigma}}{x + \nu_{+\sigma}} \right| \right) & \text{3D,} \\ \frac{(\nu_{-\sigma})}{|\nu_{-\sigma}|} \frac{\Theta(|\nu_{-\sigma}| - x)}{\sqrt{\nu_{-\sigma}^2 - x^2}} - \frac{(\nu_{+\sigma})}{|\nu_{+\sigma}|} \frac{\Theta(|\nu_{+\sigma}| - x)}{\sqrt{\nu_{+\sigma}^2 - x^2}} & \text{2D,} \\ \frac{1}{x} \left(\frac{\nu_{+\sigma}}{\nu_{+\sigma}^2 - x^2} - \frac{\nu_{-\sigma}}{\nu_{-\sigma}^2 - x^2} \right) & \text{1D,} \end{cases} \quad (1.85)$$

$$\frac{\Im \chi_{0\sigma}(q, \omega)}{N_\sigma(0)} = -\pi \begin{cases} \frac{\omega}{qv_{F\sigma}} + \frac{k_B T}{qv_{F\sigma}} \ln \frac{1 + e^{\beta[\nu_{-\sigma}^2 e_{F\sigma} - \mu_\sigma(T)]}}{1 + e^{\beta[\nu_{+\sigma}^2 e_{F\sigma} - \mu_\sigma(T)]}} & \text{3D,} \\ 2 \int_0^\infty dx \frac{F_\sigma(x, T)}{\bar{q}_\sigma} \left(\frac{\Theta(x - |\nu_{+\sigma}|)}{\sqrt{x^2 - \nu_{+\sigma}^2}} - \frac{\Theta(x - |\nu_{-\sigma}|)}{\sqrt{x^2 - \nu_{-\sigma}^2}} \right) & \text{2D,} \\ \frac{1}{2\bar{q}_\sigma} \left(\frac{1}{e^{\beta[\nu_{-\sigma}^2 e_{F\sigma} - \mu_\sigma(T)]} + 1} - \frac{1}{e^{\beta[\nu_{+\sigma}^2 e_{F\sigma} - \mu_\sigma(T)]} + 1} \right) & \text{1D.} \end{cases} \quad (1.86)$$

1.2.5 Fenomeni di trasporto e relazioni di Kubo

Consideriamo un potenziale esterno dato da $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \exp(\eta t)$ per $t \leq 0$ (con $\eta = 0^+$) e invece uguale a zero per $t > 0$: in altre parole, il potenziale è portato in maniera infinitamente lenta al valore $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ a $t = 0$, istante in cui viene improvvisamente eliminato. La variazione di densità indotta a $t = 0$ è

$$\begin{aligned} \delta\rho(\mathbf{k}, 0) &= 2i \int_{-\infty}^0 dt \tilde{\chi}(\mathbf{k}, -t) V_{\text{ext}}(\mathbf{k}) \exp(\eta t) \\ &= \frac{iV_{\text{ext}}(\mathbf{k})}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\Im m \chi(\mathbf{k}, \omega)}{i\omega + \eta} = \chi(\mathbf{k}) V_{\text{ext}}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (1.87)$$

dove $\tilde{\chi}(\mathbf{k}, t)$ è definita nella (1.36) e $\chi(\mathbf{k}) = \chi(\mathbf{k}, \omega = 0)$ è la funzione di risposta statica. Partendo dal valore sopra indicato la densità evolve liberamente (senza potenziale esterno) per $t > 0$. Utilizzando la trasformata di Laplace, con $\Im m(z) > 0$, troviamo

$$\begin{aligned} \delta\tilde{\rho}(\mathbf{k}, z) &\equiv \int_0^{+\infty} dt \exp(izt) \delta\rho(\mathbf{k}, t) = 2i \int_0^{+\infty} dt \exp(izt) \int_{-\infty}^0 dt' \tilde{\chi}(\mathbf{k}, t - t') V_{\text{ext}}(\mathbf{k}) \exp(\eta t') \\ &= iV_{\text{ext}}(\mathbf{k}) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi z} \Im m \chi(\mathbf{k}, \omega) \left(\frac{1}{\omega} + \frac{1}{z - \omega} \right) = \frac{1}{iz} \left[\frac{\chi(\mathbf{k}, z)}{\chi(\mathbf{k})} - 1 \right] \delta\rho(\mathbf{k}, 0). \end{aligned} \quad (1.88)$$

Nell'ultimo passaggio è stato eliminato $V_{\text{ext}}(\mathbf{k})$ in favore del valore "iniziale" di densità $\delta\rho(\mathbf{k}, 0)$. Abbiamo dunque trovato un'espressione che ci permette di calcolare come una fluttuazione di densità evolve spontaneamente nel tempo a partire dal suo stato iniziale al tempo $t = 0$. Possiamo interpretare la funzione

$$\Phi(\mathbf{k}, z) \equiv \frac{\chi(\mathbf{k}, z) - \chi(\mathbf{k})}{z} \quad (1.89)$$

come una funzione di trasporto per le fluttuazioni di densità. Per esempio, $\Phi(\mathbf{k}, z)$ in un fluido atomico nel limite idrodinamico (grandi lunghezze d'onda e basse frequenze) descriverà la propagazione di onde sonore e le loro attenuazioni dovute alla viscosità e alla conducibilità termica. Le *relazioni di Kubo* esprimono i coefficienti di trasporto tramite correlazioni tra fluttuazioni idrodinamiche spontanee e sono ottenute con lo stesso tipo di ragionamento che abbiamo appena illustrato [21].

Si può mostrare che la funzione $\Phi(\mathbf{k}, z)$ nell'Eq. (1.89) è diversa da zero quando $\Im m(z) \neq 0$. Quindi, la funzione $\Gamma(\mathbf{k}, z) \equiv i\chi(\mathbf{k}, z)/\Phi(\mathbf{k}, z)$ è analitica nel piano delle frequenze complesse z al di fuori dell'asse reale e si annulla all'infinito. Essa dunque ammette una rappresentazione spettrale con relazioni del tipo Kramers-Kronig sull'asse reale delle frequenze [22]. Dopo aver incluso un possibile contributo statico, si arriva alla *relazione di dispersione*

$$\chi(\mathbf{k}) - \chi(\mathbf{k}, z) = \frac{z^2 \chi(\mathbf{k})}{z^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) + iz\gamma(\mathbf{k}, z)}. \quad (1.90)$$

La possibilità di avere modi collettivi del fluido come risonanze smorzate nella sua risposta in densità è evidente dalla forma del denominatore nell'Eq. (1.90).

La struttura della *funzione memoria* $\gamma(\mathbf{k}, z)$ può essere piuttosto complicata, a seconda del comportamento fisico che si vuole descrivere con questo formalismo. Ci sono forti evidenze, specialmente dallo studio di liquidi classici con simulazioni a computer, che essa contenga una componente a decrescenza rapida, proveniente dalle collisioni interparticella, e una componente lentamente decrescente, generata dall'accoppiamento con altri modi collettivi. Un'ulteriore discussione può essere trovata sul libro di Forster [22].

1.2.6 Funzione dielettrica e RPA

In questa sezione viene introdotta e studiata la *funzione dielettrica* $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ del liquido elettronico quantistico, partendo dall'analogia con il caso classico.

Il campo elettrico \mathbf{E} e il campo di spostamento \mathbf{D} obbediscono alle equazioni di Poisson:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) &= 4\pi e \rho_e(\mathbf{r}), \\ \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= 4\pi e [\rho_e(\mathbf{r}) + n - \rho(\mathbf{r})],\end{aligned}\quad (1.91)$$

dove ρ_e è la densità di carica esterna in unità di e , $\rho(\mathbf{r})$ e n sono rispettivamente la densità elettronica e la densità uniforme del substrato ionico neutralizzante. Una carica test sente un potenziale pari a

$$V_H(\mathbf{r}) = e \int d^D \mathbf{r}' \frac{\rho_e(\mathbf{r}') + n - \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (1.92)$$

che per ragioni storiche viene chiamato potenziale di Hartree. Passando in trasformata di Fourier, le (1.91) diventano:

$$\begin{aligned}i\mathbf{q} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{q}) &= 4\pi e \rho_e(\mathbf{q}), \\ i\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{q}) &= 4\pi e [\rho_e(\mathbf{q}) + n\delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}} - \rho(\mathbf{q})].\end{aligned}\quad (1.93)$$

La funzione di risposta dielettrica $\epsilon(\mathbf{q})$ è definita da

$$\epsilon(\mathbf{q}) = \lim_{\rho_e \rightarrow 0} \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{D}}{\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}} = \lim_{\rho_e \rightarrow 0} \frac{\rho_e(\mathbf{q})}{\rho_e(\mathbf{q}) - \rho(\mathbf{q})}. \quad (1.94)$$

Usando la relazione fra campo e potenziale corrispondente, riscriviamo la (1.94) come

$$\epsilon(\mathbf{q}) = \lim_{V_{\text{ext}} \rightarrow 0} \frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{V_H(\mathbf{q})}, \quad (1.95)$$

dove V_{ext} è il potenziale prodotto nel vuoto dalla carica ρ_e . La stessa derivazione può essere fatta per perturbazioni dipendenti dal tempo, e si ottiene in tal caso la *funzione dielettrica dinamica*:

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = \lim_{V_{\text{ext}} \rightarrow 0} \frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)}{V_H(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (1.96)$$

Nella teoria del liquido elettronico quantistico la (1.96) viene presa come definizione di funzione dielettrica, con V_H dato dalla (1.92). La funzione dielettrica è intimamente connessa con la funzione di risposta densità-densità del liquido elettronico stesso: se infatti assumiamo che la (1.96) sia valida anche per potenziali non infinitesimi e sapendo che $eV_H(\mathbf{q}, \omega) = eV_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) + v_{\mathbf{q}}\delta\rho(\mathbf{q}, \omega)$, si arriva a

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)}{V_H(\mathbf{q}, \omega)} = \frac{eV_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)}{eV_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) + v_{\mathbf{q}}\delta\rho(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (1.97)$$

Confrontando quest'ultima relazione con la definizione di polarizzabilità $\delta\rho(\mathbf{q}, \omega) = \chi(\mathbf{q}, \omega)eV_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)$, si ricava la fondamentale espressione

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} = 1 + v_{\mathbf{q}}\chi(\mathbf{q}, \omega), \quad (1.98)$$

che lega la funzione dielettrica alla polarizzabilità in densità del sistema. Da questa segue che:

(i) Una risonanza nella risposta in densità del liquido elettronico corrisponde a uno zero di $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$: nel limite $q \rightarrow 0$ tale risonanza è l'eccitazione plasmonica a frequenza $\omega_p = (nq^2 v_{\mathbf{q}}/m)^{1/2}$.

(ii) Più in generale, a $T = 0$, dalla (1.98) e da $S(\mathbf{q}, \omega) = -(\pi n)^{-1} \Im m \chi_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega) \Theta(\omega)$ si ottiene per il fattore di struttura dinamico la relazione

$$S(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi n v_{\mathbf{q}}} \Im m \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right] \Theta(\omega). \quad (1.99)$$

(iii) Il comportamento della funzione dielettrica statica $\epsilon(\mathbf{q}) \equiv \epsilon(\mathbf{q}, \omega = 0)$ è determinato a grandi lunghezze d'onda dalla termodinamica, che fornisce $\rho(\mathbf{r}) - n = -(\partial n / \partial \mu) V_{\text{H}}(\mathbf{r})$. Questa equazione è equivalente a

$$\lim_{q \rightarrow 0} \delta\rho(\mathbf{q}) v_{\mathbf{q}} = -\lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{1 + (\lambda v_{\mathbf{q}})^{-1}} \right], \quad (1.100)$$

dove abbiamo definito $\lambda = \partial n / \partial \mu$. Sapendo che $v_{\mathbf{q}}$ diverge nel limite indicato, concludiamo che l'Eq. (1.100) è equivalente alla legge di Faraday (*schermo perfetto*): all'ordine dominante in q , il potenziale della carica di polarizzazione indotta cancella il potenziale esterno, cosicché il campo elettrico totale è nullo nel bulk del fluido elettronico; questo implica $\chi_{\rho\rho}(\mathbf{q}) \rightarrow -1/v_{\mathbf{q}}$.

È appropriato a questo punto introdurre la *polarizzabilità propria* $\tilde{\chi}_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega)$, che è definita come la funzione di risposta del liquido elettronico al potenziale di Hartree:

$$\delta\rho(\mathbf{q}, \omega) = \tilde{\chi}_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega) V_{\text{H}}(\mathbf{q}, \omega) = \tilde{\chi}_{\rho\rho} [V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) + v_{\mathbf{q}} \delta\rho(\mathbf{q}, \omega)], \quad (1.101)$$

e quindi dall'Eq. (1.98) si hanno le relazioni equivalenti

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - v_{\mathbf{q}} \tilde{\chi}_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega); \quad \chi_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\tilde{\chi}_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega)}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (1.102)$$

All'ordine successivo in q , l'Eq. (1.100) ci dà la regola di somma della compressibilità:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \tilde{\chi}_{\rho\rho}(\mathbf{q}) = -n^2 K_T, \quad (1.103)$$

dove si è usata nuovamente la definizione di compressibilità $K_T = n^{-2}(\partial n / \partial \mu)$. Osserviamo che questa quantità non è necessariamente positiva in un plasma elettronico: lo schermo su una carica esterna può essere oscillatorio piuttosto che monotono decrescente con la distanza.

La Random Phase Approximation (RPA) consiste nel sostituire la polarizzabilità propria $\tilde{\chi}(\mathbf{q}, \omega)$ con la suscettività di Lindhard $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$: si assume cioè che un liquido di elettroni risponda al potenziale di Hartree come un gas ideale di elettroni non-interagenti:

$$\delta\rho(\mathbf{q}, \omega) = \chi_0(\mathbf{q}, \omega) V_{\text{H}}(\mathbf{q}, \omega). \quad (1.104)$$

Con tale approssimazione l'accoppiamento elettrone-elettrone è permesso solo attraverso l'interazione coulombiana classica con la densità di carica indotta. Sostituendo l'espressione per V_{H} qui sopra, si ottiene la forma della funzione di risposta RPA:

$$\chi_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - v_{\mathbf{q}} \chi_0(\mathbf{q}, \omega)}; \quad (1.105)$$

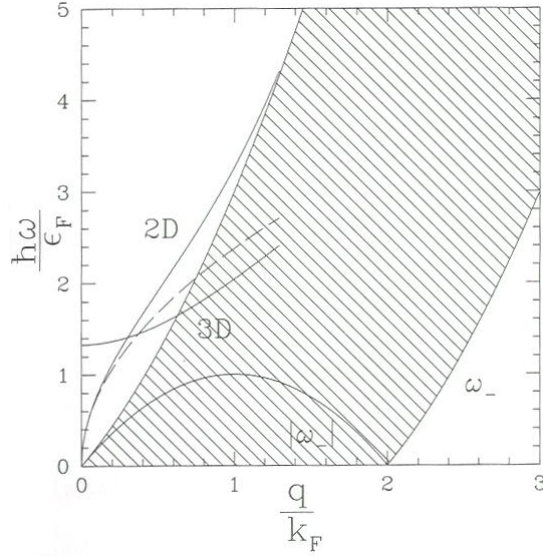


Figura 1.7: Spettro di eccitazione in RPA per $r_s = 2$. La regione ombreggiata è il continuo elettrone-buca, che ha la stessa forma del caso noninteragente. Le linee continue rappresentano la dispersione plasmonica esatta in 3D e 2D, mentre la linea tratteggiata raffigura il risultato 2D approssimato dato dalla seconda equazione delle (1.109).

il numeratore di questa espressione rende conto del continuo di eccitazioni elettrone-buca, unico meccanismo di eccitazione nel gas ideale, mentre il denominatore spiega il fenomeno di schermo e le eccitazioni di plasma, o in generale eccitazioni collettive la cui legge di dispersione è data dall'annullarsi del denominatore. La regola di somma plasmonica e il comportamento di schermo perfetto sono rispettati in maniera esatta, mentre la regola di somma della compressibilità coinvolge la compressibilità del gas ideale al posto di quella del liquido interagente (cioè la lunghezza di schermo ha il valore calcolato in approssimazione di Thomas-Fermi).

Riportiamo in Figura 1.7 lo spettro di eccitazione del liquido di elettroni in approssimazione RPA. Sia nel caso tridimensionale che nel caso bidimensionale lo spettro è costituito dal continuo di eccitazioni di singola particella, con forma invariata rispetto al gas ideale, e dall'eccitazione collettiva plasmonica. La maggiore differenza tra 2D e 3D è il comportamento della dispersione plasmonica a $k \rightarrow 0$: in 3D la frequenza limite è finita e pari alla frequenza di plasma ω_p , mentre in 2D la curva di dispersione va a zero come $k^{1/2}$.

Le proprietà dello schermo RPA sono le seguenti:

(a) *Eccitazione di plasma.* Nel limite di grandi lunghezze d'onda $q \rightarrow 0$ si ha che $\Im m \chi_0(\mathbf{q}, \omega) = 0$ e $\Re e \chi_0$ è dato da

$$\Re e \chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \left(\frac{nq^2}{m\omega^2} \right) \left[1 + a_D \frac{q^2 v_F^2}{\omega^2} \right], \quad (1.106)$$

dove $a_3 = 3/5$ per il caso tridimensionale e $a_2 = 3/4$ per quello bidimensionale. Sostituendo l'espressione appena trovata nell'equazione

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = 1 - v_{\mathbf{q}} \chi_0(\mathbf{q}, \omega) = 0, \quad (1.107)$$

che fornisce i poli della χ_{RPA} e quindi le eccitazioni del sistema, e risolvendo per ω fino ai termini

di ordine q^2 , otteniamo le seguenti espressioni per i plasmoni:

$$\Omega_p^2(q) \simeq \omega_p^2(q) + a_D q^2 v_F^2 + \dots, \quad (1.108)$$

dove $\omega_p(q)$ è data dalle (1.25). Possiamo riscrivere tale risultato utilizzando i vettori d'onda di schermo di Thomas-Fermi κ_D :

$$\Omega_p(q) \simeq \begin{cases} \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}} \left[1 + \frac{9}{10} \frac{q^2}{\kappa_3^2} + \dots \right] & 3D, \\ \sqrt{\frac{2\pi n e^2 q}{m}} \left[1 + \frac{3}{4} \frac{q}{\kappa_2} + \dots \right] & 2D, \end{cases} \quad (1.109)$$

dove $\kappa_3^2 = 3\omega_p^2/v_F^2$ e $\kappa_2 = 2/a_B$. Mentre i termini di ordine zero nelle espansioni date sono in accordo con i corrispondenti risultati ottenuti dalla trattazione classica, le correzioni successive per piccoli q sono di origine puramente quantistica.

Sia in tre che in due dimensioni il plasmone costituisce una soluzione non smorzata solo fino ad un vettore d'onda critico q_c , con $q_c \approx k_F$, valore per il quale la curva di dispersione plasmonica incontra il continuo elettrone-buca: oltre q_c si ha il cosiddetto *Landau damping*, poichè l'impulso e l'energia dell'eccitazione collettiva possono essere dissipati attraverso l'eccitazione di una coppia elettrone-buca. In realtà, si può mostrare tramite teorie più raffinate che lo smorzamento del modo collettivo inizia al di sotto di q_c , a causa del possibile decadimento in due o più coppie elettrone-buca. Si ha inoltre che, mentre in tre dimensioni per $q > q_c$ il modo plasmonico è altamente smorzato e in pratica cessa di esistere, in due dimensioni il plasmone tocca il bordo superiore del continuo elettrone-buca rimanendo ad esso parallelo, e solo poi cessa anch'esso di esistere.

Una limitazione dell'approssimazione RPA è che essa prevede una curva di dispersione per il plasmone sempre crescente, mentre è noto da esperimenti [26] e da altre teorie più avanzate (vedi sezione successiva) che esistono valori di q , sia in 3D che in 2D, per i quali la legge di dispersione è decrescente. Per ottenere informazioni anche qualitativamente più precise è dunque necessario andare oltre l'RPA per includere gli effetti di correlazione a corto raggio: la teoria RPA è una buona approssimazione solo su grandi distanze (piccoli q), dove tali effetti sono trascurabili.

(b) *Schermo statico*. Presentiamo ora una derivazione alternativa della funzione dielettrica RPA statica, che ne illustra il contenuto fisico lavorando direttamente nello spazio \mathbf{r} , e costituisce l'estensione microscopica della teoria di Thomas-Fermi esposta nella sezione 1.1.3. Il potenziale di Hartree creato a distanza r da una carica esterna e posta nell'origine deve essere calcolato in maniera auto-consistente a partire dall'equazione di Poisson $\nabla^2 V_H(\mathbf{r}) = -4\pi e[\delta(\mathbf{r}) - \delta\rho(\mathbf{r})]$, nella quale $\delta\rho(\mathbf{r})$ è la variazione indotta nella densità elettronica. La densità $\rho(\mathbf{r})$ può essere scritta come $\rho(\mathbf{r}) = 2 \sum_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2$, dove $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sono orbitali di singola particella, la somma su \mathbf{k} è ristretta agli orbitali occupati ($|\mathbf{k}| \leq k_F$) e il fattore 2 viene dalla somma sulle orientazioni di spin. Dobbiamo ora calcolare come in presenza della carica esterna variano gli stati $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ rispetto alle onde piane $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$: a tal scopo usiamo ($\hbar = 1$) l'equazione di Schrödinger $\nabla^2 \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + [k^2 - 2meV_H(\mathbf{r})]\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0$, avendo imposto che gli orbitali si riducano a onde piane di energia $k^2/(2m)$ a grandi distanze dalla carica esterna. Questo approccio (che porta al risultato RPA) è approssimato, in quanto come energia potenziale che entra nell'equazione di Schrödinger è stato scelto il potenziale di Hartree, trascurando in tal modo scambio e correlazione tra un elettrone entrante e la nuvola schermante di carica esterna.

Trasformando l'equazione di Schrödinger in un'equazione integrale per la $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, e prendendo in questa la soluzione perturbativa di ordine più basso, otteniamo una approssimazione per $\delta\rho(\mathbf{r})$, che

se inserita nell'equazione di Poisson permette di risolvere quest'ultima in trasformata di Fourier e ricavare $V_H(\mathbf{q}) = 4\pi e/[q^2\epsilon(q)]$, dove

$$\epsilon(q) = \epsilon_{\text{RPA}}(q) = 1 + \frac{2mk_{\text{F}}e^2}{\pi q^2} \left[1 + \frac{k_{\text{F}}}{q} \left(\frac{q^2}{4k_{\text{F}}^2} - 1 \right) \ln \left| \frac{q - 2k_{\text{F}}}{q + 2k_{\text{F}}} \right| \right]. \quad (1.110)$$

Questa è la funzione dielettrica statica in RPA. Per grandi lunghezze d'onda tale espressione fornisce

$$\epsilon_{\text{RPA}}(q) \xrightarrow{q \rightarrow 0} 1 + \frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{q^2}, \quad (1.111)$$

con $\kappa_{\text{TF}}^2 = 3\omega_p^2/v_{\text{F}}^2$, *i.e.* il risultato della teoria di Thomas-Fermi. Tuttavia, ϵ_{RPA} ha in più una singolarità in $q = \pm 2k_{\text{F}}$, dove la sua derivata diverge logaritmicamente: la discontinuità nella distribuzione degli impulsi in corrispondenza della superficie di Fermi produce una singolarità nei processi di scattering elastico con trasferimento di impulso pari a $\pm 2k_{\text{F}}$. Questa singolarità determina, tramite un'antitrasformata di Fourier, il comportamento di $V_H(\mathbf{r})$ a grandi r : $V_H(\mathbf{r})$ è una funzione oscillante piuttosto che monotona decrescente come nella teoria di Thomas-Fermi. Infatti,

$$V_H(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e}{q^2\epsilon(q)} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \frac{e}{i\pi r} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{e^{iqr}}{q\epsilon(q)}, \quad (1.112)$$

e l'integrando è non analitico a $q = \pm 2k_{\text{F}}$: si ha che $1/[q\epsilon(q)]_{q \rightarrow \pm 2k_{\text{F}}} \rightarrow -A[q \mp 2k_{\text{F}}] \ln |q \mp 2k_{\text{F}}| +$ termini regolari. Per cui si ricava:

$$\begin{aligned} V_H(\mathbf{r})|_{r \rightarrow +\infty} &= -\frac{Ae}{i\pi r} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \exp(iqr) \left[(q - 2k_{\text{F}}) \ln |q - 2k_{\text{F}}| + (q + 2k_{\text{F}}) \ln |q + 2k_{\text{F}}| \right] \\ &= -\frac{2Ae}{r^3} \cos(2k_{\text{F}}r), \end{aligned} \quad (1.113)$$

con $A = \kappa_{\text{TF}}^2/[4k_{\text{F}}^2(\kappa_{\text{TF}}^2 + 8k_{\text{F}}^2)]$. Le oscillazioni del potenziale di Hartree a grande distanza vengono chiamate *oscillazioni di Friedel* [23]. Il comportamento oscillatorio, essendo dovuto essenzialmente alla singolarità della funzione di risposta, è caratteristico dei fluidi elettronici sia tridimensionali che bidimensionali. Il risultato dell'Eq. (1.113) implica che l'interazione schermata ione-ione in un metallo ha carattere oscillatorio e si propaga per molti shell di siti vicini, come confermato sperimentalmente.

(c) *Dipendenza dello schermo statico dalla dimensionalità.* Consideriamo ora un sistema in cui gli elettroni sono costretti a muoversi lungo una linea. La superficie di Fermi si riduce a due punti situati a $k = \pm k_{\text{F}}$ e i processi di scattering elastico (con energia trasferita $\omega = 0$) possono avvenire solo a trasferimento di impulso $q = 0$ or $q = 2k_{\text{F}}$. Si apre una finestra di eccitazioni proibite nello spettro di scattering a basse energie: in 1D le eccitazioni aventi $\omega \leq |\omega_-(q)|$ nel range $0 \leq q \leq 2k_{\text{F}}$ sono proibite. Un calcolo completo fornisce (si veda la sezione 1.2.3)

$$\chi_0(q) = -\frac{2m}{\pi q} \ln \left| \frac{q + 2k_{\text{F}}}{q - 2k_{\text{F}}} \right|. \quad (1.114)$$

Le singolarità ai bordi del continuo elettrone-buca sono più marcate che in 3D e 2D, e la singolarità della risposta statica a $q = \pm 2k_{\text{F}}$ è una divergenza logaritmica nella $\chi_0(q)$ piuttosto che nella sua derivata. Questo comportamento dello schermo statico in 1D genera la *distorsione di Peierls* [24] in conduttori di bassa dimensionalità: *e.g.* un conduttore 1D monoatomico con banda di conduzione semi-piena guadagna energia elettronica attraverso una distorsione del reticolo, aprendo un gap al livello di Fermi attraverso la formazione di dimeri. La Fig. 1.4 illustra la dipendenza di $\chi_0(q)$ dalla dimensionalità.

1.2.7 Fattori di campo locale per effetti di scambio e correlazione

Come già osservato, la teoria RPA include le interazioni elettrone-elettrone nel calcolo della funzione dielettrica solo attraverso il contributo delle cariche di polarizzazione al potenziale di Hartree, e omette completamente gli effetti di scambio e correlazione nel potenziale efficace sentito da un elettrone, e ciò la rende non accurata a corte distanze. In questa sezione discuteremo di come migliorare l'RPA, prestando attenzione a due aspetti: (i) la relazione tra risposta del fluido reale e quella del gas ideale; (ii) la natura del campo di polarizzazione e della polarizzazione indotta. Il punto (i) conduce alla nozione di campo locale per effetti di scambio e correlazione, ed è cruciale nell'introduzione alla teoria del funzionale di densità, mentre il punto (ii) porta alla definizione di interazioni efficaci elettrone-elettrone (esprese anch'esse in termini di campi locali).

A livello microscopico, la struttura locale del liquido elettronico è complicata, rispetto a quella di un gas ideale, dagli effetti di scambio e correlazione che provocano uno svuotamento di carica attorno a ciascun elettrone. Questo effetto va sotto il nome di *buca di scambio* (o di Pauli) e *di correlazione* (o di Coulomb). La distorsione della buca dovuta alla presenza di un campo esterno contribuisce a determinare la risposta in densità del liquido elettronico: consideriamo un fluido di elettroni in un potenziale elettrico esterno; la densità locale di fluido polarizzabile attorno ad un elettrone è più bassa della densità media e quindi la buca di Pauli e Coulomb ha un ruolo diretto nel determinare il campo elettrico locale visto da un elettrone quando un potenziale esterno è applicato al sistema. Da queste considerazioni deduciamo che, in un potenziale esterno debole, il potenziale efficace visto da un elettrone medio consiste di tre termini: (1) il potenziale esterno $V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)$, (2) il potenziale $v_{\mathbf{q}}\delta\rho(\mathbf{q}, \omega)$ delle cariche di polarizzazione (che aggiunto a (1) costituisce il potenziale di Hartree), e (3) un ulteriore potenziale di "campo locale" associato alla struttura locale. Possiamo legare quest'ultimo contributo alla polarizzazione $\delta\rho(\mathbf{q}, \omega)$ scrivendolo come $-v_{\mathbf{q}}G(q, \omega)\delta\rho(\mathbf{q}, \omega)$, dove $G(q, \omega)$ è un "fattore di campo locale", che nel caso statico riceverà una definizione precisa nel contesto della teoria del funzionale densità. Inoltre, come sarà mostrato più avanti, sono necessari ulteriori fattori di campo locale per descrivere scambio e correlazione dinamici corrente-corrente e spin-risolti.

(a) *L'approssimazione Singwi-Tosi-Land-Sjölander (STLS)*. Dalla discussione fatta ci possiamo aspettare che $G(q, \omega)$ sia legato (in maniera ancora ignota) alla struttura locale dinamica (per ora anch'essa ignota). Nel lavoro di Singwi *et al.* [25] si è assunto che il liquido elettronico risponda al potenziale efficace locale come un gas ideale di Fermi:

$$\delta\rho(\mathbf{q}, \omega) = \chi_0(\mathbf{q}, \omega) [V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) + v_{\mathbf{q}}\delta\rho(\mathbf{q}, \omega) - v_{\mathbf{q}}G(q, \omega)\delta\rho(\mathbf{q}, \omega)] , \quad (1.115)$$

ovverosia la funzione di risposta diventa

$$\chi_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - v_{\mathbf{q}}[1 - G(q, \omega)]\chi_0(\mathbf{q}, \omega)} . \quad (1.116)$$

Invertendo tale relazione si ottiene:

$$G(q, \omega) = 1 + \frac{1}{v_{\mathbf{q}}} \left(\frac{1}{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)} - \frac{1}{\chi_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega)} \right) ; \quad (1.117)$$

ovviamente la (1.116) è solo una definizione, e può sembrare di utilità puramente formale, in quanto trasferisce il problema dal conoscere la funzione di risposta $\chi_{\rho\rho}$ al conoscere il fattore di campo locale G . Tuttavia il vantaggio di introdurre il fattore di campo locale sta proprio in questo, poichè $G(q, \omega)$

Tabella 1.1: Energia di correlazione (in Ry) di un liquido di elettroni 3D spolarizzato.

r_s	1	2	5	10	20
STLS	-0.124	-0.092	-0.056	-0.036	-0.022
QMC	-0.120	-0.090	-0.056	-0.037	-0.023

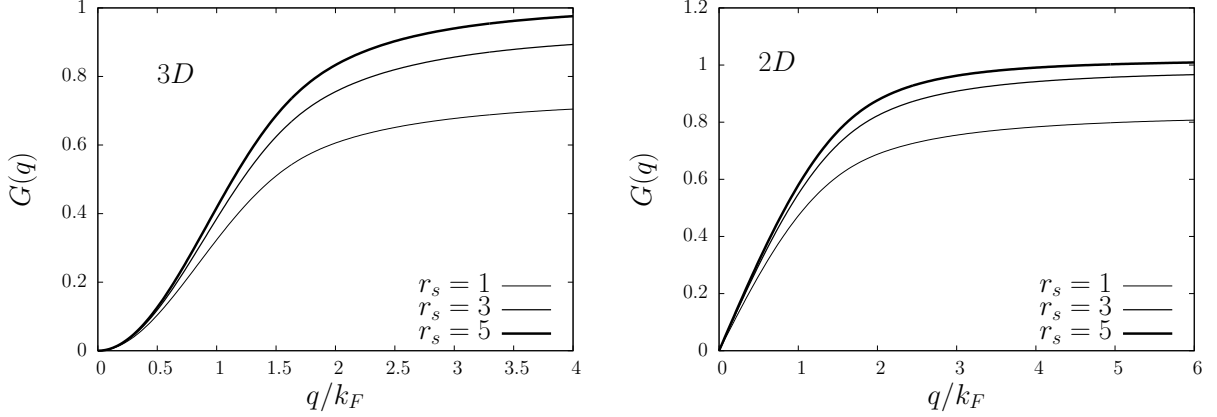


Figura 1.8: Il fattore di campo locale STLS $G(q)$ come funzione di q/k_F per un EL 3D (a sinistra) e per un EL 2D (a destra).

ha un preciso significato fisico e risulta quindi più facile dal punto di vista teorico crearne delle forme approssimate. Nel caso di potenziali efficaci spin-dipendenti si usa una notazione diversa per i fattori di campo locale: si indica con G_+ il fattore di campo locale definito dalla (1.116), mentre si definisce per il canale di spin il fattore G_- :

$$\chi_S(\mathbf{q}, \omega) = -\mu_B^2 \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{[1 + v_{\mathbf{q}} G_-(q, \omega) \chi_0(\mathbf{q}, \omega)]}, \quad (1.118)$$

dove $\chi_S(\mathbf{q}, \omega)$ è la funzione di risposta spin-spin del gas di elettroni paramagnetico e μ_B è il magnetone di Bohr. L'approccio STLS introduce due approssimazioni al fine di determinare il fattore di campo locale in maniera auto-consistente assieme alla struttura locale:

(i) la dipendenza di $G(q, \omega)$ dalla frequenza viene completamente ignorata, e (ii) $G(q)$ viene esplicitamente legato al fattore di struttura statico tramite

$$G(q) = -\frac{1}{n} \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}}{q^2} \frac{v_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{q}}} [S(|\mathbf{q} - \mathbf{k}|) - 1]. \quad (1.119)$$

Questa relazione approssimata è giustificata da un'analisi delle equazioni cinetiche per il plasma elettronico. Si assume in questa approssimazione che la forma della buca di scambio e correlazione non cambi in presenza di una debole perturbazione esterna. A questo punto, $\chi_{\rho\rho}(q, \omega)$ è un funzionale esplicito della struttura locale descritta da $S(q)$, e si può usare il teorema di fluttuazione-dissipazione dato nella Eq. (1.48), scrivendo

$$S(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} S(q, \omega) = -\frac{1}{n} \int_0^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} \Im \chi_{\rho\rho}(q, \omega), \quad (1.120)$$

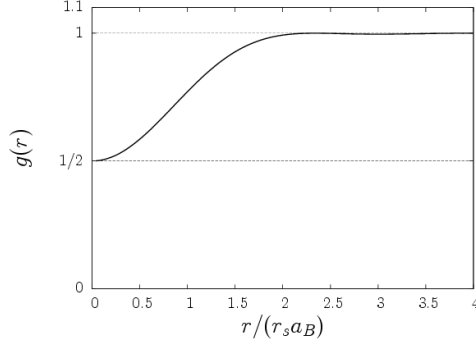


Figura 1.9: Andamento di $g(r)$ per un gas ideale di Fermi. Si ha che $g(0) = 1/2$, perchè $g_{\uparrow\downarrow}(0) = 1$ per la mancanza di correlazione tra elettroni a spin antiparallelo, e $g_{\uparrow\uparrow}(0) = 0$ per il principio di Pauli.

per determinare simultaneamente entrambi $G(q)$ e $S(q)$ secondo uno schema auto-consistente.

