

UNIVERSITATEA "BABEȘ-BOLYAI" CLUJ-NAPOCA
FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZAREA FIZICĂ

LUCRARE DE LICENȚĂ

Coordonator științific
Prof. Dr. Grosu Ioan

Absolvent
Ene Vlad-Mihai

2024

UNIVERSITATEA "BABEȘ-BOLYAI" CLUJ-NAPOCA
FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZAREA FIZICĂ

LUCRARE DE LICENȚĂ

INTERACȚIUNI NON-COULOMB ÎN LICHIDE FERMI 3D

Coordonator științific
Prof. Dr. Grosu Ioan

Absolvent
Ene Vlad-Mihai

2024

Abstract

Interactions that are longer-ranged than the Coulomb one are found in a series of practical applications, such as three-layer systems specific to semiconductor heterostructures or metal-oxide-semiconductor structures. Other situations where long-range interactions appear include those of materials in contact with electrolytic solutions, as well as certain ultra-cold atomic and molecular gasses.

In this thesis we calculate a number of properties specific to fermionic three-dimensional many-body systems in which the interaction potential has a more general dependence on the distance r between particles than the Coulombic one: $V(r) \sim r^{-\eta}$, where $\eta > 0$. This expression encompasses both long-range interactions, as well as short-range interactions, depending on the value of the parameter η .

We employ the second quantization formalism and the Heisenberg equation of motion, together with the Hartree-Fock approximation, in order to find a number of results: the energy of a single fermion in the many-body system, the energy of the entire system at a temperature of 0 K, as well as the density of states. Other formulas of interest are also found, such as an intermediary expression for the Fourier transform of the interaction potential and approximations for the energy of a particle around the Fermi momentum p_F . Using the density of states, one could carry out further calculations for the energy of the system at a non-zero temperature, together with the heat capacity, the compressibility, or the magnetic susceptibility of the Fermi liquid.

Cuprins

Introducere	4
1 Noțiuni teoretice de bază	6
1.1 Cuantificarea a doua	6
1.2 Interacțiunea biparticulă	8
1.3 Reprezentarea Heisenberg a Mecanicii Cuantice	10
1.4 Metoda ecuației de mișcare	11
1.5 Aproximația Hartree-Fock	13
2 Interacțiuni non-Coulomb în lichide Fermi 3D	16
2.1 Calculul transformatei Fourier a potențialului	16
2.2 Energia Hartree-Fock a unei particule	18
2.3 Energia Hartree-Fock a sistemului de multe particule la 0 K	20
2.4 Aproximații pentru energia unei particule în vecinătatea nivelului Fermi . . .	22
2.5 Densitatea de stări	23
Concluzii	29
Bibliografie	30

Introducere

Interacțiunile de rază mai lungă decât cele Coulombiene sunt întâlnite într-o serie de sisteme de interes practic. Conform articolului [1], abateri de la interacțiunea Coulomb apar în cazul a două sarcini electrice plasate într-un sistem cu trei straturi de material, fiecare fiind caracterizat de propria permitivitate electrică. Caracterul non-Coulombian al interacției provine din polarizarea indusă de cele două sarcini la interfețele dintre cele trei medii, sisteme de acest tip fiind întâlnite în studiul heterostructurilor semiconductoare sau al structurilor metal-oxid-semiconductor. Interacțiuni de rază lungă pot apărea și în cazul unor materiale în contact cu soluții electrolitice [2]. De asemenea, anumite sisteme de gaze atomice și moleculare ultra-rece, precum gazele moleculare dipolare, ionii confinați, sau atomii Rydberg, prezintă același caracter de rază lungă al interacțiilor [3], [4].

În cadrul lucrării de față ne propunem calcularea unor mărimi caracteristice sistemelor tridimensionale de mulți fermioni în care interacțiile dintre aceștia au o formă mai generală decât cea Coulombiană, și anume potențialul de interacțiune este dat de $V(r) \sim r^{-\eta}$, unde $\eta > 0$. Această formă a potențialului cuprinde atât interacțiile de rază lungă, pentru $\eta < 1$, cât și pe cele de rază scurtă, pentru $\eta > 1$. Principalele rezultate obținute în mod analitic sunt: energia unei particule în sistemul de mulți fermioni, energia întregului sistem la temperatura de 0 K, precum și densitatea de stări. De asemenea, s-au calculat și mărimi de interes ca și o formă intermediară pentru transformata Fourier a potențialului non-Coulomb, și s-au găsit aproximații pentru energia unei particule în jurul impulsului Fermi, p_F . Pe baza densității de stări, s-ar putea calcula mai departe o serie de mărimi macroscopice caracteristice sistemului: energia la temperaturi diferite de 0, capacitatea calorică, compresibilitatea, sau susceptibilitatea magnetică.

Lucrarea este structurată în două capitole. În primul capitol sunt prezentate noțiunile teoretice care permit studiul sistemelor de mulți fermioni. Aceasta se face prin îmbinarea a două metode specifice: în primul rând este introdus formalismul cuantificării a doua, în care funcțiile de undă din Mecanica Cuantică obișnuită sunt înlocuite de vectori de stare asupra cărora acționează operatori de creare și anihilare. Cea de-a doua componentă este metoda ecuației de mișcare a lui Heisenberg, aceasta fiind o alternativă la ecuația lui Schrödinger, în cadrul reprezentării Heisenberg a Mecanicii Cuantice. Astfel, cuantificarea a doua permite exprimarea potențialului de interacțiune pentru un sistem cu interacțiuni biparticulă prin intermediul operatorilor de creare și anihilare. Revenind cu acest rezultat în ecuația de mișcare Heisenberg, se ajunge la o expresie ce impune folosirea unei aproximații pentru

a extrage o informație importantă, energia unei particule în sistemul de mulți fermioni. Aproximația folosită în acest punct este aproximația Hartree-Fock. Calculele prezentate în această parte a lucrării urmează îndeaproape linia dată de cartea [5].

