تمرین چگال ۲- بررسی حالت پایه سیستم N الکترونی

۱. هامیلتونی مربوط به یک مایع الکترونی متشکل از N الکترون، که باهم و با زمینه مثبت برهم کنش دارند به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\widehat{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \frac{e^2}{\mid r_i - r_j \mid} + \widehat{H}_{e-b} + \widehat{H}_{b-b}$$

که در اینجا

$$\widehat{H}_{e-b} = -e^2 \int dr \int dr' \frac{n(r) n_b(r')}{\mid r - r' \mid}$$

و

$$\widehat{H}_{b-b} = e^2 \int dr \int dr' \frac{n_b(r) n_b(r')}{\mid r - r' \mid}$$

که

$$n(r) = \sum_{i=1}^{N} \delta(r - r_i)$$

عملگر چگالی عددی الکترون‌ها می‌باشد و

$$en_b(r) = en$$

چگالی بار یکنواخت زمینه است. نشان دهید که در حد ترمودینامیکی برای این سیستم داریم:

$$\widehat{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2l^d}\sum_{q\neq 0} v_q [n_{-q} n_q - N]$$

۲. انرژی حالت پایه برای یک سیستم N الکترونی با برهم کنش کولنی در دوبعد را با استفاده از تقریب هارتری فوک بدست آورید. یکبار فرض کنید که تعداد الکترون‌ها با اسپین بالا و پایین با هم برابر است و یکبار فرض کنید که همه الکترون‌ها دارای اسپین بالا باشند. انرژی این دو حالت رابا هم مقایسه کرده و مشخص کنید که چه زمانی در سیستم گذار فاز رخ می‌دهد.

۳. بررسی کنید که چرا چگالی حالت‌ها برای سیستم الکترونی همگن در تقریب هارتری-فوک در سطح فرمی صفر می‌شود.

۴. برای یک سیستم الکترونی در حد چگالی‌های کم می‌توانیم فاز کریستالی داشته باشیم. برای مشخص کردن انرژی این فاز می‌توانیم در سه بعد کریستال را به صورت مجموعه‌ای از کره‌های خنثی در نظر بگیریم که کره داری بار یکنواخت

مثبت است و یک الکترون در مرکز آن قرار دارد. نشان دهید با استفاده از این فرض انرژی بر تعداد را می‌توان به صورت زیر تقریب زد:

$$\frac{U}{N} = \frac{-۱/۸}{r_s} Ry$$

که در اینجا $۱Ry = \frac{e^۲}{۲a_B}$ می‌باشد.

****

زمان تحویل: یکشنبه ۱۳۹۴/۷/۲۶