

MECHANIKA KWANTOWA II B

29.01.2019

EGZAMIN - ROZWIĄZANIA ZADAŃ

- ① Zaczynamy od warunku na k_F ,
który posłuży do wyznaczenia ϵ_F : ($\hbar=1$)

$$N = \langle FS | \sum_{k\sigma} \hat{n}_{k\sigma} | FS \rangle = \sum_{k\sigma} \langle FS | \hat{n}_{k\sigma} | FS \rangle =$$

$$= \sum_{k\sigma} \Theta(k_F - k) \xrightarrow[V \rightarrow \infty]{n = \frac{N}{V} = \text{const}} \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d^3k \Theta(k_F - k)$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{2 \cdot 4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk k^2 = \frac{1}{3\pi^2} k_F^3 \quad (1 \text{ pkt.})$$

$$\Rightarrow k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \Rightarrow \epsilon_F = \frac{k_F^2}{2m} = \frac{(3\pi^2 n)^{2/3}}{2m}$$

Teraz najniższą energię wewnętrzną
w stanie podstawowym:

$$E = \sum_{k\sigma} \frac{\hbar^2}{2m} \langle FS | \hat{n}_{k\sigma} | FS \rangle = \sum_{k\sigma} \frac{k^2}{2m} \Theta(k_F - k)$$

w granicy termodynamicznej mamy:

$$E = \frac{V}{2m} \frac{4\pi \cdot 2}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{V}{10\pi^2 m} k_F^5,$$

czyli

$$E(V) = \frac{V}{10\pi^2 m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{5/3} =$$

$$= \frac{(3\pi^2 N)^{5/3}}{10\pi^2 m} V^{-2/3} = A V^{-2/3} \quad (1 \text{ pkt.})$$

A

Znajdujemy ciśnienie gazu:

$$p = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{T,N} = \frac{2}{3} A V^{-5/3} \quad (1 \text{ pkt.})$$

Korzystając z wyniku obliczamy
objętościowy moduł sprężystości:

$$B = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T,N} = \frac{2}{3} \frac{5}{3} \cdot V A V^{-5/3-1} = \frac{10}{9} A V^{-5/3} =$$

$$= \frac{(3\pi^2 N)^{5/3}}{10\pi^2 m} \frac{10}{9} V^{-5/3} =$$

$$= \frac{1}{9} \frac{(3\pi^2)^{5/3}}{\pi^2 m} n^{5/3} = \left\{ n = \frac{(2m\epsilon_F)^{3/2}}{3\pi^2} \right\} =$$

$$= \frac{1}{9} \frac{(3\pi^2)^{5/3}}{\pi^2 m} \left[\frac{(2m\epsilon_F)^{3/2}}{3\pi^2} \right]^{5/3} = \frac{4\sqrt{2}}{9} \frac{m^{3/2}}{\pi^2} \epsilon_F^{5/2} \quad (1 \text{ pkt.})$$

Punktacja

- 1°) Za wyznaczenie ε_F z N - 1 pkt.
- 2°) za obliczenie energii wewnętrznej w $T=0$ - 1 pkt.
- 3°) za wyrażenie E w funkcji V i znalezienie ciśnienia p - 1 pkt.
- 4°) Za obliczenie modułu sprężystości i wyrażenie go przez ε_F - 1 pkt.

Suma: 4 pkt.

2) $\hat{H} = \varepsilon_0 (c_1^\dagger c_1 + c_2^\dagger c_2) + t c_2^\dagger c_1 + t^* c_1^\dagger c_2$

(a) Szukamy równania ruchu dla

$$G_{11}^{\text{ret}}(t) = -i \theta(t) \langle \{c_1(t), c_1^\dagger\} \rangle \quad (\hbar=1)$$

$$\partial_t G_{11}^{\text{ret}}(t) = \underbrace{-i \delta(t) \langle \{c_1(t), c_1^\dagger\} \rangle}_{\text{nie zerowe tylko dla } t=0, \text{ wtedy } \{c_1, c_1^\dagger\}=1} - i \theta(t) \langle \{\partial_t c_1(t), c_1^\dagger\} \rangle$$

$$\partial_t c_1(t) = i [\hat{H}, c_1(t)] = i e^{i\hat{H}t} [\hat{H}, c_1] e^{-i\hat{H}t}$$

obliczamy teraz odpowiednie komutatory

$$[c_1^\dagger c_1, c_1] = c_1^\dagger c_1 c_1 - \underbrace{c_1 c_1^\dagger}_{1 - c_1^\dagger c_1} c_1 =$$