Cel de-al doilea capitol prezintă rezultatele noi obținute pe baza formulei enunțate în finalul primului capitol. Conform acesteia, a fost nevoie ca mai întâi să calculăm transformata Fourier a potențialului. Aceasta a fost exprimată într-o formă intermediară, suficientă pentru calculele următoare. În continuare am obținut expresia energiei unei particule în sistemul de mulți fermioni, ca funcție de impuls, pe două domenii de valori ale acestuia: $p < p_F$ și $p > p_F$. Expresiile găsite au fost, de asemenea, reprezentate grafic. Mai departe, în considerația $T = 0$ K, s-a calculat energia întregului sistem de fermioni. Expresia obținută prezintă o corecție la energia sistemului de particule libere. În următoarea secțiune este prezentată o metodă de aproximare a energiei unei particule în jurul lui p_F , prin aproximarea funcțiilor Hipergeometrice care intervin în expresia energiei. În finalul lucrării s-a calculat expresia densității de stări a sistemului. Aici se observă două comportamente diferite ale acesteia în funcție de valoarea parametrului η . Pentru interacțiunile de rază lungă, $\eta < 1$, densitatea de stări în p_F rezultă ca fiind nulă, ceea ce este nerealist. Această abatere poate fi corectată prin luarea în considerare a efectelor de ecranare, dar acest lucru depășește scopul lucrării de față. Chiar și așa, dependența obținută indică tendința generală ca densitatea de stări să scadă sub cea caracteristică sistemului de particule libere. În cazul interacțiunilor de scurtă distanță se obține o densitate de stări nenulă în p_F .

1 Noțiuni teoretice de bază

1.1 Cuantificarea a doua

În cadrul primei cuantificări se studiază sisteme cuantice simple, în timp ce cuantificarea a doua reprezintă un formalism ce face posibilă trecerea la sisteme cuantice de mai multe particule, printre altele. Această metodă a fost introdusă în a doua parte a anilor 1920 de P. Dirac, fiind mai apoi dezvoltată de P. Jordan și V. Fock.

Astfel, în a doua cuantificare, starea unui sistem de multe particule este specificată prin vectori ce indică numărul de particule în starea de impuls \vec{p} și spin σ din cadrul sistemului:

$$|\dots, n_{\vec{p},\sigma}, \dots\rangle \quad (1.1)$$

Aici se definesc operatorii de distrugere, respectiv de creare, pentru fermioni cu impulsul \vec{p} și spinul σ , $c_{\vec{p},\sigma}$ și $c_{\vec{p},\sigma}^\dagger$. Cu acești operatori se poate acționa asupra vectorilor de tipul (1.1) pentru a scădea, respectiv adăuga, o particulă la starea (\vec{p}, σ) :

$$\begin{aligned} c_{\vec{p},\sigma} |\dots, n_{\vec{p},\sigma}, \dots\rangle &\rightarrow |\dots, n_{\vec{p},\sigma} - 1, \dots\rangle \\ c_{\vec{p},\sigma}^\dagger |\dots, n_{\vec{p},\sigma}, \dots\rangle &\rightarrow |\dots, n_{\vec{p},\sigma} + 1, \dots\rangle \end{aligned} \quad (1.2)$$

Vectorii rezultați în acest mod vor fi precedați de anumiți factori multiplicativi care nu sunt de mare importanță în cazul de față.

Operatorii de distrugere și creare satisfac următorul set de relații de anticomutare provenite din expresiile (1.2):

$$\begin{aligned} \{c_{\vec{p},\sigma}, c_{\vec{p}',\sigma'}^\dagger\} &= \{c_{\vec{p},\sigma}^\dagger, c_{\vec{p}',\sigma'}\} = 0 \\ \{c_{\vec{p},\sigma}^\dagger, c_{\vec{p},\sigma}\} &= \delta_{\vec{p},\vec{p}} \delta_{\sigma,\sigma'} \end{aligned} \quad (1.3)$$

unde anticomutatorul este dat de:

$$\{A, B\} = AB + BA \quad (1.4)$$

O observație interesantă ce poate fi făcută aici este că $\{c_{\vec{p},\sigma}, c_{\vec{p},\sigma}\} = 0$, deci $2(c_{\vec{p},\sigma})^2 = 0$ și atunci $(c_{\vec{p},\sigma})^2 = 0$. Aceasta înseamnă că starea de impuls \vec{p} și spin σ nu poate avea mai mult de un fermion, ceea ce este în concordanță cu principiul de excluziune al lui Pauli.

