Лекция 3.

Оператор числа частиц. Невзаимодействующий электронный газ, его основные характеристики, уравнение состояния. Одночастичные возбуждения в электронном газе металла.

Итак,

$$E_e^{(0)} = \langle \{n\} | \sum_{\vec{k},\sigma} \hat{N}_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_k | \{n\} \rangle = 2 \cdot \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \cdot \frac{1}{5} \cdot \frac{\pi^2 k_F^5}{2m}$$

Введем теперь оператор числа электронов

$$\hat{N}_e = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) = \sum_{\substack{\vec{k}_1\sigma_1 \\ \vec{k}_2\sigma_2}} \left(\delta(\vec{r} - \vec{r}_1)\right)_{\substack{\vec{k}_1\sigma_1 \\ \vec{k}_2\sigma_2}} \hat{a}^+_{\vec{k}_1\sigma_1} \hat{a}_{\vec{k}_1\sigma_2} \quad ;$$

При этом мы опять воспользовались вторичным квантованием.

$N_e = ZN$ - оператор числа электронов.

$$\left(\delta\left(\vec{r}-\vec{r}_1\right)\right)_{\substack{\vec{k}_1\sigma_1\\ \vec{k}_2\sigma_2}} = \sum_{\xi}\int d\vec{r}_1 \frac{e^{-i\vec{k}_1\vec{r}_1}}{\sqrt{\Omega}}\chi_{\sigma_1}\left(\xi\right)\delta\left(\vec{r}-\vec{r}_1\right)\frac{e^{i\vec{k}_2\vec{r}_1}}{\sqrt{\Omega}}\chi_{\sigma_2}\left(\xi\right)=$$

$$=\left[\sum_{\xi}\chi^{+}_{\sigma_1}\left(\xi\right)\chi_{\sigma_2}\left(\xi\right)\right]\frac{1}{\Omega}\int d\vec{r}_1 e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{k}_2\right)\vec{r}_1}\delta\left(\vec{r}-\vec{r}_1\right)$$

$$\frac{e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{k}_2\right)\vec{r}}}{\Omega}$$

Теперь оператор числа электронов принимает вид

$$\hat{n}_e = \sum_{\substack{\vec{k}_1\sigma_1\\ \vec{k}_2\sigma_2}} \frac{e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{k}_2\right)\vec{r}}}{\Omega}\delta_{\sigma_1\sigma_2}\hat{a}^{+}_{\substack{\vec{k}_1\\ \sigma_1}}\hat{a}_{\substack{\vec{k}_2\\ \sigma_2}} = \sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\\ \sigma}} \frac{e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{k}_2\right)}}{\Omega}\hat{a}^{+}_{\substack{\vec{k}_1\\ \sigma}}\hat{a}_{\substack{\vec{k}_2\\ \sigma}};$$

$$n_e = \langle \{n\} | \hat{n}_e | \{n\} \rangle = \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma}} \frac{e^{i\left(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2\right)\vec{r}}}{\Omega} \left\langle \{n\} \middle| \hat{a}^{+}_{\vec{k}_1 \sigma} \hat{a}_{\vec{k}_2 \sigma} \middle| \{n\} \right\rangle (=)$$

Действуя оператором $\hat{a}_{k_2}$ на набор состояний, мы можем уменьшать n_{k_2} на 1 только внутри ферми-сферы; Затем с помощью оператора $\hat{a}^{+}_{k_1}$ можем увеличить n_{k_1} на 1 только если k_1 - снаружи сферы или единственное уменьшенное состояние внутри, то есть k_2 .
Если электрон « родится» вновь внутри сферы, получим исходное состояние.

Чтобы матричный элемент не равнялся нулю, $\hat{a}^{+}_{k_1}$ должен действовать на состояния k_2 , т.е. “исправлять” результат действия $\hat{a}_{k_2}$.

Таким образом,
$$\langle \{n\} | \hat{a}^{+}_{\vec{k}_1 \sigma} \hat{a}_{\vec{k}_2 \sigma} | \{n\} \rangle = \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \left\langle \{n\} \middle| \hat{a}^{+}_{\vec{k}_1 \sigma} \hat{a}_{\vec{k}_2 \sigma} \middle| \{n\} \right\rangle = \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \hat{N}_{\vec{k} \sigma}$$

