Exercises week 43 and week 44 , October 23-November 3, 2023

November 10, 2023

In second quantization we can write the kinetic energy operator T using creation and annihilation operators as

$$\hat{T} = \sum_{pq} \langle p|\hat{t}|q\rangle \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q, \qquad \hat{t} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}.$$

Breaking this down into wave numbers og spin quantum numbers we obtain

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k}\sigma}\sum_{\vec{k}'\sigma'} \frac{1}{2m}\langle \vec{k}\sigma|\hat{\vec{p}}^2|\vec{k}'\sigma'\rangle \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}'\sigma'}. \tag{1}$$

We can simplify this expression by inserting the plane wave representations of the single-particle states and the pertinent spin spinors

$$\langle \vec{r}m_z|\vec{k}\sigma\rangle = \psi_{\vec{k}\sigma}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\xi_\sigma. \tag{2}$$

This results in

$$\begin{aligned}
\langle \vec{k}\sigma|\hat{\vec{p}}^2|\vec{k}'\sigma'\rangle &= \frac{\hbar^2}{\Omega}\xi_\sigma^\dagger\xi_{\sigma'}\int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\left[-\nabla^2\left(e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\right)\right] \\
&= \frac{\hbar^2}{\Omega}\vec{k}^2\delta_{\sigma\sigma'}\int e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}} \\
&= \hbar^2\vec{k}^2\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'},
\end{aligned}$$

where we have use the orthogonality of the spin states and the properties of the discrete δ-function. We simplify our notation using $\vec{k}^2 = k^2$, with $k = |\vec{k}|$. This leads to the following expression for the kinetic energy

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\sigma}. \tag{3}$$

The number operator is given by the following expression (note that we have broken down the generic labeling $pqrs$ etc into the explicit quantum numbers for the wave number and spin)

$$\hat{N} = \sum_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}\sigma}. \tag{4}$$

The sum runs only over one set of quantum numbers (wave number and spin) due to the orthonormality of the single-particle basis.

The operator for the two-body interaction is given by (note that we do not employ anti-symmetrized matrix elements)

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{pqrs}\langle pq|\hat{v}|rs\rangle \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_s \hat{a}_r,$$

where $\hat{v}$ ($\hat{v} = \hat{v}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{v}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \hat{v}(r)$, der $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$) is the two-body interaction, resulting in

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\sigma_1\sigma_2\\ \sigma_3\sigma_4}}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\\ \vec{k}_3\vec{k}_4}}\langle \vec{k}_1\sigma_1, \vec{k}_2\sigma_2|\hat{v}|\vec{k}_3\sigma_3, \vec{k}_4\sigma_4\rangle \hat{a}^\dagger_{\vec{k}_1\sigma_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_2\sigma_2}\hat{a}_{\vec{k}_4\sigma_4}\hat{a}_{\vec{k}_3\sigma_3}. \qquad (5)$$

Inserting the single-particle wave functions from (2) we obtain

$$\langle \vec{k}_1\sigma_1, \vec{k}_2\sigma_2|\hat{v}|\vec{k}_3\sigma_3, \vec{k}_4\sigma_4\rangle = \frac{1}{\Omega^2}\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}\iint e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}_1}e^{-i\vec{k}_2\cdot\vec{r}_2}v(r)e^{i\vec{k}_3\cdot\vec{r}_1}e_1^{i\vec{k}_4\cdot\vec{r}_2}{}_2,$$

where we used the orthogonality of the single-particle wave functions. Using $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, which gives $\vec{r}_1 = \vec{r} + \vec{r}_2$ and ${}^3\vec{r} ={}^3 \vec{r}_1$ and the limits $-\infty$ til ∞ (these are unchanged) we obtain

$$\begin{aligned}\langle \vec{k}_1\sigma_1, \vec{k}_2\sigma_2|\hat{v}|\vec{k}_3\sigma_3, \vec{k}_4\sigma_4\rangle &= \frac{1}{\Omega^2}\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}\int e^{i(\vec{k}_4-\vec{k}_2)\cdot\vec{r}_2}\int v(r)e_2^{i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot(\vec{r}+\vec{r}_2)}\\ &= \frac{1}{\Omega^2}\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}\int v(r)e^{i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{r}}\int e_2^{i(\vec{k}_4-\vec{k}_2+\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{r}_2}.\end{aligned}$$

We recognize the integral over $\vec{r}_2$ as a δ-function. Using this we obtain

$$\langle \vec{k}_1\sigma_1, \vec{k}_2\sigma_2|\hat{v}|\vec{k}_3\sigma_3, \vec{k}_4\sigma_4\rangle = \frac{1}{\Omega}\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}\delta_{(\vec{k}_1+\vec{k}_2),(\vec{k}_3+\vec{k}_4)}\int v(r)e^{i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{r}}.$$