Come illustrazione dell'utilità dei fattori di campo locale riportiamo (i) in Tabella 1.1 i valori calcolati dell'energia di correlazione del liquido di elettroni (EL) 3D (in Rydberg), confrontati con i risultati di Ceperley and Alder da metodi QMC, e (ii) in Fig. 1.8 l'andamento dei fattori di campo locale STLS per l'EL sia in 3D che in 2D a diversi valori di r_s . Si noti che $G(q)$ si annulla come q^{D-1} per $q \rightarrow 0$, cosicchè il corretto comportamento RPA a grandi lunghezze d'onda è preservato (regola di somma plasmonica e schermo statico perfetto). Sottolineiamo inoltre che il coefficiente previsto per il termine q^2 nella relazione di dispersione plasmonica è sostanzialmente minore che nell'RPA e diventa negativo a r_s crescenti (come osservato successivamente in esperimenti di electron-energy-loss su metalli alcalini da Fink *et al.* [26]). Non diamo qui gli sviluppi ulteriori di questo approccio, sviluppi che hanno cercato principalmente di raggiungere l'auto-consistenza con la regola di somma della compressibilità e di tener conto di una dipendenza dalla frequenza del fattore di campo locale (si veda il lavoro sul liquido elettronico 2D di Neilson *et al.* [27]). Riassumiamo invece qui sotto gli studi teorici sulla cosiddetta funzione di distribuzione di coppia $g(r)$ dell'EL.

(b) *Struttura locale dell'EL attorno ad un elettrone.* La funzione di distribuzione radiale $g(r)$ (detta anche funzione di distribuzione di coppia) fornisce la probabilità di trovare due elettroni a distanza relativa r ed è definita da

$$g(r) = \frac{1}{N(N-1)} \langle \Psi_g | \sum_{i \neq j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j) | \Psi_g \rangle \quad (1.121)$$

dove Ψ_g è la funzione d'onda a molti corpi dello stato fondamentale. Nello stato paramagnetico $g(r)$ è semplicemente la media di due componenti associate alle due possibili orientazioni relative di spin, $g(r) = [g_{\uparrow\uparrow}(r) + g_{\uparrow\downarrow}(r)]/2$ (una simile espressione media può essere scritta per uno stato polarizzato nello spin usando come pesi le due popolazioni di spin). Si può mostrare [1] che (i) la trasformata di Fourier di $[g(r) - 1]$ porta al fattore di struttura statico $S(q)$, e che (ii) l'energia di stato fondamentale dell'EL può essere calcolata a partire da ciascuna di queste due funzioni.

Nel caso del gas di Fermi ideale non ci sono correlazioni tra fermioni con spin antiparalleli, *i.e.* $g_{\uparrow\downarrow}(r) = 1$, ma gli effetti di scambio tra fermioni a spin paralleli determinano deviazioni di $g_{\uparrow\uparrow}(r)$ e quindi anche di $g_0(r)$ dall'unità (si veda la figura 1.9). La funzione di distribuzione $g(r)$ in approssimazione RPA mostra dei miglioramenti qualitativi, ad esempio tiene conto della buca di Coulomb e non solo di quella di Pauli, e produce quindi uno svuotamento ulteriore di carica

attorno ad un elettrone, abbassando il valore $1/2$ previsto per $g(0)$ nel gas ideale. Tuttavia tale modifica non risulta quantitativamente corretta, nel senso che l'RPA sovrastima in maniera grossolana le correlazioni a corto raggio e produce un valore negativo per $g(0)$, che invece è positivo per definizione (ad esempio per $r_s = 4$ si ha $g(0) \simeq -1$). La teoria STLS corregge tale difetto e modifica sostanzialmente la forma di $g(r)$ a corte distanze: la funzione di correlazione è sempre positiva per $r_s < 4$, e a r_s maggiori diviene solo leggermente negativa vicino a $r = 0$.

Fattori di campo locale risolti nello spin

Ritorniamo al trattamento della risposta spin-dipendente data in precedenza, con lo scopo di introdurre gli appropriati fattori di campo locale (LFFs). A tal proposito scriviamo un'Hamiltoniana efficace a un elettrone $\mathcal{H}_\sigma(\mathbf{q}, \omega)$, nella quale un elettrone con spin σ percepisce campi efficaci che includono gli effetti di scambio con il fluido elettronico circostante. Questi campi efficaci sono la somma dei campi esterni e dei campi originati dalle variazioni indotte $\delta\rho_\sigma(\mathbf{q}, \omega)$ and $\delta\rho_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega)$ nelle due densità di spin. Questa idea sta alla base dell'approccio del funzionale di densità di spin pensato per fluidi non-omogenei (si veda la Sez. 1.3.1) e, nel regime lineare, conduce ad una descrizione dell'effetto delle buche di scambio e correlazione nel determinare l'accoppiamento efficace di un elettrone con l'EL.

Le espressioni per i campi efficaci sono le seguenti:

$$\begin{cases} W_\sigma^{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega) = W_\sigma(\mathbf{q}, \omega) + v_{\mathbf{q}} \left\{ [1 - G_\sigma^+(\mathbf{q}, \omega)] \delta\rho(\mathbf{q}, \omega) - \text{sgn}(\sigma) G_{L,\sigma}^-(\mathbf{q}, \omega) \delta m_z(\mathbf{q}, \omega) \right\} \\ W_{\sigma\bar{\sigma}}^{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega) = W_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) - v_{\mathbf{q}} G_{T,\bar{\sigma}}^-(\mathbf{q}, \omega) \delta\rho_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{q}, \omega) \end{cases} \quad (1.122)$$

con $\delta\rho(\mathbf{q}, \omega) \equiv \sum_\sigma \delta\rho_\sigma(\mathbf{q}, \omega)$ e $\delta m_z(\mathbf{q}, \omega) \equiv \sum_\sigma \text{sgn}(\sigma) \delta\rho_\sigma(\mathbf{q}, \omega)$. Il fattore $G_\sigma^+(\mathbf{q}, \omega)$ si riduce a quello che avevamo indicato con $G(q, \omega)$ quando $\zeta = 0$, mentre $G_{L,\sigma}^-(\mathbf{q}, \omega)$ e $G_{T,\sigma}^-(\mathbf{q}, \omega)$ sono legati alla magnetizzazione indotta e ai processi di spin-flip. I campi W_σ^{eff} inducono variazioni nella densità elettronica e nella densità di elettroni con spin parallelo all'asse di quantizzazione, mentre i campi $W_{\sigma\bar{\sigma}}^{\text{eff}}$ governano gli spin-flips. Da qui nasce l'anisotropia in $G_\sigma^-(\mathbf{q}, \omega)$, che dà origine a un campo locale longitudinale (L) e ad uno trasverso (T). Notiamo inoltre la proprietà di simmetria $G_\uparrow^\pm(\mathbf{q}, \omega; \zeta) = G_\downarrow^\pm(\mathbf{q}, \omega; -\zeta)$.

La risposta dell'EL ai campi efficaci dell'Eq. (1.122) è data dalle suscettività di singola particella $\Pi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega)$. Concentrandoci ora sulla risposta longitudinale, scriviamo le variazioni indotte nelle densità di spin nelle due forme alternative

$$\delta\rho_\sigma(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\sigma'} \chi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega) W_{\sigma'}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\sigma'} \Pi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega) W_{\sigma'}^{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega) \quad (1.123)$$

dove le funzioni di risposta di singola particella sono date da

$$\Pi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2,\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2,\sigma'}}{(\hbar\omega - (e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2,\sigma'} - e_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2,\sigma}) + i\eta)}. \quad (1.124)$$

Qui $e_{\mathbf{k},\sigma}$ sono le energie di singola particella ($e_{\mathbf{k},\sigma} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / (2m) + \gamma \text{sgn}(\sigma) B_z$ in presenza di un campo magnetico statico B_z) e $n_{\mathbf{k},\sigma}$ sono le distribuzioni degli impulsi per le due popolazioni di spin. Dall'Eq. (1.122) si possono ora esprimere le funzioni di risposta lineare in termini delle suscettività di singola particella e dei LFF.

(i) *LFF a grandi impulsi.* Seguendo Niklasson [28] calcoliamo la forma asintotica dei fattori di campo locale assumendo che $n_{\mathbf{k},\sigma}$ nell'Eq. (1.124) siano le vere distribuzioni degli impulsi nel

Tabella 1.2: Valori limite esatti dei LFF $G_{\sigma}^{\pm}(\mathbf{q} \rightarrow \infty, \omega)$ in un liquido elettronico polarizzato nello spin.

	$D = 2$	$D = 3$
G_{\uparrow}^{+}	$1 - \frac{1}{2}g_{\uparrow\downarrow}(0)$	$\frac{1}{3(1+\zeta)}[2 + 3\zeta - (1 + 2\zeta)g_{\uparrow\downarrow}(0)]$
$G_{L,\uparrow}^{-}$	$\frac{1}{2}g_{\uparrow\downarrow}(0)$	$\frac{1}{3(1+\zeta)}[-1 + (2 + \zeta)g_{\uparrow\downarrow}(0)]$
$G_{T,\uparrow}^{-}$	$\zeta^2 + \frac{1}{2}(1 - \zeta^2)g_{\uparrow\downarrow}(0)$	$\frac{1}{3}[-1 + 3\zeta^2 + 2(1 - \zeta^2)g_{\uparrow\downarrow}(0)]$

fluido elettronico. In tal caso, i LFF tendono ad un valore costante a grandi numeri d'onda, come mostrato in Tabella 1.2. Questi valori sono determinati dal valore di contatto $g_{\uparrow\downarrow}(0)$ della funzione di correlazione di coppia.

(ii) *Limite termodinamico*. Nel limite di grandi lunghezze d'onda ($\mathbf{q} \rightarrow 0$) è possibile sfruttare il teorema del viriale e le sue estensioni in presenza di campo magnetico per collegare i fattori di campo locale alle proprietà macroscopiche dell'EL. In questo caso i LFF sono definiti con riferimento al gas di Fermi ideale, *i.e.* usando la distribuzione di Fermi ideale al posto della reale distribuzione degli impulsi nell'Eq. (1.124). I principali risultati sono:

$$\begin{cases} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} [n_{\uparrow}G_{\uparrow}^{+}(\mathbf{q}, 0) + n_{\downarrow}G_{\downarrow}^{+}(\mathbf{q}, 0)] = \frac{1}{n v_{\mathbf{q}}} \left(\frac{1}{K_0} - \frac{1}{K} \right) \\ \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} [n_{\uparrow}G_{L,\uparrow}^{-}(\mathbf{q}, 0) + n_{\downarrow}G_{L,\downarrow}^{-}(\mathbf{q}, 0)] = \frac{n\gamma^2}{v_{\mathbf{q}}} \left(\frac{1}{\chi_0} - \frac{1}{\chi} \right) \end{cases} \quad (1.125)$$

dove $\chi = n\partial\zeta/\partial B_z$ è la suscettività di spin statica, e γ è definito come nella sezione 1.2.2 , $\gamma = g\mu_B/2$.

Interazioni efficaci elettrone-elettrone

Il concetto di fattore di campo locale fu usato da Kukkonen e Overhauser (KO) [29] per derivare delle espressioni per l'interazione efficace elettrone-elettrone nel fluido elettronico (paramagnetico), che includano scambio e correlazione in approssimazione locale di risposta lineare. KO considerano prima il problema standard di un EL perturbato da un debole potenziale esterno, come quello dovuto a una densità di carica di prova $\rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)$, cioè $eV_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) = v_{\mathbf{q}}\rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)$ (da qui in poi le variabili (\mathbf{q}, ω) saranno omesse). La perturbazione induce una variazione di densità elettronica $\delta\rho$ e il potenziale visto da un'altra carica test è $eV_{\text{tt}} = v_{\mathbf{q}}(\rho_{\text{ext}} + \delta\rho)$ (il punto importante qui è che una carica test non ha effetti di scambio con un elettrone!). Usando la precedente definizione di costante dielettrica, tale potenziale può anche essere scritto come $V_{\text{tt}} = V_{\text{ext}}/\epsilon$. Il problema sta dunque nel calcolare la risposta in densità $\delta\rho$.

Ritorniamo ora alle Equazioni (1.122) e (1.123). Il potenziale efficace V_{et} visto da un elettrone nel nostro caso è dato da $eV_{\text{et}} = eV_{\text{ext}} + v_{\mathbf{q}}(1 - G_{+})\delta\rho$, e la variazione indotta di densità è $\delta\rho = \Pi eV_{\text{et}}$. Con la definizione $Q \equiv -v_{\mathbf{q}}\Pi$ troviamo

$$V_{\text{et}} = \frac{V_{\text{ext}}}{1 + (1 - G_{+})Q} \quad (1.126)$$

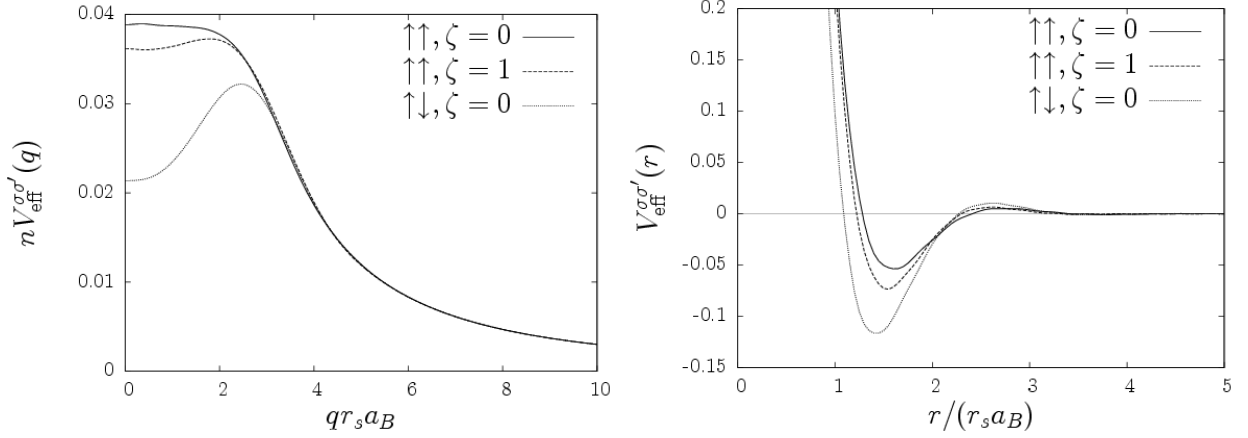


Figura 1.10: Interazioni efficaci elettrone-elettrone spin-dipendenti nell'EL 3D a $r_s = 10$: trasformata di Fourier $nV_{\text{eff}}^{\sigma\sigma'}(q)$ in unità di e^2/a_B (a sinistra) e potenziali efficaci di coppia $V_{\text{eff}}^{\sigma\sigma'}(r)$ in unità di $\hbar^2 k_F^2/m$ (a destra).

e

$$\epsilon = 1 + \frac{Q}{1 - G_+ Q}. \quad (1.127)$$

Possiamo dire che l'equazione (1.126) definisce una funzione dielettrica “di particella”

$$\epsilon_p = 1 + (1 - G_+)Q.$$

Per ottenere l'interazione efficace elettrone-elettrone, KO hanno considerato due “particolari” elettroni del mare di Fermi con impulsi \mathbf{k}_1 e \mathbf{k}_2 , spin σ_1 e σ_2 , densità ρ_{σ_1} e ρ_{σ_2} : uno di questi (diciamo ρ_\uparrow) è la particella perturbante e l'altra invece sonda la perturbazione (andando avanti si tiene conto dell'indistinguibilità degli elettroni a spin parallelo). La perturbazione dovuta a ρ_\uparrow induce le variazioni di densità $\delta\rho_\uparrow$ e $\delta\rho_\downarrow$, e il secondo elettrone interagisce con ρ_\uparrow , $\delta\rho_\uparrow$, e $\delta\rho_\downarrow$. È conveniente riscrivere l'Eq. (1.122) nel seguente modo

$$W_\sigma^{\text{eff}} = W_\sigma + v_{\mathbf{q}} [(1 - 2G_x)\delta\rho_\sigma + (1 - 2G_c)\delta\rho_{\bar{\sigma}}] \quad (1.128)$$

dove $G_x = (G_+ + G_-)/2$ e $G_c = (G_+ - G_-)/2$ hanno il significato di fattori di campo locale per scambio e correlazione, rispettivamente. Allora i potenziali $\tilde{V}_{\sigma\sigma'}$ sentiti dagli elettroni nel mare di Fermi dovuti all'elettrone perturbante ρ_\uparrow sono dati da

$$\begin{cases} e\tilde{V}_{\uparrow\uparrow} = v_{\mathbf{q}} [(1 - 2G_x)(\rho_\uparrow + \delta\rho_\uparrow) + (1 - 2G_c)\delta\rho_\downarrow] \\ e\tilde{V}_{\downarrow\uparrow} = v_{\mathbf{q}} [(1 - 2G_c)(\rho_\uparrow + \delta\rho_\uparrow) + (1 - 2G_x)\delta\rho_\downarrow] \end{cases} \quad (1.129)$$

dove, nel primo termine tra parentesi, si è tenuto conto degli effetti di scambio e correlazione con l'elettrone perturbante. Usando l'Eq. (1.123) per mettere in relazione la risposta con i potenziali, si ottiene

$$\begin{cases} e\tilde{V}_{\uparrow\uparrow} = v_{\mathbf{q}}\rho_\uparrow \left[\frac{(1 - G_+ Q)^{-2}}{\epsilon} - \frac{G_-}{1 - G_- Q} - \frac{G_+}{1 - G_+ Q} \right] \\ e\tilde{V}_{\downarrow\uparrow} = v_{\mathbf{q}}\rho_\uparrow \left[\frac{(1 - G_+ Q)^{-2}}{\epsilon} + \frac{G_-}{1 - G_- Q} - \frac{G_+}{1 - G_+ Q} \right] \end{cases} \quad (1.130)$$

Infine, i potenziali efficaci $V_{\uparrow\uparrow}$ e $V_{\downarrow\uparrow}$ necessari per calcolare le ampiezze di scattering sono ottenuti dall'Eq. (1.130) sottraendo i termini $-2G_x v_{\mathbf{q}}\rho_{\uparrow}$ da $\tilde{V}_{\uparrow\uparrow}$, e $-2G_c v_{\mathbf{q}}\rho_{\uparrow}$ da $\tilde{V}_{\downarrow\uparrow}$. Questo rimuove l'approssimazione locale per lo scambio e correlazione *diretti* tra due elettroni a spin paralleli. Il risultato finale è

$$V_{\sigma_1\sigma_2} = V_0 - \sigma_1\sigma_2 J \quad (1.131)$$

dove il termine spin-indipendente ha l'espressione

$$eV_0 = \frac{1 + (1 - G_+)G_+Q}{1 + (1 - G_+)Q} v_{\mathbf{q}}\rho_{\uparrow} \quad (1.132)$$

e il termine spin-dipendente è dato invece da

$$eJ = \frac{G_-^2 Q}{1 - G_- Q} v_{\mathbf{q}}\rho_{\uparrow}. \quad (1.133)$$

Nell'Eq. (1.131) il prodotto $\sigma_1\sigma_2$ vale $+1$ per spin paralleli e -1 per spin antiparalleli.

Mostriamo in Fig. 1.10 le interazioni efficaci elettrone-elettrone per un EL 3D nello stato paramagnetico ($\zeta = 0$) e nello stato completamente polarizzato ($\zeta = 1$) a $r_s = 10$, come calcolato da Davoudi *et al.* [30].

1.3 Teoria del Funzionale di Densità a temperatura zero

Un importante sviluppo nella teoria del liquido elettronico è stato dato dall'introduzione della teoria del funzionale di densità (DFT) [31, 32, 33] per lo studio della struttura elettronica di atomi, molecole, liquidi e solidi (sistemi elettronici disomogenei nei quali gli elettroni si muovono nel campo dei nuclei o dei substrati ionici). Tale teoria combina ad un livello formalmente esatto l'idea del metodo di Thomas-Fermi (la struttura elettronica è descritta tramite la sua distribuzione di densità $n(\mathbf{r})$) e l'idea del metodo di Hartree-Fock (la struttura elettronica è determinata attraverso orbitali di singola particella determinati in maniera auto-consistente).

Il fatto fondamentale è che in linea di principio lo stato fondamentale di un sistema a molti corpi rimane determinato dalla conoscenza della sola densità, anzichè della conoscenza più specifica della funzione d'onda. Tale possibilità è dimostrata per la prima volta in forma di teorema da Hohenberg e Kohn (1964), teorema che però non fornisce alcun metodo effettivo per la soluzione del problema; a tal fine bisogna utilizzare la formulazione del cosiddetto schema di Kohn-Sham (1965), grazie al quale si possono ottenere risultati con un'accuratezza pari a quella raggiunta con teorie ben più complicate dal punto di vista computazionale. L'utilità dello schema di Kohn-Sham è data dall'introduzione di orbitali di singola particella e dalla conseguente riduzione del problema alla soluzione di un'equazione di Schrödinger per una particella in un potenziale efficace locale, che dipende in maniera funzionale dalla densità. In questo capitolo e nel successivo, per uniformarci alla notazione standard relativa alla DFT, ripristiniamo la notazione $n(\mathbf{r})$ per la densità elettronica.

Enunciamo qui di seguito il teorema di Hohenberg and Kohn nella sua forma originale, ovvero supponendo che il sistema a molti corpi sia non relativistico, soggetto a potenziale locale e spin-indipendente, e che lo stato fondamentale del sistema sia non degenere. In realtà lo stesso risultato è stato ridimostrato in seguito (Lieb, 1982) sotto ipotesi molto meno restrittive. Il teorema afferma che l'energia di stato fondamentale di un sistema elettronico soggetto a un potenziale esterno $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ di *intensità arbitraria* è un funzionale $E_g[n(\mathbf{r})]$ del profilo di densità.

- $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \rightarrow n(\mathbf{r})$: Notiamo prima di tutto che, poichè $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ determina l'Hamiltoniana \mathcal{H} del sistema una volta fissato il potenziale d'interazione v tra le particelle, in principio esso determina la funzione d'onda a molti corpi Ψ dello stato fondamentale e la corrispondente energia $E_g[\Psi] = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle$. Poichè da Ψ possiamo anche calcolare il profilo di densità $n(\mathbf{r})$, si può dire che in ultimo $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ determina $n(\mathbf{r})$.
- $n(\mathbf{r}) \rightarrow V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$: Hohenberg e Kohn hanno dimostrato che sorprendentemente anche il contrario è vero: in linea di principio si può ricostruire da un dato profilo di densità $n(\mathbf{r})$ il potenziale $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ che lo ha determinato. Si usa il fatto generale che, se $\tilde{\Psi}$ è una funzione d'onda diversa da Ψ , vale la disuguaglianza $\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle < \langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H} | \tilde{\Psi} \rangle$ (per l'assunzione di stato fondamentale non degenere).

La dimostrazione del teorema si basa sulla *reductio ad absurdum*. Assumiamo che due diversi potenziali, $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ e $\tilde{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, determinino due differenti funzioni d'onda, Ψ e $\tilde{\Psi}$, ma diano la stessa $n(\mathbf{r})$. Dalla proprietà di minimo sopra riportata, avremmo che

$$\langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H} | \tilde{\Psi} \rangle < \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle + \int d^D \mathbf{r} n(\mathbf{r}) [\tilde{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - V_{\text{ext}}(\mathbf{r})]. \quad (1.134)$$

Interscambiando $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ e $\tilde{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ avremmo inoltre

$$\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle < \langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H} | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H} | \tilde{\Psi} \rangle + \int d^D \mathbf{r} n(\mathbf{r}) [V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \tilde{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r})], \quad (1.135)$$

e sommando queste due disuguaglianze arriviamo al risultato assurdo $\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\mathcal{H}} | \tilde{\Psi} \rangle + \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle < \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle + \langle \tilde{\Psi} | \tilde{\mathcal{H}} | \tilde{\Psi} \rangle$. Concludiamo quindi che deve esserci una relazione biunivoca tra $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ e $n(\mathbf{r})$.

Dato che $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ determina l'energia di stato fondamentale, possiamo ora dire che E_g è in linea di principio conosciuto se conosciamo $n(\mathbf{r})$. Allo stesso modo il valor medio di qualsiasi osservabile sullo stato fondamentale è conosciuto a partire dalla densità:

$$\langle \Psi[n] | \hat{\mathcal{O}} | \Psi[n] \rangle = \mathcal{O}[n]. \quad (1.136)$$

L'altro risultato del teorema di Hohenberg e Kohn è il fatto che il funzionale $E[n] = E_V[n] = \langle \Psi[n] | \hat{T} + \hat{v} + \hat{V} | \Psi[n] \rangle$ può essere scritto come

$$E_V[n] = F_{\text{HK}}[n] + \int d^D \mathbf{r} V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}), \quad (1.137)$$

con $F_{\text{HK}}[n] = \langle \Psi[n] | \hat{T} + \hat{v} | \Psi[n] \rangle$ un funzionale universale, nel senso che non dipende dal potenziale esterno: ciò significa che $F_{\text{HK}}[n]$ è lo stesso per atomi, molecole, cristalli, modelli a gellio.

Scriviamo adesso più esplicitamente l'energia di stato fondamentale come funzionale $E_g[n(\mathbf{r})]$ del profilo di densità:

$$E_g[n(\mathbf{r})] = E_0[n(\mathbf{r})] + \int d^D \mathbf{r} n(\mathbf{r}) V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{2} \int d^D \mathbf{r} \int d^D \mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] \quad (1.138)$$

dove $E_0[n(\mathbf{r})]$ è l'energia cinetica approssimata localmente con quella di un gas di Fermi *ideale* di densità (uniforme) $n(\mathbf{r})$, il terzo termine è l'energia di interazione di Hartree, e $E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]$ è (per definizione) l'energia di scambio e correlazione. Il profilo di densità di equilibrio deve essere determinato per mezzo della condizione variazionale

$$\frac{\delta E_g[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} = \mu \quad (1.139)$$

(l'equilibrio corrisponde a un minimo dell'energia rispetto a variazioni nella densità di particelle a numero totale di particelle fissato). Per confronto con l'analoga condizione di equilibrio valida per il gas ideale, cioè $\delta E_0[n(\mathbf{r})]/\delta n(\mathbf{r}) = \mu$, vediamo che il sistema a molti corpi può essere mappato in un sistema di elettroni non-interagenti che si muovono in un potenziale efficace a un corpo

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + e^2 \int d^D \mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + v_{\text{xc}}(\mathbf{r}). \quad (1.140)$$

Il potenziale efficace a un corpo è quindi la somma del potenziale esterno, del potenziale di Hartree classico, e del potenziale di scambio-correlazione v_{xc} definito come $\frac{\delta E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}$. Questo deve essere determinato in maniera auto-consistente assieme al profilo di densità di equilibrio. Notiamo che è stato implicitamente assunto che, dato un sistema di particelle interagenti, e dato un profilo di densità $n(\mathbf{r})$, è sempre possibile trovare un potenziale esterno locale tale che la densità del sistema nel suo stato fondamentale coincida con quella data (tale assunzione è stata usata ad esempio nel caso del gas ideale). La questione appena menzionata è nota come problema della *v-rappresentabilità* (si veda il libro di Dreizler e Gross [34] per una trattazione completa), ed è stata largamente studiata, con il risultato che non tutte le funzioni $n(\mathbf{r})$ regolari e normalizzate sono *v-rappresentabili*.

Il risultato (1.140) è alla base dello *schema auto-consistente di Kohn e Sham* [32], un metodo costruttivo per determinare la densità dello stato fondamentale:

- Si produce un *ansatz* di partenza per la densità $n(\mathbf{r})$, sfruttando eventuali proprietà di simmetria del sistema. Da questa si ricava il potenziale di Hartree.
- Si scrive un'equazione di Schrödinger per orbitali $\phi_\alpha(\mathbf{r})$ di singola particella, equazione nella quale ci entra il potenziale efficace v_{eff} di Eq. (1.140):

$$\left(\frac{\nabla^2}{2m} + v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right) \phi_\alpha(\mathbf{r}) = e_\alpha \phi_\alpha(\mathbf{r}). \quad (1.141)$$

- Si ricalcola la densità come $n(\mathbf{r}) = \sum_\alpha |\phi_\alpha(\mathbf{r})|^2$ (la somma è su tutti gli orbitali occupati).

Si ripete il tutto fino ad arrivare all'auto-consistenza tra $n(\mathbf{r})$ e $v_{\text{eff}}[n(\mathbf{r})]$. Lo schema di Kohn e Sham va oltre l'approssimazione di Hartree-Fock poichè contiene i contributi di scambio e correlazione, ed è al tempo stesso computazionalmente più semplice perchè coinvolge solo potenziali locali. Ovviamente, però, l'implementazione di questo metodo richiede un'approssimazione adatta per il funzionale E_{xc} .

Nel caso di densità lentamente variabile, Kohn e Sham proposero a tal scopo la cosiddetta approssimazione di densità locale (LDA), che consiste nel considerare il liquido elettronico come localmente omogeneo: il funzionale E_{xc} è costruito a partire dall'energia $\varepsilon_{\text{xc}}^{\text{h}}(n)$ di scambio e correlazione per particella di un fluido omogeneo di densità $n = n(\mathbf{r})$:

$$E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] \simeq E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}[n(\mathbf{r})] = \int d^D \mathbf{r} n(\mathbf{r}) \varepsilon_{\text{xc}}^{\text{h}}(n(\mathbf{r})). \quad (1.142)$$

In questa approssimazione si ha allora la seguente espressione per il potenziale di scambio e correlazione:

$$v_{\text{xc}} \equiv \frac{\delta E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} = \frac{d}{dn} \left(n \varepsilon_{\text{xc}}^{\text{h}}(n) \right) \Big|_{n=n(\mathbf{r})}. \quad (1.143)$$

Come illustrazione della grande utilità della LDA, citiamo due esempi: (i) l'energia di stato fondamentale dell'atomo di He calcolata in LDA è -2.870 a.u., contro il valore sperimentale di -2.904 a.u., e (ii) per la molecola di H_2 si trova un'energia di legame di 4.79 eV e una lunghezza di legame all'equilibrio di $1.44 a_B$, mentre i valori sperimentali sono rispettivamente 4.75 eV e $1.40 a_B$.

Connessione con la teoria della risposta lineare

Consideriamo ora il caso particolare in cui il potenziale esterno è sufficientemente debole da poter applicare la teoria della risposta lineare. Possiamo allora scrivere

$$n(\mathbf{r}) \simeq n + \delta n(\mathbf{r}); \quad \frac{\delta n(\mathbf{r})}{n} \ll 1; \quad \int d^D \mathbf{r} \delta n(\mathbf{r}) = 0, \quad (1.144)$$

ed usare l'espansione troncata (il termine lineare in $\delta n(\mathbf{r})$ è nullo per la condizione di equilibrio del sistema imperturbato)

$$\delta E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] = \delta E_{\text{xc}}[n] + \int d^D \mathbf{r} d^D \mathbf{r}' f_{\text{xc}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \delta n(\mathbf{r}) \delta n(\mathbf{r}') \quad (1.145)$$

dove il “kernel di scambio e correlazione” $f_{\text{xc}}(r)$ è definito da

$$f_{\text{xc}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{\delta^2 E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r}) \delta n(\mathbf{r}')} \Big|_{n(\mathbf{r})=n}. \quad (1.146)$$

Dunque, lo schema di Kohn-Sham conduce in trasformata di Fourier alla risposta

$$\delta n(\mathbf{q}) = \chi(q)V_{\text{ext}}(\mathbf{q}) = \chi_0(q)v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = \chi_0(q)[V_{\text{ext}}(\mathbf{q}) + v_{\mathbf{q}}\delta n(\mathbf{q}) + f_{\text{xc}}(q)\delta n(\mathbf{q})]. \quad (1.147)$$

Ovverosia

$$\chi(\mathbf{q}) = \frac{\chi_0(q)}{1 - [v_{\mathbf{q}} + f_{\text{xc}}(q)]\chi_0(q)}. \quad (1.148)$$

Il confronto con l'Eq. (1.116) ci fornisce

$$G(q, 0) = -\frac{f_{\text{xc}}(q)}{v_{\mathbf{q}}}. \quad (1.149)$$

Abbiamo così ottenuto una definizione esatta per il fattore di campo locale nel caso statico.

