

MECHANIKA KWANTOWA II B ĆN. #14 22.01.2019

1) Związek funkcji Greena z obserwablanmi
Dla gazu fermionów o spinie S i potencjale chemicznym μ opisywanego hamiltonianem

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma}$$

znaleźć związek między funkcją Greena

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\vec{k}} + i0^+ \text{sgn}(k - k_F)}$$

a gęstością cząstek $\langle \hat{\rho}(x) \rangle = \langle \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(x) \hat{\psi}_{\sigma}(x) \rangle$
oraz gęstością energii kinetycznej $\langle \hat{T} \rangle$.

Rozwiąż zadanie:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\rho}(x) \rangle &= \langle \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger} \hat{\psi}_{\sigma} \rangle = - \sum_{\sigma} \langle FS | \hat{J} \hat{\psi}_{\sigma}(x, 0^-) \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(x, 0) | FS \rangle \\ &= -i (2S+1) G(\vec{x}, 0^-) \Big|_{\vec{x}=0}, \quad \text{bo} \end{aligned}$$

$$G(\vec{x} - \vec{x}', t - t') = \int \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} G(\vec{k}, \omega) e^{i[\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') - \omega(t - t')]}$$

wiac

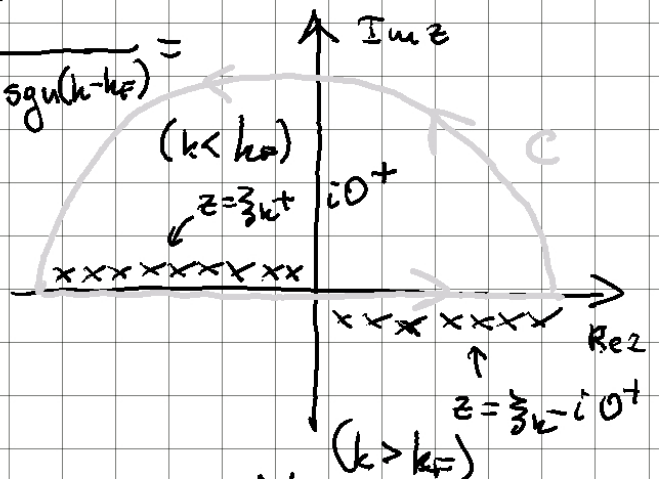
$$\langle \hat{T}(x) \rangle = i(2S+1) \frac{\hbar^2 \nabla_x^2}{2m} G(\vec{x}, 0^-) \Big|_{\vec{x}=0}$$

$$\langle \hat{f}(x) \rangle = -i(2s+1) G(\vec{0}, 0^-) =$$

$$= (2s+1) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\int \frac{d\omega}{2\pi i} e^{i\omega 0^+} \frac{1}{\omega - \xi_k + i0^+ \text{sgn}(k-k_F)} \right]$$

$$= (2s+1) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{dz}{2\pi i} \frac{e^{iz0^+}}{\omega - \xi_k + i0^+ \text{sgn}(k-k_F)} =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{Biegunki:} \\ z = \xi_k - i0^+, \quad k > k_F \\ z = \xi_k + i0^+, \quad k < k_F \end{array} \right\} =$$



$$= (2s+1) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \theta(k_F - k) = (2s+1) \frac{V_F}{(2\pi)^3} = n$$

↑
w
residuach

$$\langle \hat{T}(x) \rangle = (2s+1) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{2m} \left[\int \frac{d\omega}{2\pi i} e^{i\omega 0^+} G(\vec{k}, \omega) \right] =$$

$$\Theta(k_F - k)$$

$$= \frac{3}{5} \epsilon_F n$$

2* Diagramy Feynmana. Model jellium

Postępując się regułami Feynmana

odtworzyć wyniki dla modelu jellium

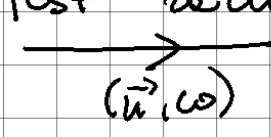
z pracy domowej (serie 4), Shomentowej

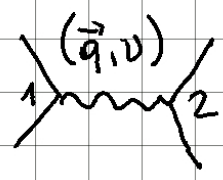
co dzieje się w drugim zakresie
 rachunku zaburzeń i w czym
 może tu pomóc technologia
 diagramów Feynmana.