The latter is non-zero only if we conserve the exchanged momentum. This leads to the requirements $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4$. With these contraints we can remove one of the summations, the sum over $\vec{k}$ in (5). We obtain then

$$\hat{V} = \frac{1}{2\Omega}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3}\left[\int v(r)e^{i(\vec{k}_3-\vec{k}_1)\cdot\vec{r}}\right]\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_1\sigma}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_2\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3,\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}_3\sigma},$$

which we can rewrite as

$$\hat{V} = \frac{1}{2\Omega}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}\left[\int v(r)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\right]\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\sigma'}\hat{a}_{\vec{p}\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}, \qquad (6)$$

where we have introduced the quantities $\vec{p} = \vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3$, $\vec{k} = \vec{k}_3$ and $\vec{q} = \vec{k}_1-\vec{k}_3$.

0.1 (b)

Jeg skal nnne $\langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|\hat{T}|\Phi_0\rangle + \langle\Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle$, der $|\Phi_0\rangle$ er Slaterdeterminanten gitt ved lle opp alle tilstander til og med ferminiv. Jeg regner frst ut forventningsverdien til den kinetiske energien:

$$\langle\Phi_0|\hat{T}|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|\left(\sum_{\vec{k}\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}\right)|\Phi_0\rangle = \sum_{\vec{k}\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\langle\Phi_0|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}|\Phi_0\rangle.$$

Hva skjer sd $\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}|\Phi_0\rangle$? Summen over $\vec{k}$ gver alle $\vec{k}$, ogser Ferminiv. $|\Phi_0\rangle$ inneholder derimot bare tilstander med $\vec{k}$ under Ferminiv, sddet over vil bli 0 for alle $|\vec{k}| = k > |\vec{k}_F| = k_F$. For alle $k \leq k_F$, vil resultatet bli $|\Phi_0\rangle$ da den bare annihilerer og seerer den samme tilstanden. Altsl jeg ha

$$\langle\Phi_0|\hat{T}|\Phi_0\rangle = \sum_{\vec{k}, k\leq k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{m} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\frac{\hbar^2}{m}\int_0^{k_F} k^2,$$

hvor jeg har summert bort spinnet siden dette vil kun vil bidra med en faktor p$ogitilleggskrevetomsummentiletintegral.Jegskifterslsfskekoordinater, ogsidendetikkeernoenvink$
Jeg sitter dermed igjen med

$$\langle\Phi_0|\hat{T}|\Phi_0\rangle = \frac{\Omega}{(2\pi)^3}\left(4\pi\int_0^{k_F} k^4\right) = \frac{4\pi\Omega}{(2\pi)^3}\frac{1}{5}k_F^5 = \frac{4\pi\Omega}{5(2\pi)^3}k_F^5 = \frac{\hbar^2\Omega}{10\pi^2 m}k_F^5.$$

Tetthet av tilstander i k-rommet er gitt ved $2\Omega/(2\pi)^3$ (med spinndegenerasjon) og volumet fermisfn dekker er $4\pi k_F^3/3$, slik at antall partikler er gitt ved

$$N = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3}\frac{4}{3}\pi k_F^3 = \frac{\Omega}{3\pi^2}k_F^3 \quad \Rightarrow \quad k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{\Omega}\right)^{1/3}.$$

Dette gir meg

$$\langle\Phi_0|\hat{T}|\Phi_0\rangle = \frac{\hbar^2\Omega}{10\pi^2 m}\left(\frac{3\pi^2 N}{\Omega}\right)^{5/3} = \frac{\hbar^2(3\pi^2)^{5/3}N}{10\pi^2 m}\rho^{2/3}, \tag{7}$$

Jeg ser s forventningsverdien til den potensielle energien ved nytte ligning (6):

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle &= \langle\Phi_0|\left(\frac{1}{2\Omega}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}\left[\int v(r)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\right]\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\sigma'}\hat{a}_{\vec{p}\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}\right)|\Phi_0\rangle \\ &= \frac{1}{2\Omega}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}\left[\int v(r)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\right]\langle\Phi_0|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\sigma'}\hat{a}_{\vec{p}\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}|\Phi_0\rangle.\end{aligned}$$