1.3.1 Teoria del Funzionale di Densità di Spin

Nella forma con cui è stata presentata nella sezione precedente, la DFT fu inizialmente formulata per sistemi elettronici non-omogenei nel loro stato fondamentale. Durante gli anni sono state sviluppate diverse estensioni alla teoria-base della DFT, spaziando da elettroni in campi magnetici, sistemi polarizzati nello spin, liquidi di Luttinger, superconduttori e superfluidi, gas fermionici e bosonici, e liquidi classici. In questa sezione esponiamo la formulazione della teoria del funzionale di densità di spin (SDFT), come sviluppo della trattazione fatta nelle sezioni precedenti per sistemi polarizzati nello spin.

Nella SDFT l'accoppiamento con il campo esterno è dato dal primo termine dell'Eq. (1.50), $\mathcal{H}_1 = \sum_{\sigma} \int d^D\mathbf{r} W_{\sigma}(\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$ dove $W_{\sigma}(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \gamma \text{sgn}(\sigma)b_z(\mathbf{r})$ e $\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$ è l'operatore densità di spin $\hat{n}_{\sigma}(\mathbf{r})$. Ovviamente, il potenziale scalare esterno e il campo magnetico esterno ora sono di intensità arbitrariamente grande, e non ci limitiamo cioè al regime di risposta lineare. Ammesso che le densità di spin possano essere variate indipendentemente, gli aspetti formali della teoria sono una immediata estensione della DFT standard: è sufficiente introdurre funzionali dell'energia che dipendano da più variabili (le densità di spin) e procedere derivando equazioni di Kohn-Sham auto-consistenti per orbitali di singola particella spin-dipendenti. Le proprietà del funzionale E_{xc} in SDFT sono state esaminate criticamente da Capelle and Vignale [35]: un problema di non-unicità nasce a densità tali per cui lo stato fondamentale è rigido rispetto a combinazioni dei campi esterni, e a queste densità il funzionale E_{xc} presenta discontinuità nelle derivate.

In ogni caso, è un dato di fatto che la SDFT in molti studi recenti abbia rimpiazzato l'approccio DFT standard anche nel trattamento di sistemi non-magnetici. Essenzialmente, il maggior numero di variabili densità permette più flessibilità nella ricerca del minimo dell'energia e un'accurata determinazione delle densità di spin locali.

1.3.2 Correlazioni dinamiche

In questa sezione ci concentreremo principalmente sulla fisica delle densità di corrente longitudinale e trasversa nel liquido elettronico omogeneo a grandi lunghezze d'onda, e sulla formulazione della teoria del funzionale di densità dipendente dal tempo (TD-DFT) [36] tramite funzionale di densità di corrente (CDFT). Prima di introdurre questi argomenti ci sarà utile ridiscutere brevemente alcune proprietà dello spettro di eccitazione a molte coppie dell'EL.

Abbiamo visto nella sezione 1.2.6 che nella teoria RPA esiste un bordo superiore netto nello spettro di eccitazione di singola coppia elettrone-buca, bordo situato a frequenza $\omega_{+}(q) = qk_{\text{F}}/m + q^2/(2m)$, tale per cui lo spettro di scattering anelastico è nullo a frequenze maggiori. Questa

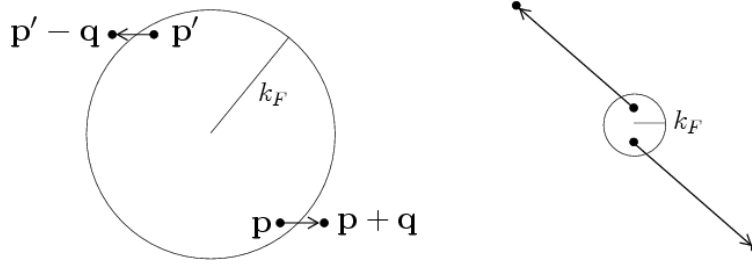


Figura 1.11: Struttura delle eccitazioni a grandi lunghezze d'onda di due coppie elettrone-buca nell'EL, per energie di eccitazione molto minori (a sinistra) o molto maggiori (destra) dell'energia di Fermi. Le frecce collegano elettrone e buca di ogni coppia, e la loro lunghezza è indicativa dell'impulso trasferito.

proprietà è una conseguenza della discontinuità nella distribuzione degli impulsi al livello della superficie di Fermi, ed è una proprietà condivisa da tutti i diagrammi di polarizzabilità propria nei quali tutti gli stati intermedi consistono a ogni dato istante di esattamente una coppia elettrone-buca. Tuttavia, al secondo ordine perturbativo e a quelli successivi, compaiono anche diagrammi che rappresentano l'eccitazione simultanea di due o più coppie elettrone-buca e questi danno origine a contributi spettrali che ricoprono l'intero piano (q, ω) (a parte l'ordine dominante in q per $q \rightarrow 0$). Di conseguenza, l'eccitazione di plasma acquisisce una larghezza finita anche fuori dal continuo elettrone-buca, a causa dello smorzamento dato dal decadimento in eccitazioni multiple di coppie elettrone-buca. Inoltre, le eccitazioni coerenti di tali N coppie possono produrre degli ulteriori picchi spettrali alle frequenze $\approx N\omega_p$.

Studi sistematici dei diagrammi al second'ordine [37] hanno mostrato che a bassi q i termini diretti sono dominanti a basse frequenze rispetto ai corrispondenti termini di scambio, mentre ad alte frequenze i diagrammi di scambio ne cancellano metà del contributo. Questo si può comprendere dal seguente ragionamento (si veda Fig. 1.11): un'eccitazione di due coppie elettrone-buca a grandi lunghezze d'onda coinvolge la creazione di buche con impulsi \mathbf{p} e \mathbf{p}' all'interno della sfera di Fermi e di elettroni con impulsi $\mathbf{p} + \mathbf{q}$ e $\mathbf{p}' - \mathbf{q}$ al di fuori di questa. Se $\hbar\omega \ll e_F$, allora $q \ll k_F$ e ogni elettrone è molto vicino nello spazio degli impulsi alla rispettiva buca, e quindi i processi di scambio sono sostanzialmente soppressi. Al contrario, se $\hbar\omega \gg e_F$, allora $q \gg k_F$ e per spin paralleli le ampiezze dei processi diretti e di quelli di scambio sono uguali ed opposte.

Glick e Long [37] hanno ottenuto un'espressione asintotica esatta per la parte immaginaria della funzione dielettrica del liquido elettronico 3D,

$$\Im \epsilon(q, \omega) = \frac{92}{135\pi^2} \frac{k_F^6}{a_B^3} \frac{q^2}{(m\omega)^{11/2}}, \quad (1.150)$$

espressione che è valida se sono soddisfatte le condizioni $\hbar\omega \gg e_F$ e $q \ll k_F$. Osserviamo che la forma $\omega^{-11/2}$ implica che il quinto momento spettrale diverge. Il risultato (1.150), e uno studio analogo fatto per l'EL 2D, forniscono [38]

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{q \rightarrow 0, \omega \rightarrow \infty} \Im m G_+^{3D}(q, \omega) = \frac{4^{1/3}}{(9\pi)^{1/3}} \frac{23r_s}{60} \left(\frac{q}{k_F}\right)^2 \left(\frac{2e_F}{\hbar\omega}\right)^{3/2} \\ \lim_{q \rightarrow 0, \omega \rightarrow \infty} \Im m G_+^{2D}(q, \omega) = \frac{11\pi r_s}{64\sqrt{2}} \left(\frac{q}{k_F}\right) \left(\frac{2e_F}{\hbar\omega}\right) \end{array} \right. . \quad (1.151)$$

Le forme asintotiche del fattore di campo locale dielettrico sono quindi conosciute. Rivedremo ora alcune definizioni generali relative alle fluttuazioni di densità di corrente nell'EL, prima di passare a studiare l'intero spettro a grandi lunghezze d'onda.

1.3.3 Funzioni di risposta in corrente

Consideriamo la risposta lineare del liquido elettronico ad un potenziale vettore esterno $\mathbf{a}(\mathbf{q}, \omega)$, trascurando gli effetti di ritardo dovuti alla velocità di propagazione finita. La corrente canonica indotta è esprimibile per mezzo di un tensore di risposta:

$$\delta \mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{\mathbf{J}\mathbf{J}}(\mathbf{q}, \omega) \cdot \mathbf{a}(\mathbf{q}, \omega) \quad (1.152)$$

(un fattore e/c è stato inglobato nel potenziale vettore, ed è stata fatta la scelta di gauge $V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) = 0$). La corrente fisica è $\tilde{\mathbf{j}} = \delta \mathbf{j}(\mathbf{q}, \omega) + n\mathbf{a}(\mathbf{q}, \omega)/m$ e, in un sistema omogeneo ed isotropo, il tensore di risposta $\chi_{\mathbf{J}\mathbf{J}}$ ha solo due componenti indipendenti:

$$\chi_{J_i J_j}(\mathbf{q}, \omega) = \left(\frac{q_i q_j}{q^2} \right) \chi_L(\mathbf{q}, \omega) + \left[\delta_{ij} - \frac{q_i q_j}{q^2} \right] \chi_T(\mathbf{q}, \omega). \quad (1.153)$$

L'invarianza di Gauge e l'equazione di continuità per la conservazione di particelle permettono di collegare $\chi_L(\mathbf{q}, \omega)$ alla funzione di risposta densità-densità $\chi_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega)$:

$$\chi_{\rho\rho}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{q^2}{\omega^2} \chi_L(\mathbf{q}, \omega) + \frac{nq^2}{m\omega^2} \quad (1.154)$$

dove il secondo termine nel membro di destra è il contributo dominante ad alte frequenze e soddisfa la f -sum rule.

Il nostro prossimo obiettivo è di derivare un'equazione del moto per la risposta di corrente. Dalla teoria della risposta lineare abbiamo

$$\chi_{AB}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_\omega = -i \int_0^\infty dt \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] \rangle \exp[i(\omega + i\eta)t], \quad (1.155)$$

dove gli operatori sono scritti in rappresentazione di Heisenberg. L'equazione del moto per la generica funzione di risposta $\chi_{AB}(\mathbf{q}, \omega)$ segue *via* integrazione per parti:

$$\omega \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_\omega = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle + \langle\langle [\hat{A}, \mathcal{H}]; \hat{B} \rangle\rangle_\omega. \quad (1.156)$$

Dall'Hamiltoniana dell'EL troviamo che il termine di energia potenziale $v_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\rho}_{\mathbf{q}}$ fornisce alla corrente longitudinale un contributo a lungo raggio del tipo RPA, $\omega_p^2 \mathbf{q} \cdot \mathbf{j}_{\mathbf{q}}$. Questo contributo è escluso dall'equazione del moto per la risposta longitudinale propria $\tilde{\chi}_L$, che è definita come

$$\left[\tilde{\chi}_L(\mathbf{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right]^{-1} = \left[\chi_L(\mathbf{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right]^{-1} - v_{\mathbf{q}}. \quad (1.157)$$

La corrente trasversa invece commuta con $v_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\rho}_{\mathbf{q}}$, cosicchè $\tilde{\chi}_T = \chi_T$. Il kernel di scambio e correlazione (xc) può essere introdotto a questo punto con la procedura usata nella sezione 1.2.7,

$$\left(\frac{q^2}{\omega^2} \right) f_{\text{xc}}^{L,T}(\mathbf{q}, \omega) = \left[\chi_{L,T}^0(\mathbf{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right]^{-1} - \left[\tilde{\chi}_{L,T}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{n}{m} \right]^{-1} \quad (1.158)$$

e all'ordine dominante in q a frequenze finite troviamo

$$f_{\text{xc}}^{L,T}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{m^2 \omega^2}{n^2 q^2} [\tilde{\chi}_L(\mathbf{q}, \omega) - \chi_{L,T}^0(\mathbf{q}, \omega)] . \quad (1.159)$$

Notiamo per utilità futura che l'Eq. (1.159) per grandi lunghezze d'onda fornisce la relazione:

$$\Im f_{\text{xc}}^{L,T}(\omega) = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{m^2 \omega^2}{n^2 q^2} \Im \tilde{\chi}_{L,T}(\mathbf{q}, \omega) . \quad (1.160)$$

Questa relazione può essere considerata come un'estensione a frequenza finita delle relazioni di Kubo [39].

Derivando ancora una volta rispetto al tempo si trova la seguente espressione esatta per la risposta di corrente propria nel limite di grandi lunghezze d'onda [40]:

$$\Im \tilde{\chi}_{J_i J_j}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{m^2 \omega^4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{s, s'} \Gamma_{is}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \Gamma_{js'}(\mathbf{k}', -\mathbf{q}) \Im \langle \hat{j}_{\mathbf{k}s}(t) \hat{\rho}_{-\mathbf{k}}(t); \hat{j}_{\mathbf{k}'s'}(0) \hat{\rho}_{-\mathbf{k}'}(0) \rangle_{\omega} . \quad (1.161)$$

Tale relazione è scritta in termini di una funzione di risposta a quattro punti che contiene operatori di fluttuazione di densità di particelle e di densità di corrente. L'espressione per i coefficienti $\Gamma_{is}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ può essere trovata nel lavoro originale. La parte reale di $\tilde{\chi}_{J_i J_j}(\mathbf{q}, \omega)$ è quindi ottenuta dall'Eq. (1.39) utilizzando l'appropriata relazione di Kramers-Kronig. Questa produce $\tilde{\chi}_{L,T}(\mathbf{q}, \omega) \rightarrow \tilde{M}_{L,T}^{(3)}(q)/\omega^2$ ad alte frequenze, dove $\tilde{M}_{L,T}^{(3)}(q) \rightarrow [nq^2/(2m^2)](a_{L,T}K + b_{L,T}U)$ è il terzo momento spettrale. Si sono indicate con K e U rispettivamente l'energia cinetica media e l'energia potenziale media dell'EL, mentre $a_{L,T}$ e $b_{L,T}$ sono coefficienti numerici.

Questi risultati forniscono immediatamente il comportamento ad alte frequenze dei kernel xc a grandi lunghezze d'onda,

$$\begin{cases} f_{\text{xc}}^L(\omega \rightarrow \infty) = \frac{1}{2n} \left[4(K - K_0) + \frac{8}{15}U \right] \\ f_{\text{xc}}^T(\omega \rightarrow \infty) = \frac{1}{2n} \left[\frac{4}{3}(K - K_0) - \frac{4}{15}U \right] \end{cases} \quad (1.162)$$

Il comportamento a basse frequenze, invece, dipende dall'ordine con cui vengono eseguiti i limiti [41]:

(i) Nel limite statico, la regola di somma della compressibilità fornisce

$$f_{\text{xc}}^L(q \rightarrow 0, \omega = 0) = \frac{1}{n^2} \left(\frac{1}{K_0} - \frac{1}{K} \right) \quad (1.163)$$

mentre $f_{\text{xc}}^T(q \rightarrow 0, \omega = 0)$ è legata alla suscettività magnetica orbitale ξ [42] da

$$\xi = \frac{e^2}{c^2} \left\{ \lim_{q \rightarrow 0} \left[\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{q^4 f_{\text{xc}}^T(q, \omega)}{\omega^2} \right] - \frac{12\pi^2 m}{k_F} \right\} ; \quad (1.164)$$

(ii) Nel regime ($q = 0, \omega \rightarrow 0$), d'altra parte, i kernel xc sono determinati dai parametri simmetrici di spin F_ℓ^s introdotti dalla cosiddetta *teoria di Landau per i liquidi di Fermi*

$$\begin{cases} f_{\text{xc}}^L(q = 0, \omega \rightarrow 0) = \frac{2e_F}{n} \frac{(\frac{1}{3}F_0 + \frac{4}{75}F_2 - \frac{1}{5}F_1)}{(1 + \frac{1}{3}F_1)} \\ f_{\text{xc}}^T(q = 0, \omega \rightarrow 0) = \frac{2e_F}{n} \frac{(\frac{1}{25}F_2 - \frac{1}{15}F_1)}{(1 + \frac{1}{3}F_1)} \end{cases} . \quad (1.165)$$

Inoltre, per il limite statico la stessa teoria di Landau fornisce $f_{xc}^L(q \rightarrow 0, \omega = 0) = (2e_F/n)(F_0/3 - F_1/9)/(1 + F_1/3)$. Uno schema di interpolazione tra il regime collisionale e quello non-collisionale, all'interno di un modello per il tempo di rilassamento, è stato proposto da Conti e Vignale.

Calcolo approssimato degli spettri di eccitazione a due coppie

Un disaccoppiamento approssimato della funzione di correlazione a quattro punti presente nell'Eq. (1.161) in tutti i possibili prodotti di funzioni a due punti ha condotto Nifosì *et al.* al risultato approssimato

$$\begin{aligned} \Im m f_{xc}^{L,T}(\omega) = & - \int_0^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left(\frac{q^2 v_{\mathbf{q}}}{n\omega'} \right)^2 \frac{1}{(\omega - \omega')^2} \Im m \chi_L(q, \omega - \omega') \\ & \times \left[a_{L,T} \Im m \chi_L(q, \omega') + b_{L,T} \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \Im m \chi_T(q, \omega') \right]. \end{aligned} \quad (1.166)$$

Ci concentriamo qui sul liquido elettronico 3D, dove i coefficienti numerici sono $a_L = 23a_T/16 = 23/30$ e $b_L = 4b_T/3 = 8/15$ (nel lavoro originale è trattato anche il caso 2D). L'equazione (1.166) include solo il contributo diretto delle eccitazioni di due coppie elettrone-buca correlate, e non considera i termini di scambio, che sono tuttavia necessari per ritrovare il corretto coefficiente numerico nel risultato asintotico dato nell'Eq. (1.150). Di tali contributi si può tenere conto brutalmente utilizzando un fattore ω -dipendente lentamente variabile che interpola tra 1 e 1/2.

L'Equazione (1.166) mostra che sia lo spettro longitudinale che quello trasversale coinvolgono un canale LL e uno LT , essendo infatti il primo dominante ad alte frequenze e l'ultimo a basse frequenze, su una scala di frequenze data dalla frequenza di plasma. In pratica i due spettri hanno forme molto simili, con la relazione $\Im m f_{xc}^T(\omega) \approx 0.72 \Im m f_{xc}^L(\omega)$ che vale a tutte le frequenze. Un canale a due plasmoni compare nello spettro ad una frequenza doppia di quella di plasma e, dato il grosso peso spettrale a grandi lunghezze d'onda dell'eccitazione plasmonica rispetto a quello del continuo elettrone-buca, produce un'accumulazione nella regione spettrale proprio sopra a $2\omega_p$ di buona parte della forza di oscillatore per processi a due coppie.

Questo fatto a sua volta comporta un appiattimento della dispersione plasmonica, in accordo qualitativo con i dati raccolti da esperimenti di Electron Energy Loss su metalli alcalini – sebbene gli effetti di struttura a bande (*e.g.* eccitazioni da stati occupati di tipo d vicini al livello di Fermi nel Cs) giochino un ruolo importante nel confronto quantitativo con gli esperimenti.

Un'illustrazione dei risultati numerici di Nifosì *et al.* per i kernel xc relativi a eccitazioni a due coppie è mostrata in Fig. 1.12, confrontata con un tentativo precedente di Gross and Kohn [38] di valutazione dello spettro longitudinale con un'interpolazione “smooth” tra basse e alte frequenze. Uno schema di interpolazione più accurato sia per lo spettro longitudinale che per quello trasverso, che includa i corretti comportamenti asintotici e che tenga esplicitamente conto della componente a due plasmoni, è stato presentato da Qian e Vignale [43]. Un'interpolazione smooth è maggiormente giustificata nell'EL 2D, dove la legge di dispersione $q^{1/2}$ del plasmone a grandi lunghezze d'onda assicura che non esistano soglie brusche per il canale a due plasmoni.

1.3.4 Teoria del Funzionale di Densità Dipendente dal Tempo

Secondo un teorema di Runge e Gross [44], le densità $n(\mathbf{r}, t)$ e $\tilde{n}(\mathbf{r}, t)$ che, partendo da uno stato iniziale comune $|\Psi_0\rangle$, evolvono nel tempo in un sistema a molti corpi soggetto a due diversi potenziali esterni $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$ e $\tilde{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$ che possano essere scritti come un'espansione di Taylor attorno al

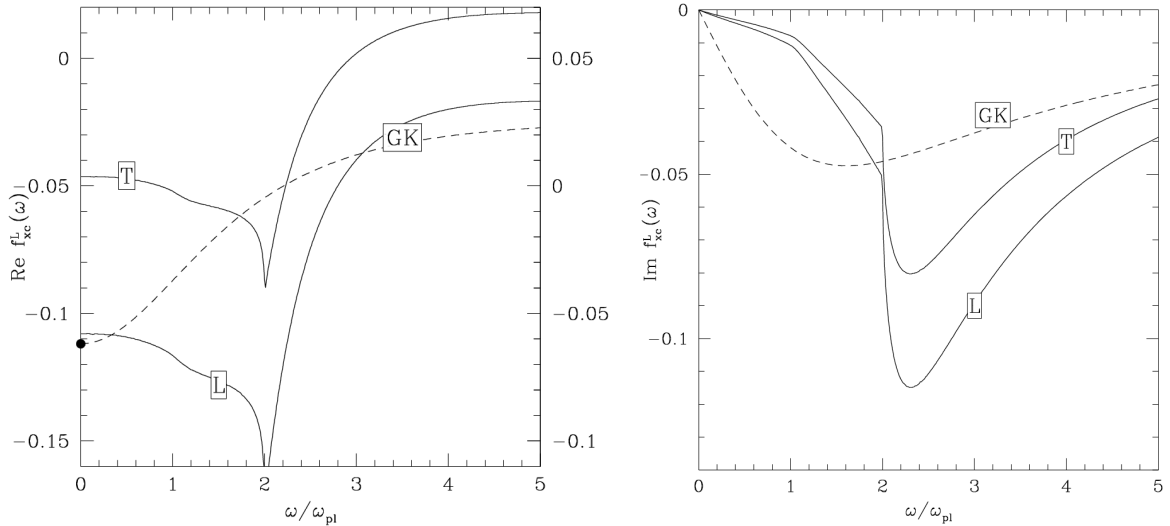


Figura 1.12: Parte reale (a sinistra) e parte immaginaria (a destra) dei kernel longitudinale e trasverso di scambio e correlazione calcolati da Nifosì *et al.* per il liquido elettronico 3D a $r_s = 3$, in unità di $2\omega_p/n$, come funzioni di ω/ω_p . La linea tratteggiata rappresenta il kernel proposto da Gross and Kohn tramite uno schema interpolativo tra basse e alte frequenze. Nella figura di sinistra il punto indica il valore del kernel longitudinale ottenuto dai dati QMC relativi alla compressibilità dell'EL, e sull'asse verticale destro è riportata la scala per il kernel trasverso.

tempo iniziale t_0 , sono necessariamente diverse a patto che i due potenziali differiscano per più di una funzione puramente tempo-dipendente. Il teorema permette di derivare un'equazione di Schrödinger di tipo Kohn-Sham per un set di orbitali di singola particella dipendenti dal tempo $\phi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma, t)$, per descrivere come la densità di un sistema elettronico evolve nel tempo a partire dal suo stato fondamentale imperturbato, sotto l'azione di un potenziale esterno dipendente dal tempo. È necessario trovare approssimazioni adatte per il termine di scambio e correlazione ($V_{xc}[n](\mathbf{r}, t)$, diciamo) nel potenziale di Kohn-Sham dipendente dal tempo.

Una forma diffusa per $V_{xc}[n](\mathbf{r}, t)$ è quella data dalla cosiddetta approssimazione adiabatica di densità locale (ALDA), nella quale si assume che $V_{xc}[n](\mathbf{r}, t)$ sia il potenziale LDA statico calcolato alla densità istantanea. Ovverosia,

$$V_{xc}^{(ALDA)}[n](\mathbf{r}, t) = \left. \frac{d[n e_{xc}(n)]}{dn} \right|_{n=n(\mathbf{r}, t)} \quad (1.167)$$

come nel corrispondente problema statico trattato nella LDA. La ALDA incorpora la corretta compressibilità del liquido elettronico, ma non descrive correttamente la dispersione plasmonica e ignora completamente lo smorzamento del plasmon, così come le fluttuazioni di corrente trasversa. Nel contesto dell'idrodinamica linearizzata per un fluido monoatomico, la ALDA fornirebbe la velocità del suono idrodinamico isoterma, ma non terrebbe conto dello smorzamento delle onde sonore, nè prevederebbe una possibile transizione da regime collisionale a regime non-collisionale, cosa che invece può accadere con l'aumento della frequenza o la diminuzione della temperatura.

Mentre questo tipo di approssimazione ben si presta nella trattazione di fenomeni di bassa frequenza, un'analisi dei vincoli imposti da semplici leggi di conservazione ha mostrato che possono

nascere inconsistenze, legate in ultimo alla non-esistenza di un'espansione in gradiente per il potenziale xc a frequenza finita ω in termini della sola densità elettronica. Parlando della dinamica del fluido elettronico, diventano importanti oltre alle correnti longitudinali, legate alle fluttuazioni di densità tramite l'equazione di continuità, anche le correnti trasverse.

In ogni caso, la ALDA ha riscontrato notevole successo nei calcoli degli spettri di eccitazione di singola particella sia in sistemi atomici che in sistemi estesi [45]. Processi di eccitazione a molte coppie sono esclusi, ma in molti casi questi diventano importanti solo a frequenze molto più alte di quelle di interesse pratico.

1.3.5 Teoria del Funzionale di Densità di Corrente

Vignale e Kohn [46] hanno proposto di superare le difficoltà appena descritte ricorrendo a un potenziale xc *vettoriale* anche per il caso di sistemi soggetti a un potenziale esterno *scalare*. Essi hanno ottenuto un'espressione per il potenziale vettore xc nel regime di risposta lineare in termini di kernel che vanno calcolati sull'EL omogeneo alla densità di equilibrio locale. La loro espressione diventa esatta quando la densità di equilibrio e il potenziale esterno variano lentamente nello spazio, su scale di lunghezza date da $1/k_F$ e v_F/ω rispettivamente.

Seguendo questo approccio, la variazione di densità di corrente indotta è scritta come

$$\delta \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) = \int d^3 \mathbf{r}' \chi_{\mathbf{J}\mathbf{J}}^{\text{KS}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot [\mathbf{a}_{\text{ext}}(\mathbf{r}', \omega) + \mathbf{a}_{\text{H}}(\mathbf{r}', \omega) + \mathbf{a}_{\text{xc}}(\mathbf{r}', \omega)] \quad (1.168)$$

dove $\chi_{\mathbf{J}\mathbf{J}}^{\text{KS}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ è il tensore di risposta di Kohn-Sham di un sistema di riferimento non-interagente, $\mathbf{a}_{\text{ext}}(\mathbf{r}, \omega)$ è il potenziale vettore applicato al sistema, $\mathbf{a}_{\text{H}}(\mathbf{r}, \omega)$ è il termine di campo medio di Hartree, e $\mathbf{a}_{\text{xc}}(\mathbf{r}, \omega)$ è il potenziale vettore xc. Quest'ultimo è legato alla densità di corrente indotta dalla relazione

$$\mathbf{a}_{\text{xc}}(\mathbf{r}, \omega) = \int d^3 \mathbf{r}' \mathbf{f}_{\text{xc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \cdot \delta \mathbf{j}(\mathbf{r}', \omega). \quad (1.169)$$

I kernel tensoriali $\mathbf{f}_{\text{xc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ che compaiono nell'Eq. (1.169) godono di alcune proprietà esatte, che sono necessarie per poterli mettere in relazione, nel limite di debole disomogeneità, agli analoghi kernel per il liquido elettronico calcolati alla densità elettronica locale. Le suddette proprietà sono:

- (i) le relazioni di reciprocità di Onsager;
- (ii) i teoremi di forza nulla e momento nullo (in breve, la forza netta e il momento netto esercitati dal potenziale xc sul sistema devono essere nulli);
- (iii) un'identità di Ward che incorpora la regola di somma della compressibilità per l'EL omogeneo.

Come risultato finale, la correzione dinamica al potenziale vettore xc ALDA è espressa in termini del *campo di velocità* indotto $\mathbf{u}(\mathbf{r}, \omega) = \delta \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega)/n(\mathbf{r})$ e del kernel di densità di corrente xc omogeneo $\mathbf{f}_{\text{xc}}^{\text{hom}}(\mathbf{q}, \omega)$, valutato alla densità di equilibrio locale $n(\mathbf{r})$. Il kernel può essere separato nella somma di una componente longitudinale e di una trasversa:

$$f_{\text{xc}, ij}^{\text{hom}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega^2} [f_{\text{xc}}^L(\omega) q_i q_j + f_{\text{xc}}^T(\omega) (q^2 \delta_{ij} - q_i q_j)]. \quad (1.170)$$

Questi kernel sono legati in maniera diretta alle funzioni di risposta corrente-corrente presentate nella sezione (1.3.3).

La bellezza di questo approccio è che il kernel xc può essere riscritto in maniera fisicamente trasparente tramite un tensore degli sforzi visco-elastico $\boldsymbol{\sigma}$, permettendo in tal modo una formulazione *idrodinamica generalizzata* della teoria [47, 41]. Nel limite di grandi lunghezze d'onda la terza legge di Newton implica che la forza xc esercitata su un elemento di volume può essere riscritta come la divergenza di un tensore degli sforzi simmetrico, che dipende solo dalle proprietà locali del fluido. Il vincolo di momento torcente nullo è soddisfatto con un tale tensore simmetrico. L'invarianza per trasformazioni di Galileo implica che il campo di velocità può entrare nel tensore degli sforzi solo attraverso il suo gradiente, che è piccolo a grandi lunghezze d'onda anche se la velocità di per sé non lo è. La forza xc agente su una particella nel regime di risposta lineare è $\mathbf{F}^{(xc)} = -i\omega \mathbf{a}_{xc}$ ed è data dalla formula

$$F_i^{(xc)}(\mathbf{r}, \omega) = -\nabla_i V_{xc}^{(ALDA)}(\mathbf{r}, \omega) + \frac{1}{n(\mathbf{r})} \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}^{(xc)}(\mathbf{r}, \omega)}{\partial r_j}. \quad (1.171)$$

Il tensore degli sforzi xc è

$$\sigma_{ij}^{(xc)} = \eta_{xc}(\omega) \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + \zeta_{xc}(\omega) \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (1.172)$$

in completa analogia con le leggi dell'idrodinamica linearizzata, generalizzate per poter tener conto di fenomeni di frequenza finita tramite la dipendenza da ω di $\eta_{xc}(\omega)$ e $\zeta_{xc}(\omega)$. Questi sono i contributi xc *complessi* alla viscosità propria e alla viscosità di taglio, le quali sono legate ai kernel xc da

$$\begin{cases} \eta_{xc}(\omega; n) = -n^2 f_{xc}^T(\omega; n)/(i\omega) \\ \zeta_{xc}(\omega; n) = -n^2 [f_{xc}^L(\omega; n) - 4f_{xc}^T(\omega; n)/3 - d^2 \varepsilon_{xc}(n)/dn^2]/(i\omega) \end{cases}. \quad (1.173)$$

La teoria dell'elasticità connette queste funzioni al modulo di taglio e al coefficiente di compressibilità di un mezzo elastico isotropo secondo le relazioni $\mu_{xc}^{dyn}(\omega) = \omega \Im \eta_{xc}(\omega)$ e $K_{xc}^{dyn}(\omega) = \omega \Im \zeta_{xc}(\omega)$. Nel limite statico la quantità $K_{xc}^{dyn}(\omega)$ si annulla, poichè in tale limite la resistenza alla compressione è descritta dal solo coefficiente di compressibilità statico già contenuto nel termine ALDA.

Riassumendo, le correzioni alla forza di richiamo ALDA nel regime di risposta lineare e di debole disomogeneità includono gli effetti visco-elastici associati alle costanti elastiche e ai coefficienti di attrito ω -dipendenti, dati dalla parte immaginaria e dalla parte reale della viscosità xc. È inoltre utile sottolineare che la teoria degli effetti di scambio e correlazione in sistemi a molti corpi dipendenti dal tempo può essere generalizzata al regime non-lineare [48]. I kernel xc $f_{xc}^{L,T}(\omega)$ del liquido elettronico (o equivalentemente i corrispondenti fattori di campo locale) determinano completamente il potenziale efficace dinamico nel regime lineare e anche in quello non-lineare, a condizione che sia la densità elettronica, sia il campo di velocità siano lentamente variabili nello spazio.

Una proposta molto recente per estendere la teoria del funzionale di densità dipendente dal tempo oltre all'approssimazione ALDA è stata fatta da Tokatly [49], sempre sulla base dell'idrodinamica quantistica e la teoria dell'elasticità, ma lavorando in un sistema di riferimento lagrangiano solidale. Questo nuovo approccio risulta identico alla teoria del funzionale di densità di corrente in certi limiti, ma mostra alcune differenze nel modo di trattare la dinamica elastica e dissipativa degli elettroni.