De asemenea, în cadrul cuantificării a doua sunt introduși și operatorii de câmp de distrugere $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$, respectiv creare $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})$, a unui fermion în punctul \vec{r} . La rândul lor, aceștia satisfac un set de relații de anticomutare:

$$\begin{aligned} \{\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\} &= \{\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\} = 0 \\ \{\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}')\} &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma,\sigma'} \end{aligned} \quad (1.5)$$

Legătura dintre operatorii de câmp și operatorii de anihilare și creare este dată de următoarele expresii, unde V este volumul sistemului:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} c_{\vec{p},\sigma} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \\ \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}\end{aligned}\quad (1.6)$$

Nu în ultimul rând, pe baza operatorilor de câmp se poate exprima operatorul asociat densității de particule la poziția \vec{r} :

$$\hat{\rho}(\vec{r}, \sigma) = \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \quad (1.7)$$

Această relație poate fi privită prin prisma faptului că operatorii de câmp reprezintă ”cuantificarea” funcției de undă din reprezentarea Schrödinger. Astfel, expresia de mai sus este asemănătoare cu cea a densității de probabilitate din cuantificarea întâi.

Folosind operatorul densității de particule se poate obține o informație importantă prin calculul numărului total de particule din sistem:

$$N = \sum_{\sigma} \int d^3r \cdot \hat{\rho}(\vec{r}, \sigma) = \sum_{\sigma} \int d^3r \cdot \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \quad (1.8)$$

Mai departe se face trecerea de la operatorii de câmp la operatorii de creare și anihilare:

$$N = \sum_{\sigma} \int d^3r \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}'} c_{\vec{p}',\sigma} e^{i\vec{p}'\cdot\vec{r}} \quad (1.9)$$

Prelucrarea acestui rezultat se face ținând seama de o egalitate pentru integrala care apare ce urmează a fi justificată în finalul secțiunii:

$$N = \sum_{\sigma, \vec{p}, \vec{p}'} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger c_{\vec{p}',\sigma} \cdot \frac{1}{V} \cdot \int d^3r \cdot e^{i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{r}} = \sum_{\sigma, \vec{p}, \vec{p}'} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger c_{\vec{p}',\sigma} \cdot \delta_{\vec{p}',\vec{p}} = \sum_{\vec{p},\sigma} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger c_{\vec{p},\sigma} \quad (1.10)$$

Aici se identifică numărul de particule în starea (\vec{p}, σ) :

$$n_{\vec{p},\sigma} = c_{\vec{p},\sigma}^\dagger c_{\vec{p},\sigma} \quad (1.11)$$

O observație ce trebuie făcută este că acest număr de particule este, la rândul lui, un operator, provenind din produsul a doi operatori. Operatorul $n_{\vec{p},\sigma}$ reprezintă numărul de particule în sensul în care aplicându-l asupra vectorilor de tipul $|\dots, n_{\vec{p},\sigma}, \dots\rangle$ se obține o ecuație de tip vectori și valori proprii, în care valoarea proprie este scalarul reprezentând numărul de particule în starea (\vec{p}, σ) .

În finalul acestei secțiuni vom justifica o informație folosită în ecuația (1.10), și anume:

$$\frac{1}{V} \cdot \int d^3r \cdot e^{i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{r}} = \delta_{\vec{p}',\vec{p}} \quad (1.12)$$

Pentru aceasta se consideră expresia funcției de undă normate pentru o particulă cu impulsul \vec{p} :

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \quad (1.13)$$

Atunci, integrala din (1.12) devine:

$$\int d^3r \cdot \psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \langle \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) | \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \rangle = \delta_{\vec{p},\vec{p}} \quad (1.14)$$

1.2 Interacțiunea biparticulă

Se consideră un sistem de particule în care acestea interacționează fiecare cu fiecare și energia potențială depinde numai de poziție:

$$V_b = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (1.15)$$

Aici factorul 1/2 apare pentru a evita numărarea dublă a aceleiași interacțiuni. Mai departe se consideră expresia densității unui gaz de particule punctiforme:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (1.16)$$

Astfel, energia de interacțiune devine:

$$V_b = \frac{1}{2} \int \int d^3r d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') \left[\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}') - \rho(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}') \right] \quad (1.17)$$

Al doilea termen din expresia de mai sus are rolul de a elimina interacțiunea particulei cu ea însăși. Se mai consideră:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \rho(\vec{r}, \sigma) \quad ; \quad \rho(\vec{r}') = \sum_{\sigma'} \rho(\vec{r}', \sigma') \quad (1.18)$$

Cu aceste considerații, energia de interacțiune biparticulă devine:

$$V_b = \frac{1}{2} \int \int d^3r d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') \left[\sum_{\sigma, \sigma'} \rho(\vec{r}, \sigma) \rho(\vec{r}', \sigma') - \sum_{\sigma} \rho(\vec{r}, \sigma) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \right] \quad (1.19)$$

Făcând trecerea la operatorii de câmp:

$$V_b = \frac{1}{2} \int \int d^3r d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') \left[\sum_{\sigma, \sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \cdot \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') - \sum_{\sigma} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}') \right] \quad (1.20)$$

Mai departe, cea de-a doua sumă de mai sus se trece la indicii (σ, σ') printr-un mic artificiu:

$$V_b = \frac{1}{2} \int \int d^3r d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{\sigma, \sigma'} \left[\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \cdot \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') - \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}) \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma, \sigma'} \right] \quad (1.21)$$

Conform relației de anticomutare pentru operatorii de câmp fermionici:

$$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma, \sigma'} - \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \quad (1.22)$$

Se observă că acest produs de operatori apare în primul termen din suma de mai sus. Înlocuindu-l, paranteza dreaptă din expresia energiei potențiale devine:

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \cdot \left(\delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma, \sigma'} - \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \right) \cdot \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') - \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}) \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma, \sigma'} = \\ & = \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma, \sigma'} - \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') - \\ & \quad - \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}) \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma, \sigma'} \end{aligned} \quad (1.23)$$

Datorită funcțiilor δ , primul și ultimul termen din expresia de mai sus se reduc. Astfel, în forma energiei potențiale se introduce termenul rămas, asupra căruia se aplică și relația de anticomutare:

$$V_b = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int \int d^3r d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}) \quad (1.24)$$

Mai departe se face trecerea de la operatorii de câmp la cei de creare și anihilare, deoarece, așa cum va fi prezentat în secțiunile următoare, această scriere este necesară pentru a calcula energia unei particule în cadrul unui sistem de mulți fermioni cu interacțiune biparticulă pe baza ecuației de mișcare a lui Heisenberg.

$$\begin{aligned} V_b = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int \int d^3r d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}_1} c_{\vec{p}_1, \sigma'}^\dagger e^{-i\vec{p}_1 \cdot \vec{r}'} \cdot \\ \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}_2} c_{\vec{p}_2, \sigma'} e^{i\vec{p}_2 \cdot \vec{r}'} \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}_3} c_{\vec{p}_3, \sigma} e^{i\vec{p}_3 \cdot \vec{r}} \end{aligned} \quad (1.25)$$

Scoțând în afara integralelor sumele după impulsuri se obține:

$$V_b = \frac{1}{2V^2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\vec{p}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3} \int \int d^3r d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}_1, \sigma'}^\dagger c_{\vec{p}_2, \sigma'} c_{\vec{p}_3, \sigma} e^{i(\vec{p}_3 - \vec{p}) \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{p}_2 - \vec{p}_1) \cdot \vec{r}'} \quad (1.26)$$

Acum se consideră transformata Fourier a potențialului:

$$V_{\vec{q}} = \int d^3r \cdot V(\vec{r}) \cdot e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (1.27)$$

Pe baza acesteia, admitem că următoarea formulă este valabilă:

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} \cdot e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \quad (1.28)$$

Astfel, energia de interacțiune devine:

$$V_b = \frac{1}{2V^3} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\vec{p}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, \vec{q}} \int \int d^3r d^3r' V_{\vec{q}} c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}_1, \sigma'}^\dagger c_{\vec{p}_2, \sigma'} c_{\vec{p}_3, \sigma} e^{i(\vec{p}_3 - \vec{p} + \vec{q}) \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{p}_2 - \vec{p}_1 - \vec{q}) \cdot \vec{r}'} \quad (1.29)$$

Aici operatorii de creare și anihilare sunt scoși în fața integralelor, care apoi sunt separate ținând seama de variabilele de integrare diferite:

$$V_b = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\vec{p}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, \vec{q}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}_1, \sigma'}^\dagger c_{\vec{p}_2, \sigma'} c_{\vec{p}_3, \sigma} \cdot \frac{1}{V} \int d^3r e^{i(\vec{p}_3 - \vec{p} + \vec{q}) \cdot \vec{r}} \cdot \frac{1}{V} \int d^3r' e^{i(\vec{p}_2 - \vec{p}_1 - \vec{q}) \cdot \vec{r}'} \quad (1.30)$$

Mai departe este folosit rezultatul (1.12):

$$V_b = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\vec{p}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3, \vec{q}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}_1, \sigma'}^\dagger c_{\vec{p}_2, \sigma'} c_{\vec{p}_3, \sigma} \cdot \delta_{\vec{p}, \vec{p}_3 + \vec{q}} \cdot \delta_{\vec{p}_1, \vec{p}_2 - \vec{q}} \quad (1.31)$$

Considerând acțiunea simbolurilor δ în sume se obține:

$$V_b = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\vec{p}_2, \vec{p}_3, \vec{q}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}_3 + \vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}_2 - \vec{q}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{p}_2, \sigma'} c_{\vec{p}_3, \sigma} \quad (1.32)$$

Expresia finală a energiei de interacțiune se obține făcând renotările:

$$\vec{p}_3 \rightarrow \vec{p} \quad ; \quad \vec{p}_2 \rightarrow \vec{k} \quad (1.33)$$

Atunci:

$$V_b = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\vec{p}, \vec{k}, \vec{q}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p} + \vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k} - \vec{q}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma'} c_{\vec{p}, \sigma} \quad (1.34)$$

1.3 Reprezentarea Heisenberg a Mecanicii Cuantice

În cadrul Mecanicii Cuantice există trei reprezentări echivalente pentru descrierea evoluției unui sistem în timp: reprezentarea Schrödinger, reprezentarea Heisenberg, și reprezentarea de interacțiune. În reprezentarea Schrödinger, funcția de undă evoluează conform ecuației Schrödinger, în timp ce operatorii sunt independenți de timp. Reprezentarea Heisenberg presupune că stările $|\hat{\psi}_H\rangle$ sunt staționare, iar evoluția operatorilor este dată de ecuația de mișcare:

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}_H = [H, \hat{O}_H] \quad (1.35)$$

Reprezentarea de interacțiune este o variantă intermediară dintre cea Schrödinger și cea Heisenberg, atât stările cât și operatorii evoluând în timp. În cazul de față, folosită este

ecuația de mișcare a lui Heisenberg, într-o formă ușor modificată. Astfel, mai întâi este conjugată complex ecuația (1.35):