M finne matriseelementet. Innser at fordi $|\Phi_0\rangle$ bare inneholder tilstander under Ferminiv, kreasjons- og annihilasjonsoperatorene gi 0 dersom de har en blgevektor over Ferminiv. Altsk $\leq k_F$, $p \leq k_F$, $|\vec{p}-\vec{q}| < \vec{k}_F$ og $|\vec{k}+\vec{q}| \leq k_F$. Samtidig mg enten ha $\vec{k}+\vec{q} = \vec{p}$, $\vec{p}-\vec{q} = \vec{k}$ og $\sigma = \sigma'$, eller $\vec{k}+\vec{q} = \vec{k}$ og $\vec{p}-\vec{q} = \vec{p}$. Jeg har dermed:

$$\vec{k}+\vec{q} = \vec{p} \quad \text{og} \quad \sigma = \sigma', \qquad \text{eller} \qquad \vec{q} = \vec{0}.$$

Hva blir striseelementet ved hver av disse betingelsene? Den frste betingelsen gir -1 fordi $|\Phi_0\rangle$ er normert, og det gjres et odde antall permutasjoner for kse rekkeflgen til kreasjons- og annihilasjonsoperatorene. Den andre betingelsen gir $+1$, fordi det nres et like antall permutasjoner, og jeg har dermed:

$$\langle\Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle = \frac{1}{2\Omega}\left(\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\substack{\vec{k}\vec{p} \\ kq\leq k_F}}\left[\int v(r)\right] - \sum_{\sigma}\sum_{\substack{\vec{p}\vec{q} \\ pq\leq k_F}}\left[\int v(r)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\right]\right),$$

som gir

$$\langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle = \frac{1}{2\Omega} \left(N^2 \left[\int v(r) \right] - N \sum_{\substack{\vec{q} \\ q \leq k_F}} \left[\int v(r) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \right] \right). \tag{8}$$

Ser s det siste integralet. $v(r)$ avtar forholdsvis fort siden $\int |v(r)| r < \infty$ og $v(r) < 0$. q er alltid veldig liten da Fermisfn er er liten. Det betyr at eksponentialfunksjonen alltid vil v n1$fordeverdierforrsomgir$v(r)$betydeligulik0.Dermedkanjegsetteeksponent$ $\frac{E_0}{N} = \frac{\langle \Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle}{N} = \frac{\langle \Phi_0|\hat{T}|\Phi_0\rangle + \langle \Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle}{N} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2)^{5/3}}{10\pi^2 m}\rho^{2/3} - \pi\rho \int_0^\infty |v(r)|\, r.(9)$ Et plott av denne funksjonen kan sees i figur 1. Ser fra figuren at funksjonen ikke har noe minimumspunkt sett bort fra $\rho = 0$. Det betyr at systemet enten vil v "spredt for alle vinder", som tilsvarer $\rho = 0$ eller det vil kollapse helt fordi energien vil stadig minke n$\rho \to \infty$. Potensialet virker tiltrekkende siden $v(r) < 0$. Av resultatet over kommer det derfor frem at potensialet er for kraftig til at systemet er stabilt ved en ikke-null tetthet.

0.2 (c)

Jeg skal ngne ut flgende del av Hamiltonoperatoren:

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

hvor $n(\vec{r}) = N/\Omega$, det vil si tettheten til den positive bagkrunnsladningen. I tillegg til tte inn dette i integralet over, skifter jeg variabel. Jeg setter $\vec{r}_{12} = \vec{r} - \vec{r}'$, noe som gir meg ${}^3\vec{r}_{12} ={}^3 r$, og jeg fermed

$$\hat{H}_b = \frac{e^2 N^2}{2\Omega^2} \iint \frac{e^{-\mu|\vec{r}_{12}|}{}'}{|\vec{r}_{12}|}{}_{12} = \frac{e^2 N^2}{2\Omega} \int \frac{e^{-\mu|\vec{r}_{12}|}}{|\vec{r}_{12}|}{}_{12}.$$

Her har jeg brukt at $\int = \Omega$. Jeg skifter sl sfske koordinater. Ingen vinkelavhengighet gir at vinkelintegralene bidrar med en faktor pπ, og jeg sitter dermed igjen med

$$\hat{H}_b = \frac{4\pi e^2 N^2}{2\Omega} \int_0^\infty r e^{-\mu r}\, r.$$

Integralet lser jeg ved hjelp av delvis integrasjon:

$$\int_0^\infty r e^{-\mu r}\, r = \left[-\frac{r}{\mu} e^{-\mu r} \right]_0^\infty + \frac{1}{\mu} \int_0^\infty e^{-\mu r}\, r = \frac{1}{\mu} \left[-\frac{1}{\mu} e^{-\mu r} \right]_0^\infty = \frac{1}{\mu^2},$$

som gir

$$\hat{H}_b = \frac{e^2}{2} \frac{N^2}{\Omega} \frac{4\pi}{\mu^2}. \tag{10}$$

Figure 1: Her vises et plott av energi per partikkel E_0/N som funksjon av tettheten ρ gitt ved ligning (9).