Capitolo 2

Teoria del coefficiente di spin drag

In questo capitolo verrà introdotta una caratteristica distintiva dei fenomeni di trasporto in sistemi spin-polarizzati: a causa delle correlazioni tra elettroni di spin opposto, per una corrente di spin si genera un meccanismo intrinseco fonte di attrito, detto *spin coulomb drag* o semplicemente *spin drag* (sd).

2.1 Introduzione e definizioni

Alla base del fenomeno dello spin drag vi sta il fatto che le componenti ‘up’ e ‘down’ dell’impulso totale, definite come $\mathbf{P}_\uparrow = \sum_{\sigma_i=\uparrow} \mathbf{p}_i$ e $\mathbf{P}_\downarrow = \sum_{\sigma_i=\downarrow} \mathbf{p}_i$ rispettivamente, non sono separatamente conservate, nonostante lo sia l’impulso totale del sistema $\mathbf{P} = \sum_i \mathbf{p}_i$. Infatti, l’interazione può trasferire impulso tra elettroni di spin diverso, introducendo in tal modo a tutti gli effetti un “attrito” nel moto relativo delle due componenti di spin. Ad esempio, se una delle due componenti è posta in moto rispetto all’altra, essa tenderà a trascinare (“drag”) quest’ultima nella stessa direzione, e ne verrà a sua volta frenata. Una corrente di spin ($\langle P_\uparrow \rangle \neq \langle P_\downarrow \rangle$), in assenza del campo esterno che l’ha generata, tenderà dunque inevitabilmente ad annullarsi a causa dello spin drag. Tale forma di attrito è quantificata da un *coefficiente di spin drag* γ , definito attraverso un’equazione del moto fenomenologica per la velocità \mathbf{v}_σ degli elettroni di spin σ [50]:

$$mN_\sigma \dot{\mathbf{v}}_\sigma = -eN_\sigma \mathbf{E}_\sigma + \mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}} - \frac{m}{\tau_D} N_\sigma \mathbf{v}_\sigma \quad (2.1)$$

$$\mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}} = -\gamma m N_\sigma \frac{n_{\bar{\sigma}}}{n} (\mathbf{v}_\sigma - \mathbf{v}_{\bar{\sigma}}) \quad (2.2)$$

Si è indicato con \mathbf{v}_σ la velocità del centro di massa degli elettroni di spin σ , con N_σ il numero di tali elettroni e con n_σ la corrispondente densità. τ_D è il tempo di scattering (collisione) di Drude: descrive anch’esso una forma di dissipazione, ma non mescola le due popolazioni di spin. Infine, $\mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}}$ è la forza mediata dalle interazioni esercitata dagli elettroni di spin $\bar{\sigma}$ ($= -\sigma$) sugli elettroni di spin σ ; è questo il contributo interessante nell’equazione del moto (2.1), con il quale si intende descrivere lo spin drag, legando le due componenti di spin. Dalla terza legge di Newton abbiamo che $\mathbf{F}_{\sigma\bar{\sigma}} = -\mathbf{F}_{\bar{\sigma}\sigma}$, e inoltre per invarianza galileiana tale forza può dipendere solamente dalla velocità relativa delle due componenti [51]. Perciò, al primo ordine nelle interazioni, siamo autorizzati a scrivere la (2.2).

Consideriamo ora l’equazione (2.1) in trasformata di Fourier e, facendo uso della relazione

$\mathbf{j}_\sigma(\omega) = -en_\sigma \mathbf{v}_\sigma(\omega)$ tra densità di corrente e velocità, otteniamo:

$$i\omega \mathbf{j}_\sigma(\omega) = -\frac{n_\sigma e^2}{m} \mathbf{E}_\sigma(\omega) + \left(\frac{n_{\bar{\sigma}}}{n} \gamma + \frac{1}{\tau_D} \right) \mathbf{j}_\sigma(\omega) - \frac{n_\sigma}{n} \gamma \mathbf{j}_{\bar{\sigma}}(\omega) \quad (2.3)$$

La matrice di resistività $\rho_{\sigma\sigma'}$ è definita come il coefficiente di proporzionalità tra il campo elettrico e la densità di corrente:

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j} \quad \text{cioè} \quad \mathbf{E}_\sigma = \sum_{\sigma'} \rho_{\sigma\sigma'} \mathbf{j}_{\sigma'} \quad (2.4)$$

Confrontando questa espressione con l'Eq. (2.3) si deduce che il coefficiente di spin drag è direttamente proporzionale alla trans-resistività di spin:

$$\gamma = -\frac{ne^2}{m} \rho_{\uparrow\downarrow}. \quad (2.5)$$

Si tratta ora dunque di calcolare microscopicamente la trans-resistività di spin. Tale calcolo, eseguito da D'Amico e Vignale [50], si riduce in ultimo alla valutazione della funzione di risposta a quattro punti

$$\langle\langle \rho_{-\mathbf{q}\uparrow} \rho_{\mathbf{q}\downarrow}; \rho_{\mathbf{q}'\uparrow} \rho_{-\mathbf{q}'\downarrow} \rangle\rangle_\omega. \quad (2.6)$$

In un'approssimazione di RPA generalizzata tale funzione può essere scritta come somma di convoluzioni delle funzioni di risposta a due punti [52]:

$$\Im m \langle\langle AB; CD \rangle\rangle_\omega \simeq - \int_0^\omega \frac{d\omega'}{\pi} [\Im m \langle\langle A; C \rangle\rangle_{\omega'} \Im m \langle\langle B; D \rangle\rangle_{\omega-\omega'} + \Im m \langle\langle A; D \rangle\rangle_{\omega'} \Im m \langle\langle B; C \rangle\rangle_{\omega-\omega'}]. \quad (2.7)$$

In questo modo la parte reale della trans-resistività di spin è data da (qui riprendiamo a scrivere \hbar dove presente):

$$\begin{aligned} \Re e \rho_{\uparrow\downarrow}(\omega, T) &\simeq \frac{\hbar}{n_\uparrow n_\downarrow e^2 V_D} \sum_q \frac{q^2}{D} v_q^2 \frac{(e^{-\beta\hbar\omega} - 1)}{\omega} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{[\Im m \chi_{\uparrow\uparrow}(q, \omega') \Im m \chi_{\downarrow\downarrow}(q, \omega - \omega') - \Im m \chi_{\uparrow\downarrow}(q, \omega') \Im m \chi_{\downarrow\uparrow}(q, \omega - \omega')]}{(e^{-\beta\hbar\omega'} - 1)(e^{-\beta\hbar(\omega - \omega')} - 1)}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Si è posto, come usualmente, $\beta = 1/(k_B T)$, con k_B costante di Boltzmann; $\chi_{\sigma\sigma'}(q, \omega)$ è la funzione di risposta RPA densità-densità spin-risolta, ed è legata alla funzione di risposta noninteragente $\chi_\sigma^0(q, \omega)$ dalla relazione:

$$\begin{aligned} \chi_{\sigma\sigma'}(q, \omega) &= \frac{\chi_{0\sigma}(q, \omega)}{1 - v_q \chi_{0\sigma}(q, \omega)}; \\ [\chi^{-1}(q, \omega)]_{\sigma\sigma'} &= [\chi_{0\sigma}]^{-1}(q, \omega) \delta_{\sigma\sigma'} - v_q. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Utilizzando tale relazione troviamo che al secondo ordine perturbativo il coefficiente di spin drag (statico) è dato da

$$\begin{aligned} \gamma(T) &= -\frac{ne^2}{m} \rho_{\uparrow\downarrow}(\omega \rightarrow 0, T) \\ &\simeq \frac{n\hbar^2}{4mn_\uparrow n_\downarrow} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{q^2}{D} v_q^2 \left(\frac{1}{k_B T} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\Im m \chi_{0\uparrow}(q, \omega') \Im m \chi_{0\downarrow}(q, \omega')}{\sinh^2(\hbar\omega'/2k_B T)}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

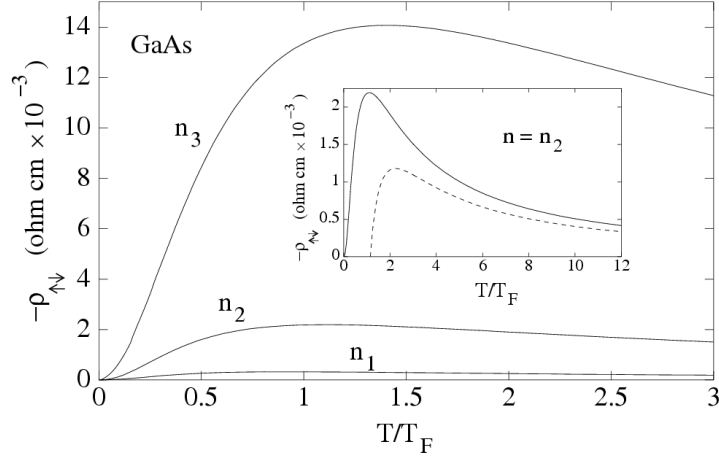


Figura 2.1: Trans-resistività di spin $\rho_{\uparrow\downarrow}$ per un gas di elettroni 3D in un semiconduttore drogato (GaAs) nello stato paramagnetico, in funzione della temperatura riscaldata T/T_F . I parametri del semiconduttore sono $m^*/m_e = 0.067$, $\epsilon = 12$, $\mu = 3 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ (mobilità). Ogni curva corrisponde a una diversa densità di portatori: $n_1 = 1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $n_2 = 1.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $n_3 = 1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Nell'inserto: confronto tra $\rho_{\uparrow\downarrow}$ e la sua approssimazione analitica nel regime non degenere (per $n = n_2$). Si noti come il picco di $\rho_{\uparrow\downarrow}$ corrisponda a $T \approx T_F$, evidenziando la transizione da regime degenere a non degenere. Figura presa dalla Ref. [54].

dove si è usato il fatto che la parte immaginaria della funzione di risposta è una funzione dispari della frequenza. È possibile dimostrare [50] che l'espressione (2.10) è in realtà l'espansione esatta al secondo ordine perturbativo della funzione a quattro punti (2.6); questa proprietà è valida per la combinazione di operatori di fluttuazione di densità presente nella (2.6), ma non per operatori generici A, B, C, D .

Facciamo inoltre notare che la teoria delle perturbazioni al secondo ordine nel caso 2D e 3D porta a delle divergenze infrarosse ($q \rightarrow 0$) nell'integrale della (2.10), legate al lungo raggio del potenziale coulombiano. Tali divergenze si possono eliminare, ad esempio, schermando il potenziale: nel caso tridimensionale si scrive $4\pi e^2/q^2 \rightarrow 4\pi e^2/(q^2 + \kappa_{\text{TF}}^2)$, dove κ_{TF} è la lunghezza inversa di schermo di Thomas-Fermi, definita nella sezione 1.1.3. Tuttavia, in questo lavoro di tesi per v_q sarà utilizzato:

- (i) un potenziale di contatto $v(x) = g_{1\text{D}}\delta(x)$, con trasformata di Fourier pari alla costante $g_{1\text{D}}$, utilizzato ad esempio per modellizzare l'interazione in un gas di atomi freddi. La notazione $g_{1\text{D}}$ è quella usualmente usata per il modello di Gaudin-Yang [53], che utilizzeremo più avanti.
- (ii) il potenziale coulombiano 1D, la cui trasformata di Fourier ha una divergenza molto meno problematica dei casi 2D e 3D: come mostrato nella sezione 1.1.1, per $q \rightarrow 0$ nel caso unidimensionale si ha $v_q \propto -\ln(qa)$, e l'integrale (2.10) che definisce γ risulta convergente.

Nel lavoro citato [50] di D'Amico e Vignale, in cui è sviluppata la teoria completa dello spin drag, e in un lavoro successivo degli stessi autori [54], il calcolo di $\rho_{\uparrow\downarrow}$ è specializzato al solo caso tridimensionale, in vari regimi di temperatura. Riportiamo qui una figura presa da [54], relativa all'andamento di $\rho_{\uparrow\downarrow}$ in funzione della temperatura, per diversi valori della densità. Il comportamento della trans-resistività di spin consiste in un aumento monotono a basse temperature, seguito

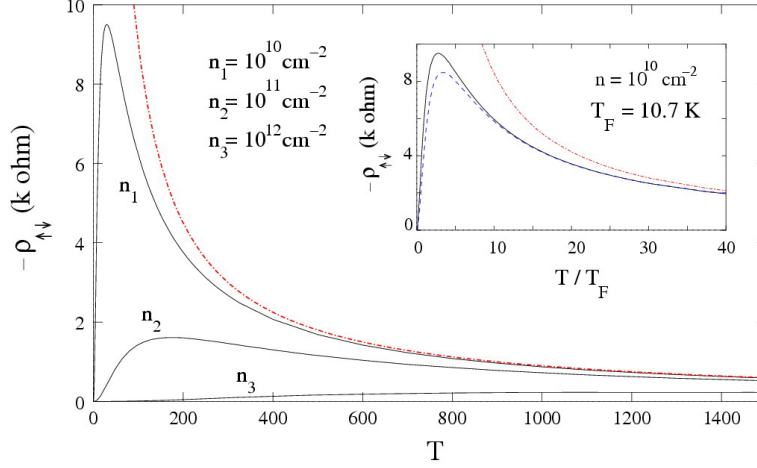


Figura 2.2: Trans-resistività di spin per un gas di elettroni 2D al variare della temperatura (in Kelvin), per diverse densità e con valori di massa efficace e costante dielettrica appropriati per InAs ($m^*/m_e = 0.026$, $\epsilon = 13.6$). La linea rossa tratto-punto rappresenta il comportamento limite universale nel regime completamente non degenere. Nell'inserto: confronto tra $\rho_{\uparrow\downarrow}$ (linea continua) e una sua approssimazione per $T \gg T_F$ [55] (linea tratteggiata blu). Le curve sono calcolate per $n = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ e graficate vs la temperatura riscalata T/T_F . Figura dalla Ref. [55].

da saturazione in corrispondenza della temperatura di Fermi, e da una lenta decrescita ad alte temperature (si veda la figura 2.1). È da notare inoltre come $\rho_{\uparrow\downarrow}$ aumenti notevolmente al decrescere della densità, principalmente a causa del fattore $1/n^2$ nella (2.8). In un diverso lavoro del 2003 [55], D'amico e Vignale hanno calcolato la trans-resistività di spin per un sistema elettronico bidimensionale, utilizzando un calcolo di tipo RPA. Rimandiamo al lavoro citato per i calcoli dettagliati, mostrando qui solo l'andamento di $\rho_{\uparrow\downarrow}$ al variare della temperatura per diversi valori di densità (figura 2.2). Si osserva che tale andamento è qualitativamente analogo a quello del caso tridimensionale, con un picco caratteristico a $T \approx T_F$. I calcoli quantitativi mostrano che però i comportamenti asintotici in temperatura e in densità sono significativamente diversi.

A partire dalla prossima sezione, noi ci occuperemo esclusivamente di spin drag in sistemi unidimensionali. Essendo un processo di tipo dissipativo, spesso lo spin drag viene quantificato con un tempo di rilassamento τ_{sd} , definito come l'inverso del coefficiente di spin drag, $\gamma = 1/\tau_{\text{sd}}$; per cui da qui in avanti adotteremo tale notazione.

2.2 Spin drag in sistemi unidimensionali

Ci dedichiamo in questa sezione al caso $D = 1$. La parte immaginaria della funzione di risposta di Lindhard a T finita per il caso unidimensionale si scrive:

$$\frac{\Im m \chi_{0\sigma}(q, \omega)}{N_{\sigma}(0)} = -\frac{\pi k_{F\sigma}}{2q} \left\{ \frac{1}{\exp\{[\nu_{-, \sigma}^2 e_{F\sigma} - \mu_{\sigma}(T)]/k_B T\} + 1} - \frac{1}{\exp\{[\nu_{+, \sigma}^2 e_{F\sigma} - \mu_{\sigma}(T)]/k_B T\} + 1} \right\}, \quad (2.11)$$

dove $k_{F\sigma}$ è il numero d'onda di Fermi per la popolazione di spin σ , mentre $N_\sigma(0) = m/(\pi\hbar^2 k_{F\sigma})$ è la densità di stati di spin σ al livello di Fermi, per unità di volume; si è inoltre definita la quantità adimensionale (già utilizzata nel Capitolo 1)

$$\nu_{\pm,\sigma} = \frac{m\omega}{q\hbar k_{F\sigma}} \pm \frac{q}{2k_{F\sigma}}. \quad (2.12)$$

I due potenziali chimici $\mu_\sigma(T)$ sono determinati in maniera implicita dal vincolo:

$$n_\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{(\exp\{[e_k - \mu_\sigma(T)]/k_B T\} + 1)}, \quad (2.13)$$

che esprime la conservazione del numero medio di particelle con dato spin σ . Per futura utilità, ricordiamo che per un sistema non polarizzato (detto anche paramagnetico) si ha la relazione $k_F = \pi n/2$, con n densità totale. Per un sistema polarizzato nello spin, si definisce la polarizzazione di spin $\zeta = (n_\uparrow - n_\downarrow)/n$, e in funzione di questa si esprimono raggi di Fermi e densità di spin: $k_{F\uparrow,\downarrow} = k_F(1 \pm \zeta)$; $n_{\uparrow,\downarrow} = n(1 \pm \zeta)/2$. Operando le sostituzioni nella formula (2.10), dopo alcune semplificazioni algebriche si arriva all'espressione

$$\frac{1}{\tau_{sd}(T)} = \frac{mn}{8\pi^2\hbar^2 n_\uparrow n_\downarrow} \frac{1}{k_B T} \int_0^\infty dq v_q^2 \int_0^\infty d\omega \frac{I(q, \omega)}{\sinh^2(\hbar\omega/2k_B T)}, \quad (2.14)$$

dove $I(q, \omega)$ resta definito dall'equazione seguente:

$$I(q, \omega) = \left\{ \frac{1}{e^{[\nu_{-,1}^2 e_{F\uparrow} - \mu_\uparrow(T)]/k_B T} + 1} - \frac{1}{e^{[\nu_{+,1}^2 e_{F\uparrow} - \mu_\uparrow(T)]/k_B T} + 1} \right\} \times \left\{ \frac{1}{e^{[\nu_{-,1}^2 e_{F\downarrow} - \mu_\downarrow(T)]/k_B T} + 1} - \frac{1}{e^{[\nu_{+,1}^2 e_{F\downarrow} - \mu_\downarrow(T)]/k_B T} + 1} \right\}. \quad (2.15)$$

L'integrale doppio dell'espressione (2.14) non è in generale valutabile analiticamente; è tuttavia possibile determinarne l'espressione asintotica nei due limiti $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$. Esponiamo nelle due sottosezioni successive i risultati relativi al caso non polarizzato, riportati anche da Polini *et al.* [56], e quelli relativi al caso polarizzato, che costituiscono invece parte del lavoro originale di questa tesi.

2.2.1 Sistemi non polarizzati

In un sistema non polarizzato si ha egual numero di elettroni a spin up ed elettroni a spin down, ovverosia la polarizzazione di spin è nulla, $\zeta = 0$. In tal caso si hanno le semplificazioni:

$$n_\sigma = n/2; \quad k_{F\sigma} = k_F; \quad e_{F\sigma} = e_F; \quad \nu_{\pm,\sigma} = \nu_{\pm}; \quad \mu_\sigma = \mu, \quad (2.16)$$

e di conseguenza anche $\Im m \chi_{0\uparrow} = \Im m \chi_{0\downarrow}$. Quindi l'espressione (2.14) per $1/\tau_{sd}$ diventa:

$$\frac{1}{\tau_{sd}(T)} = \frac{m}{2\pi^2\hbar^2 n} \frac{1}{k_B T} \int_0^\infty dq v_q^2 \int_0^\infty d\omega \frac{I(q, \omega)}{\sinh^2(\hbar\omega/2k_B T)}, \quad (2.17)$$

dove ora $I(q, \omega)$ è dato semplicemente da

$$I(q, \omega) = \left\{ \frac{1}{e^{[\nu_-^2 e_F - \mu(T)]/k_B T} + 1} - \frac{1}{e^{[\nu_+^2 e_F - \mu(T)]/k_B T} + 1} \right\}^2. \quad (2.18)$$

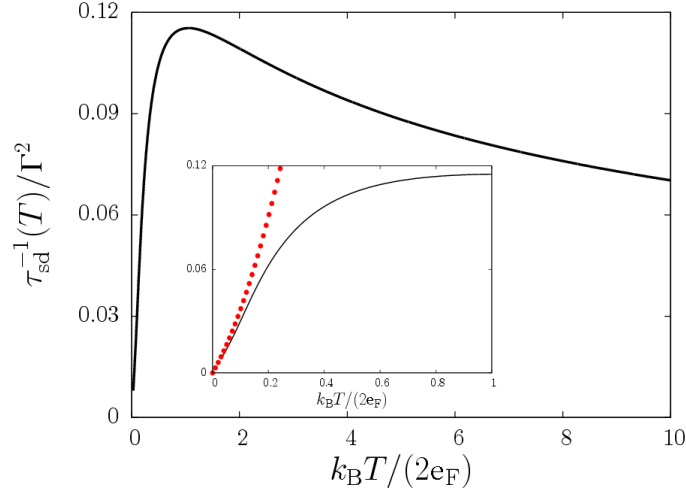


Figura 2.3: Tempo di rilassamento di spin drag τ_{sd} (in unità di e_F/\hbar e diviso per Γ^2) in funzione della temperatura ridotta $k_B T/(2e_F)$. Nell'inserto mostriamo uno zoom della regione di basse temperature $0 < k_B T/(2e_F) < 1$: i cerchi rossi rappresentano il risultato analitico (2.19). Figura presa dalla Ref. [56].

Limite $T \rightarrow 0$

Nel limite di basse temperature si ha la semplificazione ulteriore $\mu(T) \rightarrow \mu_0 = e_F$. Utilizzando le opportune approssimazioni nell'integrando della formula (2.17) si trova che nel limite di basse temperature il risultato è dato dalla somma di due contributi, uno lineare in T e l'altro quadratico, provenienti dalla regione di impulsi $q \approx 2k_F$ e dalla regione $q \approx 0$ rispettivamente:

$$\frac{1}{\tau_{sd}(T)} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \left[\frac{8}{9\pi} \Gamma_{2k_F}^2 \left(\frac{k_B T}{2e_F} \right) + \frac{8}{3\pi} \Gamma_0^2 \left(\frac{k_B T}{2e_F} \right)^2 \right] \frac{e_F}{\hbar}. \quad (2.19)$$

I coefficienti adimensionali Γ_q sono definiti come $\Gamma_q = mv_q/(n\hbar^2)$; dunque tutta l'espressione entro parentesi quadre è adimensionale e $1/\tau_{sd}$ è espresso in unità di e_F/\hbar (usiamo la notazione del lavoro di Polini *et al.* [56]). Per $T \rightarrow 0$ il primo termine domina sul secondo e quindi lo spin drag decresce linearmente a basse temperature. Tale andamento è confermato (si veda la figura 2.3) dai risultati delle simulazioni a calcolatore che abbiamo eseguito utilizzando un programma in C++, il quale valuta l'integrale doppio della (2.17) ad ogni dato valore di temperatura. Osserviamo però che, se consideriamo una temperatura finita e fissata, il peso relativo dei due contributi alla (2.19) è determinato dal rapporto Γ_0/Γ_{2k_F} , che dipende dalla forma del potenziale scelto. È così possibile che alle temperature tipicamente raggiungibili in un lavoro sperimentale il contributo lineare in T sia trascurabile rispetto a quello quadratico, proveniente da $q \approx 0$ (ciò è vero ad esempio per il potenziale coulombiano, essendo v_q monotono decrescente [57]).

Limite $T \rightarrow \infty$

Partendo dal regime $T \approx 0$ e aumentando la temperatura, il calcolo numerico mostra che $1/\tau_{sd}$ prima aumenta e arriva a saturazione in corrispondenza di una temperatura $k_B T \approx 2e_F$, e poi decade a zero in maniera piuttosto lenta (figura 2.3). L'andamento analitico esatto per $T \rightarrow \infty$ si

ottiene utilizzando nella (2.18) la forma asintotica di $\mu(T)$,

$$\mu(T \rightarrow \infty) \sim k_B T \log \left(\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} n \right) = -\frac{k_B T}{2} \log \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2 n^2} \right), \quad (2.20)$$

che conduce all'espressione

$$\frac{1}{\tau_{sd}}(T) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{\hbar}{2m} \frac{8}{\pi^{7/2}} \left(\frac{k_B T}{2\varepsilon_F} \right)^{-3/2} \int_0^{+\infty} dq \, q \, \Gamma_q^2 \exp[-e_q/(2k_B T)], \quad (2.21)$$

dove si è posto $e_q = \hbar^2 q^2 / (2m)$. Nel caso di un potenziale di contatto, $v_q = g_{1D}$ (usiamo anche qui la notazione usuale nel contesto del modello di Gaudin-Yang [53]), l'integrazione in dq è banale e l'equazione 2.21 prevede un decadimento molto lento:

$$\frac{1}{\tau_{sd}}(T) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{16}{\pi^{7/2}} \Gamma^2 \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{k_B T}} \frac{e_F}{\hbar}, \quad (2.22)$$

dove, coerentemente con quanto scritto sopra, si è posto $\Gamma = mg_{1D}/(n\hbar^2)$. Le espressioni analitiche 2.19 e 2.21 sono in accordo con i risultati della Ref. [57] relativi al Coulomb drag ordinario tra due fili quantici paralleli (riguardo al Coulomb drag si veda anche [58]).

2.2.2 Sistemi polarizzati nello spin

Per polarizzazione ζ non nulla bisogna utilizzare per $1/\tau_{sd}$ l'espressione completa data dalle equazioni (2.14) e (2.15). Il calcolo è più complesso rispetto al caso paramagnetico e porta a risultati significativamente diversi.

Limite $T \rightarrow 0$

L'analisi della funzione $I(q, \omega) / \sinh^2(\hbar\omega/2k_B T)$ presente nell'integrando della (2.14), esposta nei dettagli in Appendice B, mostra che nel limite $T \rightarrow 0$ questa decade in maniera esponenziale e il contributo importante viene da una regione nel piano (q, ω) all'interno della quale tale funzione assume valore costante (a parte correzioni di ordine esponenziale superiore). Precisamente, si ha che

$$\frac{I(q, \omega)}{\sinh^2(\hbar\omega/2k_B T)} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 4 \exp \left(-\frac{4e_F}{k_B T} \zeta \right), \quad (2.23)$$

su un dominio (q, ω) dato dall'unione di due regioni sconnesse, che abbiamo chiamato "Olive-leaf" e "Shark fin" a causa della loro forma caratteristica (si veda la figura 2.4). Tali regioni sono individuate tramite le curve $\omega(q)$ che le delimitano. Introduciamo per comodità le variabili adimensionali $y \equiv \hbar\omega/e_F$ e $x \equiv q/k_F$, utilizzate anche nei grafici riportati di seguito. Allora si ha che la regione a Olive-leaf si estende tra $x = 0$ e $x = 2\zeta$ ed è delimitata nel piano (x, y) dalle curve

$$\begin{cases} y_1(x) = x^2 + 2x(1 - \zeta), \\ y_2(x) = -x^2 + 2x(1 + \zeta), \end{cases} \quad (2.24)$$

mentre la regione Shark fin è compresa tra $x = 2(1 - \zeta)$ e $x = 2(1 + \zeta)$, con bordi dati dalle curve

$$\begin{cases} y_2(x) = -x^2 + 2x(1 + \zeta), \\ y_3(x) = x^2 - 2x(1 - \zeta). \end{cases} \quad (2.25)$$

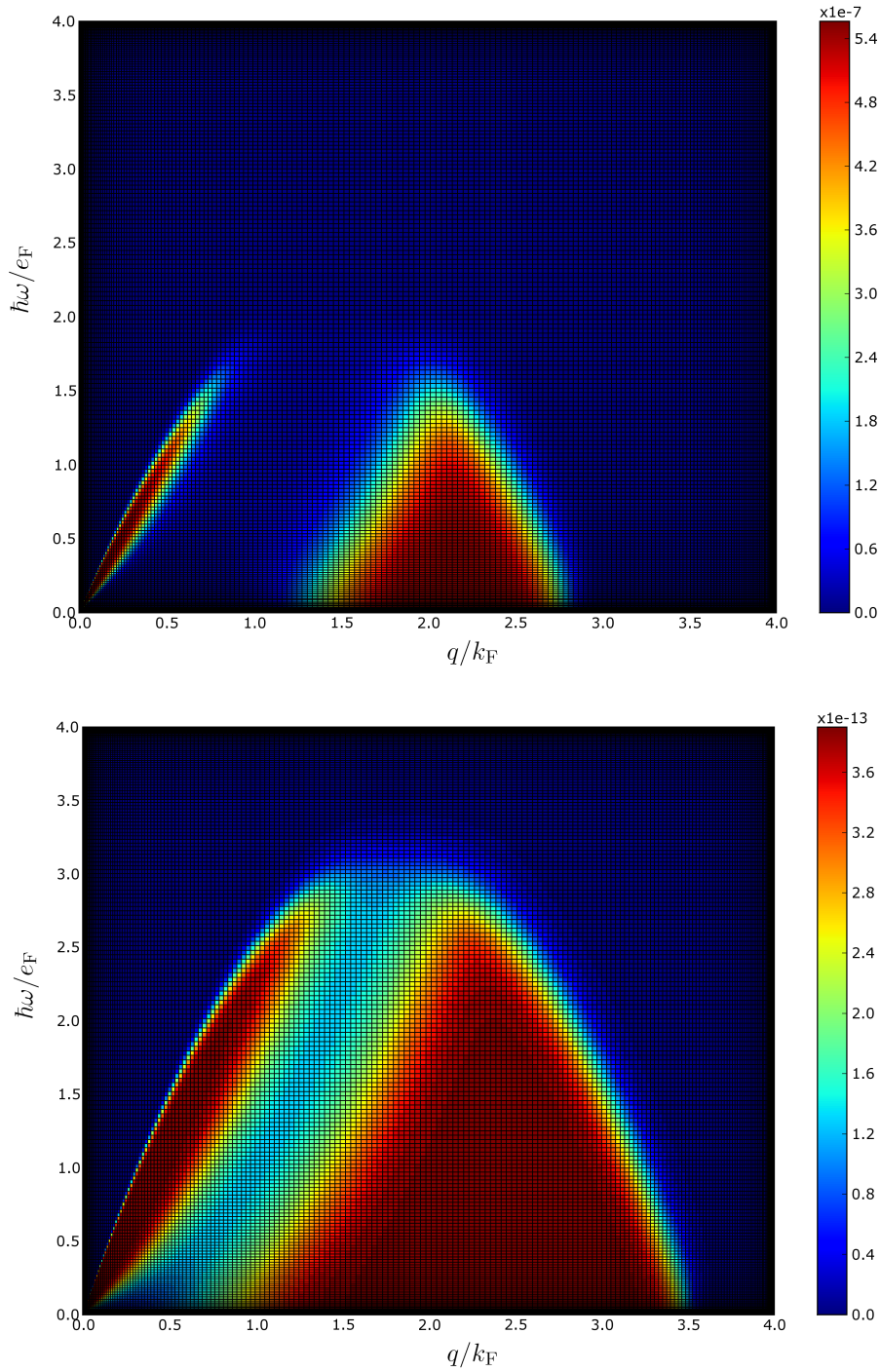


Figura 2.4: Rappresentazione per $T = 0.1e_F$ delle regioni del dominio (q, ω) importanti nell'integrale (2.14). La figura sopra si riferisce a $\zeta = 0.4$, quella sotto a $\zeta = 0.75$. Si notano chiaramente le due zone indicate nel testo come “Olive-leaf” e “Shark fin”; all'aumentare di ζ tali zone si allargano, ma il valore che la funzione vi assume diminuisce esponenzialmente.

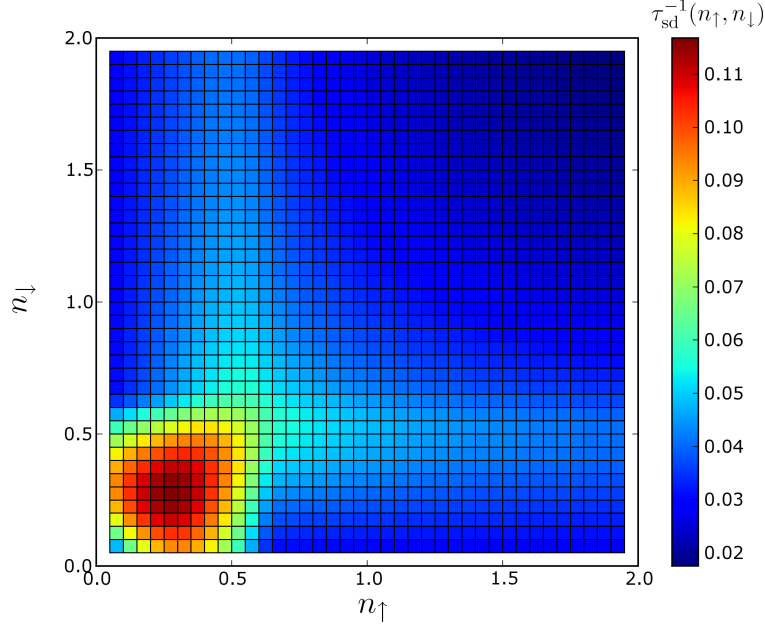


Figura 2.5: Rappresentazione bidimensionale di $1/\tau_{\text{sd}}$ al variare di n_{\uparrow} e n_{\downarrow} nel range $[0 : 2]$. Le densità sono date in unità di $1/L^*$, con $L^* = L/N$ in un sistema di lunghezza L e contenente N particelle. Corrispondentemente $1/\tau_{\text{sd}}$ è fornito in unità di mL^{*2}/\hbar . Si osserva che il tempo inverso di spin drag assume valore massimo in un punto lungo la bisettrice (sulla quale $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$) e poi decade rapidamente allontanandosi da tale punto.