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}_H(t)\right)^\dagger = \left(H \hat{O}_H(t) - \hat{O}_H(t) H\right)^\dagger \quad (1.36)$$

Pe baza proprietăților cunoscute ale conjugării, rezultă:

$$i \frac{\partial^\dagger}{\partial t} \hat{O}_H^\dagger(t) = \left(H \hat{O}_H(t)\right)^\dagger - \left(\hat{O}_H(t) H\right)^\dagger = \hat{O}_H^\dagger(t) H^\dagger - H^\dagger \hat{O}_H^\dagger(t) \quad (1.37)$$

Aici se ține cont de faptul că Hamiltonianul este un operator hermitic, $H^\dagger = H$, astfel încât:

$$i \frac{\partial^\dagger}{\partial t} \hat{O}_H^\dagger(t) = - \left[H, \hat{O}_H^\dagger(t) \right] \quad (1.38)$$

Mai departe se face trecerea la spațiul Fourier pe baza relațiilor de legătură:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega_{\vec{q}} \quad \hat{O}_H(t) \rightarrow \hat{O}_{\vec{q}} \quad (1.39)$$

Astfel rezultă:

$$i (-i\omega_{\vec{q}})^\dagger \hat{O}_{\vec{q}}^\dagger = - \left[H, \hat{O}_{\vec{q}}^\dagger \right] \quad (1.40)$$

De aici se obține forma ecuației de mișcare a lui Heisenberg folosită mai departe:

$$\left[H, \hat{O}_{\vec{q}}^\dagger \right] = \omega_{\vec{q}} \hat{O}_{\vec{q}}^\dagger \quad (1.41)$$

1.4 Metoda ecuației de mișcare

Calculul energiei $\varepsilon_{\vec{p}}$ a unei particule de impuls \vec{p} și spin σ presupune analizarea ecuației de mișcare (1.41), în care $\omega_{\vec{q}}$ este redenumit $\varepsilon_{\vec{p}}$:

$$\left[H, c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] = \varepsilon_{\vec{p}} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \quad (1.42)$$

unde H este Hamiltonianul care descrie sistemul în care se află particula, exprimat în general prin operatori de creare și anihilare, c^\dagger și c . Odată ce H este înlocuit, comutatorul se prelucrează pe baza relațiilor de comutare și anticomutare cunoscute astfel încât să se izoleze operatorul $c_{\vec{p},\sigma}^\dagger$. Mai departe, prin compararea cantităților de la stânga și dreapta egalului se găsește energia $\varepsilon_{\vec{p}}$.

Spre exemplu, în cazul simplu al unei particule libere, fără interacțiune, Hamiltonianul este dat de: $H = \sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{\vec{p}}^0 c_{\vec{p},\sigma}^\dagger c_{\vec{p},\sigma}$. Aici, $\varepsilon_{\vec{p}}^0 = \frac{p^2}{2m}$ și $c_{\vec{p},\sigma}^\dagger c_{\vec{p},\sigma} = n_{\vec{p},\sigma}^0$ este numărul de particule în starea (\vec{p}, σ) , deci Hamiltonianul este compus doar din energii de tip cinetic.

În cazul unui sistem cu interacțiuni de tip biparticulă, Hamiltonianul conține atât o componentă cinetică, cât și una de interacție:

$$H = \sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{\vec{p}}^0 c_{\vec{p},\sigma}^\dagger c_{\vec{p},\sigma} + \sum_{\sigma,\sigma',\vec{p},\vec{k},\vec{q}} \frac{V_{\vec{q}}}{2} c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} c_{\vec{p},\sigma} \quad (1.43)$$

Înlocuind Hamiltonianul în ecuația de mișcare și făcând redenumirile $\vec{p} \rightarrow \vec{p}'$ și $\sigma \rightarrow \sigma''$ în expresia lui pentru evitarea confuziei cu indicii operatorului $c_{\vec{p},\sigma}^\dagger$ corespunzător particulei studiate, rezultă:

$$\left[H, c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] = \sum_{\vec{p}',\sigma'} \varepsilon_{\vec{p}'}^0 \left[c_{\vec{p}',\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}',\sigma'} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] + \sum_{\sigma'',\sigma',\vec{p}',\vec{k},\vec{q}} \frac{V_{\vec{q}}}{2} \left[c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma''}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} c_{\vec{p}',\sigma''} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] \quad (1.44)$$

Pentru calculul comutatorului din prima sumă se folosește identitatea:

$$[A, BC] = \{A, B\} C - B \{A, C\} \quad (1.45)$$

unde $\{A, B\}$ este anticomutatorul. Astfel, ținând seama de relațiile de anticomutare pentru operatorii fermionici, se obține:

$$\begin{aligned} \left[c_{\vec{p}',\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}',\sigma'} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger, c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] &= - \left[c_{\vec{p},\sigma}^\dagger, c_{\vec{p}',\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}',\sigma'} \right] = - \left(\left\{ c_{\vec{p},\sigma}^\dagger, c_{\vec{p}',\sigma'}^\dagger \right\} c_{\vec{p}',\sigma'} - \right. \\ &\quad \left. - c_{\vec{p}',\sigma'}^\dagger \left\{ c_{\vec{p},\sigma}^\dagger, c_{\vec{p}',\sigma'} \right\} \right) = c_{\vec{p}',\sigma'}^\dagger \delta_{\vec{p},\vec{p}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \end{aligned} \quad (1.46)$$

