

Prosjekt 2, FYS-KJM4480, Høst 2009

Prosjekt 2, frist kl 12 (formiddag) fredag 30 oktober

Oppgave 1, homogene system av fermioner

Vi skal i denne oppgava holde oss til et system av fermioner med spinn 1/2. Her kan det være nyttig å se over for eksempel kapittel 3.4-3.6 i Raimes eller Gross, Runge og Heinonen kapittel 9 og 10.

Vi skal avgrense oss til det som kalles uendelig materie, et homogent system hvor en-partikkel tilstandene er gitt ved plan bølge funksjoner normert til et volum Ω for en boks med lengde L (grensa $L \rightarrow \infty$ skal tas ved slutten av rekninga av ulike integral)

$$\psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})\xi_{\sigma}$$

hvor \mathbf{k} er bølgetallet og ξ_{σ} er standard spinnfunksjoner for spinn opp eller ned

$$\xi_{\sigma=+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \xi_{\sigma=-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Periodiske randbetingelser avgrenser de tillatte bølgetalla til

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L} \quad i = x, y, z \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Vi antar først at partiklene vekselvirker via ei sentral-symmetrisk og translasjons invariant vekselvirkning $V(r_{12})$ med $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Vekselvirkninga er spinn uavhengig.

Den totale Hamilton operatoren består av kinetisk og potensiell energi

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}.$$

1a) Vis at operatoren for kinetisk energi kan skrives som

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma}.$$

Finn antallsoperatoren \hat{N} også og sett deretter opp det tilsvarende uttrykket for vekselvirkninga \hat{V} uttrykt ved kreasjons og annihilasjons operatører. Du skal også sette opp uttrykket for vekselvirkninga i k -rommet sjøl om V ikke er spesifisert, det vil si sett opp uttrykket for den Fourier transformerte vekselvirkninga $\langle \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j | V | \mathbf{k}_m \mathbf{k}_n \rangle$.

1b) Vi antar nå at $V(r_{12}) < 0$ og at integralet $\int |V(x)| d^3x < \infty$.

Bruk operatorforma til \hat{H} fra forrige oppgave og rekn ut $E_0 = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle$ for dette systemet til første orden i perturbasjonsteori som funksjon av tettheten $\rho = N/\Omega$. Tilstanden $|\Phi_0\rangle$ er Slater determinanten gitt ved å fylle opp alle tilstander til og med Fermi nivået. Vis at systemet vil kollapse. Kommenter resultatet.

1c) Vi skal nå studere den degenererte elektrongassen. Hamilton operatoren er nå gitt ved

$$\hat{H} = \hat{H}_{el} + \hat{H}_b + \hat{H}_{el-b},$$

med den elektroniske delen gitt ved

$$\hat{H}_{el} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^{-\mu|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|},$$

hvor vi har innført en eksplisitt konvergensfaktor (grensa $\mu \rightarrow 0$ tas etter utrekning av ulike integral), tilsvarende er

$$\hat{H}_b = \frac{e^2}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')e^{-\mu|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

energien til den positive bakgrunnsladninga med tetthet $n(\mathbf{r}) = N/\Omega$, og

$$\hat{H}_{el-b} = -\frac{e^2}{2} \sum_{i=1}^N \int d\mathbf{r} \frac{n(\mathbf{r})e^{-\mu|\mathbf{r}-\mathbf{x}_i|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}_i|},$$

er vekselvirkninga mellom elektrona og den positive bakgrunnen.

Vis at

$$\hat{H}_b = \frac{e^2}{2} \frac{N^2}{\Omega} \frac{4\pi}{\mu^2},$$

og

$$\hat{H}_{el-b} = -e^2 \frac{N^2}{\Omega} \frac{4\pi}{\mu^2}.$$

Vis deretter at den endelige Hamilton operatoren kan skrives som

$$H = H_0 + H_I,$$

med

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma},$$

og

$$H_I = \frac{e^2}{2\Omega} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \mathbf{k}, \mathbf{p}} \frac{4\pi}{q^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\sigma_2} a_{\mathbf{k}\sigma_1}.$$