La derivazione delle (2.24)-(2.25) coinvolge una discreta quantità di algebra, per cui l'abbiamo postposta completamente in Appendice B. Giunti a questo punto, si dovrebbe integrare sul dominio appena determinato il potenziale in trasformata $v(q)$; noi consideriamo ancora una volta il caso semplice di $v(q) = g_{1D} = \text{costante}$, per il quale l'integrazione fornisce la misura dell'area del dominio in questione, e il risultato è il seguente:

$$\frac{1}{\tau_{\text{sd}}(T, \zeta)} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \left[\frac{32}{3\pi^3} \frac{(3\zeta^2 + \zeta^3)}{(1 - \zeta^2)} \Gamma^2 \left(\frac{2e_F}{k_B T} \right) e^{-4e_F \zeta / (k_B T)} \right] \frac{e_F}{\hbar}. \quad (2.26)$$

Facciamo alcune osservazioni.

- Il contenuto più importante dell'Eq. (2.26) è il fattore esponenziale $e^{-\frac{4e_F}{(k_B T)} \zeta}$ che comporta di per sé una forte inibizione dello spin drag a basse temperature per sistemi con polarizzazione di spin diversa da zero. A temperatura fissata, tale inibizione inizia a farsi sentire a valori di ζ tali che $4e_F \zeta \gtrsim k_B T$. A ζ più piccoli la forma dell'integrando che determina $\tau_{\text{sd}}(T, \zeta)$ non è più quella semplice descritta sopra, e il risultato (2.26) perde quindi di validità. Tuttavia, anche in tale regime ($k_B T \ll e_F$, $\zeta \lesssim k_B T / (4e_F)$) l'effetto dello spin drag è ridotto rispetto al caso paramagnetico, essenzialmente a causa della non sovrapposizione dei continui elettrone-buca legati alle due funzioni di risposta $\chi_{0\uparrow}$ e $\chi_{0\downarrow}$.
- La formula (2.26) prevede a T fissata una divergenza per $\zeta \rightarrow 1$ che però, a causa del fattore esponenziale, diventa apprezzabile solo per ζ molto vicini a 1, e per questo motivo non è osservabile nei plot mostrati in queste pagine. Sottolineiamo tuttavia che tale divergenza è del

tutto non fisica, e anzi, non ha senso in sè considerare il limite $\zeta \rightarrow 1$ dell'espressione (2.26). Tale limite corrisponde infatti ad avere un numero di particelle con spin down tendente a zero (il caso $n_{\uparrow} \rightarrow 0$ è equivalente), e allora la popolazione di elettroni con spin down non costituisce più un sistema fermionico degenere (per il quale si deve avere $T \ll T_F \propto e_F \propto n^2$), e la funzione di risposta $\chi_{0\downarrow}$ usata nel calcolo di $1/\tau_{sd}$ va sostituita con quella di un gas classico ideale. Con tale correzione, viene ripristinato il comportamento corretto per $\zeta \rightarrow 1$, e cioè l'inverso del tempo di spin drag tende ad una costante indipendente da n_{\uparrow} (si veda la Ref. [54]). Una questione analoga è quella riguardante il cosiddetto “paradosso di Maxwell”, descritto ad esempio nel libro di Huang [59]: inaspettatamente, la viscosità di un gas classico per una data temperatura risulta indipendente dalla densità, $\eta \approx \sqrt{mk_B T}/a^2$ con a diametro molecolare del gas. Maxwell testò tale risultato misurando il tempo di smorzamento di un pendolo in gas di differenti densità, e trovò piena conferma.

- Il risultato principale da noi trovato è che nel regime $k_B T \ll e_F$, $k_B T \ll 4\zeta e_F$ il tempo inverso di spin drag si comporta come (a parte prefattori numerici)

$$\frac{1}{\tau_{sd}(T, \zeta)} \sim \frac{(3\zeta^2 + \zeta^3)}{(1 - \zeta^2)} \frac{1}{\bar{T}} \exp(-2\zeta/\bar{T}), \quad (2.27)$$

dove si è introdotta la notazione $\bar{T} = k_B T / (2e_F)$. Nel contesto del Coulomb drag, Pustilnik *et al.* [57] hanno calcolato la “drag resistivity” r tra due fili quantici unidimensionali, in diversi regimi di temperatura. La drag resistivity r ha per i due fili quantici lo stesso ruolo che la trans-resistività di spin $\rho_{\uparrow\downarrow}$ riveste per le due popolazioni di spin in un liquido elettronico. L'espressione per r presente in [57] è infatti formalmente identica alla 2.14. Gli autori trovano che nel regime di temperature sopra indicato, e con l'assunzione $\zeta \ll 1$, la drag resistivity ha il seguente andamento (traduciamo il risultato nella nostra notazione):

$$r = \zeta \bar{T} \exp(-2\zeta/\bar{T}). \quad (2.28)$$

Tale risultato è in disaccordo con le nostre conclusioni, Eq. 2.27. La dipendenza esponenziale è la stessa, ma la rimanente forma funzionale in T e in ζ è palesemente diversa ($r \propto T$ vs $\rho_{\uparrow\downarrow} \propto T^{-1}$ e $r \propto \zeta$ vs $\rho_{\uparrow\downarrow} \propto \zeta^2$ a $\zeta \ll 1$). Attribuiamo queste discrepanze all'utilizzo di approssimazioni incontrollate in [57] che portano a ignorare completamente i contributi delle regioni (q, ω) da noi indicate come Olive-leaf e Shark fin.

Nel Capitolo 3 i risultati relativi a τ_{sd} qui ottenuti saranno utilizzati in un calcolo TDDFT per un sistema unidimensionale confinato con densità locali di spin $n_{\uparrow}(x)$ e $n_{\downarrow}(x)$. A tale scopo, è stato necessario calcolare l'inverso del tempo di spin drag per un sistema omogeneo di densità di spin n_{\uparrow} e n_{\downarrow} , al variare di n_{\uparrow} e n_{\downarrow} nel range di valori richiesti dal sistema in questione. I risultati sono riportati qui di seguito in un color-plot 2D (figura 2.5) e in un plot 3D (figura 2.6).

Limite $T \rightarrow \infty$

Anche nel caso di sistema polarizzato calcoliamo le espressioni asintotiche per $\mu_{\sigma}(T)$ ad alte temperature:

$$\mu_{\sigma}(T \rightarrow \infty) \sim k_B T \log \left(\sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} n_{\sigma} \right). \quad (2.29)$$

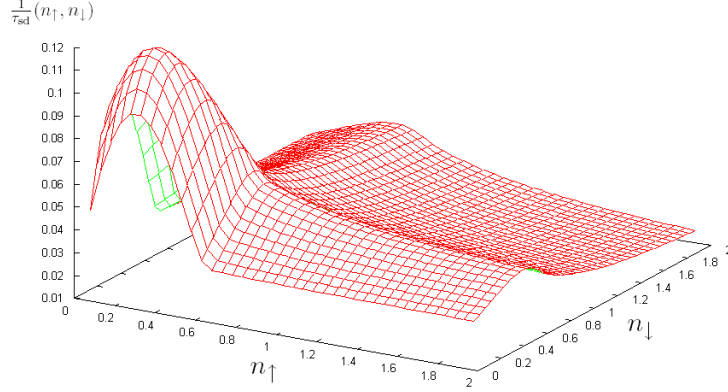


Figura 2.6: Rappresentazione tridimensionale di τ_{sd}^{-1} a partire dagli stessi dati utilizzati per la figura 2.5. Anche qui l'unità di misura per le densità è $N/L = 1/L^*$, in un sistema con N particelle e di lunghezza L ; l'unità di misura per $1/\tau_{\text{sd}}$ è mL^*/\hbar . In questo grafico è maggiormente visibile il rapido decadimento di τ_{sd}^{-1} attorno al suo massimo.

Inseriamo questa espressione nella formula per $1/\tau_{\text{sd}}$, e utilizziamo l'approssimazione

$$\frac{1}{e^{[\nu_{\pm, \sigma}^2 e_{\text{F}\sigma} - \mu_{\sigma}(T)]/(k_{\text{B}}T)} + 1} \approx \frac{1}{e^{[\nu_{\pm, \sigma}^2 e_{\text{F}\sigma} - \mu_{\sigma}(T)]/(k_{\text{B}}T)}}; \quad (2.30)$$

otteniamo così che i termini $e^{\mu_{\sigma}(T)/(k_{\text{B}}T)}$ sono proporzionali a n_{σ} , e cancellano il fattore $1/(n_{\uparrow}n_{\downarrow})$ nella 2.14. In tal modo scompare completamente la dipendenza da ζ e il risultato per τ_{sd}^{-1} è identico a quello del caso non polarizzato:

$$\frac{1}{\tau_{\text{sd}}}(T, \zeta) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{\hbar}{2m} \frac{8}{\pi^{7/2}} \left(\frac{k_{\text{B}}T}{2\varepsilon_{\text{F}}} \right)^{-3/2} \int_0^{+\infty} dq \, q \, \Gamma_q^2 \exp[-e_q/(2k_{\text{B}}T)], \quad (2.31)$$

dove si è posto $e_q = \hbar^2 q^2/(2m)$. Ricordiamo che per $v_q = g_{1\text{D}}$ la 2.31 si riduce a

$$\frac{1}{\tau_{\text{sd}}(T, \zeta)} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{16}{\pi^{7/2}} \Gamma^2 \sqrt{\frac{2e_{\text{F}}}{k_{\text{B}}T}} \frac{e_{\text{F}}}{\hbar}. \quad (2.32)$$

Capitolo 3

Connessione tra spin drag e separazione spin-carica

In questo capitolo verranno analizzati in dettaglio i sistemi fermionici unidimensionali, per la cui descrizione il paradigma corretto è costituito dal cosiddetto *liquido di Luttinger*, che sostituisce il concetto di *liquido di Fermi normale*, usato invece per sistemi fermionici 2D e 3D. Si discuterà una delle principali caratteristiche del caso unidimensionale: *la separazione spin-carica*, ovvero l'esistenza di eccitazioni collettive indipendenti relative al canale di carica e a quello di spin, caratterizzate da velocità di propagazione diverse. Successivamente si utilizzeranno i concetti e i risultati quantitativi del Capitolo 2 per mostrare quale ruolo abbia lo spin drag in sistemi 1D relativamente alla separazione spin-carica: la propagazione nel canale di spin è soggetta ad uno smorzamento intrinseco che invece manca nel canale di carica, dove la propagazione è di tipo essenzialmente balistico. Indicheremo inoltre quali sono i sistemi di interesse sperimentale dove si realizzano geometrie quasi-unidimensionali e dove è possibile osservare comportamenti di tipo Luttinger.

3.1 Il paradigma del liquido di Luttinger

In questa sezione il nostro scopo principale è quello di tracciare il percorso logico che porta al modello risolubile di Tomonaga-Luttinger (LM) [60], proposto per la prima volta negli anni '50, e poi al concetto di liquido di Luttinger (LL), con l'inclusione del grado di libertà di spin.

Sarà utile richiamare brevemente i punti principali della teoria di Landau per i liquidi di Fermi normali. L'assunzione base della teoria di Landau è che le eccitazioni di bassa energia siano *quasi-particelle* con una vita media molto lunga e possano essere trattate tramite l'introduzione di un semplice funzionale per l'energia libera, scritto in termini delle deviazioni della distribuzione degli impulsi dalla sua forma nel gas di Fermi ideale. La teoria predice che le proprietà termodinamiche di bassa temperatura di un liquido di Fermi interagente sono molto simili a quelle di un sistema non-interagente: la presenza delle interazioni conduce solamente a delle rinormalizzazioni quantitative. Un'estensione della teoria a proprietà di non-equilibrio, seguendo un punto di vista alla Boltzmann basato sull'equazione di Vlasov-Landau, porta alla predizione dell'esistenza di eccitazioni collettive di tipo non-collisionale (*zero sound*), in aggiunta alla presenza di suono ordinario di origine collisionale, e permette lo studio di fenomeni di trasporto.

Le proprietà di un liquido di Luttinger 1D sono fondamentalmente diverse da quelle dai liquidi

di Fermi normali 2D e 3D [61]. Non è più vero che le eccitazioni sono quasiparticelle quasi-libere, ovvero si muovono insieme alla nuvola di auto-energia generata dalle interazioni. Anche solo intuitivamente si può capire che la riduzione di dimensionalità elimina gradi di libertà disponibili al moto: un fermione che vuole propagare deve necessariamente entrare in interazione con i suoi primi vicini. Dunque ogni eccitazione di singola particella diventa eccitazione collettiva.

Oltre a questa rappresentazione qualitativa della particolarità del caso 1D, fatta in termini di geometria dello spazio reale, è anche possibile pensare in termini di spazio reciproco degli impulsi: come già osservato in precedenza, la sfera di Fermi diventa in una dimensione un segmento e la superficie è costituita da due soli punti. Ciò ha grosse conseguenze sulla forma dello spettro di eccitazione e sulle proprietà di risposta del sistema; il continuo elettrone-buca non è più tale a bassi q (vedi sezione (1.2.3)), e la relazione di dispersione è lineare in q nel limite in questione di $q \rightarrow 0$.

Iniziamo ora la trattazione che porta ad un modello per tale peculiare comportamento. Consideriamo un sistema 1D di fermioni non-interagenti senza grado di libertà di spin, con dispersione parabolica $e_{\mathbf{k}} = k^2/(2m)$ ($\hbar = 1$). Nello stato fondamentale gli stati di singola particella con $|k| < k_F$ sono occupati e quelli con $|k| > k_F$ sono vuoti (il valore di k_F è legato alla densità 1D di particelle n dalla relazione $k_F = \pi n$). Per eccitazioni di bassa energia (diciamo entro un valore di cutoff Λ negli impulsi) è coinvolto solo un intorno dei due “punti” situati a $\pm k_F$, e in questa regione (“il settore di bassa energia”) la relazione di dispersione può essere linearizzata con uno sviluppo di Taylor al primo ordine:

$$\begin{cases} e_{k,R} \simeq e_F + v_F(k - k_F) \\ e_{k,L} \simeq e_F - v_F(k + k_F) \end{cases} \quad (3.1)$$

Si è introdotto il pedice R,L per indicare gradi di libertà relativi a fermioni con $k > 0$ o $k < 0$ rispettivamente. Nel modello di Tomonaga-Luttinger si manda il cutoff Λ all’infinito, e si estende quindi la validità delle 3.1 a tutti i valori di k : si creano in tal modo due settori di particelle, i fermioni *right* R (con velocità positiva) e i fermioni *left* L (con velocità negativa). Tale modifica rende il modello senza grado di libertà di spin esattamente risolvibile anche quando si introducono le interazioni. L’aver esteso la linearità dello spettro al di fuori dell’intorno di $\pm k_F$, dove era giustificata l’espansione 3.1, non costituisce un’operazione non-fisica: sebbene nel modello LM si creino infiniti stati ad energia negativa in ciascun settore R e L, i processi di eccitazione coinvolgono sempre un numero finito di particelle, e per processi di bassa energia quali quelli a cui siamo interessati le particelle coinvolte saranno localizzate in un intorno di $\pm k_F$, cioè proprio dove la linearizzazione è accurata.

Consideriamo gli operatori $\hat{c}_{k,\alpha}$ e $\hat{c}_{k,\alpha}^\dagger$ di singola particella relativi al settore $\alpha=R,L$; questi obbediscono a regole di commutazione fermioniche, $\{\hat{c}_{k,\alpha}, \hat{c}_{k',\alpha'}^\dagger\} = \delta_{kk'}\delta_{\alpha\alpha'}$. Lo stato del sistema può essere individuato tramite la deviazione della distribuzione degli impulsi dalla sua forma nello stato fondamentale $n_\alpha^{(0)}(k) = \Theta(k_F - \alpha k)$ (con $\alpha = \pm 1$ per $\alpha = R,L$):

$$\begin{cases} \delta \hat{n}_{k,\alpha} = : \hat{c}_{k,\alpha}^\dagger \hat{c}_{k,\alpha} : = \hat{c}_{k,\alpha}^\dagger \hat{c}_{k,\alpha} - \langle 0 | \hat{c}_{k,\alpha}^\dagger \hat{c}_{k,\alpha} | 0 \rangle ; \\ \delta n_{k,\alpha} = n_{k,\alpha} - n_{k,\alpha}^{(0)} . \end{cases} \quad (3.2)$$

Ora è possibile scrivere l’Hamiltoniana non-interagente $\hat{\mathcal{H}}_0$ in maniera semplice come

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = v_F \sum_{k,\alpha} (\alpha k - k_F) \delta \hat{n}_{k,\alpha} . \quad (3.3)$$

Prima di passare ad introdurre le interazioni, facciamo notare che $\hat{\mathcal{H}}_0$ può essere scritta in altro modo, in termini di operatori di fluttuazione di densità (e ciò sta alla base della procedura detta

bosonizzazione). Tale possibilità nasce direttamente dalle assunzioni fatte dal modello LM, e cioè dal fatto di considerare un mare di Fermi infinitamente esteso al di sotto di $\pm k_F$. Sia dunque $\hat{\rho}_\alpha(q)$ la componente di Fourier dell'operatore densità di particelle per fermioni del settore α ,

$$\hat{\rho}_\alpha(q) = \sum_k \hat{c}_{k-q,\alpha}^\dagger \hat{c}_{k,\alpha} \quad , \quad (3.4)$$

con $\alpha = R$ o L . Per arrivare alla nuova scrittura di $\hat{\mathcal{H}}_0$ ci si basa sui seguenti fatti:

(i) In un sistema fermionico gli operatori di fluttuazione di densità usualmente commutano tra di loro, $[\hat{\rho}_\alpha(-q), \hat{\rho}_\alpha(q)] = 0$ (si ricorda che $\hat{\rho}_\alpha^\dagger(q) = \hat{\rho}_\alpha(-q)$); invece, se si fanno agire tali operatori sullo stato fondamentale del modello LM si scopre che i $\hat{\rho}_\alpha(q)$ rispettano regole di commutazione bosoniche:

$$[\hat{\rho}_\alpha(q), \hat{\rho}_{\alpha'}(-q')] = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{qq'} \frac{\alpha q L}{2\pi} \quad , \quad (3.5)$$

dove L è la dimensione del sistema. Tale peculiarità viene spesso indicata come il problema del “commutatore anomalo”. Si introducono a questo punto degli operatori $\hat{b}_q, \hat{b}_q^\dagger$ che rispettino regole di commutazione standard, cioè $[\hat{b}_q, \hat{b}_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'}$; tali operatori sono legati ai $\hat{\rho}_\alpha(q)$ da:

$$\begin{cases} \hat{b}_q^\dagger := \sqrt{\frac{2\pi}{L|q|}} \left[\Theta(q) \hat{\rho}_R^\dagger(q) + \Theta(-q) \hat{\rho}_L^\dagger(q) \right] \\ \hat{b}_q := \sqrt{\frac{2\pi}{L|q|}} \left[\Theta(q) \hat{\rho}_R(q) + \Theta(-q) \hat{\rho}_L(q) \right] \end{cases} \quad (3.6)$$

(ii) L'operatore \hat{b}_q^\dagger crea autostati di $\hat{\mathcal{H}}_0$ con energia $\pm qv_F$, cosicchè è possibile riscrivere $\hat{\mathcal{H}}_0$ in termini di operatori bosonici nella forma

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{q \neq 0} |q| v_F \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q \quad . \quad (3.7)$$

Il poter scrivere $\hat{\mathcal{H}}_0$ come forma quadratica degli operatori di creazione e distruzione di singola particella e contemporaneamente come forma quadratica degli operatori di fluttuazione di densità significa, in essenza, che non è possibile aggiungere al sistema 1D una particella (o una buca) senza creare al tempo stesso un'onda di densità (la linearizzazione della relazione di dispersione implica che tutte le coppie elettrone-buca hanno la stessa energia qv_F indipendentemente da k , cosicchè gli stati creati dall'operatore di fluttuazione di densità sono sovrapposizioni lineari coerenti di singole eccitazioni elettrone-buca).

(iii) Gli spettri di eccitazione delle rappresentazioni fermionica e bosonica di $\hat{\mathcal{H}}_0$ sono quindi gli stessi (si può dimostrare che anche le degenerazioni dei livelli sono le stesse).

Il prossimo passo nello sviluppo del LM senza spin prevede l'introduzione delle interazioni, partendo dalla forma base dell'Hamiltoniana di interazione per un sistema di fermioni che interagiscono *via* un potenziale inter-particella v_q :

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \frac{1}{2L} \sum_{q \neq 0} v_q \hat{\rho}_{-q} \hat{\rho}_q \quad , \quad (3.8)$$

dove $\hat{\rho}_q$ è un operatore densità riferito a fermioni. Tuttavia, nel nostro modello, un fermione è un fermione right per $q > 0$ mentre è un fermione left per $q < 0$. Ovverosia si ha che $\hat{c}_k = \Theta(k)\hat{c}_{k,R} + \Theta(-k)\hat{c}_{k,L}$. Inserendo tale forma per \hat{c}_k nell'espressione di $\hat{\rho}_q$ si ottiene:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_q &= \sum_k \hat{c}_{k-q}^\dagger \hat{c}_k \\ &= \sum_k \left[\Theta(k-q)\Theta(k)\hat{c}_{k-q,R}^\dagger \hat{c}_{k,R} + \Theta(-k+q)\Theta(-k)\hat{c}_{k-q,L}^\dagger \hat{c}_{k,L} \right] \\ &+ \sum_k \left[\Theta(k-q)\Theta(-k)\hat{c}_{k-q,R}^\dagger \hat{c}_{k,L} + \Theta(-k+q)\Theta(k)\hat{c}_{k-q,L}^\dagger \hat{c}_{k,R} \right].\end{aligned}\quad (3.9)$$

Ora, seguendo l'assunzione di lavorare nel settore di bassa energia, richiediamo che i vettori d'onda interessati nei processi di scattering da interazione (k e $k - q$) siano vicini a $\pm k_F$; per quanto riguarda q , tale condizione significa richiedere:

$$|q| \approx 0; \quad |q| \approx 2k_F. \quad (3.10)$$

In altre parole, esistono due tipi principali di processi di scattering che contribuiscono a $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$:

- quelli caratterizzati da $|q| \approx 0$, detti processi di “forward scattering”,
- quelli che invece coinvolgono trasferimenti di impulso $|q| \approx 2k_F$, detti di “back-scattering”.

I corrispondenti contributi a $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{int},1} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int},2}$ sono dati da:

$$\left\{ \begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{\text{int},1} &= \frac{1}{2L} \sum_{|q| \approx 0} v_q (\hat{\rho}_{-q,R} + \hat{\rho}_{-q,L})(\hat{\rho}_{q,R} + \hat{\rho}_{q,L}) \\ \hat{\mathcal{H}}_{\text{int},2} &= \frac{1}{2L} \sum_{|q| \approx 2k_F} v_q \sum_{kk'} (\hat{c}_{k+q,R}^\dagger \hat{c}_{k,L} \hat{c}_{k'-q,L}^\dagger \hat{c}_{k',R} + \dots \text{R} \leftrightarrow \text{L} \dots)\end{aligned}\right. \quad (3.11)$$

Il termine di back-scattering è scritto in termini di operatori \hat{c}_k perchè mescola apparentemente componenti L e R, e quindi non è possibile ottenere degli operatori $\hat{\rho}_q$. Tuttavia si tenga presente che in quanto back-scattering, questo tipo di processo coinvolge trasferimenti di impulso $|q| \approx 2k_F$, ovverosia scattering da un settore all'altro; possiamo quindi cambiare l'ordine dei \hat{c}_k nella seconda delle 3.11 e scrivere, prendendo solo il contributo importante dell'interazione a $q = 2k_F$,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{int},2} = \frac{1}{2L} \sum_{|q| \approx 0} (-v_{2k_F}) (\hat{\rho}_{-q,R} \hat{\rho}_{q,L} + \hat{\rho}_{-q,L} \hat{\rho}_{q,R}), \quad (3.12)$$

dove il segno $(-)$ viene dalle regole di anticommutazione. Utilizzando ora nuovamente gli operatori bosonici definiti nella 3.6, è possibile scrivere la Hamiltoniana completa di Tomonaga-Luttinger:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{LM}} = \sum_{q \neq 0} \left[\left(v_F + \frac{V_1(q)}{2\pi} \right) |q| \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q + \frac{V_2(q)}{4\pi} |q| \left(\hat{b}_q^\dagger \hat{b}_{-q}^\dagger + \hat{b}_{-q} \hat{b}_q \right) \right], \quad (3.13)$$

dove le costanti di accoppiamento sono legate al potenziale interparticella da $V_1(q) = v_q$ e $V_2(q) = v_q - v_{2k_F}$. Abbiamo dunque una Hamiltoniana quadratica negli operatori \hat{b}_q e \hat{b}_q^\dagger , sia per quanto

riguarda il termine cinetico che per il termine di interazione. Non stupisce che il termine di interazione sia scritto come forma quadratica dei \hat{b}_q , e cioè dei $\hat{\rho}_q$, perchè la Hamiltoniana base di interazione fermionica è quartica negli operatori di creazione e distruzione \hat{c}_k . Ciò che deve stupire invece è che anche il termine cinetico, quadratico negli operatori fermionici \hat{c}_k , rimanga quadratico se scritto in termini degli operatori di fluttuazione di densità. Come già detto, tale caratteristica deriva dalla peculiarità del modello LM, che cambia le usuali regole di commutazione per i $\hat{\rho}_q$.

Il grande vantaggio di avere una Hamiltoniana completamente quadratica è che questa può essere diagonalizzata tramite una trasformazione di Bogoliubov, ovvero con un cambio di base $\hat{b}_q \rightarrow \hat{\beta}_q$, con il risultato

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{LM}} = \sum_{q \neq 0} \omega_q \hat{\beta}_q^\dagger \hat{\beta}_q, \quad (3.14)$$

dove $\omega_q = c_q |q|$, con

$$c_q = \sqrt{\left[v_F + \frac{V_1(q)}{2\pi} \right]^2 - \left[\frac{V_2(q)}{2\pi} \right]^2}. \quad (3.15)$$

Gli operatori bosonici $\hat{\beta}_q, \hat{\beta}_q^\dagger$ sono combinazioni lineari degli originali operatori di fluttuazione di densità, cosicchè le eccitazioni elementari della Hamiltoniana 3.14 sono sovrapposizioni coerenti di oscillazioni collettive di densità. Evidentemente, affinchè la relazione di dispersione sia reale, deve essere soddisfatta la seguente condizione di stabilità:

$$|2\pi v_F + V_1(q)| > |V_2(q)|. \quad (3.16)$$

Inoltre si ha che la funzione d'onda di stato fondamentale è normalizzabile se è verificata la condizione

$$\lim_{q \rightarrow \infty} \left[\frac{q^{1/2} V_2(q)}{2\pi v_F + V_1(q)} \right] = 0. \quad (3.17)$$

Si osservi che nel limite di gas non-interagente ($v_q = 0$) si ritrova la relazione di dispersione dello zero sound in un gas di Fermi ($\omega_q = v_F |q|$): le coppie elettrone-buca vengono sostituite da tale eccitazione collettiva.

Nel caso di interazione coulombiana nuda 1D, abbiamo $v_q \rightarrow 2e^2 |\ln(qr_0)|$ per $|q| \rightarrow 0$ (si veda l'Appendice A) e quindi dall'equazione (3.14) otteniamo una relazione di dispersione di tipo plasmonico,

$$\omega_q = C |q| |\ln(qr_0)|^{1/2}, \quad (3.18)$$

dove la costante C si riduce al valore calcolato in RPA se $v_{2k_F} = 0$. Un valore finito di v_{2k_F} si può dire introduca una correzione di massa efficace.

D'altra parte, nel caso di interazioni a corto raggio, la relazione di dispersione (3.15) descrive onde di suono a grandi lunghezze d'onda, limite in cui i parametri di accoppiamento tendono a dei valori costanti (usando la convenzione scriviamo $V_1(q) \rightarrow 2g_4$ e $V_2(q) \rightarrow g_2$). Si può dimostrare che in questo limite la Hamiltoniana (3.14) può essere trasformata nella Hamiltoniana di un modello continuo per una corda elastica:

$$\mathcal{H}_{\text{LM}} = \frac{1}{2} \int dx \left[\pi u K \Pi^2(x) + \frac{u}{\pi K} [\partial_x \phi(x)]^2 \right]. \quad (3.19)$$

Qui i campi $\phi(x)$ e $\Pi(x)$, che obbediscono a regole di commutazione canonica $[\phi(x), \Pi(x')] = i\delta(x - x')$, sono legati alla densità di particelle $\rho(x)$ e alla densità di corrente $j(x)$ da

$$\begin{cases} \partial_x \phi(x) = -\pi[\rho(x) - \rho_0]; \\ j(x) = uK \Pi(x), \end{cases} \quad (3.20)$$

dove ρ_0 è la densità media di particelle nello stato fondamentale. I parametri u e K sono dati dalle espressioni:

$$\begin{cases} u = \sqrt{\left(v_F + \frac{g_4}{\pi}\right)^2 - \left(\frac{g_2}{2\pi}\right)^2}; \\ K = \sqrt{\frac{(2\pi v_F + 2g_4 - g_2)}{(2\pi v_F + 2g_4 + g_2)}}. \end{cases} \quad (3.21)$$

La forma della Hamiltoniana dell'equazione (3.19) enfatizza la natura collettiva dei moti delle particelle su una catena: una particella di impulso iniziale dato collide con un primo vicino e scambia impulso, dando origine ad un'onda di densità lungo la catena.

Elenchiamo qui di seguito senza dimostrazione tre proprietà importanti del liquido quantistico descritto dal LM:

- (a) *Distribuzione degli impulsi.* I numeri di occupazione nello spazio degli impulsi $n_{k,\alpha}$ hanno la stessa forma per fermioni right e left, e obbediscono alla relazione:

$$n_{k_F + \delta k, \alpha} = 1 - n_{k_F - \delta k, \alpha}. \quad (3.22)$$

Si ha dunque $n_{k_F, \alpha} = 1/2$ (come nel gas di Fermi), ma la funzione $n_{k,\alpha}$ è continua nel passare attraverso k_F , a differenza dei casi 2D e 3D. Tuttavia, con un qualsiasi tipo di interazione non nulla, la distribuzione degli impulsi e la densità di stati hanno singolarità a legge di potenza al livello di Fermi, con una densità di stati di singola particella nulla a e_F . L'assenza di un salto discontinuo a $k = k_F$ corrisponde all'assenza di poli di quasiparticella nella funzione di Green a una particella.

- (b) *Oscillazioni di Friedel e onde di densità di carica.* Le oscillazioni di Friedel eseguite dalla densità di carica elettronica in risposta alla presenza di un'impurezza carica in un fluido elettronico 1D normale hanno la forma $\cos(2k_F x)/|x|$, dove la lunghezza d'onda $2\pi/(2k_F)$ è pari alla distanza media fra primi vicini L/N nel caso spinless. L'effetto delle interazioni repulsive nel LM è quello di moltiplicare l'andamento sopra indicato per una funzione che descrive un decadimento spaziale estremamente lento. Come è ben noto, ogni forma di ordine a lungo raggio quale la cristallizzazione di Wigner è impedita in 1D dalle fluttuazioni, secondo il teorema di Mermin-Wagner. Si può piuttosto vedere il fluido LM spinless come incline alla formazione di una modulazione di densità di carica con numero d'onda $2k_F$ e ampiezza lentamente decrescente; il ruolo dell'impurezza è quello di fissare la fase di tale modulazione. L'introduzione del grado di libertà di spin-1/2 aggiunge al risultato sopra citato per la carica schermante un termine avente la forma $\cos(4k_F x)$, moltiplicato anch'esso per un fattore a decrescenza estremamente lenta. Una predisposizione alle onde di densità di carica (CDWs) con lunghezza d'onda $2\pi/(4k_F) = L/N$ (con k_F ora pari a $\pi n/2$) è indicata nel liquido di Luttinger con interazioni repulsive.

- (c) *Conduttanza elettrica.* La corrente I che fluisce attraverso un liquido omogeneo 1D soggetto ad una differenza di potenziale ΔV applicata tra il source (a sinistra) e il drain (a destra) è data dalla differenza tra la corrente portata dai fermioni right, guidati verso il drain dal potenziale di source, e la corrente dei fermioni left mossi dal potenziale di drain verso il source. Il valore di I è determinato dalla funzione di risposta propria densità di corrente-densità di carica, e nel modello LM senza spin tale funzione coincide con quella del fluido non-interagente. Il risultato è $I = G\Delta V$, dove la conduttanza G ha il valore fondamentale

$$G = \frac{e^2}{h} \quad (3.23)$$

(o il doppio di tale valore se si include lo spin). L'inclusione di una impurezza puntiforme nel fluido causa una corrente di back-scattering, data dal trasferimento di fermioni right al settore left, meno il trasferimento di fermioni left in direzione opposta. Il risultato è una riduzione della corrente netta che attraversa il filo ad un dato valore di ΔV . La corrente di back-scattering è proporzionale a $(\Delta V)^{2g-1}$, dove

- (i) $g = 1$ in assenza di interazioni, e quindi il comportamento ohmico è mantenuto, anche se con una conduttanza ridotta;
- (ii) $g < 1$ per interazioni repulsive, e ciò comporta una conduttanza nulla per $\Delta V \rightarrow 0$.