Cu acest rezultat, prima sumă din (1.44) devine:

$$\sum_{\vec{p}',\sigma'} \varepsilon_{\vec{p}'}^0 c_{\vec{p}',\sigma'}^\dagger \delta_{\vec{p},\vec{p}'} \delta_{\sigma,\sigma'} = \varepsilon_{\vec{p}}^0 c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \quad (1.47)$$

De aici rezultă energia cinetică a particulei, identică cu cea a unei particule libere: $\varepsilon_{\vec{p}}^0 = \frac{p^2}{2m}$. Mai departe trebuie analizat cel de-al doilea comutator din expresia (1.44). Pentru aceasta se consideră următoarea egalitate pentru comutatori:

$$[A, BC] = [A, B] C + B [A, C] \quad (1.48)$$

Aceasta se folosește asupra comutatorului:

$$\left[c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma''}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} c_{\vec{p}',\sigma''} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] = - \left[c_{\vec{p},\sigma}^\dagger, c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma''}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} c_{\vec{p}',\sigma''} \right] \quad (1.49)$$

Aici se face următoarea separare:

$$A = c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \quad B = c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma''}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger \quad C = c_{\vec{k},\sigma'} c_{\vec{p}',\sigma''} \quad (1.50)$$

Se observă că, aplicând (1.48) asupra (1.49), primul termen va conține un comutator numai cu operatori de creare. Folosind (1.45), vor rezulta doi anticomutatori de operatori de creare,

egali cu 0 pe baza relațiilor cunoscute. Astfel, va rămâne doar al doilea termen din (1.48), egal cu:

$$-c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma''}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger \left[c_{\vec{p},\sigma}^\dagger, c_{\vec{k},\sigma'} c_{\vec{p}',\sigma''} \right] \quad (1.51)$$

Asupra comutatorului se aplică relația (1.45), precum și relațiile de anticmutare, astfel încât rezultă:

$$c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma''}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} \delta_{\vec{p},\vec{p}'} \delta_{\sigma,\sigma''} - c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma''}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}',\sigma''} \delta_{\vec{p},\vec{k}} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (1.52)$$

Această expresie este egală cu al doilea comutator din (1.44). Considerând acțiunea simbolurilor Delta în interiorul sumelor, al doilea termen din (1.44) devine:

$$\sum_{\sigma',\vec{k},\vec{q}} \frac{V_{\vec{q}}}{2} c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} - \sum_{\sigma'',\vec{p}',\vec{q}} \frac{V_{\vec{q}}}{2} c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma''}^\dagger c_{\vec{p}-\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{p}',\sigma''} \quad (1.53)$$

În al doilea termen obținut se fac redenumirile: $\sigma'' \rightarrow \sigma'$, $\vec{p}' \rightarrow \vec{k}$, și $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$. Se consideră și $V_{-\vec{q}} = V_{\vec{q}}$, astfel că rezultă:

$$\sum_{\sigma',\vec{k},\vec{q}} \frac{V_{\vec{q}}}{2} c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} - \sum_{\sigma',\vec{k},\vec{q}} \frac{V_{\vec{q}}}{2} c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} \quad (1.54)$$

În cea de-a doua sumă se folosește relația de anticmutare pentru cei doi operatori de creare, astfel încât rezultatul final va fi dublul primei sume:

$$\sum_{\sigma',\vec{k},\vec{q}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} \quad (1.55)$$

Revenind la (1.44):

$$\left[H, c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] = \varepsilon_{\vec{p}}^0 c_{\vec{p},\sigma}^\dagger + \sum_{\sigma',\vec{k},\vec{q}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} \quad (1.56)$$

În cel de-al doilea termen din rezultatul obținut ar trebui izolat operatorul de creare $c_{\vec{p},\sigma}^\dagger$ pentru a găsi energia unei particule în sistemul descris de Hamiltonianul ales. Pentru a realiza acest lucru, mai departe vom folosi aproximația Hartree-Fock.

1.5 Aproximația Hartree-Fock

În cadrul metodei ecuației de mișcare se obține următorul rezultat pentru mișcarea unei particule într-un mediu cu interacții de tip biparticulă:

$$\left[H, c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] = \varepsilon_{\vec{p}}^0 c_{\vec{p},\sigma}^\dagger + \sum_{\sigma',\vec{k},\vec{q}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}'+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} \quad (1.57)$$

Aproximația Hartree-Fock constă în liniarizarea produsului de operatori $c^\dagger c^\dagger c$, astfel încât să poată fi identificată energia particulei descrise de ecuația de mai sus prin compararea cu

forma generală a ecuației de mișcare. Pentru aceasta, trebuie ca în partea dreaptă a egalului să poată fi izolat operatorul $c_{\vec{p},\sigma}^\dagger$. Această formă a ecuației (1.57) se obține dacă produsul celor trei operatori $c^\dagger c^\dagger c$ este înlocuit cu următoarea cantitate:

$$c_1^\dagger c_2^\dagger c_3 \rightarrow c_1^\dagger \langle c_2^\dagger c_3 \rangle - c_2^\dagger \langle c_1^\dagger c_3 \rangle \quad (1.58)$$