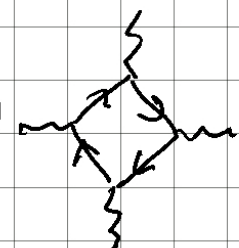
Rozwiązanie:

Reguły Feynmana:

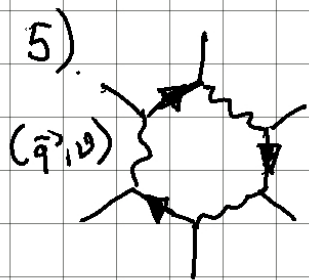
1) Narysuj wszystkie topologicznie różne
 diagramy danego typu z daną
 liczbą wierzchołków. Pełn i energia
 jest zachowane w wierzchołku.

2)  - oznacza swobodny propagator
 fermionowy (funkcja Greena)
 $G_0(\vec{k}, \omega)$

3)  - oznacza linię oddziaływania
 której przyporządkujemy $iV(q)$

4)  - petlom fermionowy w
 przyporządkujemy

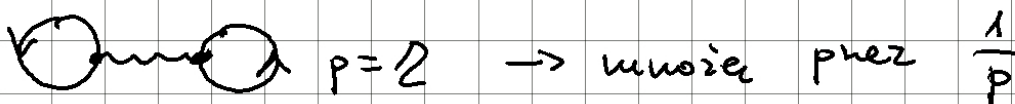
$$[-(2s+1)]^F, \quad F - \text{l. petli}$$



- całkujemy po wewnętrznych
pędach i częstościach

$$\int \frac{d^d q d\nu}{(2\pi)^{d+1}} e^{i\nu 0^+}$$

6) Dopisujemy odpowiednie czynniki
kombinatoryczne, np.



$p=2$
↑ rząd grupy symetrii

Twierdzenie Goldstone'a

Przesunięcie energii stanu podstawowego

E_0 ze względu na zaburzenie \hat{H}_1

możemy obliczyć wypisując wszystkie

związane diagramy Feynmana,

przy czym związane oznacza, że

wszystkie linie propagatorowe i obliczy-

wania muszą być ze sobą połączone.

$$E - E_0 = \langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle + \sum_{n \neq 0} \frac{\langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle}{E_0 - E_n} + \dots$$

↑ stan podstawowy

$$= \langle \Phi_0 | \hat{H}_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{E_0 - \hat{H}_0} \hat{H}_1 \right)^n | \Phi_0 \rangle = i\Omega \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots \right]$$

↓ objętość układowa

↑ związane

W przybliżeniu Hartree-Focka:

$$E_{HF} - E_0 = i\Omega \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} \right]$$

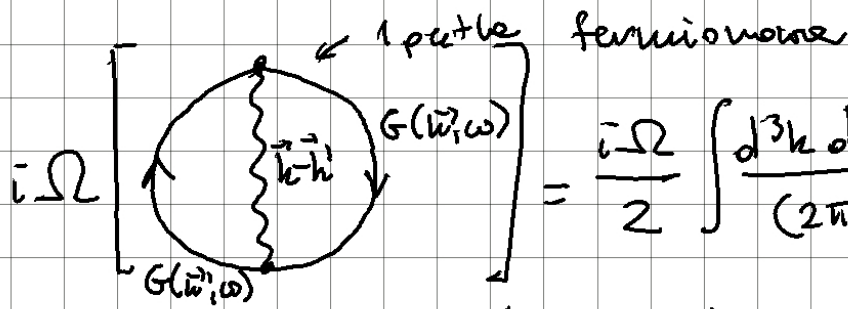
$$i\Omega \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} \right] = \frac{i\Omega}{2} \int \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^6} \int \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} e^{i(\omega+\omega')\Omega t} \cdot (-2s+1)^2 (iV_{\vec{q}=0}) G(\vec{k}, \omega) G(\vec{k}', \omega') =$$