3.1.1 Aggiunta del grado di libertà di spin-1/2: la separazione spin-carica

Fino a questo punto abbiamo ignorato lo spin dell'elettrone. Introducendo questo ulteriore grado di libertà, tutti gli operatori nelle equazioni (3.11) e (3.13) acquisiscono un indice di spin σ ed è necessario aggiungere le sommatorie su σ . Riprendiamo ora l'espressione (3.11) per $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int},2}$, scritta in termini dei \hat{c}_k e non ancora tradotta nella forma finale (3.12) con le fluttuazioni di densità:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{int},2} = \frac{1}{2L} \sum_{|q| \approx 2k_F} v_q \sum_{kk'} (\hat{c}_{k+q,R}^\dagger \hat{c}_{k,L} \hat{c}_{k'-q,L}^\dagger \hat{c}_{k',R} + \dots). \quad (3.24)$$

Aggiungendo l'indice di spin otteniamo termini del tipo:

$$\hat{c}_{k+q,\sigma R}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma L} \hat{c}_{k'-q,\sigma' L}^\dagger \hat{c}_{k',\sigma' R}. \quad (3.25)$$

Tentando di fare quanto fatto nel caso spinless, anticommutiamo i \hat{c}_k per ottenere coppie adiacenti di operatori dello stesso settore; tuttavia, a questo punto si ha che se $\sigma' \neq \sigma$ lo spin non è conservato in ciascun singolo settore, e non è possibile quindi introdurre degli operatori di fluttuazione di densità:

$$\hat{c}_{k+q,\sigma R}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma L} \hat{c}_{k'-q,\sigma' L}^\dagger \hat{c}_{k',\sigma' R} = -\hat{c}_{k+q,\sigma R}^\dagger \hat{c}_{k',\sigma' R} \hat{c}_{k'-q,\sigma' L}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma L} \stackrel{?}{=} -\hat{\rho}_{-q,R} \hat{\rho}_{q,L}. \quad (3.26)$$

Ammettiamo allora la possibilità di processi di spin-flip che accompagnino il back-scattering a $2k_F$, cosicchè si ripristini la scrittura in termini dei $\hat{\rho}_q$. Il problema è che con l'inclusione di tali effetti il modello non ha più soluzione esatta in generale.

Trascuriamo allora completamente il back-scattering a spin antiparalleli e scriviamo la nuova Hamiltoniana del liquido di Luttinger (LL), in termini degli operatori bosonici $\hat{b}_{q\sigma}$ (ora spin-

dipendenti):

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{\text{LL}} &= \sum_{q \neq 0} \sum_{\sigma} v_F |q| \hat{b}_{q\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{q\sigma} \\
&+ \sum_{q \neq 0} \sum_{\sigma \sigma'} \frac{v_q}{2\pi} |q| \left[\hat{b}_{q\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{q\sigma'} + \frac{1}{2} \left(\hat{b}_{q\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{-q\sigma'}^{\dagger} + \hat{b}_{-q\sigma} \hat{b}_{q\sigma'} \right) \right] \\
&+ \sum_{q \neq 0} \sum_{\sigma} \frac{(-v_{2k_F})}{4\pi} |q| \left(\hat{b}_{q\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{-q\sigma}^{\dagger} + \hat{b}_{-q\sigma} \hat{b}_{q\sigma} \right). \tag{3.27}
\end{aligned}$$

È stato messo in evidenza il fatto che nel termine di back-scattering è presente solo il processo a spin paralleli. Si opera a questo punto un cambio di base per gli operatori $\hat{b}_{q\sigma}$, introducendo le combinazioni spin-simmetrica e spin-antisimmetrica:

$$\begin{cases} \hat{b}_q^{\text{C}} := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{b}_{q\uparrow} + \hat{b}_{q\downarrow}) \\ \hat{b}_q^{\text{S}} := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{b}_{q\uparrow} - \hat{b}_{q\downarrow}) \end{cases}, \quad [\hat{b}_q^{\text{C}}, \hat{b}_q^{\text{S}}] = 0. \tag{3.28}$$

Con questo cambio di base nella Hamiltoniana LL i gradi di libertà di spin e di carica vengono completamente separati e si può scrivere $\hat{\mathcal{H}}_{\text{LL}} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{C}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{S}}$, dove

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{C}} = \sum_{q \neq 0} \left\{ \left[v_F + \frac{V_1(q)}{\pi} \right] |q| \hat{b}_q^{\text{C}\dagger} \hat{b}_q^{\text{C}} + \frac{V_1(q) + V_2(q)}{4\pi} |q| \left(\hat{b}_q^{\text{C}\dagger} \hat{b}_{-q}^{\text{C}\dagger} + \hat{b}_{-q}^{\text{C}} \hat{b}_q^{\text{C}} \right) \right\}, \tag{3.29}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{S}} = \sum_{q \neq 0} \left[v_F |q| \hat{b}_q^{\text{S}\dagger} \hat{b}_q^{\text{S}} + \frac{V_2(q) - V_1(q)}{4\pi} |q| \left(\hat{b}_q^{\text{S}\dagger} \hat{b}_{-q}^{\text{S}\dagger} + \hat{b}_{-q}^{\text{S}} \hat{b}_q^{\text{S}} \right) \right]. \tag{3.30}$$

Ognuna di queste due Hamiltoniane può essere diagonalizzata con una trasformazione di Bogoliubov, e si trovano in tal modo due tipi di eccitazioni: onde di densità di carica che si propagano a velocità

$$c_q^{\text{C}} = \sqrt{\left[v_F + \frac{V_1(q)}{\pi} \right]^2 - \left[\frac{V_1(q) + V_2(q)}{2\pi} \right]^2} \tag{3.31}$$

e onde di densità di spin con velocità di propagazione pari a

$$c_q^{\text{S}} = \sqrt{v_F^2 - \left[\frac{V_2(q) - V_1(q)}{2\pi} \right]^2}. \tag{3.32}$$

Il fatto che in generale questi due tipi di eccitazioni propagano a velocità diverse costituisce il fenomeno della *separazione spin-carica*. Se dunque invertendo le (3.28) scriviamo gli operatori bosonici spin-dipendenti come somma di una componente di carica e di una componente di spin, le due componenti evolveranno nel tempo secondo due Hamiltoniane differenti e indipendenti, e propagheranno a velocità diverse, producendo una separazione spaziale osservabile.

Il risultato che abbiamo qui ottenuto dalla bosonizzazione non prevede alcuna forma di dissipazione: le due Hamiltoniane di carica e di spin sono completamente quadratiche e le eccitazioni corrispondenti sono quindi autostati del sistema, privi di smorzamento. È tuttavia possibile mostrare [4] che il termine di back-scattering a spin antiparalleli che noi abbiamo completamente

trascurato è il responsabile del comportamento diffusivo caratteristico del canale di spin, descritto nel Capitolo 2 tramite l'introduzione del concetto di spin drag. Il termine di back-scattering comporta uno smorzamento della corrente di spin $j_\sigma \propto \partial_t \phi_\sigma$ e determina una resistività di spin che a basse temperature ha la forma

$$\rho \propto g_1^2 T^{(4K_\sigma-3)}. \quad (3.33)$$

(Si è usata la notazione del libro di Giamarchi [4]). Dal momento che $K_\sigma = 1$ per un sistema con invarianza spin-rotazionale, vediamo che il risultato 3.33 della bosonizzazione è in accordo con il termine dominante dell'Eq. 2.19 per lo spin drag (termine che infatti proveniva dai contributi a $q \approx 2k_F$). Si veda a tal proposito le Ref. [62].

Nelle sezioni 3.3 e 3.4 mostreremo come includere la dissipazione nella descrizione delle eccitazioni di spin, facendo uso della teoria dello spin drag esposta nel Capitolo 2.

3.2 Sistemi di interesse sperimentale

In questa sezione presentiamo brevemente le configurazioni e gli apparati sperimentali che sono ordinariamente utilizzati nella realizzazione di sistemi fermionici in geometrie quasi-unidimensionali. Parlando di sistemi fermionici quasi-1D di interesse sperimentale, due sono le principali alternative adatte all'osservazione dei fenomeni trattati in questa tesi: una è il liquido di elettroni in fili quantici realizzati tramite tecniche di crescita epitassiale e Cleaved Edge Overgrowth (CEO), nei quali è stata osservata la separazione spin-carica [63]; l'altra è data dai gas di atomi fermionici freddi confinati in trappole magneto-ottiche o reticoli ottici [64]; tali sistemi costituiscono dei liquidi di Luttinger "atomici" sui quali testare le proprietà predette dalla teoria, e verificare in particolare l'esistenza del meccanismo di spin drag.

3.2.1 Gas di Fermi atomici in geometria quasi-unidimensionale

Ci occupiamo qui di gas di atomi freddi confinati tramite trappole magnetiche o reticoli ottici. Tali sistemi sono particolarmente adatti all'osservazione del fenomeno dello spin drag e alla misurazione di τ_{sd} , come illustrato nella sezione successiva. Anche se lo spin drag è stato originariamente introdotto come meccanismo di attrito fra elettroni, la sua misura sperimentale in sistemi propriamente elettronici comporta delle difficoltà. Infatti, il modo più diretto per la determinazione di τ_{sd} consiste nel preparare un pacchetto di spin e nell'osservarne poi la propagazione smorzata: dalla misura dell'allargamento del pacchetto si risale a τ_{sd} . Tuttavia per creare un pacchetto di spin è necessario utilizzare un potenziale che agisca su una sola specie di spin, e un tale potenziale non è di facile realizzazione sperimentale. Utilizzare atomi fermionici al posto degli elettroni permette di sostituire al grado di libertà di spin un grado di libertà atomico interno (iperfine), per il quale è possibile agire separatamente sulla componente "↑" o "↓" tramite impulsi laser adatti.

Una possibilità per il confinamento 1D è data dall'utilizzo di fasci laser unitamente ad una trappola magnetica: con il laser si "congela" il moto degli atomi lungo le due direzioni ortogonali all'asse scelto come orientazione del sistema 1D, e con un campo magnetico di quadrupolo dato da due bobine in configurazione anti-Helmoltz si confinano gli atomi al centro della trappola.

L'altra possibilità, che a noi interessa maggiormente, è quella utilizzata nelle esperienze di Moritz *et al.* [65]-[66], e cioè l'utilizzo di reticoli ottici. Se si fanno contropropagare (lungo l'asse x , diciamo) due fasci laser di uguale frequenza, la risultante onda stazionaria costituisce un potenziale periodico per gli atomi, con periodo pari a metà della lunghezza d'onda della luce laser utilizzata. Gli atomi tenderanno a disporsi nei minimi di tale potenziale, e il moto in direzione x è bloccato o

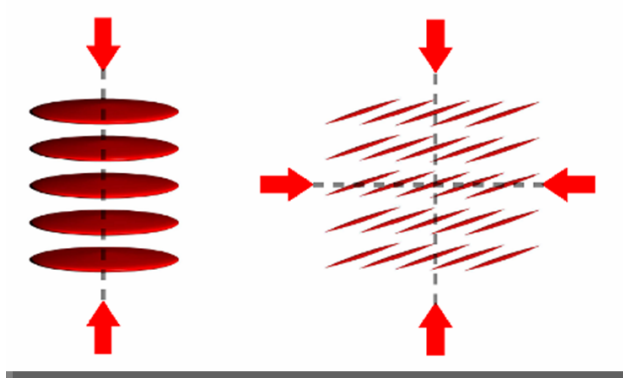


Figura 3.1: (Sinistra) Creazione di un sistema quasi-bidimensionale tramite potenziale periodico dato da una coppia di fasci laser contropropaganti. (Destra) Creazione di sistemi quasi-unidimensionali tramite due coppie di fasci laser.

fortemente limitato. Non essendo gli altri due gradi di libertà spaziali influenzati, con il potenziale descritto si creano una serie di sistemi confinati quasi-bidimensionali (piani $y-z$) in corrispondenza di ciascun minimo di potenziale (si veda l’immagine di sinistra della figura 3.1). Se invece si fanno agire due coppie di fasci laser contropropaganti, una ortogonale all’altra, il potenziale periodico è attivo su due direzioni (diciamo x e y), e il conseguente confinamento crea quindi un reticolo 2D di “tubi” quasi-unidimensionali diretti lungo l’asse z (si veda l’immagine di destra della 3.1 e la figura 3.2). I reticoli ottici offrono il vantaggio di un confinamento radiale molto forte, con larghezza caratteristica data da una frazione della lunghezza d’onda del potenziale di reticolo ($\lambda = 826$ nm in Ref. [66]).

La volontà di studiare il sistema nel regime di forte interazione ($\gamma \gg 1$) comporta l’utilizzo di basse densità ($\gamma \propto n^{-1}$): ad esempio nell’esperienza di Moritz *et al.* si aveva $N < 100$ atomi per tubo. Ne consegue un problema legato alla rilevazione di un segnale estremamente debole; tale problema è però aggirato se si lavora con i reticoli ottici descritti, che permettono di studiare contemporaneamente molte copie del sistema 1D di interesse, aumentando così l’intensità del segnale. In particolare, nell’esperienza appena citata si riescono a popolare 70×70 tubi, utilizzando atomi di ^{40}K .

Affinchè il sistema creato tramite confinamento sia un sistema strettamente 1D, è necessario che il grado di libertà trasverso sia congelato, e che cioè l’occupazione sia ristretta al primo livello energetico. Indicando con ω_{\perp} la frequenza di confinamento trasversale, la condizione appena descritta si traduce in:

$$e_F \ll \hbar\omega_{\perp}. \quad (3.34)$$

Nella configurazione sperimentale di Ref. [66] il fascio laser ha un involuppo gaussiano, e da tale proprietà consegue un debole confinamento assiale, quantificato da una frequenza ω_{\parallel} ; la relazione tra ω_{\parallel} e ω_{\perp} , che determina la forma del sistema quasi-1D, è determinata esclusivamente dalle caratteristiche del fascio: $\omega_{\perp}/\omega_{\parallel} = \pi w/\lambda$, con λ lunghezza d’onda e w waist del fascio laser. In presenza del confinamento assiale, si ha che $e_F = N\hbar\omega_{\parallel}$, per cui la richiesta (3.34) diventa $N\hbar\omega_{\parallel} \ll \hbar\omega_{\perp}$, che costituisce una condizione sul numero di particelle ammesse in un singolo tubo, una volta fissate le caratteristiche del fascio. Utilizzando i valori numerici di Moritz *et al.*,

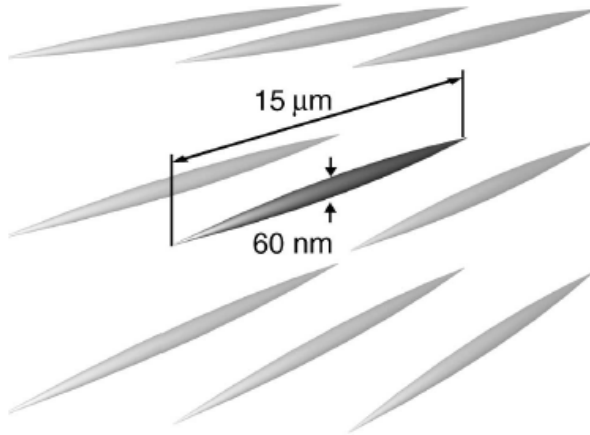


Figura 3.2: Geometria e dimensioni di sistemi quasi-1D confinati in un reticolo ottico bidimensionale. La distanza tra i tubi 1D in direzione verticale e orizzontale è di 413 nm. Figura presa dalla Ref. [65].

$\omega_{\parallel} = 2\pi \times 250$ Hz e $\omega_{\perp} = 2\pi \times 65$ kHz, otteniamo:

$$N \ll \frac{\omega_{\perp}}{\omega_{\parallel}} \approx 260. \quad (3.35)$$

Una condizione analoga alla (3.34) deve valere per la temperatura: l'energia termica deve essere sufficientemente bassa da non popolare stati eccitati trasversi:

$$k_B T \ll \hbar \omega_{\perp}, \quad (3.36)$$

che corrisponde a temperature dell'ordine dei μK o inferiori. Infine, affinché le varie copie dei sistemi 1D siano fra loro isolate, il tunneling tra i vari tubi deve essere trascurabile; questo si ottiene aumentando l'intensità del potenziale di reticolo.

3.2.2 Liquidi elettronici in fili quantici quasi-unidimensionali

Facciamo qui un breve accenno ad un altro possibile modo di realizzare sistemi fermionici unidimensionali, basato sull'utilizzo di strutture a semiconduttore. Già da tempo è affermato l'utilizzo di crescita epitassiale (MBE) per la realizzazione di sistemi quasi-bidimensionali: tramite MBE si depositano piani di un materiale semiconduttore, AlGaAs ad esempio, seguiti da piani di un diverso semiconduttore, ad esempio GaAs. All'interfaccia tra i due materiali, i due livelli di Fermi si equalizzano, e il conseguente adattamento della struttura a bande dei due materiali crea una buca di potenziale, e cioè un cosiddetto strato di inversione dove si possono accumulare elettroni, che provengono da una zona di drogaggio appositamente preparata (ad esempio uno strato di Si, come mostrato in figura 3.3). Il potenziale di accumulazione ha una larghezza tale per cui il grado di libertà trasverso rispetto all'interfaccia è congelato, e solo il primo autostato della buca di potenziale è occupato. In tal modo, avendo moto libero solo su due gradi di libertà, il sistema creato costituisce un gas elettronico quasi-bidimensionale di elettroni (2DEG).

Per preparare invece un sistema unidimensionale, si considera un sistema di partenza identico a quello appena descritto, ma senza strato di drogaggio parallelo all'interfaccia tra i due semiconduttori. Poi si inizia a depositare piani di AlGaAs in direzione ortogonale a quella di crescita

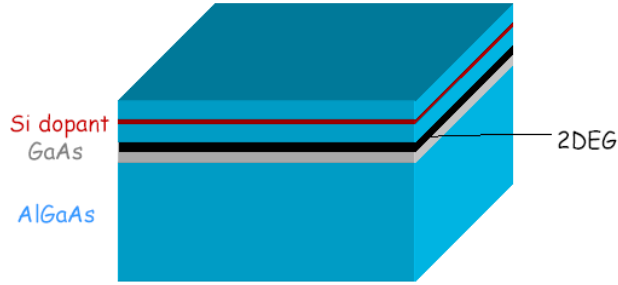


Figura 3.3: Creazione di un sistema quasi-bidimensionale: all'interfaccia tra uno strato di AlGaAs e uno di GaAs si genera una buca di potenziale, che può essere popolata tramite l'introduzione di uno strato di drogaggio (qui silicio) posto a distanza dall'interfaccia. La larghezza ridotta di tale buca limita il moto lungo la direzione trasversa e rende il sistema di elettroni confinati quasi-bidimensionale.

precedentemente usata, e si pone in tale direzione lo strato di drogaggio, come in figura 3.4(a). Allora si ha a disposizione uno strato di inversione tra i piani di GaAs e i piani di AlGaAs depositati trasversalmente, e il nuovo strato di drogaggio fornisce elettroni che vanno a formare il gas confinato. Questa volta, oltre alla dimensione trasversa di confinamento, c'è una limitazione anche in un'altra direzione (verticale in figura 3.4), data dal ridotto spessore dello strato di GaAs, che ammonta a qualche strato atomico ed è controllabile con grande precisione grazie alla MBE.

Il fenomeno della separazione spin-carica è stato osservato in uno di tali sistemi da Ausländer *et al.* [63], [67]: utilizzando due fili quantici paralleli, preparati come indicato sopra, e sfruttando l'effetto tunnel tra i due fili, hanno osservato i modi di eccitazione a molti corpi del sistema e misurato le velocità delle eccitazioni di spin e di carica, trovando discreto accordo con le previsioni teoriche.

3.3 Studio dell'effetto dello spin drag sulla separazione spin-carica: approccio tramite Teoria della Risposta Lineare

In questa sezione mostriamo, utilizzando un calcolo in approssimazione di risposta lineare, come la presenza dello spin drag modifichi la propagazione di un pacchetto di spin: in assenza di spin drag ($\tau_{sd} = \infty$) un pacchetto di spin lasciato libero di evolvere propaga in maniera balistica mantenendo il profilo iniziale, identicamente a quanto accade per un pacchetto di densità di carica; per τ_{sd} finiti il pacchetto di spin si allarga e si attenua durante la propagazione. Il procedimento e la notazione che adotteremo sono quelli del lavoro di Polini *et al.* [56].

Consideriamo un gas di Fermi a due componenti, costituito da N atomi confinati all'interno di una stretta guida d'onda atomica di lunghezza L orientata in direzione x . Il confinamento lungo le due direzioni trasverse può essere realizzato ad esempio utilizzando due onde stazionarie lungo le direzioni y e z che si sovrappongono, come descritto nella sezione precedente e nelle Ref. [64]. Tale guida d'onda consiste in un forte confinamento armonico nel piano $y - z$, caratterizzato da una frequenza $\omega_{\perp} \simeq 2\pi \times 10$ kHz (negli esperimenti citati è presente anche un debole confinamento lungo l'asse x , il cui effetto viene però qui trascurato). Si assume che le due specie di atomi fermionici

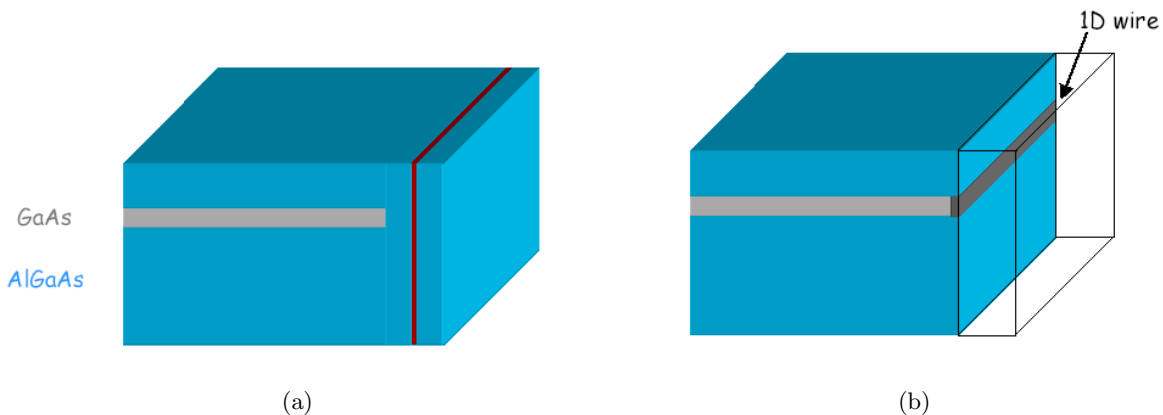


Figura 3.4: (Sinistra) Partendo da una sequenza di strati AlGaAs-GaAs-AlGaAs cresciuta in verticale, vi si depositano sul bordo piani di AlGaAs in direzione di crescita ortogonale (CEO). (Destra) L'introduzione di uno strato di drogaggio nella nuova direzione di crescita crea una stretta regione di confinamento popolata lungo tutta la larghezza dello strato di GaAs, formando così un sistema quasi-unidimensionale.

abbiano la stessa massa m e diverso spin $\sigma = \uparrow$ o \downarrow , con la convenzione esposta in precedenza. La Hamiltoniana del sistema è quella del modello di Gaudin-Yang [53]:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2m} + g_{1D} \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j), \quad (3.37)$$

ovvero gli atomi interagiscono *via* un potenziale in onda s a raggio nullo [68]. In tal caso la costante di accoppiamento efficace unidimensionale g_{1D} è pari alla trasformata di Fourier del potenziale di interazione v_q , e il suo valore può essere variato usando una risonanza di Feshbach indotta da campo magnetico tra i due differenti stati di spin per cambiare la lunghezza di scattering tridimensionale a_{3D} [66]. Nel limite $a_{3D} \ll a_{\perp}$, dove $a_{\perp} = \sqrt{\hbar^2/(m\omega_{\perp})}$, si trova che $g_{1D} = 2\hbar^2 a_{3D}/(ma_{\perp}^2)$. Nel limite termodinamico ($N, L \rightarrow \infty$) le proprietà del sistema sono determinate dalla densità lineare $n = N/L$, dal grado di polarizzazione di spin $\zeta = (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})/N$, e dalla costante di accoppiamento efficace g_{1D} . L'energia di stato fondamentale (per atomo) $\varepsilon(n, \zeta, g_{1D})$ può essere determinata in maniera accurata risolvendo un sistema di equazioni integrali accoppiate di tipo *Bethe-Ansatz* (si veda *e.g.* Ref. [69]). In maniera analoga a quanto fatto nel Capitolo 2 introduciamo le componenti adimensionali dell'interazione $\Gamma_q = mv_q/(\hbar^2 n)$ (per $v_q = g_{1D}$ questa quantità coincide con il ben noto parametro adimensionale γ di Yang [53]). Ricordiamo inoltre che $k_F = \pi n/2$, e che la velocità di Fermi è data da $v_F = \hbar k_F/m$.

La dinamica delle oscillazioni di densità e di spin è controllata, nello schema teorico che adottiamo in questa sezione, dalle funzioni di risposta lineare densità-densità e spin-spin, rispettivamente $\chi_{\rho\rho}(q, \omega)$ e $\chi_{S_z S_z}(q, \omega)$, che possono essere convenientemente espresse in termini dei fattori di campo locale dinamici simmetrici e antisimmetrici $G_{\pm}(q, \omega)$ [1],

$$\begin{cases} \chi_{\rho\rho}(q, \omega) = \frac{\chi_0(q, \omega)}{1 - v_q[1 - G_+(q, \omega)]\chi_0(q, \omega)} \\ \chi_{S_z S_z}(q, \omega) = \frac{\chi_0(q, \omega)}{1 + v_q G_-(q, \omega)\chi_0(q, \omega)} \end{cases}. \quad (3.38)$$

Qui $\chi_0(q, \omega)$ è la funzione di risposta non-interagente 1D, descritta nella sezione 1.2, che nel limite

di grandi lunghezze d'onda ha la forma

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi_0(q, \omega) = N(0) \frac{(v_F q)^2}{\omega^2 - (v_F q)^2}, \quad (3.39)$$

con $N(0) = 4m/(\pi^2 \hbar^2 n)$ densità di stati 1D al livello di Fermi. I fattori di campo locale obbediscono alle relazioni di the Kramers-Kronig

$$\Re G_{\pm}(q, \omega) = G_{\pm}(q, 0) + \frac{2\omega^2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} d\omega' \frac{\Im G_{\pm}(q, \omega')}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)}. \quad (3.40)$$

Il limite di grandi lunghezze d'onda dei fattori di campo locale *statici* $G_{\pm}(q, 0)$ è fissato dalle regole di somma della compressibilità e della suscettività di spin, *i.e.*

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{q \rightarrow 0} G_+(q, 0) = 1 - \frac{\pi^2}{4\gamma} \left(\frac{\kappa_0}{\kappa} - 1 \right) \\ \lim_{q \rightarrow 0} G_-(q, 0) = -\frac{\pi^2}{4\gamma} \left[\frac{\chi_{\sigma 0}}{\chi_{\sigma}} - 1 \right] \end{array} \right\}, \quad (3.41)$$

dove $\kappa = n^{-2} \{ \partial^2 [n\varepsilon(n, 0, g_{1D})] / \partial n^2 \}^{-1}$ e $\chi_{\sigma} = n [\partial^2 \varepsilon(n, \zeta, g_{1D}) / \partial \zeta^2 |_{\zeta=0}]^{-1}$ sono la compressibilità e la suscettività di spin del sistema interagente, mentre $\kappa_0 = N(0)/n^2$ e $\chi_{\sigma 0} = N(0)$ sono le stesse quantità per un sistema non-interagente.

A frequenza finita, tuttavia, la parte reale e la parte immaginaria di $G_-(q, \omega)$ divergono nel limite di grandi lunghezza d'onda come $\omega^2/(q^2 v_q)$ e $\omega/(q^2 v_q)$, rispettivamente [70]. Tale comportamento divergente è invece assente nel canale di carica e quindi in $G_+(q, \omega)$. Di conseguenza, i comportamenti a piccoli q della funzione di risposta densità-densità e di quella spin-spin sono profondamente diversi.

Infatti, scrivendo un'espansione idrodinamica esatta (piccoli q e ω) delle due funzioni di risposta, usando le equazioni (3.39)-(3.41) e la forma nota della singolarità di $G_-(q, \omega)$, si può mostrare che $\chi_{\rho\rho}$ e $\chi_{S_z S_z}^{-1}$ hanno le seguenti espressioni limite:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \chi_{\rho\rho}^{-1}(q, \omega) = \frac{m\omega^2}{nq^2} - \frac{m}{n} v_F^2 \frac{\kappa_0}{\kappa} \quad (3.42)$$

e

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \chi_{S_z S_z}^{-1}(q, \omega) = \frac{m_{\sigma}\omega^2}{nq^2} - \frac{m}{n} v_F^2 \frac{\chi_{\sigma 0}}{\chi_{\sigma}} + \frac{im\omega}{nq^2 \tau_{sd}(T)}, \quad (3.43)$$

dove sono stati introdotti il tempo di rilassamento di spin drag $\tau_{sd}(T)$, definito nel Capitolo 2, e la massa di spin m_{σ} , definita ad esempio in [71]. Analizziamo ora le implicazioni delle equazioni (3.42) e (3.43). Secondo l'Eq. (3.42), la funzione di risposta densità-densità ha un polo acustico a $\omega = v_{\rho} q$, dove $v_{\rho}^2 = v_F^2 \kappa_0 / \kappa$. É facilmente verificabile che questo risultato è in accordo con il risultato della bosonizzazione $v_{\rho} = v_F K_{\rho} \kappa_0 / \kappa$ [4], grazie alla relazione $K_{\rho} = v_F / v_{\rho}$ che vale per un sistema invariante per trasformazioni di Galileo. La velocità del suono v_{ρ} ha i seguenti comportamenti: $v_{\rho} = v_F(1 + \gamma/\pi^2 + \dots)$ nel limite $\gamma \rightarrow 0$ di interazione debole, e $v_{\rho} = 2v_F(1 - 4 \ln 2/\gamma + \dots)$ nel limite $\gamma \rightarrow +\infty$ di interazione forte [72]. L'equazione (3.42) non tiene di conto dello smorzamento di questo modo acustico associato alla relazione di dispersione non-lineare delle particelle: infatti tale smorzamento compare solo a ordini più alti in q , e si annulla come q^2 [73].

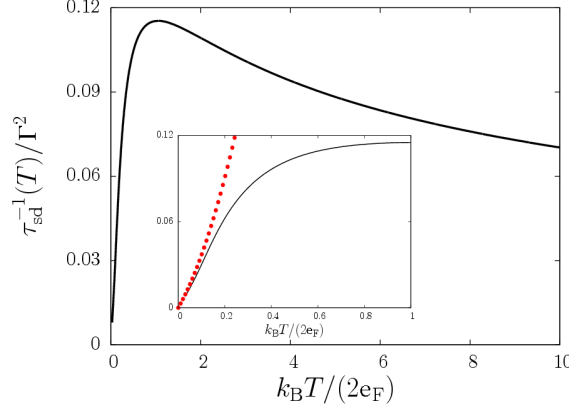


Figura 3.5: Tempo di rilassamento di spin drag τ_{sd} (in unità di e_F/\hbar e diviso per Γ^2) in funzione della temperatura ridotta $k_B T/(2e_F)$. I cerchi rossi nell'inserto rappresentano il risultato analitico (3.46). Figura presa dalla Ref. [56].

Utilizzando invece l'equazione (3.43), si trova che la funzione di risposta spin-spin ha un polo acustico alla frequenza $\omega = v_\sigma q$, con $v_\sigma^2 = v_F^2 (m/m_\sigma) \chi_{\sigma 0}/\chi_\sigma$. Il risultato fornito dalla bosonizzazione per la velocità di spin è $v_\sigma = v_F K_\sigma \chi_{\sigma 0}/\chi_\sigma$ [4], con $K_\sigma = 1$ a causa dell'invarianza spin-rotazionale. I due risultati per v_σ coincidono solo se vale la seguente relazione non-perturbativa tra la massa di spin e la suscettività di spin:

$$\frac{m_\sigma}{m} = \frac{\chi_\sigma}{\chi_{\sigma 0}}. \quad (3.44)$$

Nel limite di interazione debole si ha $v_\sigma = v_F(1 - \gamma/\pi^2 + \dots)$, mentre nel limite opposto la velocità di spin si annulla come $v_\sigma = 2\pi^2 v_F/(3\gamma) + \dots$ [72]. Da questi comportamenti limite troviamo che $m_\sigma/m = 1 + \gamma/\pi^2 + \dots$ nel limite $\gamma \rightarrow 0$ e che invece la massa di spin diverge linearmente per $\gamma \rightarrow \infty$, $m_\sigma/m = 3\gamma/(2\pi^2) + \dots$.