Sal jeg regne ut en ny del av Hamiltonoperatoren:

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

Jeg setter inn for $n(\vec{r})$ og skifter variabel pmme m som isted med $\vec{y} = \vec{r} - \vec{x}_i$, som gir ${}^3\vec{y} ={}^3 \vec{r}$. Dermed har jeg

$$\hat{H}_{el-b} = -\frac{e^2 N}{\Omega} \sum_{i=1^N} \int \frac{e^{-\mu|\vec{y}|}}{|\vec{y}|} {}^3\vec{y} = -\frac{4\pi e^2 N}{\Omega} \sum_{i=1}^{N} \int_0^{\infty} y e^{-\mu y} y,$$

hvor jeg i den siste overgangen har byttet til sfske koordinater pmme m som tidligere. Dette integralet har jeg nettopp regnet ut, og ved uke det tidligere resultatet feg

$$\hat{H}_{el-b} = -\frac{4\pi e^2 N}{\Omega} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\mu^2},$$

som gir

$$\hat{H}_{el-b} = -e^2 \frac{N^2}{\Omega} \frac{4\pi}{\mu^2}. \tag{11}$$

M til slutt finne leddet $\hat{H}_{el}$. Det er gitt ved

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

Det frste leddet her er $\hat{T}$ som jeg regnet ut i oppgave 1a gitt ved ligning (3). Det siste leddet er potensialet, og det er b sentral-symmetrisk og translasjonsinvariant slik at jeg kan bruke uttrykket for $\hat{V}$ ogsnt i oppgave 1a gitt ved ligning (6). Siden $v(r)$ n oppgitt,

$$v(|\vec{r}|) = e^2 \frac{e^{\mu|\vec{r}|}}{|\vec{r}|},$$

kan jeg se nere ptegralet i denne ligningen. Det viser seg at jeg har regnet ut dette integralet p regnevelse, st gjr jeg ikke her ogsesultatet blir:

$$\int v(|\vec{r}|)e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = e^2 \int \frac{e^{\mu|\vec{r}|}}{|\vec{r}|} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} = e^2 \frac{4\pi}{\mu^2 + q^2},$$

som gir

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{el} &= \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} + \frac{e^2}{2\Omega} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \frac{4\pi}{\mu^2 + q^2} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{p}-\vec{q},\sigma'} \hat{a}_{\vec{p}\sigma'} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} \\
&= \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} + \frac{e^2}{2\Omega} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\substack{\vec{k}\vec{p}\vec{q} \\ q \neq 0}} \frac{4\pi}{q^2} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{p}-\vec{q},\sigma'} \hat{a}_{\vec{p}\sigma'} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} + \\
&\quad \frac{e^2}{2\Omega} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\vec{k}\vec{p}} \frac{4\pi}{\mu^2} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{p},\sigma'} \hat{a}_{\vec{p}\sigma'} \hat{a}_{\vec{k}\sigma},
\end{aligned}$$

hvor jeg i den siste overgangen har delt opp summen over $\vec{q}$ og benyttet at $\mu \to 0$. Finner sa sekvensen av kreasjons- og annihilasjonsoperatorer er for den siste summen:

$$\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{p},\sigma'} \hat{a}_{\vec{p}\sigma'} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} = -\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{p},\sigma'} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma'} = -\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma'} \delta_{\vec{p}\vec{k}} \delta_{\sigma\sigma'} + \hat{a}^{\dagger}_{\vec{k},\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\vec{p},\sigma'} \hat{a}_{\vec{p}\sigma'},$$

som gir

$$\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\vec{k}\vec{p}} \hat{a}^\dagger_{\vec{k},\sigma}\hat{a}^\dagger_{\vec{p},\sigma'}\hat{a}_{\vec{p}\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}\sigma} = \hat{N}^2 - \hat{N},$$

hvor jeg har kjent igjen antallsoperatoren fra ligning (4). Leddet med $\hat{N}$ i frste potens vil gt 0 i den termodynamiske grensen. Dette fordi vi ser pergien per partikkelen, E_0/N, som gjr at dette leddet gir opphav til et ledd som er proposjonalt med $1/(\Omega\mu^2)$. I den termodynamiske grensen gΩ mot uendelig, og dermed vil dette leddet kunne settes lik 0. Jeg har dermed

$$\hat{H}_{el} = \sum_{\vec{k}\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma} + \frac{e^2}{2\Omega}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\substack{\vec{k}\vec{p}\vec{q}\\ q\neq 0}}\frac{4\pi}{q^2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\sigma'}\hat{a}_{\vec{p}\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}\sigma} + \frac{e^2}{2}\frac{N^2}{\Omega}\frac{4\pi}{\mu^2}.$$