продолжим вычисления,

$$(=) \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma}} \frac{e^{i\left(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2\right)\vec{r}}}{\Omega} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \langle \{n\} | \hat{N}_{\vec{k} \sigma} | \{n\} \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \left\langle \{n\} \middle| \hat{N}_{\vec{k} \sigma} \middle| \{n\} \right\rangle$$

$$E_i \approx -\frac{1{,}8}{r_s} Z^{5/3} NRy \;,\; r_s = \frac{r_e}{a_б}$$

$$\hat{T}_e = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \frac{p_\alpha^2}{2m} = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_k \hat{N}_{\vec{k}\sigma} \quad , \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad , \quad \hat{N}_{\vec{k}\sigma} = \hat{a}^+_{\vec{k}\sigma} \hat{a}_{\vec{k}\sigma}$$

$$n_k = \begin{cases} 1, & 0 \le k \le k_F \;\; внутри \leftarrow сферы \;\; Ферми \\ 0, & k > k_F \end{cases}$$

$$E_e^{(0)} = \left\langle \{n\} \middle| \hat{T}_e \middle| \{n\} \right\rangle = 2 \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{k_F^5}{5}$$ - это кинетическая энергия электронов.

$$\hat{n}_e = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \delta\left(\vec{r} - \vec{r}_\alpha\right) = \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \sigma} \frac{e^{i\left(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2\right)\vec{r}}}{\Omega} \hat{a}^+_{\vec{k}_1 \sigma} \hat{a}_{\vec{k}_2 \sigma} \;,$$

Заметим, что

$$n_e \cdot \Omega = N_e = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} k_F^3 \qquad (*)$$

Тогда

$$E_e^{(0)} = \left\langle \{n\} \middle| \hat{T}_e \middle| \{n\} \right\rangle 2 \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^5}{5} = \left[\frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \right] \cdot \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m},$$

или

$E_e^{(0)} = N_e \cdot \frac{3}{5} \varepsilon_F$, коэффициент $\frac{3}{5}$ показывает, что электроны ближе к поверхности Ферми дают вклад больше; (n_k - однородное распределение от 0 до 1).

Шаровой слой при большем радиусе (большей энергии) содержит в себе больше точек.

Получим теперь уравнение состояния электронного газа.

$T = 0, \quad S = 0 \quad \Rightarrow$ нет разницы между полной и свободной энергиями.

$$P_e^{(0)} = -\frac{\partial E_o^{(0)}}{\partial \Omega}\bigg|_{N_e} = N_e \cdot \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\partial}{\partial \Omega} K_F^2\right)$$

$$(*) \quad \rightarrow \quad K_F = \left(3\pi^2 \frac{N_e}{\Omega}\right)^{1/3}, \quad K_F^2 = \left(3\pi^2 N_e\right)^{2/3} \Omega^{-2/3}$$

$$P_e^{(0)} = N_e \cdot \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 N_e\right)^{2/3}\left(-\frac{\partial}{\partial \Omega}\Omega^{-2/3}\right) = \frac{2}{3}\left(N_e \cdot \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m} K_F^2\right)\frac{1}{\Omega} = \frac{2}{3} E_e^{(0)} \frac{1}{\Omega}$$

Получаем уравнение состояния $\Omega P_e^{(0)} = \frac{2}{3} E_e^{(0)}$ - в некотором смысле, это аналог уравнения Клайперона – Менделеева для идеального газа.

Система свободных электронов сопротивляется сжатию, то есть устойчива против коллапса. Существование K_F^2 следует из принципа запрета Паули.

$$\hat{T}_e = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \frac{p_\alpha^2}{2m} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{N}_{k\sigma}; \qquad N_e = Z \cdot N$$

Выразим электронную энергию в ридбергах

$$E_0^{(0)} = N_e \cdot \frac{3}{5}\varepsilon_F = N_e \cdot \frac{3}{5}\ \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 \frac{1}{\Omega / N_e}\right)^{2/3} = N_e \cdot \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 \frac{1}{\frac{4\pi}{3} r_e^3}\right)^{2/3} =$$

$$= N_e \cdot \frac{3}{5}\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{r_e^2} = N_e \cdot \frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \cdot \frac{1}{2}\left(\cancel{\frac{\hbar^2}{me^2}}\right) e^2 \frac{1}{r_б^2}\frac{1}{a^2} = N_e \cdot \frac{3}{5}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}_s \frac{1}{r^2} Ry$$

$$\frac{\Omega}{N_e} = \Omega_e = \frac{4\pi}{3} r_e^3$$ объем, приходящийся на одну частицу; $$r_s = \frac{r_e}{a_б}$$

Окончательно для кинетической энергии электронного газа имеем

$$\boxed{E_e^{(0)} \approx \frac{2{,}21}{r_s^2} ZN \cdot Ry}.$$

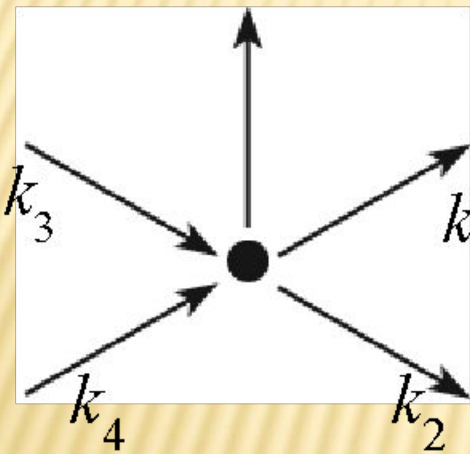
Теперь рассмотрим энергию взаимодействия электронов.

