Лекция 3.

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

Итак,

$$E_e^{(0)} = <\{n\}|\sum_{\vec{k},\sigma} \widehat{N_{\vec{k}\sigma}}\varepsilon_k|\{n\}> = 2\cdot\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\cdot 4\pi\cdot\frac{1}{5}\cdot\frac{\pi^2 k_F^5}{2m}$$

Введем теперь оператор числа электронов

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

При этом мы опять воспользовались вторичным квантованием.

$N_e = ZN$ - оператор числа электронов.

$$\left(\delta\left(\vec r-\vec r_1\right)\right)_{\substack{\vec k_1\sigma_1\\ \vec k_2\sigma_2}}=\sum_{\xi}\int d\vec r_1\frac{e^{-i\vec k_1\vec r_1}}{\sqrt{\Omega}}\hat\chi_{\sigma_1}\left(\xi\right)\delta\left(\vec r-\vec r_1\right)\frac{e^{i\vec k_2\vec r_1}}{\sqrt{\Omega}}\hat\chi_{\sigma_2}\left(\xi\right)=$$

$$=\left[\sum_{\xi}\hat\chi^{+}_{\sigma_1}\left(\xi\right)\hat\chi_{\sigma_2}\left(\xi\right)\right]\underbrace{\frac{1}{\Omega}\int dr_1 e^{i\left(-\vec k_1+\vec k_2\right)\vec r_1}\delta\left(\vec r-\vec r_1\right)}_{\frac{e^{i\left(-\vec k_1+\vec k_2\right)\vec r}}{\Omega}}$$

Теперь оператор числа электронов принимает вид

$$\hat n_e=\sum_{\substack{\vec k_1\sigma_1\\ \vec k_2\sigma_2}}\frac{e^{i\left(-\vec k_1+\vec k_2\right)\vec r}}{\Omega}\delta_{\sigma_1\sigma_2}\hat a^{+}_{\substack{\vec k_1\\ \sigma_1}}\hat a_{\substack{\vec k_2\\ \sigma_2}}=\sum_{\substack{\vec k_1\vec k_2\\ \sigma}}\frac{e^{i\left(-\vec k_1+\vec k_2\right)}}{\Omega}\hat a^{+}_{\substack{\vec k_1\\ \sigma}}\hat a_{\substack{\vec k_2\\ \sigma}};$$

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

Действуя оператором $\widehat{a_{k_2}}$ на набор состояний, мы можем уменьшать n_{k_2} на 1 только

внутри ферми-сферы; Затем с помощью оператора $\widehat{a^{+}_{k_1}}$ 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, $\widehat{a^{+}_{k_1}}$ должен действовать на состояния k_2 ,

т.е. “исправлять” результат действия $\widehat{a_{k_2}}$.

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

продолжим вычисления,

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

$$E_i \simeq -\frac{1{,}8}{r_s} Z^{5/3} N Ry \quad , \quad r_s = \frac{r_e}{a_б}$$

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

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

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

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

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.

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

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

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

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.

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

Выразим электронную энергию в ридбергах

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

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

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

Окончательно для кинетической энергии электронного газа имеем

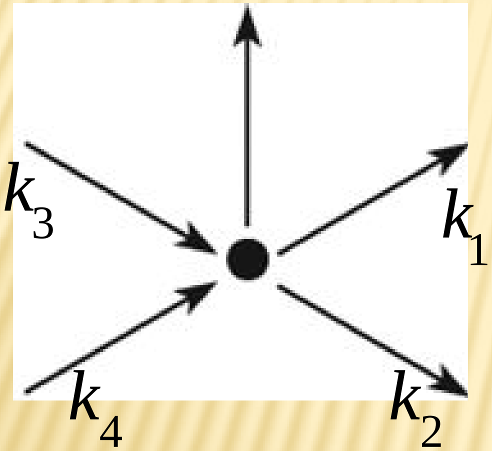
$$\boxed{E_e^{(0)} \simeq \frac{2,21}{r_s^2} ZN \cdot Ry}.$$

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.

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



"четырехвостка"(диаграмма взаимодействия электронов)

$$\left(A\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2\right)\right)_{k_1k_2k_3k_4}=\sum_{1...}\sum_{2...}\int d\vec{r}_1\int d\vec{r}_2\Phi^+_{k_1}\left(1,...,\vec{r}_1\right)\cdot\Phi^+_{k_2}\left(2,...,\vec{r}_2\right)\hat{A}\left(r_1,r_2\right)\Phi_{k_3}\left(2,...,\vec{r}_2\right)\times$$
$$\Phi_{k_4}\left(1,...,\vec{r}_1\right)$$

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

Вычислим матричный элемент

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

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

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

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

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

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

При этом мы учли известные выражения для символа Кронекера

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

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