Det totale uttrykket for Hamiltonoperatoren er $\hat{H} = \hat{H}_{el} + \hat{H}_b + \hat{H}_{el-b}$. Sammenligner stte med ligning (10) og (11) og ser at det siste leddet i ligningen over kanselleres. Dermed vil Hamiltonoperatoren vil kunne skrives som $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$, hvor

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\sigma}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}, \tag{12}$$

og

$$\hat{H}_I = \frac{e^2}{2\Omega}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\substack{\vec{k}\vec{p}\vec{q}\\ q\neq 0}}\frac{4\pi}{q^2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\sigma'}\hat{a}_{\vec{p}\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}, \tag{13}$$

0.3 (d)

Jeg skal nregne $E_0 = \langle\Phi_0|\hat{H}|\Phi_0\rangle$, hvor $\hat{H}$ er gitt ved ligning (12) og (13). Jeg ser at $\hat{H}_0$ er nyaktig den samme som $\hat{T}$ i oppgave 1b, og jeg kan dermed plukke resultatet fra denne oppgaven. Alts $\langle\Phi_0|\hat{H}_0|\Phi_0\rangle = \frac{\hbar^2\Omega}{10\pi^2m}k_F^5$. Forventningsverdien for $\hat{H}_I$ er gitt ved

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|\hat{H}_I|0\rangle &= \langle\Phi_0|\left(\frac{e^2}{2\Omega}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\substack{\vec{k}\vec{p}\vec{q}\\ q\neq 0}}\frac{4\pi}{q^2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\sigma'}\hat{a}_{\vec{p}\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}\right)|\Phi_0\rangle \\ &= \frac{e^2}{2\Omega}\sum_{\sigma\sigma'}\sum_{\substack{\vec{k}\vec{p}\vec{q}\\ q\neq 0}}\frac{4\pi}{q^2}\langle\Phi_0|\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\sigma'}\hat{a}_{\vec{p}\sigma'}\hat{a}_{\vec{k}\sigma}|\Phi_0\rangle,\end{aligned}$$

hvor jeg har satt inn for $\hat{H}_I$ ved hjelp av ligning (13). For at dette matriseelementet skal v ulik 0 mk $+ \ = og\sigma = \sigma'$ (fkke den andre muligheten som jeg fikk i oppgave 1b fordi $q \neq 0$). Samtidig m $\leq k_F$ og $k \leq k_F$. Da er matriseelementet -1, og jeg f $\langle\Phi_0|\hat{H}_I|0\rangle = -\frac{4\pi e^2}{2\Omega}\sum_\sigma\sum_{\substack{\vec{k},\vec{p}\neq\vec{k}\\ k,p\leq k_F}}\frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2} = -\frac{4\pi e^2}{\Omega}\sum_{\substack{\vec{k},\vec{p}\neq\vec{k}\\ k,p\leq k_F}}\frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2}$. Gjr stte om til integral, og f $\langle\Phi_0|\hat{H}_I|\Phi_0\rangle = -\frac{4\pi e^2}{\Omega}\left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\right)^2\int_0^{k_F}\int_0^{k_F}\frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2}\,{}^3\vec{k}\,{}^3\vec{p}$. Mtsnne dette integralet. Skriver om til polarkoordinater, og f $\int_0^{k_F}\int_0^{k_F}\frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2}\,{}^3\vec{k}\,{}^3\vec{p} = 2\pi\int_0^{k_F}\int_0^{\pi}\int_0^{k_F}\frac{k^2\sin\theta}{p^2+k^2-2kp\cos\theta}\,k\theta\,{}^3\vec{p}$, da p vil v en konstant i k-integralet. Frst tar jeg integralet over θ. Dette integralet har vi gjort tidligere pgnevelse, og gir

$$\begin{aligned}
\int_0^{k_F}\int_0^{k_F} \frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2}\, {}^3\vec{k}\, {}^3\vec{p} &= 2\pi \int_0^{k_F}\int_0^{k_F} \left[\frac{k^2 \ln\left(k^2+p^2-2kp\cos\theta\right)}{2kp}\right]_{\theta=0}^{\theta=\pi} k\, {}^3\vec{p} \\
&= \pi \int_0^{k_F}\int_0^{k_F} \frac{k}{p} \ln\left(\frac{(p+k)^2}{(p-k)^2}\right) k\, {}^3\vec{p} \\
&= 2\pi \int_0^{k_F}\int_0^{k_F} \frac{k}{p} \ln\left|\frac{p+k}{p-k}\right| k\, {}^3\vec{p} \\
&= 2\pi \int_0^{k_F}\int_0^{k_F} \frac{k}{p} \ln|p+k| - \frac{k}{p}\ln|k-p|\, k\, {}^3\vec{p}.
\end{aligned}$$