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta=1}^{N_e} e^2 \sum_{\vec{q}} \frac{4\pi}{\Omega q^2} e^{i\vec{q}\left(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta\right)}$$

- это уже двухчастичный оператор.

Перейдем к вторичному квантованию.

$$\hat{A} = \sum_{\alpha,\beta} \hat{A}\left(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta\right) = \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 \vec{k}_4} \left(A\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2\right)\right)_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 \vec{k}_4} \hat{a}^+_{k_1} \hat{a}^+_{k_2} \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4}$$



“четырехквостка”(диаграмма взаимодействия электронов)

$$\left(A\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2\right)\right)_{k_1 k_2 k_3 k_4} = \sum_{1\ldots}\sum_{2\ldots} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \Phi^+_{k_1}\left(1,\ldots,\vec{r}_1\right) \cdot \Phi^+_{k_2}\left(2,\ldots,\vec{r}_2\right) \hat{A}\left(r_1, r_2\right) \Phi_{k_3}\left(2,\ldots,\vec{r}_2\right) \times$$

$$\Phi_{k_4}\left(1,\ldots,\vec{r}_1\right)$$

$$\hat{V}_{ee}=\frac{1}{2}\sum_{\vec{q}\neq 0}\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4\\ \sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}}\left(e^{i\vec{q}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)}\right)_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4\\ \sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}}\hat{a}^+_{\vec{k}_1\sigma_1}\hat{a}^+_{\vec{k}_2\sigma_2}\hat{a}_{\vec{k}_3\sigma_3}\hat{a}_{\vec{k}_4\sigma_4}$$

Вычислим матричный элемент

$$\left(e^{i\vec{q}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)}\right)_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\vec{k}_3\vec{k}_4\\ \sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}}=$$

$$\sum_{\xi_1}\sum_{\xi_2}\int d\vec{r}_1\int d\vec{r}_2\frac{e^{-i\vec{k}_1\vec{r}_1}}{\sqrt{\Omega}}\hat{\chi}^+_{\sigma_1}\left(\xi_1\right)\frac{e^{-i\vec{k}_2\vec{r}_2}}{\sqrt{\Omega}}\hat{\chi}^+_{\sigma_2}\left(\xi_2\right)\cdot e^{i\vec{q}\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)}\times$$

$$\times\frac{e^{-i\vec{k}_3\vec{r}_2}}{\sqrt{\Omega}}\hat{\chi}^+_{\sigma_3}\left(\xi_2\right)\frac{e^{-i\vec{k}_4\vec{r}_1}}{\sqrt{\Omega}}\hat{\chi}^+_{\sigma_4}\left(\xi_1\right)=$$

$$=\left[\underbrace{\sum_{\xi_1}\chi^{+}_{\sigma_1}(\xi_1)\chi_{\sigma_4}(\xi_1)}_{\delta_{\sigma_1\sigma_4}}\right]\left[\underbrace{\sum_{\xi_2}\chi^{+}_{\sigma_2}(\xi_2)\chi_{\sigma_3}(\xi_2)}_{\delta_{\sigma_2\sigma_3}}\right]\times$$

$$\frac{1}{\Omega}\int d\vec{r}_1 e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{q}+\vec{k}_4\right)\vec{r}_1}\cdot\frac{1}{\Omega}\int d\vec{r}_2 e^{i\left(-\vec{k}_2-\vec{q}+\vec{k}_3\right)\vec{r}_2}=$$

$$=\delta_{\sigma_1\sigma_4}\delta_{\sigma_2\sigma_3}\delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_1-\vec{q}}\delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_2+\vec{q}}$$

При этом мы учли известные выражения для символа Кронекера

$$\frac{1}{\Omega}\int d\vec{r}_1 e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{q}+\vec{k}_4\right)\vec{r}_1}=\delta_{\vec{k}_4,\vec{k}_1-\vec{q}}$$

$$\frac{1}{\Omega}\int d\vec{r}_2 e^{i\left(-\vec{k}_2-\vec{q}+\vec{k}_3\right)\vec{r}_2}=\delta_{\vec{k}_3,\vec{k}_2+\vec{q}}.$$