L'ultimo termine dell'Eq. (3.43) descrive lo smorzamento del modo di spin dovuto al meccanismo dello spin drag. Nel caso non polarizzato $N_\uparrow = N_\downarrow$ e al secondo ordine perturbativo, il tempo di rilassamento di spin drag è dato dalla formula (2.10):

$$\frac{1}{\tau_{sd}(T)} = \frac{4\hbar^2}{nmk_B T} \int_0^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} q^2 v_q^2 \int_0^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{[\Im m \chi_0(q, \omega)]^2}{\sinh^2[\hbar\omega/(2k_B T)]}. \quad (3.45)$$

Seguendo l'usuale notazione, $\chi_0(q, \omega)$ è la funzione di Lindhard 1D a temperatura finita. In figura 3.5 riportiamo ancora una volta il comportamento di $\tau_{sd}^{-1}(T)/\Gamma^2$ in funzione della temperatura, calcolato numericamente. Come riportato nel Capitolo 2, il calcolo analitico per l'inverso del tempo di spin drag nel limite di $T \rightarrow 0$ fornisce il risultato

$$\frac{1}{\tau_{sd}(T)} \rightarrow \left[\frac{8}{9\pi} \Gamma_{2k_F}^2 \left(\frac{k_B T}{2e_F} \right) + \frac{8}{3\pi} \Gamma_0^2 \left(\frac{k_B T}{2e_F} \right)^2 \right] \frac{e_F}{\hbar}. \quad (3.46)$$

Avevamo già fatto notare nella sezione 2.2.1 che tale comportamento risulta confermato dai risultati numerici riportati in figura 3.5, i quali prevedono un andamento lineare a basse temperature, poi un aumento di $\tau_{sd}^{-1}(T)$ fino a saturazione, seguito da un lento decadimento a zero per alte

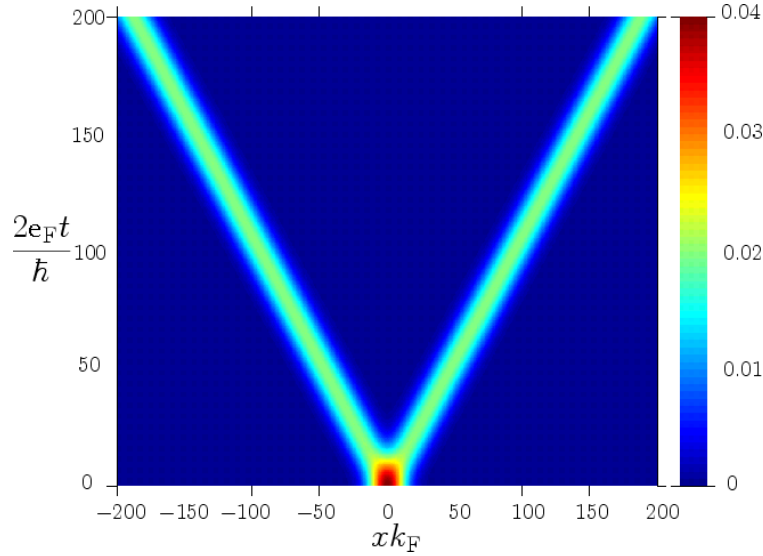


Figura 3.6: Evoluzione spazio-temporale di un pacchetto di spin gaussiano di larghezza iniziale $w = 10k_F^{-1}$ nel limite balistico ($D_\sigma \rightarrow \infty$). La densità di spin $s(x,t)$ (in unità di k_F^{-1}) è mostrata come funzione di x (in unità di k_F^{-1}) e di t (in unità di $\hbar/(2e_F)$). In questo esempio abbiamo scelto $\gamma = 0.6$. Si osservi come le componenti right e left del pacchetto iniziale propagghino essenzialmente alla velocità di Fermi e come la loro ampiezza non cambi nel tempo. Figura da Ref. [56].

temperature: asintoticamente si ha $\tau_{sd}^{-1}(T) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 16\pi^{-7/2}\gamma^2[k_B T/(2e_F)]^{-1/2}e_F/\hbar$ nel caso $v_q = g_{1D}$.

Passiamo ora a derivare le equazioni del moto per i pacchetti di densità e di spin. Come discusso nelle Refs. [72] e [74], pacchetti localizzati di densità e di spin possono essere creati tramite brevi impulsi di luce laser non-risonanti, focalizzati su uno spot di diametro w , tali che $R \gg w \gg k_F^{-1}$, dove R è la dimensione della nube atomica e k_F^{-1} è la distanza interatomica media.

L'evoluzione temporale di tali pacchetti è determinata dalle equazioni $\chi_{\rho\rho}^{-1}(q,\omega)n(q,\omega) = 0$ e $\chi_{S_z S_z}^{-1}(q,\omega)s(q,\omega) = 0$, con $s(x,t)$ densità di spin. Facendo uso delle (3.42) e (3.43), le equazioni appena scritte possono essere convertite in due equazioni alle derivate parziali del secondo ordine per la densità di carica $n(x,t)$ e la densità di spin $s(x,t)$:

$$\begin{cases} (v_\rho^{-2}\partial_t^2 - \partial_x^2) n(x,t) = 0 \\ (v_\sigma^{-2}\partial_t^2 - \partial_x^2) s(x,t) + D_\sigma^{-1} \partial_t s(x,t) = 0 \end{cases} \quad (3.47)$$

dove abbiamo introdotto la costante di diffusione di spin $D_\sigma = v_\sigma^2 \tau_{sd}(T) = n\tau_{sd}(T)/(m_\sigma \chi_\sigma)$ (relazione di Einstein). La prima equazione è un'equazione d'onda 1D che dipende unicamente dalla velocità di densità (di carica) v_ρ : la soluzione di tale equazione con condizioni iniziali

$$\begin{cases} n(x,0) = n_0(x) \\ \partial_t n(x,t)|_{t=0} = 0 \end{cases} \quad (3.48)$$

è data dalla formula di d'Alembert

$$n(x,t) = \frac{n_0(x + v_\rho t) + n_0(x - v_\rho t)}{2}. \quad (3.49)$$

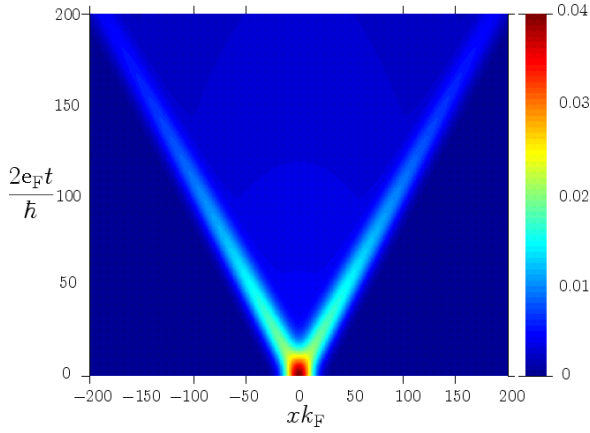


Figura 3.7: Evoluzione spazio-temporale di un pacchetto di spin gaussiano di larghezza iniziale $w = 10k_F^{-1}$ in presenza di un tempo di rilassamento di spin drag $\tau_{sd} \approx 0.04\hbar/e_F$ (corrispondente a $\gamma = 0.6$ e $T = e_F/k_B$). Si notino l'allargamento e l'attenuazione del pacchetto di spin al passare del tempo. Figure prese entrambe dalla Ref. [56].

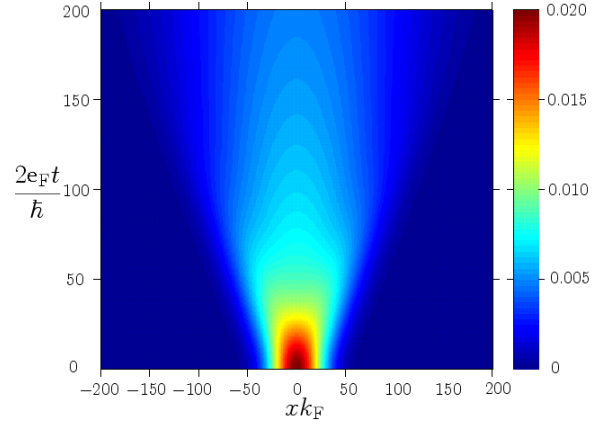


Figura 3.8: Evoluzione spazio-temporale di un pacchetto di spin gaussiano di larghezza iniziale $w = 20k_F^{-1}$ in presenza di un tempo di rilassamento di spin drag $\tau_{sd} \approx 0.12\hbar/e_F$ (corrispondente a $\gamma = 1$ e $T = 2e_F/k_B$). Il pacchetto si espande in maniera diffusiva e non si separa in componenti right e left contropropaganti.

L'evoluzione temporale di un pacchetto d'onda di densità è dunque piuttosto semplice: il pacchetto si separa in una componente left e una right, ognuna delle quali propaga in maniera balistica mantenendo la forma del profilo di densità iniziale n_0 .

La seconda equazione invece è un'equazione d'onda smorzata che dipende da due parametri, la velocità di spin v_σ e la costante di diffusione di spin D_σ . Nel limite di smorzamento zero, $D_\sigma \rightarrow +\infty$, la soluzione è data dall'espressione di d'Alembert $s(x, t) = [s_0(x + v_\sigma t) + s_0(x - v_\sigma t)]/2$. In tale limite quindi sia i pacchetti di densità che quelli di spin si muovono balisticamente (ma con velocità diverse). Questa situazione è mostrata in figura 3.6 per un pacchetto di spin iniziale di tipo gaussiano, $s_0(x) = [(2\pi)^{-1/2}w^{-1}] \exp[-x^2/(2w^2)]$, di larghezza $w = 10k_F^{-1}$.

Per un valore finito della costante di diffusione, al contrario, la dinamica spatio-temporale del pacchetto di spin differisce notevolmente da quella di tipo d'Alambertiano. La soluzione all'equazione d'onda smorzata che soddisfa alle condizioni iniziali

$$\begin{cases} s(x, 0) = s_0(x) \\ \partial_t s(x, t)|_{t=0} = 0 \end{cases} \quad (3.50)$$

può essere scritta nella forma finale

$$s(x, t) = \exp\left(-\frac{t}{2\tau_{sd}}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \tilde{s}_0(q) \exp(iqx) \left[\cos(\omega_q t) + \frac{\sin(\omega_q t)}{2\omega_q \tau_{sd}} \right]. \quad (3.51)$$

Abbiamo definito $\omega_q = \sqrt{(2qL_\sigma)^2 - 1}/(2\tau_{sd})$ e introdotto la lunghezza di diffusione di spin $L_\sigma = D_\sigma/v_\sigma$ (la radice complessa per ω_q è definita qui con parte immaginaria positiva). Si è inoltre indicato con $\tilde{s}_0(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx s_0(x) \exp(-iqx)$ la trasformata di Fourier del profilo di densità di spin iniziale.

In Fig. 3.7 mostriamo l'evoluzione temporale ottenuta dall'Eq. (3.51) dello stesso pacchetto di spin gaussiano introdotto sopra, per $T = e_F/k_B$ e $\gamma = 0.6$. L'attenuazione e lo spreading

del pacchetto sono chiaramente osservabili. Se il tempo di spin drag è sufficientemente breve ($v_\sigma \tau_{\text{sd}} < w$) è anche possibile che ciò impedisca la separazione del profilo iniziale in due pacchetti distinti: in tal caso l'evoluzione del pacchetto di spin è difficilmente distinguibile dalla ordinaria diffusione di spin in dimensionalità superiori (si veda la Fig. 3.8).

3.4 Approccio tramite Teoria del Funzionale di Densità di Corrente

Affrontiamo ora lo stesso problema discusso nella sezione precedente, e cioè l'analisi della propagazione di pacchetti di carica e di spin, utilizzando però al posto della teoria della risposta lineare la teoria del funzionale di densità di corrente dipendente dal tempo (TD-CDFT).

Il sistema fisico in esame è lo stesso presentato in precedenza: un gas di Fermi a due componenti con N atomi confinati in una sottile guida d'onda di lunghezza L (un "filo quantico atomico") lungo l'asse x , realizzata ad esempio utilizzando due onde stazionarie sovrapposte lungo la direzione y e z , come nella Ref. [66]. Il confinamento armonico nel piano trasversale è caratterizzato da una frequenza di trappola $\omega_\perp \simeq 2\pi \times 10$ kHz. Nella configurazione sperimentale descritta nel lavoro appena citato è presente anche un debole potenziale di confinamento lungo l'asse di simmetria x , indicato con $V_{\text{trap}}(x)$, che tipicamente è di tipo armonico e caratterizzato da una frequenza $\omega_\parallel \simeq 2\pi \times (10 - 300)$ Hz.

Si assume che le due specie atomiche abbiano la stessa massa m e diverso spin σ , $\sigma = \uparrow$ o \downarrow , nel senso spiegato in precedenza, secondo il quale viene attribuito il ruolo di spin a un grado di libertà interno (iperfine). I fermioni in esame interagiscono *via* un potenziale di contatto $v(x) = g_{1D}\delta(x)$ [53]; la trasformata di Fourier di tale potenziale è la costante di accoppiamento g_{1D} , il cui valore può essere variato usando una risonanza di Feshbach che cambi la lunghezza di scattering a_{3D} [66].

Immaginiamo ora di far agire per tempi $t < 0$ sul gas di Fermi un potenziale locale esterno, da qui in avanti indicato come il *potenziale di accumulazione*, che si accoppia solo ad atomi di una specie di spin, diciamo agli atomi con spin-up. Tale potenziale crea un accumulo di atomi con spin-up in prossimità del centro della trappola. Ovviamente, a causa della repulsione coulombiana, ci sarà un corrispondente svuotamento nella densità di atomi con spin-down nel centro della trappola. All'istante $t = 0$ il potenziale di accumulazione viene improvvisamente disattivato e la densità di "carica", $n(x, t) = n_\uparrow(x, t) + n_\downarrow(x, t)$, e quella di "spin", $s(x, t) = n_\uparrow(x, t) - n_\downarrow(x, t)$, sono lasciate libere di propagare in presenza del solo potenziale di trappola $V_{\text{trap}}(x)$. Questo problema è definito dalla seguente Hamiltoniana dipendente dal tempo:

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{ext}}(t) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + g_{1D} \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j) + V_0 + V_{\text{acc}}(t), \quad (3.52)$$

nella quale \mathcal{H}_0 è la Hamiltoniana (3.37) del modello di Gaudin-Yang omogeneo. Il potenziale confinante $V_0 = \sum_i V_{\text{trap}}(x_i)$ è attivo a tutti i tempi $-\infty < t < +\infty$, mentre il potenziale di accumulazione, attivo solo nell'intervallo di tempo $-\infty < t < 0$, è dato da $V_{\text{acc}}(t) = \sum_{i,\sigma} V_{\text{ext}}^{(\sigma)}(x_i, t)$, con

$$V_{\text{ext}}^{(\sigma)}(x, t) = A_\sigma \exp[-x^2/(2w)]\Theta(-t). \quad (3.53)$$

Come detto sopra, tale potenziale agisce su una sola specie atomica: $A_\uparrow < 0$ e $A_\downarrow = 0$. Non si fa alcuna ipotesi sull'intensità del potenziale di accumulazione, *i.e.* non si assume di essere in

regime di risposta lineare. Si noti infine che, per concretezza, abbiamo preso per V_{ext} una semplice gaussiana di larghezza w , che scegliamo essere molto maggiore della distanza media inter-particella.

L'evoluzione temporale delle densità di spin $n_\sigma(x, t)$ dopo l'eliminazione del potenziale di accumulazione (quenching) è data dalle soluzioni delle seguenti equazioni di Kohn-Sham dipendenti dal tempo:

$$i\hbar \partial_t \psi_\alpha^{(\sigma)}(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{KS}}^{(\sigma)}[n_\sigma](x, t) \right] \psi_\alpha^{(\sigma)}(x, t), \quad (3.54)$$

assieme alla chiusura fornita da

$$n_\sigma(x, t) = \sum_{\alpha, \text{occ.}} \left| \psi_\alpha^{(\sigma)}(x, t) \right|^2. \quad (3.55)$$

Qui $V_{\text{KS}}^{(\sigma)}[n_\sigma](x, t) = V_{\text{H}}^{(\sigma)}[n_\sigma](x, t) + V_{\text{xc}}^{(\sigma)}[n_\sigma](x, t) + V_{\text{ext}}^{(\sigma)}(x, t)$ è il potenziale di Kohn-Sham. Con V_{H} si è indicato il termine di Hartree, e con V_{xc} il potenziale di scambio e correlazione, a sua volta dato dalla somma di due contributi:

$$V_{\text{xc}}^{(\sigma)} = V_{\text{xc-ALSDA}}^{(\sigma)} + V_{\text{xc-dyn}}^{(\sigma)}. \quad (3.56)$$

La novità nella forma di questo potenziale è la presenza del secondo termine, il potenziale xc dinamico, che abbiamo introdotto per tenere conto dello spin drag. Per poter utilizzare all'interno di $V_{\text{xc-dyn}}^{(\sigma)}$ l'espressione di τ_{sd} , ricordiamo come questo era stato introdotto in maniera fenomenologica nel Capitolo 2 (Eq. (2.2)):

$$F_{\text{xc-dyn}}^{(\sigma)} = -m \frac{n_{\bar{\sigma}} v_\sigma - v_{\bar{\sigma}}}{n \tau_{\text{sd}}} \quad (3.57)$$

è la forza di spin drag esercitata dalle particelle con spin $\bar{\sigma}$ su una particella con spin σ . A questo punto è immediato scrivere

$$V_{\text{xc-dyn}}^{(\sigma)}(x, t) = - \int_{-L/2}^x dx' F_{\text{xc-dyn}}^{(\sigma)}. \quad (3.58)$$

Per il nostro sistema vale inoltre, separatamente per ciascuna popolazione di spin, l'equazione di continuità, che scriviamo nella forma

$$j_\sigma(x, t) = - \int_{-L/2}^x dx' \frac{\partial n_\sigma(x', t)}{\partial t}. \quad (3.59)$$

A questo punto, inserendo la (3.57) e la (3.59) nella relazione (3.58), otteniamo l'equazione

$$\begin{aligned} V_{\text{xc-dyn}}^{(\sigma)}(x, t) &= - \int_{-L/2}^x dx' F_{\text{xc-dyn}}^{(\sigma)} \\ &= - \int_{-L/2}^x dx' \frac{m (\tau_{\text{sd}}^{-1})|_{n_\uparrow(x', t), n_\downarrow(x', t)}}{n(x', t)} \sum_{\sigma'} \frac{\sigma \sigma' n_\uparrow(x', t) n_\downarrow(x', t)}{n_\sigma(x', t) n_{\sigma'}(x', t)} \int_{-L/2}^{x'} dx'' \frac{\partial n_{\sigma'}(x'', t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

La teoria presentata al Capitolo 2 permette di calcolare $\tau_{\text{sd}}(n_\uparrow, n_\downarrow)$ solo per sistemi con densità di spin n_σ uniformi, seppure diverse per $\sigma = \uparrow$ e $\sigma = \downarrow$. Per cui nell'equazione (3.60) dobbiamo ricorrere ad un'approssimazione di densità di spin locale (LSDA): in un punto x l'effetto di spin drag è quantificato da $1/\tau_{\text{sd}}(n_\uparrow, n_\downarrow)$, calcolato per un sistema omogeneo con densità di spin pari

alle densità locali $n_\uparrow(x)$ e $n_\downarrow(x)$. Tale approssimazione è giustificata quando le densità di spin non variano in maniera troppo rapida nello spazio.

L'altro termine dell'equazione (3.56), indicato con $V_{xc-ALSDA}^{(\sigma)}$, costituisce una delle approssimazioni più diffuse per il potenziale di scambio e correlazione: l'approssimazione adiabatica di densità locale (già presentata nella sezione 1.3.4), nel nostro caso fatta per ciascuna componente di spin. Nella ALDA, che costituisce la naturale estensione della LDA per potenziali dipendenti dal tempo, si assume che il potenziale $V_{xc}^{(\sigma)}[n](x, t)$ dipendente dal tempo sia il potenziale xc statico calcolato alla densità istantanea $n(x, t)$. Successivamente il potenziale statico xc è trattato con l'approssimazione LDA. Per cui abbiamo l'espressione

$$V_{xc-ALSDA}^{(\sigma)}(x, t) \equiv \left. \frac{d[n e_{xc}(n_\uparrow, n_\downarrow)]}{dn_\sigma} \right|_{n_\sigma = n_\sigma(x, t)}, \quad (3.61)$$

dove $e_{xc}(n_\uparrow, n_\downarrow)$ è l'energia di scambio e correlazione per particella nel modello di Gaudin-Yang omogeneo (3.37) di densità di spin n_\uparrow e n_\downarrow . Una delle caratteristiche apprezzabili della ALDA è il fatto che la sua validità non è ristretta a piccole deviazioni della densità dalla configurazione di stato fondamentale, *i.e.* non è ristretta al regime di risposta lineare. Inoltre, la sua semplicità e facilità di implementazione ne hanno determinato il grande successo, con risultati molto migliori di quello che ci si potrebbe aspettare a priori: ad esempio, come già osservato nella sezione 1.3.4, la ALDA si presta molto bene al calcolo di energie di eccitazione, nonostante l'approssimazione adiabatica in quanto tale dovrebbe funzionare solo a frequenze molto minori delle frequenze caratteristiche di eccitazione del sistema. Una spiegazione di tale sorprendente comportamento può essere trovata in [1], sezione 7.7.

Riportiamo qui di seguito il risultato delle simulazioni numeriche con cui abbiamo implementato i calcoli TD-CDFEFT relativi alla propagazione dei pacchetti di carica e di spin: nei grafici sono raffigurati i profili spaziali delle due densità di spin e delle corrispondenti densità di carica e di spin. Mostriamo prima la situazione a tempi $t < 0$, per i quali il potenziale di accumulazione è attivo, e poi la situazione a tempi successivi. Il primo set di quattro figure è relativo al caso di temperatura zero, le ultime tre figure raffigurano invece la situazione agli stessi tempi, ma con temperatura non nulla, e cioè con spin drag attivo.

Dalla lettura dei grafici si possono fare le seguenti osservazioni:

- La propagazione del pacchetto di carica e quella del pacchetto di spin avvengono a velocità diverse, come previsto dalla separazione spin-carica per un sistema fermionico unidimensionale.
- Il pacchetto di spin mostra una forte attenuazione al passare del tempo: nell'ultimo grafico di figura 3.11 il profilo del pacchetto è difficilmente distinguibile da quello del background. Tale effetto di smorzamento è generato dallo spin drag.
- Anche la propagazione nel canale di carica sembra essere caratterizzata da una qualche forma di smorzamento, seppur in misura minore rispetto al canale di spin. Tale smorzamento, di cui non si teneva conto nell'approssimazione di risposta lineare, nasce dalla possibilità di decadimento del modo collettivo in eccitazione di coppie particella-buca. Nell'espressione (3.56) per il potenziale di scambio e correlazione abbiamo trascurato gli effetti visco-elastici nel canale di carica discussi nella sezione 1.3.5, che portano a dissipazioni di ordine q^2 . Avendo qui trovato che le eccitazioni di carica sono smorzate, sarebbe opportuno includere per completezza anche il contributo visco-elastico allo smorzamento.

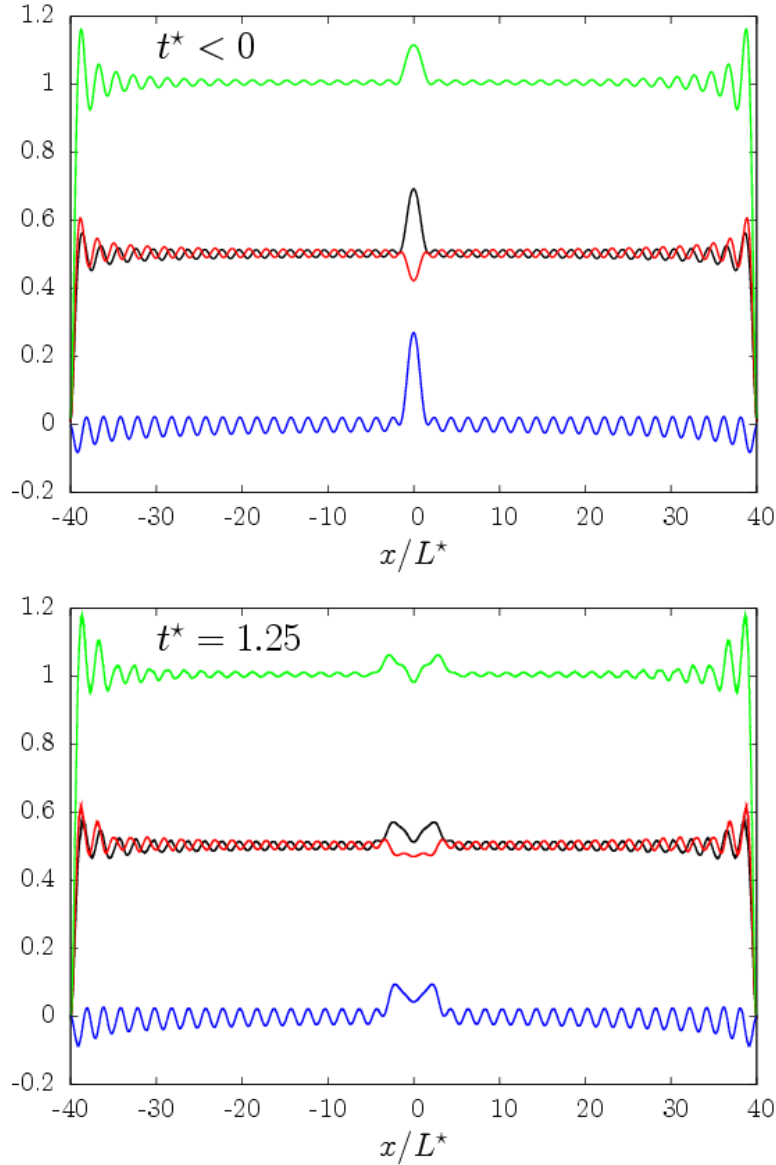


Figura 3.9: Evoluzione spazio-temporale delle densità di particelle con spin up (al centro, in nero) e di particelle con spin down (in rosso) a temperatura $T = 0$. Le corrispondenti densità di carica (verde) e di spin (blu) sono ottenute come somma e differenza delle prime due. Il sistema fisico in questione è una scatola di lunghezza L con pareti infinite; L^* è definito in modo tale che $L = NL^*$, e qui abbiamo $N = 80$ (40 particelle a spin up e 40 a spin down). Il tempo t^* è misurato in unità di mL^{*2}/\hbar . L'immagine sopra raffigura i profili di densità a tempi $t < 0$, per i quali è attivo il potenziale di accumulazione e i pacchetti sono formati al centro della sistema. L'immagine sotto mostra l'inizio della propagazione, durante il quale i pacchetti si separano in due componenti contropropaganti. Il potenziale di accumulazione, attivo solo per fermioni con spin up, ha la forma $V_{\text{ext}}^{(\uparrow)}(x, t) = A_{\uparrow} \exp[-x^2/(2w)]\Theta(-t)$, con $A_{\uparrow} = -1$ e $w = 0.5$. Si osservi l'oscillazione in controfase delle densità di spin up e di spin down, lungo tutta la lunghezza del sistema, causata dalle interazioni repulsive. Poichè il sistema è a temperatura zero, lo spin drag è completamente assente, e la propagazione del pacchetto di spin qualitativamente simile a quella del pacchetto di carica (pur avendo diverse velocità di propagazione).

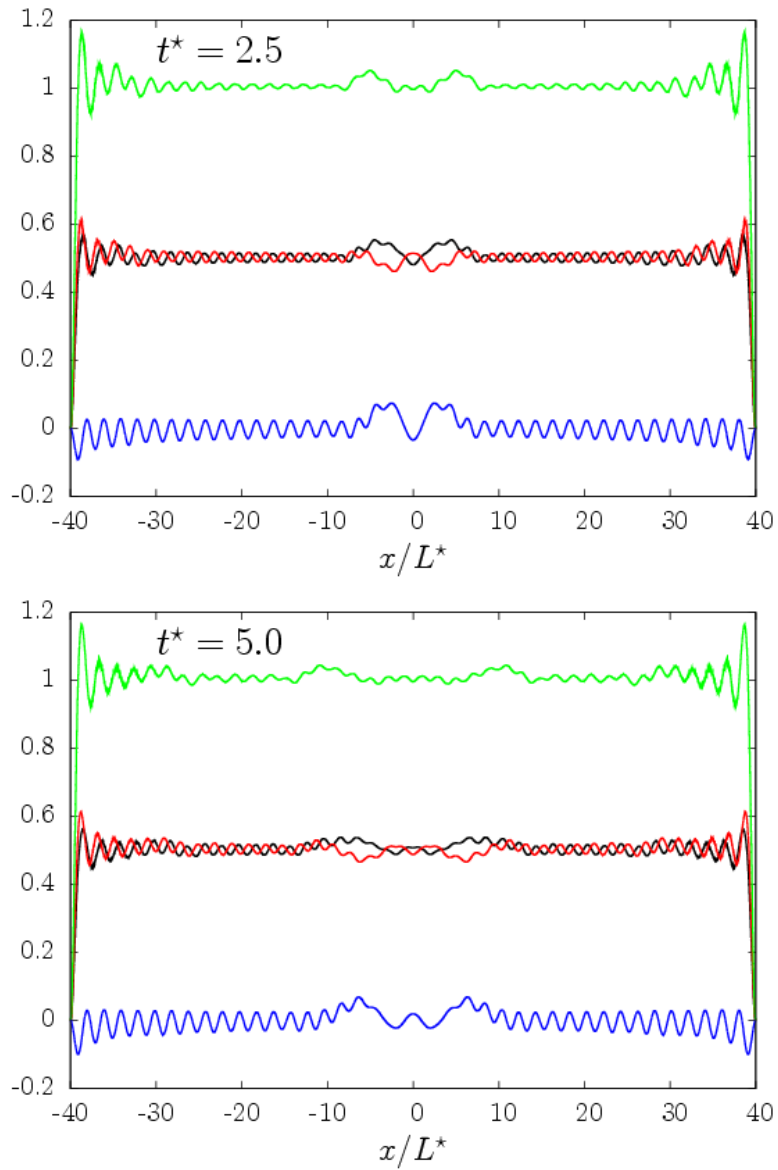


Figura 3.10: Evoluzione degli stessi pacchetti di carica e di spin mostrati sopra, a tempi successivi. Si noti la chiara separazione spaziale tra i pacchetti di carica e quelli di spin, causata dalla differente velocità di propagazione.

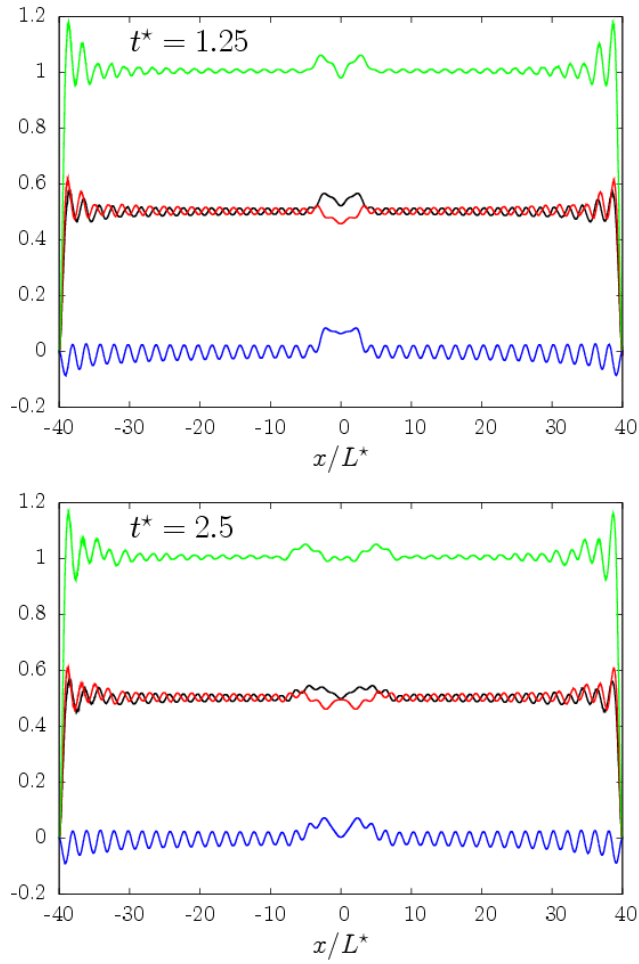


Figura 3.11: Si veda la didascalia della figura successiva.

- Tutti i profili di densità sono caratterizzati da una struttura ondulatoria, corrispondente alle oscillazioni di Friedel. Inoltre, le oscillazioni nella densità di particelle con spin up sono in controfase rispetto a quelle della densità di particella con spin down, a causa dell'interazione repulsiva che tende ad anticorrelare i due profili di densità.

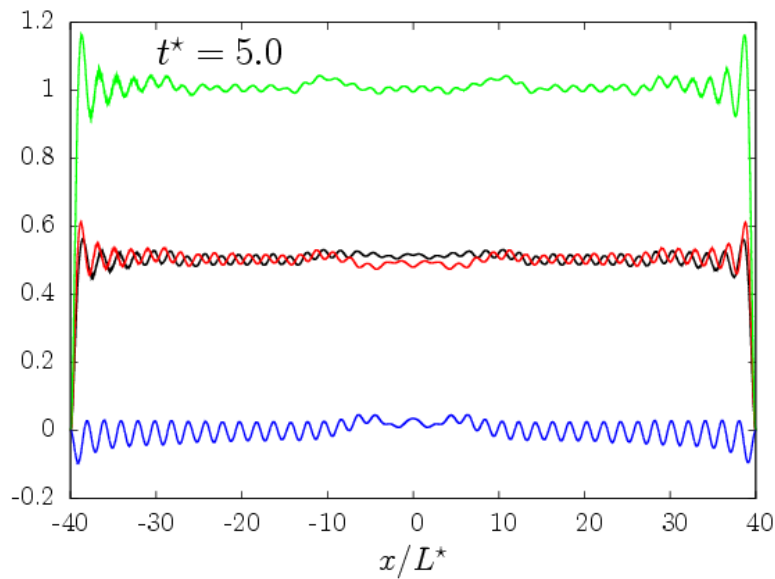


Figura 3.12: Evoluzione spazio-temporale delle densità di particelle con spin up e di particelle con spin down nello stesso sistema delle figure 3.9-3.10, agli stessi istanti di tempo, ma a temperatura non nulla: $k_B T = 0.5 \hbar^2 / (mL^{*2})$. Il tempo t^* è inteso in unità di mL^{*2} / \hbar . Si osservi l'effetto della presenza di spin drag sulla propagazione nel canale di spin, effetto che risulta evidente dal confronto diretto dei due set di figure. A grandi tempi lo smorzamento e l'allargamento dei pacchetti di spin risulta più marcato, e un analogo effetto di smorzamento diventa visibile anche per i pacchetti di carica.