egne ut alle disse integralene blir det lite tid til. Jeg bruker derfor resultatet

$$\int k\ln|k+p| = \frac{1}{2}k^2\ln|k+p| - \frac{k^2}{4} - \frac{1}{2}p^2\ln|k+p| + \frac{kp}{2} + C,$$

som gir meg

$$\int_0^{k_F} k\ln|k+p| = \frac{1}{2}k_F^2\ln|k_F+p| - \frac{k_F^2}{4} - \frac{1}{2}p^2\ln|k_F+p| + \frac{k_F p}{2} + \frac{1}{2}p^2\ln p,$$

og

$$\int_0^{k_F} k\ln|k-p| = \frac{1}{2}k_F^2\ln|k_F-p| - \frac{k_F^2}{4} - \frac{1}{2}p^2\ln|k_F-p| - \frac{k_F p}{2} + \frac{1}{2}p^2\ln p.$$

Sleg dette sammen feg

$$\begin{aligned}
\int_0^{k_F}\int_0^{k_F} \frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2}\, {}^3\vec{k}\, {}^3\vec{p} &= 2\pi \int_0^{k_F} \frac{1}{p}\left(\frac{1}{2}k_F^2\ln\left|\frac{k_F+p}{k_F-p}\right| - \frac{1}{2}p^2\ln\left|\frac{k_F+p}{k_F-p}\right| + k_F p\right)\, {}^3\vec{p} \\
&= 2\pi k_F \frac{4}{3}\pi k_F^3 + \pi \int_0^{k_F} \left(\frac{k_F^2}{p} - p\right)\ln\left|\frac{k_F+p}{k_F-p}\right|\, {}^3\vec{p} \\
&= \frac{8\pi^2}{3}k_F^4 + 4\pi^2 \int_0^{k_F} \left(k_F^2 p - p^3\right)\ln\left|\frac{k_F+p}{k_F-p}\right|\, p.
\end{aligned}$$

Jeg bruker slfram Alpha, som gir meg

$$\int_0^{k_F} p\ln|p+k_F|\, p = \frac{1}{4}k_F^2\left(2\ln k_F + 1\right),$$

$$\int_0^{k_F} p^3\ln|p+k_F|\, p = \frac{1}{48}k_F^4\left(12\ln k_F + 7\right),$$

$$\int_0^{k_F} p\ln|p-k_F|\, p = \frac{1}{4}k_F^2\left(2\ln k_F - 3\right),$$

og

$$\int_0^{k_F} p^3\ln|p-k_F|\, p = \frac{1}{48}k_F^4\left(12\ln k_F - 25\right).$$

Dette gir meg

$$\begin{aligned}
&\int_0^{k_F}\int_0^{k_F} \frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2}\, {}^3\vec{k}\, {}^3\vec{p} = \\
&\quad \frac{8\pi^2}{3}\pi k_F^4 + 4\pi^2\left(k_F^2\frac{1}{4}k_F^2\left(2\ln k_F+1\right) - k_F^2\frac{1}{4}k_F^2\left(2\ln k_F-3\right) - \right. \\
&\qquad\qquad \left. \frac{1}{48}k_F^4\left(12\ln k_F+7\right) + \frac{1}{48}k_F^4\left(12\ln k_F-25\right)\right),
\end{aligned}$$

som jeg kan trekke sammen og $\text{f}_0^{k_F}\int_0^{k_F} \frac{1}{|\vec{p}-\vec{k}|^2} {}^3\vec{k}\,{}^3\vec{p} = \frac{8}{3}\pi^2 k_F^4 + 4\pi^2\left(k_F^4 - \frac{2}{3}k_F^4\right) = 4\pi^2 k_F^4$. Dette setter jeg sn i uttrykket for $\langle\Phi_0|\hat{H}_I|\Phi_0\rangle$, og da feg

$$\langle\Phi_0|\hat{H}_I|\Phi_0\rangle = -\frac{4\pi e^2}{\Omega}\left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\right)^2 4\pi^2 k_F^4.$$

Dermed feg

$$\frac{E_0}{N} = \frac{1}{N}\left(\frac{\hbar^2\Omega}{10\pi^2 m}k_F^5 - \frac{4\pi e^2}{\Omega}\left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\right)^2 4\pi^2 k_F^4\right).$$