$$= c_1^\dagger c_1 c_1 - c_1 + c_1^\dagger c_1 c_1 = -c_1$$

bo $c_1^2 = 0$ due fermionão

$$[c_2^\dagger c_2, c_1] = c_2^\dagger c_2 c_1 - \underbrace{c_1 c_2^\dagger c_2}_{-} =$$

$$= c_2^\dagger c_2 c_1 - c_2^\dagger c_2 c_1 = 0$$

$$[c_2^\dagger c_1, c_1] = c_2^\dagger c_1 c_1 - \underbrace{c_1 c_2^\dagger}_{-} c_1 = c_2^\dagger c_1 c_1 + c_2^\dagger c_1 c_1 =$$

$$= 0, \text{ bo } c_1^2 = 0$$

$$[c_1^\dagger c_2, c_1] = c_1^\dagger \underbrace{c_2 c_1}_{-} - \underbrace{c_1 c_1^\dagger}_{1 - c_1^\dagger c_1} c_2 =$$

$$= -c_1^\dagger c_1 c_2 - c_2 + c_1^\dagger c_1 c_2 = -c_2,$$

analogi

$$\partial_t \overbrace{G_{11}^{\text{ret}}(t)}^{G_{11}^{\text{ret}}(t)} = -i\delta(t) - i\varepsilon_0 (-i\theta(t) \langle \{c_1(t), c_1^\dagger\} \rangle) +$$

$$- i t^* \underbrace{(-i\theta(t) \langle \{c_2(t), c_1^\dagger\} \rangle)}_{G_{21}^{\text{ret}}(t)},$$

$$\text{analogi } (\partial_t + i\varepsilon_0) G_{11}^{\text{ret}}(t) = -i\delta(t) - i t^* G_{21}^{\text{ret}}(t)$$

(1.5 pts.)

Analogicznie obliczamy równania ruchu
dla $G_{21}^{\text{ret}}(t) = -i\theta(t) \langle \{c_2(t), c_1^\dagger\} \rangle$

$$\partial_t G_{21}^{\text{ret}}(t) = -i\delta(t) \underbrace{\langle \{c_2(t), c_1^\dagger\} \rangle}_{\text{niezerowe dla } t=0, \text{ wtedy } \{c_2, c_1^\dagger\}=0} - i\theta(t) \langle \{\partial_t c_2(t), c_1^\dagger\} \rangle$$

$$\partial_t c_2(t) = i[\hat{H}, c_2(t)] = i e^{+i\hat{H}t} [\hat{H}, c_2] e^{-i\hat{H}t},$$

gdzie analogicznie

$$[c_2^\dagger c_2, c_2] = -c_2, \quad [c_2^\dagger c_1, c_2] = -c_1,$$

$$\text{a } [c_1^\dagger c_1, c_2] = [c_1^\dagger c_2, c_2] = 0$$

mamy więc

$$(\partial_t + i\varepsilon_0) G_{21}^{\text{ret}}(t) = -i\theta(t) G_{11}^{\text{ret}}(t) \quad (1,5 \text{ pkt})$$

(b) Wykonujemy transformację Fouriera:

$$G^{\text{ret}}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{izt} G^{\text{ret}}(t), \quad z = \omega + i\eta$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{izt} \partial_t G^{\text{ret}}(t) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{przez} \\ \text{całk.}}}{iz G^{\text{ret}}(t) e^{izt}} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} iz e^{izt} G^{\text{ret}}(t) dt =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{ponieważ } G^{\text{ret}}(t) \sim \theta(t), \text{ czyli jest } G^{\text{ret}}(t) = 0 \\ \text{dla } t < 0 \text{ ponadto} \\ \exp(izt) = \exp(i\omega t - \eta t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0, \text{ więc wyraz} \\ \text{biegowy zniknie} \end{array} \right\} =$$

$$= i z G^{\text{ret}}(z) \quad | \quad \text{ponadto}$$

$$\int dt e^{i z t} \delta(t) = 1$$

Dostajemy układ równań:

$$\begin{cases} (-i z + i \epsilon_0) G_{11}^{\text{ret}}(z) = -i - i t^* G_{21}^{\text{ret}}(z) \\ (-i z + i \epsilon_0) G_{21}^{\text{ret}}(z) = -i t G_{11}^{\text{ret}}(z) \end{cases} \quad (1 \text{ pkt})$$