1d) Rekn deretter ut $E_0/N = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle / N$ for dette systemet til første orden i perturbasjonsteori. Vis at, ved å bruke

$$\rho = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{3}{4\pi r_0^3},$$

med $\rho = N/\Omega$ og r_0 som er radien til ei kule som representerer volumet et ledningselektron opptar og Bohr radien $a_0 = \hbar^2/e^2 m$, så kan energien per elektron skrives som

$$E_0/N = \frac{e^2}{2a_0} \left[\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right].$$

Her har vi definert $r_s = r_0/a_0$ som er en dimensjonsløs størrelse. Plott resultatet og tolk det, spesielt i sammenheng med det du fant i oppgave 1b). Hva er det som gjør at dette systemet ikke kolliderer?

Rekn også ut termodynamiske størrelser som trykket, gitt ved

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial \Omega} \right)_N,$$

og bulk modulusen

$$B = -\Omega \left(\frac{\partial P}{\partial \Omega} \right)_N,$$

og kommenter resultatene.

1e) En-partikkel Hartree-Fock energien er gitt ved

$$\epsilon_k^{HF} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{2\pi} \left[2 + \frac{k_F^2 - k^2}{kk_F} \ln \left| \frac{k + k_F}{k - k_F} \right| \right].$$

(Du skal ikke utlede dette uttrykket). Hvordan kan du bruke Hartree-Fock energien til å finne grunntilstands energien? Er det forskjeller mellom resultatene fra ei slik rekning og det du fant i forrige punkt? Kommenter.

Oppgave 2, perturbasjonsteori

La $H = H_0 + V$ og $|\phi_n\rangle$ er egentilstandene til H_0 og at $|\psi_n\rangle$ er de tilsvarende for H . Anta at grunntilstandene $|\phi_0\rangle$ og $|\psi_0\rangle$ ikke er degenererte.

2a) Vis at

$$E_0 - \varepsilon_0 = \frac{\langle \phi_0 | V | \psi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | \psi_0 \rangle},$$

med $H |\psi_0\rangle = E_0 |\psi_0\rangle$ og $H_0 |\phi_0\rangle = \varepsilon_0 |\phi_0\rangle$. Definer operatorene $P = |\phi_0\rangle \langle \phi_0|$ og $Q = 1 - P$. Vis at disse operatorene er idempotente. Vis også at for enhver z så gjelder

$$|\psi_0\rangle = \langle \phi_0 | \psi_0 \rangle \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{Q}{z - H_0} (z - E_0 + V) \right)^n |\phi_0\rangle,$$

og

$$E_0 = \varepsilon_0 + \sum_{n=0}^{\infty} \langle \phi_0 | V \left(\frac{Q}{z - H_0} (z - E_0 + V) \right)^n |\phi_0\rangle.$$

Diskuter disse resultatene for $z = E_0$ (Brillouin-Wigner pert. teori) og $z = \varepsilon_0$ (Rayleigh-Schrödinger pert. teori). Sammenhold de første ledd i utviklinga (til tredje orden i vekselvirkninga).

2b) Betrakt deretter et system av to fermioner i parorbitalene $|m_0\rangle$ og $|-m_0\rangle$ i et enkelt skall j med $2j + 1 > 2$. Projeksjonen av j tar verdiene $m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$. Anta at matriseelementa for vekselvirkninga mellom partiklene er av forma

$$\langle m, -m | v | m', -m' \rangle = -G.$$

Dette er et enkelt eksempel på ei såkalla parkraft, som dukker opp i for eksempel kjernefysikk og teorier om superledning.

Hvordan vil du definere en-partikkel delen av Hamilton operatoren?

Vis at Brillouin-Wigner utviklinga fra 2a) kan summeres til å gi

$$E_0 = -(j + 1/2)G.$$

Vis ved ei direkte diagonalisering av Hamilton funksjonen at dette er den eksakte energien og finn den eksakte ikke-degenererte grunntilstanden.

2c) Bruk deretter Rayleigh-Schrödinger perturbasjonsteori og diskuter forskjellene.