↑ 2 pętle fermionowe

$$= \left\{ \int \frac{d\omega}{2\pi i} G(\vec{k}, \omega) e^{i\omega\Omega t} = \Theta(k_F - k) \right\} =$$

$$= \frac{\Omega}{2} \int \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^6} \left[(2s+1)^2 V_{\vec{q}=0} \right] \Theta(k_F - k) \Theta(k_F - k') =$$

$$= 0, \text{ bo w modelu jellium } V_{\vec{q}=0} = 0.$$



$$= \frac{i\Omega}{2} \int \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^6} \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \cdot (- (2s+1)) (i V_{\vec{k}-\vec{k}'}) G(\vec{k}, \omega) G(\vec{k}', \omega') =$$

$$= - \frac{(2s+1)}{2} \Omega \int \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^6} \frac{e^2}{\epsilon_0 (\vec{k}-\vec{k}')^2} \Theta(k-k_F) \Theta(k'-k_F) =$$

$$= - \frac{(2s+1)}{6\pi^2} k_F^3 \Omega \frac{3}{4\pi} \frac{e^2 k_F}{4\pi \epsilon_0}, \text{ czyli}$$

↑
praca domowa
(serie 4)

$$\frac{E_{HF}}{\Omega} = \frac{E_0}{\Omega} + i \left(\text{diagram} \right) = n \left[\frac{3}{5} \epsilon_F - \frac{3}{4\pi} \frac{e^2 k_F}{4\pi \epsilon_0} \right]$$

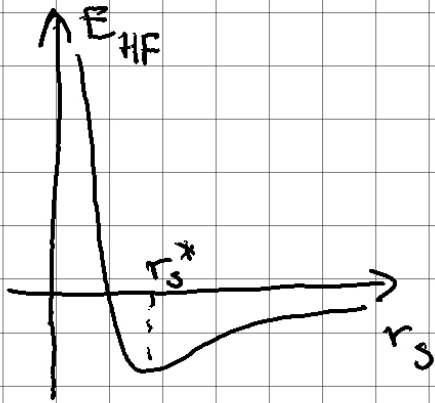
$$n = \frac{2s+1}{6\pi^2} k_F^3$$

$\frac{4\pi R_c^3}{3} \leftarrow$ średnia odległość między elektronami
 $= n^{-1}$, wtedy wprowadzamy

parametr $r_s = R_c / a_B$, wtedy

↑
promień Bohra $R_y = \frac{1}{2m\alpha_B^2}$

$$\frac{E_{HF}}{\Omega} \stackrel{s=\frac{1}{2}}{\downarrow} = \left(\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right) R_y$$



Gaz elektronowy
 w r_s^* jest stabilny,
 co można tłumaczyć
 powstaniem wiązania
 metalicznego.

Co się dzieje dla diagramów
 wyższego rzędu?

$$\sim \int_0^{q_c} dq \frac{1}{q} \rightarrow \infty$$

$$\sim \int_0^{q_c} dq q \rightarrow \text{skończony wnted}$$

Okazuje się, że w wyższych rzędach
 pojawiają się rozbieżności. Okazuje się,
 że można sobie z tym poradzić
 wykonując reśiowe wysumowanie
 całej klasy diagramów.

Niedr

$$\text{wavy line} = \text{wavy line} + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots$$

diagramy pierścieniowe
tworzą one szereg geometryczny

$$\text{diagram with } 2/r_1 \text{ label} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots$$

Wtedy do korekcji:

$$\frac{E_{\text{corr}}}{\Omega} = \frac{E_r}{\Omega} + i \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} \right] =$$

$$= \left[\frac{2}{\pi^2} (1 - \ln 2) \ln r_s - 0,094 + \mathcal{O}(r_s \ln r_s) \right] R_y$$

$$= \left[0,0622 \ln r_s - 0,094 + \mathcal{O}(r_s \ln r_s) \right] R_y$$