można go przepisać jako:

$$\begin{cases} (z - \epsilon_0) G_{11}^{\text{ret}}(z) = 1 + t^* G_{21}^{\text{ret}}(z) \\ (z - \epsilon_0) G_{21}^{\text{ret}}(z) = t G_{11}^{\text{ret}}(z) \Rightarrow G_{21}^{\text{ret}} = \frac{t}{z - \epsilon_0} G_{11}^{\text{ret}}(z) \end{cases}$$

czyli

$$G_{11}^{\text{ret}}(z) = \frac{1}{z - \epsilon_0 - \frac{|t|^2}{z - \epsilon_0}} = \frac{1}{G_0^{-1}(z) - \frac{|t|^2}{z - \epsilon_0}}$$

(0,5 pkt)

Korzystając z definicji $G^{-1}(z) = G_0^{-1}(z) - \Sigma(z)$

dostajemy, że self energia to

$$\Sigma(z) = \frac{|t|^2}{z - \epsilon_0}$$

(0,5 pkt)

Wyrażenie na $G_{11}^{\text{ret}}(z)$ można przekształcić do bardziej wygodnej postaci:

$$G_{11}^{\text{ret}}(z) = \frac{z - \varepsilon_0}{(z - \varepsilon_0)^2 - |t|^2} = \frac{z - \varepsilon_0}{(z - \varepsilon_0 - |t|)(z - \varepsilon_0 + |t|)} =$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{z - \varepsilon_0 - |t|} + \frac{1}{2} \frac{1}{z - \varepsilon_0 + |t|}$$

rozłożony
na ułamki
proste

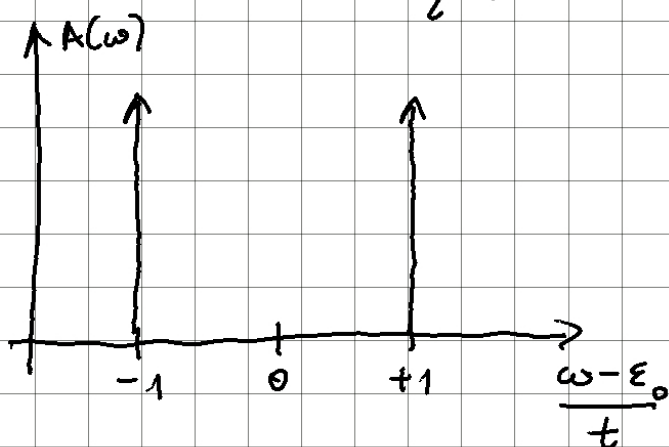
(c) szukamy funkcji spektralnej

$$A(z) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{11}^{\text{ret}}(z) =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma}{(\omega - \varepsilon_0 - |t|)^2 + \gamma^2} + \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma}{(\omega - \varepsilon_0 + |t|)^2 + \gamma^2}$$

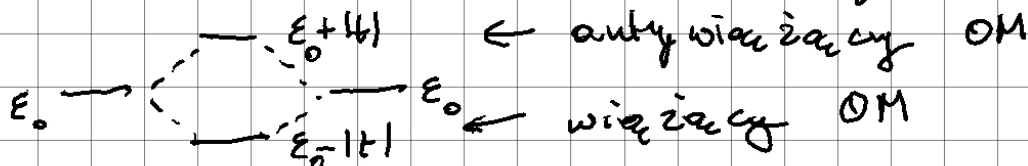
czyli

$$A(\omega + i\gamma) \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0^+} \frac{1}{2} \delta(\omega - \varepsilon_0 - |t|) + \frac{1}{2} \delta(\omega - \varepsilon_0 + |t|)$$



Pik o mniejszej energii odpowiada molekularnemu orbitalowi wiążącemu, a pik o większej

molekularnemu orbitalowi anty wiążącemu.



(0,5 pkt)

Punktacja:

1°) Poprawne wyrowadzenie równań ruchu

dla G_{11}^{ret} i G_{21}^{ret} - 1,5 pkt. $\times 2$

2°) Poprawne policzenie transformat Fouriera - 1 pkt.

3°) Znalezienie $G_{11}^{ret}(z)$ - 0,5 pkt.

4°) Znalezienie $\Sigma(z)$ - 0,5 pkt.

5°) Obliczenie $A(\omega)$ - 0,5 pkt.

6°) Komentarz - 0,5 pkt.

Suma: 6 pkt.