Oppgave 14, 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 $L \to \infty$ skal tas ved slutten av rekninga av ulike integral)

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

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

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

Periodiske randbetingelser avgrenser de tillatte bølgetalla til

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

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

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

Finn antallsoperatoren $\hat{N}$ også og sett deretter opp det tilsvarende uttrykket for vekselvirkninga $\hat{V}$ uttrykt ved kreasjons og annihilasjons operatorer. 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 $\mu \to 0$ 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

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

og

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

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 dimensjonløs 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 kollapser?
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

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

(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.