Setter sn for k_F og regner ut:

$$\begin{aligned}
\frac{E_0}{N} &= \frac{\hbar^2\Omega}{10\pi^2 mN}k_F^5 - \frac{4\pi e^2}{\Omega N}\left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\right)^2 4\pi^2 k_F^4 \\
&= \frac{\hbar^2\Omega}{10\pi^2 mN}k_F^5 - \frac{e^2\Omega}{4\pi^3 N}k_F^4 \\
&= \frac{\hbar^2\Omega}{10\pi^2 mN}\left(\frac{3\pi^2 N}{\Omega}\right)^{5/3} - \frac{e^2\Omega}{4\pi^3 N}\left(\frac{3\pi^2 N}{\Omega}\right)^{4/3} \\
&= \frac{\hbar^2 N^{2/3}}{\Omega^{2/3}}\frac{(3\pi^2)^{5/3}}{10\pi^2 m} - \frac{e^2\Omega^{1/3}}{N^{1/3}}\frac{(3\pi^2)^{4/3}}{4\pi^3}.
\end{aligned}$$

Innfrer $\text{s}_0 = \left(\frac{3\Omega}{4\pi N}\right)^{1/3}$, og $a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m}$, som gir meg

$$\begin{aligned}
\frac{E_0}{N} &= \hbar^2\frac{(3\pi^2)^{5/3}}{10\pi^2 m}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3}\frac{1}{r_0^2} - e^2\frac{(3\pi^2)^{4/3}}{4\pi^3}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3}\frac{1}{r_0} \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2}{m}\frac{2.21}{r_0^2} - e^2\frac{0.916}{r_0}\right)
\end{aligned}$$

Til slutt definerer jeg $r_s = r_0/a_0$, og fequation $\text{E}_0 \overline{}_{N = \frac{e^2}{2a_0}\left(\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s}\right).}$ Et plott av dette uttrykket kan sees i figur 2. Fra figuren kommer det tydelig frem at funksjonen har et minimumspunkt, og det er dette som gjr at systemet ikke kollapser. Dette fordi det faktum at funksjonen har et globalt minimumspunkt gjr at systemet kan henfalle til et stabilt energiminimum. Den mer fysiske begrunnelsen for at dette systemet ikke vil kollapse som det i oppgave 1b er at de positive ladningene fra gitteret og de negative ladningene fra elektrongassen vil skjerme for hverandre. Jeg kan nkelt finne det globale minimumspunktet:

$$\frac{\partial}{\partial r_s}\left(\frac{E_0}{N}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{2\times 2.21}{r_s^3} - \frac{0.916}{r_s^2} = 0,$$

som gir

$$r_s = \frac{2\times 2.21}{0.916} \approx 4.83.$$

Figure 2: Her vises et plott av E_0/N gitt i ligning (0.3). Ser tydelig at funksjonen har et minimumspunkt.

For gne ut de termodynamiske strrelsene regner jeg frst ut flgende:

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial r_s}{\partial \Omega}\right)_N &= \left(\frac{\partial}{\partial \Omega}\left[\frac{1}{a_0}\left(\frac{3\Omega}{4\pi N}\right)^{1/3}\right]\right)_N = \frac{1}{3a_0}\left(\frac{3}{4\pi N}\right)^{1/3}\Omega^{-2/3} \\
&= \frac{1}{3a_0}\left(\frac{3}{4\pi N}\right)^{1/3}\frac{1}{a_0^2}\left(\frac{3}{4\pi N}\right)^{2/3}\frac{1}{r_s^2} = \frac{1}{4\pi N a_0^3}\frac{1}{r_s^2}.
\end{aligned}
$$

Regningene blir dermed litt enklere. Trykket blir dermed:

$$
\begin{aligned}
P &= -\left(\frac{\partial E_0}{\partial \Omega}\right)_N = -\frac{\partial E_0}{\partial r_s}\left(\frac{\partial r_s}{\partial \Omega}\right)_N \\
&= \frac{Ne^2}{2a_0}\left(\frac{2\times 2.21}{r_s^3} - \frac{0.916}{r_s^2}\right)\left(\frac{1}{4\pi N a_0^3}\frac{1}{r_s^2}\right) \\
&= \frac{e^2}{8\pi a_0^4}\frac{1}{r_s^4}\left(\frac{2\times 2.21}{r_s} - 0.916\right).
\end{aligned}
$$

Ved energiminimum feg derfor $P = 0$. Dette er fornuftig, siden et trykk ulik 0 ville medfrt enten ekspansjon eller kontraksjon av systemet, noe som ikke skal skje i et stabilt punkt.