Conclusioni

In questo lavoro di tesi ci siamo occupati di fenomeni di trasporto in sistemi polarizzati nello spin. In particolare, abbiamo esposto nel Capitolo 2 il concetto di spin drag, un meccanismo intrinseco di attrito a molti corpi tra elettroni di spin opposto, che tende ad equalizzare gli impulsi medi delle due popolazioni di spin e ad annullare quindi una eventuale corrente di spin. Abbiamo calcolato l'espressione analitica del coefficiente di spin drag τ_{sd}^{-1} nei limiti di temperature molto basse e di temperature molto alte, prima per il caso paramagnetico (polarizzazione di spin =0) e poi per un sistema polarizzato nello spin. La stessa trattazione è facilmente estendibile al caso di sistemi di atomi freddi, nei quali lo spin è sostituito da un grado di libertà atomico interno. É infatti sufficiente modificare nella formula (2.14) l'espressione per la trasformata del potenziale di interazione.

Nel Capitolo 3 abbiamo presentato il paradigma del liquido di Luttinger per sistemi fermionici unidimensionali, e particolare attenzione è stata data al fenomeno della separazione spin-carica, che prevede velocità di propagazione diverse per le eccitazioni di carica e quelle di spin. Utilizzando i risultati quantitativi relativi a τ_{sd}^{-1} ottenuti al Capitolo 2, mostriamo come tenere conto dell'effetto dello spin drag nella dinamica di pacchetti di carica e di spin, e chiariamo la relazione tra spin drag e separazione spin-carica. Riportiamo prima un calcolo in approssimazione di risposta lineare, che riesce a descrivere caratteristiche importanti per quanto riguarda la propagazione smorzata nel canale di spin, ma che risulta poco adatto alla modellizzazione di un sistema sperimentale realistico. Proponiamo quindi l'utilizzo di una teoria più raffinata, la Teoria del Funzionale di Densità di Corrente Dipendente dal tempo, che permette di studiare la dinamica di pacchetti di spin anche in sistemi disomogenei (ad esempio sistemi confinati) e in presenza di potenziali dipendenti dal tempo. All'interno di tale schema teorico, il coefficiente di spin drag τ_{sd}^{-1} viene utilizzato in Approssimazione di Densità Locale. I risultati di tale calcolo contengono elementi di novità rispetto a quanto ottenuto con la teoria di risposta lineare; in particolare si osserva che anche nella propagazione di pacchetti di carica esiste uno smorzamento, non ascrivibile allo spin drag.

Un possibile sviluppo del nostro calcolo potrebbe dunque consistere nello studio di tale smorzamento, e nel corrispondente completamento del potenziale di scambio e correlazione $V_{xc}^{(\sigma)}$, con l'inclusione degli effetti visco-elastici discussi nella sezione 1.3.5. Un altro possibile miglioramento consiste nel tener conto degli effetti di temperatura finita: l'occupazione degli orbitali di Kohn-Sham non è data da una distribuzione a gradino, come è stato assunto nella (3.55), ma dalla funzione di distribuzione di Fermi-Dirac.

L'utilizzo di gas di atomi freddi per l'osservazione del fenomeno della separazione spin-carica è già stato proposto da Recati *et al.* [72], e sistemi sperimentali adatti che raggiungano geometrie quasi-unidimensionali sono già stati realizzati e studiati [66]. Questi stessi sistemi sono particolarmente adatti per una verifica sperimentale delle idee e dei risultati quantitativi relativi allo spin drag trovati in questo lavoro di tesi: pacchetti di spin possono essere preparati mediante l'utilizzo di impulsi laser adatti, e dallo studio della propagazione di tali pacchetti sarebbe possibile ottenere una misura del tempo di rilassamento di spin drag.

Appendice A

Interazione coulombiana in 1D

In questa appendice deriviamo la forma del potenziale di interazione di Coulomb in sistemi unidimensionali. Partiamo dall'interazione schermata di Yukawa

$$v_\kappa(r) = e^2 \frac{\exp(-\kappa r)}{r} \quad (\text{A.1})$$

in un filo cilindrico infinito di raggio a , che si assume essere così piccolo che tutti gli elettroni occupano la sottobanda di moto trasverso ϕ_0 ad energia minore, e le altre sottobande sono ad energie talmente elevate da essere ignorabili. Dunque l'unica funzione d'onda di singola particella rilevante ha la dipendenza spaziale

$$\phi_{k_z}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik_z z) \phi_0(\mathbf{r}_\perp), \quad (\text{A.2})$$

dove z e \mathbf{r}_\perp sono le componenti di \mathbf{r} , rispettivamente parallela e perpendicolare all'asse del filo, e similmente k_z è la componente di \mathbf{k} parallela all'asse del filo. Indicheremo questi stati semplicemente come $|k_z\rangle$.

Per costruire l'interazione efficace elettrone-elettrone in 1D, consideriamo l'elemento di matrice dell'interazione tra due stati a due elettroni formati dal prodotto di funzioni d'onda nella sottobanda più bassa:

$$v_{a,\kappa}(q_z) \equiv e^2 \langle i, k_z + q_z | \langle j, k'_z - q_z | \frac{\exp(-\kappa r_{ij})}{r_{ij}} | j, k'_z \rangle | i, k_z \rangle, \quad (\text{A.3})$$

dove abbiamo posto $r_{ij} \equiv |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Usando la trasformata di Fourier tridimensionale di $v_\kappa(r)$,

$$e^2 \frac{\exp(-\kappa r)}{r} = \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2 + \kappa^2} \exp[i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)], \quad (\text{A.4})$$

possiamo riscrivere $v_{a,\kappa}(q_z)$ in maniera più compatta come

$$v_{a,\kappa}(q_z) = 4\pi e^2 \int \frac{d^2 \mathbf{q}_\perp}{(2\pi)^2} \frac{|F(\mathbf{q}_\perp)|^2}{(\mathbf{q}_\perp^2 + q_z^2 + \kappa^2)}, \quad (\text{A.5})$$

nella quale \mathbf{q}_\perp è la componente perpendicolare di \mathbf{q} e

$$F(\mathbf{q}_\perp) = \int d^2 \mathbf{r}_\perp |\phi_0(\mathbf{r}_\perp)|^2 \exp(-i\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp) \quad (\text{A.6})$$

è il fattore di forma associato alla distribuzione di densità trasversa $|\phi_0(\mathbf{r}_\perp)|^2$.

Per essere più espliciti, dobbiamo specificare la forma della funzione d'onda radiale, che dipende dal tipo di confinamento trasverso. Per un confinamento armonico $V_\perp(\mathbf{r}_\perp) = m\omega_\perp^2 \mathbf{r}_\perp^2/2$ con $\omega_\perp = \hbar/(2ma^2)$, ϕ_0 ha la forma gaussiana

$$\phi_0(\mathbf{r}_\perp) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp[-\mathbf{r}_\perp^2/(4a^2)], \quad (\text{A.7})$$

e il fattore di forma diventa

$$F(\mathbf{q}_\perp) = \exp(-\mathbf{q}_\perp^2 a^2/2). \quad (\text{A.8})$$

Sostituendo l'Eq. (A.8) nell'espressione (A.5) otteniamo

$$\begin{aligned} v_{a,\kappa}(q_z) &= 4\pi e^2 \int \frac{d^2 \mathbf{q}_\perp}{(2\pi)^2} \frac{\exp(-\mathbf{q}_\perp^2 a^2)}{\mathbf{q}_\perp^2 + q_z^2 + \kappa^2} \\ &= e^2 \int_0^\infty dt \frac{\exp(-t)}{t + (q_z^2 + \kappa^2)a^2} \\ &= e^2 \exp[(q_z^2 + \kappa^2)a^2] \text{Ei}[(q_z^2 + \kappa^2)a^2]. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Prendendo ora il limite $\kappa \rightarrow 0$ (che riporta l'interazione di Yukawa alla forma coulombiana nuda) arriviamo a

$$v_a(q_z) = e^2 \exp(q_z^2 a^2) \text{Ei}(-q_z^2 a^2). \quad (\text{A.10})$$

Qui $\text{Ei}(x)$ è la funzione esponenziale-integrale:

$$\text{Ei}(x) = \int_{-\infty}^x dt \frac{e^{-t}}{t}. \quad (\text{A.11})$$

A questo punto, la trasformata di Fourier unidimensionale di $v_a(q_z)$ fornisce l'interazione efficace nello spazio reale

$$v_a(z) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{e^2}{a} \exp[z^2/(4a^2)] \text{erfc}[z/(2a)], \quad (\text{A.12})$$

dove $\text{erfc}(x)$ è la funzione complementary error, $\text{erfc}(x) = (2/\sqrt{\pi}) \int_0^x e^{-t^2} dt$. Sottolineiamo che il limite per $a \rightarrow 0$ dell'espressione (A.12) non esiste, dal momento che $\text{Ei}(x)$ diverge logicamente per $x \rightarrow 0$. Quindi, l'utilizzo di un raggio finito a in fili unidimensionali non è solo una caratteristica fisicamente realistica, ma anche una necessità matematica. Da un punto di vista fisico, il bisogno di un raggio finito a nasce dal fatto ovvio che in uno spazio letteralmente unidimensionale gli elettroni non possono evitarsi e subiscono quindi massimamente l'effetto della loro interazione coulombiana, divergente per $r \rightarrow 0$.

Diamo qui infine le forma asintotiche per $v_a(z)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} v_a(z \rightarrow 0) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{e^2}{a} \left(1 - \frac{z}{\sqrt{\pi}a}\right) + \dots \\ v_a(z \rightarrow +\infty) = \frac{e^2}{z} + \dots \end{array} \right. \quad (\text{A.13})$$

Appendice B

Calcolo di $\tau_{\text{sd}}^{-1}(T \rightarrow 0)$ per sistemi polarizzati nello spin

Mostriamo qui in dettaglio come si arriva all'espressione (2.26). Riscriviamo la (2.14):

$$\frac{1}{\tau_{\text{sd}}(T)} = \frac{mn}{8\pi^2 \hbar^2 n_{\uparrow} n_{\downarrow}} \frac{1}{k_{\text{B}}T} \int_0^{\infty} dq v_q^2 \int_0^{\infty} d\omega \frac{I(q, \omega)}{\sinh^2(\hbar\omega/2k_{\text{B}}T)}, \quad (\text{B.1})$$

dove $I(q, \omega)$ è dato da

$$I(q, \omega) = \left\{ \frac{1}{e^{[\nu_{+,1}^2 e_{\text{F}\uparrow} - \mu_{\uparrow}(T)]/k_{\text{B}}T} + 1} - \frac{1}{e^{[\nu_{+,1}^2 e_{\text{F}\uparrow} - \mu_{\uparrow}(T)]/k_{\text{B}}T} + 1} \right\} \times \left\{ \frac{1}{e^{[\nu_{-,1}^2 e_{\text{F}\downarrow} - \mu_{\downarrow}(T)]/k_{\text{B}}T} + 1} - \frac{1}{e^{[\nu_{-,1}^2 e_{\text{F}\downarrow} - \mu_{\downarrow}(T)]/k_{\text{B}}T} + 1} \right\}. \quad (\text{B.2})$$

Introducendo le notazioni

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha(\omega) = \frac{1}{k_{\text{B}}T} \left(\frac{m\omega^2}{2q^2} + \frac{\hbar^2 q^2}{8m} - \frac{\hbar^2 k_{\text{F}}^2}{2m} (1 + \zeta^2) \right); \\ \beta &= \beta(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2k_{\text{B}}T}; \\ \gamma &= \frac{\zeta \hbar^2 k_{\text{F}}^2}{mk_{\text{B}}T}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

e utilizzando le formule di prostaferesi per sinh e cosh, si arriva alla riscrittura

$$\begin{aligned} I(q, \omega) &= \left\{ \frac{1}{e^{\alpha-\beta+\gamma} + 1} - \frac{1}{e^{\alpha+\beta+\gamma} + 1} \right\} \left\{ \frac{1}{e^{\alpha-\beta-\gamma} + 1} - \frac{1}{e^{\alpha+\beta-\gamma} + 1} \right\} \\ &= \left\{ \frac{\sinh \beta}{\cosh(\alpha + \gamma) + \cosh \beta} \right\} \left\{ \frac{\sinh \beta}{\cosh(\alpha - \gamma) + \cosh \beta} \right\} \\ &= \frac{\sinh^2 \beta}{\{1/2(\cosh 2\alpha + \cosh 2\gamma) + \cosh^2 \beta + 2 \cosh \alpha \cosh \beta \cosh \gamma\}}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Il fattore $\sinh^2 \beta$ si semplifica con $\frac{1}{\sinh^2(\hbar\omega/2k_{\text{B}}T)}$ che compare nell'integrale (B.1). Per cui rimane

$$I'(q, \omega) \equiv \frac{I(q, \omega)}{\sinh^2(\hbar\omega/2k_{\text{B}}T)} = \frac{1}{[\cosh(\alpha + \gamma) + \cosh \beta][\cosh(\alpha - \gamma) + \cosh \beta]} \quad (\text{B.5})$$

$$= \frac{1}{\{1/2(\cosh 2\alpha + \cosh 2\gamma) + \cosh^2 \beta + 2 \cosh \alpha \cosh \beta \cosh \gamma\}} \quad (\text{B.6})$$

La forma più utile è la (B.6), il cui denominatore è costituito da 4 addendi; nel limite di $T \rightarrow 0$ uno di tali addendi domina e gli altri sono trascurabili. Essendo γ fissato, le “zone di minimo” del denominatore, corrispondenti alle “zone di massimo” di $I'(q, \omega)$, sono quelle regioni del dominio (q, ω) dove tutti gli addendi sono trascurabili rispetto a $\frac{1}{2} \cosh 2\gamma \approx \frac{1}{4} e^{2\gamma}$ (ammettendo che tali regioni esistano). Dato che tutti gli argomenti dei coseni iperbolici hanno T a denominatore, è facile stabilire quando un addendo A è trascurabile o meno: se non lo fosse, allora avrei $A \geq \frac{1}{4} e^{2\gamma} \gg 1$, e saprei quindi a posteriori che tale addendo lo posso scrivere come esponenziale anzichè come coseno iperbolico, e basterebbe dunque confrontare i numeratori degli esponenti.

Si trova che tali regioni di minimo esistono, e sono comprese tra $q = 0$ e $q = 2(1 + \zeta)k_F$. Oltre, a qualsiasi valore di ω si ha che uno degli addendi nel denominatore di $I'(q, \omega)$ domina rispetto a $\frac{1}{4} e^{2\gamma}$, e quindi $I'(q, \omega)$ assume valori esponenzialmente piccoli rispetto alle regioni di massimo.

Per $T \rightarrow 0$ la regione di massimo è costituita da due sottoregioni non connesse, una compresa tra $q = 0$ e $q = 2\zeta k_F$ e detta “Olive-leaf” a causa della sua forma, l'altra compresa tra $2(1 - \zeta)k_F$ e $2(1 + \zeta)k_F$ e detta invece “Shark fin”. La differenza tra le due sottoregioni è il fatto che i punti $(q, \omega = 0)$ appartengano o meno alla regione di massimo. Calcoliamo ora in dettaglio le condizioni che individuano tali suddivisioni.

Dopo aver posto $y \equiv \hbar\omega/e_F$, $x \equiv q/k_F$, $T \equiv k_B T/e_F$, abbiamo che

$$I(x, y)^{-1} = \frac{e^{4\zeta/T}}{4} + \frac{1}{2} \cosh \left(\frac{2}{T} \left(\frac{y^2}{4x^2} + \frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 \right) \right) + \cosh^2(y/2T) \\ + e^{2\zeta/T} \cosh \left(\frac{1}{T} \left(\frac{y^2}{4x^2} + \frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 \right) \right) \cosh(y/2T) \quad (\text{B.7})$$

Osserviamo che il termine $\cosh^2(y/2T)$ non è mai l'addendo che per primo e da solo diventa dominante all'aumentare di y : quando $\cosh^2(y/2T) \approx (1/4)\exp(4\zeta/T)$ si ha anche che $\cosh^2(y/2T) \approx (1/4)\exp(y/T)$ e allora l'ultimo addendo vale $(1/2)\exp(4\zeta/T) \cosh(\alpha(y))$, che è più piccolo al più di un fattore $1/2$. Discorso analogo vale per il termine $\frac{1}{2} \cosh(2\alpha(y))$, che diventa importante solo quando lo è pure l'ultimo termine.

Richiediamo ora che per la regione Shark fin si abbia $I(x, 0) \approx 4\exp(-4\zeta/T)$, e ciò equivale a richiedere che tutti gli addendi del denominatore siano trascurabili rispetto a quel termine, come detto sopra:

$$I(x, 0)^{-1} = \frac{e^{4\zeta/T}}{4} + \frac{1}{2} \cosh \left(2 \left(\frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 \right) / T \right) + 1 + e^{2\zeta/T} \cosh \left(\left(\frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 \right) / T \right), \quad (\text{B.8})$$

$$\left| \frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 \right| < 2\zeta \quad \Leftrightarrow \quad 2(1 - \zeta) < x < 2(1 + \zeta) \quad (\text{B.9})$$

Calcoliamo ora a che valore di y l'integrando $I'(x, y)$ inizia ad assumere valori trascurabilmente piccoli rispetto alla regione di massimo. È sufficiente lavorare con gli esponenti, come spiegato prima, facendo però attenzione a quale segno dell'argomento scegliere quando si passa dal coseno

iperbolico all'esponenziale:

$$\begin{cases} \text{Per } \frac{y^2}{4x^2} + \frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 < 0 & \text{impongo } \frac{y}{2} - \frac{y^2}{4x^2} - \frac{x^2}{4} + 1 + \zeta^2 = 2\zeta \\ \text{Per } \frac{y^2}{4x^2} + \frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 > 0 & \text{impongo } \frac{y}{2} + \frac{y^2}{4x^2} + \frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 = 2\zeta \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \text{Per } y < y_0(x) \equiv x\sqrt{4(1+\zeta^2)-x^2} & \text{impongo } y = y_3(x) \equiv x^2 - 2x(1-\zeta) \quad (*) \\ \text{Per } y > y_0(x) & \text{impongo } y = y_2(x) \equiv -x^2 + 2x(1+\zeta) \end{cases}$$

Imponiamo infine le condizioni di compatibilità:

$$\begin{cases} y_3(x) < y_0(x) & \Rightarrow x < 2 \\ y_2(x) > y_0(x) & \Rightarrow x > 2 \quad (*) \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

(*) Le soluzioni ignorate delle equazioni di secondo grado in questione sono già considerate nel contributo della regione Olive-leaf.

Dunque il contributo della regione Shark fin è facilmente calcolabile: l'area della zona di massimo è data da

$$A_{\text{Sh}} = \int_{2(1-\zeta)}^2 z_1(x) dx + \int_2^{2(1+\zeta)} z_2(x) dx = 8\zeta^2 \quad (\text{B.12})$$

Passiamo ora al contributo Olive-leaf. Analogamente a prima arriviamo a:

$$\begin{cases} \text{Per } \frac{y^2}{4x^2} + \frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 < 0 & \text{impongo } \frac{y}{2} - \frac{y^2}{4x^2} - \frac{x^2}{4} + 1 + \zeta^2 = 2\zeta \\ \text{Per } \frac{y^2}{4x^2} + \frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 > 0 & \text{impongo } \frac{y}{2} + \frac{y^2}{4x^2} + \frac{x^2}{4} - 1 - \zeta^2 = 2\zeta \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \text{Per } y < y_0(x) \equiv x\sqrt{4(1+\zeta^2)-x^2} & \text{impongo } y = y_1(x) \equiv x^2 + 2x(1-\zeta) \\ \text{Per } y > y_0(x) & \text{impongo } y = y_2(x) \equiv -x^2 + 2x(1+\zeta) \end{cases}$$

Imponiamo nuovamente le condizioni di compatibilità:

$$\begin{cases} y_1(x) < y_0(x) & \Rightarrow x < 2\zeta \\ y_2(x) > y_0(x) & \Rightarrow x < 2\zeta \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

L'area della regione Olive-leaf è quindi

$$A_{\text{OI}} = \int_0^{2\zeta} [y_2(x) - y_1(x)] dx = \frac{8}{3}\zeta^3 \quad (\text{B.15})$$

Raccogliendo i due contributi e ricordando che nelle due regioni $I'(x, y)$ vale $4e^{-4\zeta/T}$, otteniamo:

$$\int_0^\infty dx \int_0^\infty dy I'(x, y) \stackrel{T \rightarrow 0}{\approx} \frac{32}{3}(3\zeta^2 + \zeta^3)e^{-4\zeta/T} \quad (\text{B.16})$$

Riscritto in unità fisiche, ciò equivale a

$$\int_0^\infty dq \int_0^\infty d\omega I'(q, \omega) \stackrel{T \rightarrow 0}{\approx} \frac{32}{3}(3\zeta^2 + \zeta^3) \frac{\hbar k_F^3}{2m} e^{-\frac{2\hbar^2 k_F^2}{mk_B T} \zeta} \quad (\text{B.17})$$

E dunque per lo spin drag, per $v(q) = v = \text{costante}$, si ottiene la (2.26):

$$\frac{1}{\tau_{\text{sd}}} = \frac{4k_F^2 v^2}{3\pi\hbar} \frac{(3\zeta^2 + \zeta^3)}{(1 - \zeta^2)} \frac{1}{k_B T} e^{-\frac{2\hbar^2 k_F^2}{m k_B T} \zeta} = \left[\frac{32}{3\pi^3} \frac{(3\zeta^2 + \zeta^3)}{(1 - \zeta^2)} \Gamma^2 \left(\frac{2e_F}{k_B T} \right) e^{-4e_F \zeta / (k_B T)} \right] \frac{e_F}{\hbar}. \quad (\text{B.18})$$

Bibliografia

- [1] G.F. Giuliani e G. Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
- [2] D. Pines e P. Nozières, *The Theory of Quantum Liquids* (W.A. Benjamin, Inc., New York, 1966).
- [3] M. Polini e M. Tosi, *Many-body physics in condensed matter systems* (Edizioni della Normale, Pisa, 2006).
- [4] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Clarendon Press, Oxford, 2004).
- [5] F.D.M. Haldane, *J. Phys. C* **14**, 2585 (1981).
- [6] K. Flensberg, T.S. Jensen, e N.A. Mortensen, *Phys. Rev. B* **64**, 245308 (2001).
- [7] C.P. Weber, N. Gedik, J.E. Moore, J. Orenstein, J. Stephens e D.D. Awschalom, *Nature* **437**, 1330 (2005).
- [8] M. Gell-Mann e K.A. Bruckner, *Phys. Rev.* **106**, 364 (1957).
- [9] A.K. Rajagopal e J.C. Kimball, *Phys. Rev. B* **15**, 2819 (1977).
- [10] E.P. Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934) e *Trans. Faraday Soc.* **34**, 678 (1938).
- [11] D.M. Ceperley e B.J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [12] S.H. Vosko, L. Wilk, e M. Nusair, *Can. J. Phys.* **58**, 1200 (1980).
- [13] B. Tanatar e D.M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **39**, 5005 (1989).
- [14] D.M. Ceperley, in *The Electron Liquid Paradigm in Condensed Matter Physics*, edito da G.F. Giuliani e G. Vignale (IOS Press, Amsterdam 2004).
- [15] B. Bernu, L. Candido, e D.M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 870 (2001).
- [16] C.C. Grimes e G. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 795 (1979).
- [17] J. Yoon, C.C. Li, D. Shahar, D.C. Tsui, e M. Shayegan, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1744 (1999).
- [18] S.V. Kravchenko, G.V. Kravchenko, J.E. Furneaux, V.M. Pudalov, e M. D'Iorio, *Phys. Rev. B* **50**, 8039 (1994); D. Popovic, A.B. Fowler, e S. Washburn, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1543 (1997).
- [19] A.L. Fetter e J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).

- [20] D.C. Marinescu e J.J. Quinn, Phys. Rev. B **56**, 1114 (1997);
M. Polini e M.P. Tosi, Phys. Rev. B **63**, 045118 (2001).
- [21] R. Kubo, Rep. Progr. Phys. **29**, 255 (1966).
- [22] D. Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions* (Benjamin, Reading, 1975).
- [23] J. Friedel, N. Cimento Suppl. **7**, 287 (1958);
J. Langer e S.H. Vosko, J. Phys. Chem. Solids **12**, 196 (1960).
- [24] R.E. Peierls, *Quantum Theory of Solids* (Clarendon Press, Oxford, 1955).
- [25] K.S. Singwi, M.P. Tosi, R.H. Land e A. Sjölander, Phys. Rev. **176**, 589 (1968). Si veda anche
K.S. Singwi e M.P. Tosi, Solid State Phys. **36**, 177 (1981); S. Ichimaru, Rev. Mod. Phys. **54**,
1017 (1982).
- [26] A. vom Felde, J. Sprösser-Prou, e J. Fink, Phys. Rev. B **40**, 10181 (1989).
- [27] D. Neilson, L. Swierkowski, A. Sjölander, e J. Szymanski, Phys. Rev. B **44**, 6291 (1991).
- [28] G. Niklasson, Phys. Rev. B **10**, 3052 (1974).
- [29] C.A. Kukkonen e A.W. Overhauser, Phys. Rev. B **20**, 550 (1979).
- [30] B. Davoudi, R. Asgari, M. Polini, e M.P. Tosi, Phys. Rev. B **68**, 155112 (2003).
- [31] P. Hohenberg e W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [32] W. Kohn e L.J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [33] For a recent review see W. Kohn, Rev. Mod. Phys **71**, 1253 (1999).
- [34] Molte delle applicazioni della DFT sono presentate in *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*, edito da S. Lundqvist e N.H. March (Plenum, New York, 1983). Un'esposizione con approfondimento particolare della DFT dipendente dal tempo è stata scritta da E.K.U. Gross e W. Kohn, Adv. quant. Chem. **21**, 255 (1990). Per una presentazione generale della teoria si veda R.M. Dreizler e E.K.U. Gross, *Density Functional Theory, an Approach to the Quantum Many-Body Problem* (Springer, Berlin, 1990). Un'eccellente introduzione alla DFT è presente anche nel libro di G.F. Giuliani e G. Vignale.
- [35] K. Capelle e G. Vignale, Phys. Rev. Lett. **86**, 5546 (2001).
- [36] Per una trattazione della TDDFT si veda E.K.U. Gross, J.F. Dobson, e M. Petersilka, in *Topics in Current Chemistry*, edito da R.F. Nalewajski (Springer, Berlin, 1996); G. Vignale e W. Kohn, in *Electronic Density Functional Theory*, edito da J.F. Dobson, G. Vignale, e M.P. Das (Plenum, New York, 1997).
- [37] J.A. Glick e W.F. Long, Phys. Rev. B **4**, 3455 (1971); M.E. Bachlechner, A. Holas, H.M. Böhm, e A. Schinner, Phys. Rev. B **54**, 2360 (1996).
- [38] E.K.U. Gross e W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **55**, 2850 (1985);
A. Holas e K.S. Singwi, Phys. Rev. B **40**, 158 (1989).

- [39] S. Conti, R. Nifosì, e M.P. Tosi, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, L475 (1997).
- [40] R. Nifosì, S. Conti, e M.P. Tosi, *Phys. Rev. B* **58**, 12758 (1998).
- [41] S. Conti e G. Vignale, *Phys. Rev. B* **60**, 7966 (1999).
- [42] G. Vignale, M. Rasolt, e D.J.W. Geldart, *Phys. Rev. B* **37**, 2502 (1988).
- [43] Z. Qian e G. Vignale, *Phys. Rev. B* **65**, 235121 (2002).
- [44] E. Runge e E.K.U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 997 (1984).
- [45] Si veda ad esempio M. Petersilka, U.J. Gossmann e E.K.U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1212 (1996); C.A. Ullrich e G. Vignale, *Phys. Rev. B* **65**, 245102 (2002).
- [46] G. Vignale e W. Kohn, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2037 (1996).
- [47] G. Vignale, C.A. Ullrich, e S. Conti, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4878 (1997).
- [48] J.F. Dobson, M.J. Büchner, e E.K.U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1905 (1997).
- [49] I.V. Tokatly, *Phys. Rev. B* **71**, 165104 e 165105 (2005);
C.A. Ullrich e I.V. Tokatly, *Phys. Rev. B* **73**, 235102 (2006).
- [50] I. D'Amico e G. Vignale, *Phys. Rev. B* **62**, 4853 (2000).
- [51] C. Caccamo, G. Pizzimenti, e M.P. Tosi, *Il Nuovo Cimento* **31 B**, 53 (1976).
- [52] R. Nifosì, S. Conti e M.P. Tosi, *Phys. Rev. B* **58**, 12758 (1998).
- [53] C.N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1312 (1967);
M. Gaudin, *Phys. Lett. A* **24A**, 55 (1967).
- [54] I. D'Amico e G. Vignale, *Phys. Rev. B* **65**, 085109 (2002).
- [55] I. D'Amico e G. Vignale, *Phys. Rev. B* **68**, 045307 (2003).
- [56] M. Polini e G. Vignale, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 266403 (2007).
- [57] M. Pustilnik, E.G. Mishchenko, L.I. Glazman e A.V. Andreev, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 126805 (2003).
- [58] Lian Zheng e A.H. MacDonald, *Phys. Rev. B* **48**, 8203 (1993).
Y.V. Nazarov e D.V. Averin, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 653 (1998).
R. Klesse e A. Stern, *Phys. Rev. B* **62**, 16912 (2000).
- [59] K. Huang, *Meccanica Statistica* (Zanichelli, Bologna, 1997).
- [60] S. Tomonaga, *Progr. Theor. Phys.* **5**, 544 (1950); J.M. Luttinger, *J. Math. Phys.* **4**, 1154 (1963); D.C. Mattis e E.H. Lieb, *ibid.* **6**, 304 (1965); A. Luther e I. Peschel, *Phys. Rev. B* **9**, 2911 (1974); F.D.M. Haldane, *J. Phys. C* **14**, 2585 (1981).

- [61] Per una trattazione a riguardo si veda J. Voit, Rep. Progr. Phys. **58**, 977 (1995); H.J. Schulz, G. Cuniberti e P. Pieri, in *Field Theories for Low-Dimensional Condensed Matter systems*, edito da G. Morandi, P. Sodano, A. Tagliacozzo, e V. Tognetti (Springer, Berlin, 2000); G.F. Giuliani e G. Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005). Si veda anche T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Clarendon Press, Oxford, 2004).
- [62] Q. Si, Phys. Rev. Lett. **78**, 1767 (1997);
L. Balents e R. Egger, Phys. Rev. B **64**, 035310 (2001).
- [63] O.M. Auslaender, H. Steinberg, A. Yacoby, Y. Tserkovnyak, B.I. Halperin, R. de Picciotto, K.W. Baldwin, L.N. Pfeiffer e K.W. West, Solid State Comm. **131**, 657 (2004).
- [64] H. Moritz *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 210401 (2005); si veda anche F. Schreck *et al.*, *ibid.* **87**, 080403 (2001); A. Görlitz *et al.*, *ibid.* **87**, 130402 (2001); M. Greiner *et al.*, *ibid.* **87**, 160405 (2001); H. Moritz *et al.*, *ibid.* **91**, 250402 (2003); T. Stöferle *et al.*, *ibid.* **92**, 130403 (2004); B. Laburthe Tolra *et al.*, *ibid.* **92**, 190401 (2004); B. Paredes *et al.*, Nature **429**, 277 (2004); T. Kinoshita, T. Wenger, e D.S. Weiss, Science **305**, 1125 (2004).
- [65] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl e T. Esslinger, Phys. Rev. Lett. **91**, 250402 (2003).
- [66] H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter, M. Köhl e T. Esslinger, Phys. Rev. Lett. **94**, 210401 (2005).
- [67] O.M. Auslaender, H. Steinberg, A. Yacoby, Y. Tserkovnyak, B.I. Halperin, K.W. Baldwin, L.N. Pfeiffer e K.W. West, Science **308**, 88 (2005).
- [68] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).
- [69] Gao Xianlong, M. Polini, R. Asgari, e M.P. Tosi, Phys. Rev. A **73**, 033609 (2006); Gao Xianlong, M. Polini, M.P. Tosi, V.L. Campo Jr., K. Capelle, and M. Rigol, Phys. Rev. B **73**, 161520 (2006).
- [70] Z. Qian, A. Costantinescu, e G. Vignale, Phys. Rev. Lett. **90**, 066402 (2003).
- [71] Z. Qian, G. Vignale, e D.C. Marinescu, Phys. Rev. Lett. **93**, 106601 (2004).
- [72] A. Recati, P.O. Fedichev, W. Zwerger, e P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **90**, 020401 (2003)
e J. Opt. B **5**, S55 (2003).
- [73] M. Pustilnik, M. Khodas, A. Kamenev, e L.I. Glazman, Phys. Rev. Lett. **96**, 196405 (2006).
- [74] C. Kollath, U. Schollwöck, e W. Zwerger, Phys. Rev. Lett. **95**, 176401 (2005);
C. Kollath, J. Phys. B **39**, S65 (2006).