Dersom r_s ker vil trykket bli negativt. Det kan fortsed at systemet gjerne vil v i den stabile tilstanden, og ved nke tettheten vil systemet motsette seg disse endringene ved ve ekke seg sammen - derav negativt trykk.

Dersom r_s minker, vil trykket bli positivt. Det kan forstlsvarende m ved at tettheten til systemet ner, og systemet motsetter seg denne endringen ved e trykket utover. Jeg regner ut bulk modulus pmme m:

$$
\begin{aligned}
B &= -\Omega\left(\frac{\partial P}{\partial \Omega}\right) = -\Omega\frac{\partial P}{\partial r_s}\left(\frac{\partial r_s}{\partial \Omega}\right)_N \\
&= \Omega\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{4\pi a_0^3}\left(\frac{5\times 2\times 2.21}{r_s^6} - \frac{4\times 0.916}{r_s^5}\right)\left(\frac{1}{4\pi N a_0^3}\frac{1}{r_s^2}\right) \\
&= \frac{\Omega e^2}{32\pi^2 N a_0^7}\frac{1}{r_s^7}\left(\frac{5\times 2\times 2.21}{r_s} - 4\times 0.916\right) \\
&= \frac{e^2}{32\pi^2 a_0^7}\frac{1}{r_s^7}\left(\frac{5\times 2\times 2.21}{r_s} - 4\times 0.916\right)\frac{4\pi a_0^3}{3}r_s^3 \\
&= \frac{e^2}{24\pi a_0^4}\frac{1}{r_s^4}\left(\frac{5\times 2\times 2.21}{r_s} - 4\times 0.916\right).
\end{aligned}
$$

Dette gir at bulk modulus got uendelig n$r_s \to 0$, men den synker asymptotisk mot 0 n$r_s \to \infty$. Det virker fornuftig, da systemet vil mer og mer motsette seg kompresjon nettheten til systemet minker som beskrevet tidligere.

0.4 (e)

Dersom enpartikkel Hatree-Fock-energiene er gitt, vil grunntilstandsenergien kunne finnes ved hjelp av formelen

$$
E = \sum_{\substack{\vec{k} \\ k\leq k_F}} \epsilon_k + \langle\vec{k}|\hat{f}|\vec{k}\rangle, \tag{14}
$$

hvor $\hat{f}$ gitt helt i begynnelsen av denne besvarelsen. Denne formelen har jeg hentet fra ligning (3.38) i Raimes, og modifisert med en faktor p$punnavspinndegenerasjon.Dettematriseel$
$\sum_{\substack{\vec{k} \\ k \leq k_F}} \epsilon_k + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. For aluere denne summen skrives den om til et integral, og det gir

$$E = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} \epsilon_k + \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

som ved omskriving til polarkoordinater og innsetting av enpartikkel Hatree-Fock-energiene gir

$$E = \frac{4\pi\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^4}{m} - \frac{e^2 k^2 k_F}{2\pi} \left[2 + \frac{k_F^2 - k^2}{k k_F} \ln \left| \frac{k + k_F}{k - k_F} \right| \right] k. \qquad (15)$$

Jeg har tidligere i denne oppgaven funnet forventningsverdien til Hamiltonoperatoren, gitt $|\Phi_0\rangle$, som er en Slater-determinant av tilstandene $|\psi_{\vec{k}\sigma}\rangle$ opp til Ferminiv. E_0 gitt ved ligning (9) er derfor grunntilstandsenergien gitt ved frste ordens perturbasjonsteori.

Energien E gitt ved ligning (14) er den estimerte grunntilstandsenergien som en Hatree-Fock-regning gir, og ved tilbake pgningene mine ser jeg at uttrykket i ligning (15) er nyaktig det samme som et uttrykk jeg har f i utregningen av E_0, som betyr at $E_0 = E$. Estimatet til grunntilstandsenergien fra en Hatree-Fock-regning er altsyaktig det samme som det man fed frste ordens perturbasjonsteori.

I Gross, Runge & Heinonen er det vist at forventningsverdien til den fulle Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ gitt Hatree-Fock-blgefunksjonene, det vil si frste ordens perturbasjonsteori med Hatree-Fock-blgefunksjonene som basis, alltid vil gi grunntilstandsenergien estimert ut fra en Hatree-Fock-regning. I v tilfelle er Hatree-Fock-blgefunksjonene nyaktig de samme som egentilstandene til den uperturberte Hamiltonoperatoren $\hat{H}_0$. Av den grunn vil frste ordens perturbasjonsteori med planblgene, slik jeg har gjort tidligere i denne oppgaven, gi samme estimat for grunntilstandsenergien som en Hatree-Fock-regning gir.