De asemenea, se consideră următoarea relație generală pentru valoarea așteptată a produsului $c^\dagger c$:

$$\langle c_{\vec{p},\alpha}^\dagger c_{\vec{p},\beta} \rangle = \langle c_{\vec{p},\alpha}^\dagger c_{\vec{p},\alpha} \rangle \delta_{\vec{p},\vec{p}} \delta_{\alpha,\beta} = n_{\vec{p},\alpha}^0 \delta_{\vec{p},\vec{p}} \delta_{\alpha,\beta} \quad (1.59)$$

Cu aceste două relații aproximația capătă următoarea formă:

$$c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger c_{\vec{k},\sigma'} \rightarrow c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^\dagger n_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^0 \delta_{\vec{k}-\vec{q},\vec{k}} - c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger n_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^0 \delta_{\vec{p}+\vec{q},\vec{k}} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (1.60)$$

Înlocuind această expresie în ecuația de mișcare, termenul corespunzător interacțiunii devine:

$$\sum_{\sigma', \vec{k}, \vec{q}} V_{\vec{q}} c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^\dagger n_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^0 \delta_{\vec{k}-\vec{q},\vec{k}} - \sum_{\sigma', \vec{k}, \vec{q}} V_{\vec{q}} c_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^\dagger n_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^0 \delta_{\vec{p}+\vec{q},\vec{k}} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (1.61)$$

În prima sumă, simbolul Delta este nenul pentru $\vec{k} - \vec{q} = \vec{k}$, adică pentru $\vec{q} = \vec{0}$. În cea de-a doua sumă, termenii nenuli corespund lui $\vec{p} + \vec{q} = \vec{k}$, adică $\vec{q} = \vec{k} - \vec{p}$. Astfel, expresia termenului de interacțiune devine:

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{k}, \sigma'} V_0 c_{\vec{p},\sigma}^\dagger n_{\vec{k},\sigma'}^0 - \sum_{\vec{k}, \sigma'} V_{\vec{k}-\vec{p}} c_{\vec{p},\sigma}^\dagger n_{\vec{k},\sigma'}^0 \delta_{\sigma,\sigma'} = \\ & = \sum_{\vec{k}, \sigma'} n_{\vec{k},\sigma'}^0 (V_0 - V_{\vec{p}-\vec{k}} \delta_{\sigma,\sigma'}) c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \end{aligned} \quad (1.62)$$

Revenind înapoi la ecuația de mișcare, de partea dreaptă a egalului se poate izola acum operatorul $c_{\vec{p},\sigma}^\dagger$, iar rezultatul obținut este următorul:

$$\left[H, c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \right] = \left(\varepsilon_{\vec{p}}^0 + \sum_{\vec{k}, \sigma'} n_{\vec{k},\sigma'}^0 (V_0 - V_{\vec{p}-\vec{k}} \delta_{\sigma,\sigma'}) \right) c_{\vec{p},\sigma}^\dagger \quad (1.63)$$

Aici se identifică energia totală a particulei, compusă din energia cinetică, $\varepsilon_{\vec{p}}^0 = \frac{p^2}{2m}$, și cea de interacțiune:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\vec{p}} &= \varepsilon_{\vec{p}}^0 + \sum_{\vec{k}, \sigma'} n_{\vec{k},\sigma'}^0 (V_0 - V_{\vec{p}-\vec{k}} \delta_{\sigma,\sigma'}) \\ &= \varepsilon_{\vec{p}}^0 + V_0 \sum_{\vec{k}, \sigma'} n_{\vec{k},\sigma'}^0 - \sum_{\vec{k}, \sigma'} V_{\vec{p}-\vec{k}} n_{\vec{k},\sigma'}^0 \delta_{\sigma,\sigma'} \end{aligned} \quad (1.64)$$

Al doilea termen din expresia obținută este termenul Hartree și reprezintă energia medie de interacțiune a particulei cu toate celelalte particule din sistem. Acesta este o constantă și

este absorbit în potențialul chimic. Termenul al treilea este termenul Fock, corespunzător energiei de schimb. Mai departe, se face următoarea considerație:

$$n_{\vec{k},\sigma'}^0 = \begin{cases} 1, & k < p_F \\ 0, & k > p_F \end{cases} \quad (1.65)$$

Astfel, considerând și termenul Hartree absorbit în expresia potențialului chimic, energia $\varepsilon_{\vec{p}}$ devine:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}}^0 - \sum_{\vec{k}, k < p_F} V_{\vec{p}-\vec{k}} \quad (1.66)$$

Aici se ține cont de formula de trecere de la suma după \vec{k} la integrală:

$$\sum_{\vec{k}} (\dots) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k (\dots) \quad (1.67)$$

Cu această informație, se găsește expresia energiei particulei în interacțiune cu sistemul de multe particule în aproximația Hartree-Fock:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \int_{(k < p_F)} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} V_{\vec{p}-\vec{k}} \quad (1.68)$$

2 Interacțiuni non-Coulomb în lichide Fermi 3D

2.1 Calculul transformatei Fourier a potențialului

În cadrul aproximației Hartree-Fock, energia unei particule cu impulsul \vec{p} , în interacțiune cu un sistem de multe particule prin potențialul $V(\vec{r})$ al interacțiunii între două particule individuale, este dată de expresia:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \int_{(k < p_F)} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} V_{\vec{p}-\vec{k}} \quad (2.1)$$

unde $V_{\vec{p}-\vec{k}}$ este transformata Fourier a potențialului $V(\vec{r})$:

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \int d^3r \cdot V(\vec{r}) \cdot e^{-i(\vec{p}-\vec{k})\vec{r}} \quad (2.2)$$

Conform notațiilor din Figura 2.1, se explicitază forma lui $V_{\vec{p}-\vec{k}}$:

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \int d^3r \cdot V(\vec{r}) \cdot e^{-ipr \cos \theta} e^{ikr \cos \gamma} \quad (2.3)$$

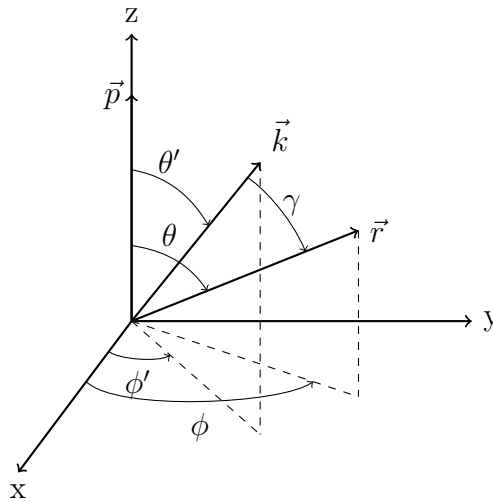


Figura 2.1: Aranjarea vectorilor implicați în calculul transformatei Fourier a potențialului

În Figura 2.1 se observă că vectorul \vec{p} s-a luat de-a lungul axei verticale z. Această alegere este justificată dacă aruncăm o privire la expresiile (2.1), respectiv (2.2). Se observă că integralele după k și r se fac pentru toate valorile coordonatelor unghiulare. Astfel, oricum ar fi orientat \vec{p} , prin integrare se vor obține toate configurațiile posibile ale celor trei vectori, ceea ce permite alinierea lui \vec{p} cu axa z.

Mai departe sunt folosite dezvoltările de forma:

$$e^{\pm iqr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (\pm i)^l (2l+1) P_l(\cos \theta) j_l(q \cdot r) \quad (2.4)$$

unde $P_l(\cos \theta)$ sunt polinoamele Legendre de ordin l , iar $j_l(q \cdot r)$ sunt funcțiile Bessel sferice de prima speță. Aceste dezvoltări sunt introduse în expresia (2.3) cu indici de sumare diferiți pentru cele două exponențiale (l, l') și sunt interschimbate sumele cu integralele. De asemenea, se consideră că potențialul are simetrie sferică, $V(\vec{r}) = V(r)$:

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \sum_{l,l'=0}^{\infty} (-1)^l i^{l+l'} (2l+1)(2l'+1) \int_0^{\infty} dr r^2 \cdot V(r) j_l(p \cdot r) j_{l'}(k \cdot r) \int_0^{2\pi} d\phi \cdot \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \gamma) \quad (2.5)$$

Mai departe se consideră următoarea scriere:

$$P_{l'}(\cos \gamma) = P_{l'}(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta') + 2 \sum_{m=1}^{l'} \frac{(l'-m)!}{(l'+m)!} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^m(\cos \theta') \cdot \cos[m(\phi - \phi')] \quad (2.6)$$

Introducând această dezvoltare în expresia (2.5), se observă că se poate izola următorul termen multiplicativ corespunzător termenului al doilea din (2.6):

$$\int_0^{2\pi} d\phi \cos[m(\phi - \phi')] = 0 \quad (2.7)$$

Astfel, $V_{\vec{p}-\vec{k}}$ devine:

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = 2\pi \sum_{l,l'=0}^{\infty} (-1)^l i^{l+l'} (2l+1)(2l'+1) \int_0^{\infty} dr r^2 \cdot V(r) j_l(p \cdot r) j_{l'}(k \cdot r) P_{l'}(\cos \theta') \cdot \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \quad (2.8)$$

Aici se folosește relația de ortogonalitate pentru polinoamele Legendre:

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin \theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{l,l'} \quad (2.9)$$

Având în vedere acțiunea simbolului δ al lui Kronecker în interiorul sumei duble, $V_{\vec{p}-\vec{k}}$ se aduce la următoarea formă:

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \sum_{l=0}^{\infty} 4\pi \int_0^{\infty} dr r^2 \cdot V(r) j_l(p \cdot r) j_l(k \cdot r) (2l+1) P_l(\cos \theta') \quad (2.10)$$

Mai departe se face următoarea notație:

$$V_l(p, k) = 4\pi(2l+1) \int_0^{\infty} dr r^2 \cdot V(r) j_l(p \cdot r) j_l(k \cdot r) \quad (2.11)$$

Cu care:

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \sum_{l=0}^{\infty} V_l(p, k) P_l(\cos \theta') \quad (2.12)$$

Cu aceste informații se revine în expresia (2.1) a energiei Hartree-Fock, forma exactă a transformatei Fourier a potențialului nefiind de interes în cazul de față. Forma intermediară (2.10) obținută este suficientă pentru a calcula $\varepsilon_{\vec{p}}$.

2.2 Energia Hartree-Fock a unei particule

Revenind la expresia (2.1) cu cele găsite înainte:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\vec{p}} &= \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{p_F} dk \int_0^\pi d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' \cdot k^2 \cdot \sin \theta' \sum_{l=0}^{\infty} V_l(p, k) P_l(\cos \theta') \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} \int_0^{p_F} dk k^2 \cdot V_l(p, k) \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' P_l(\cos \theta')\end{aligned}\quad (2.13)$$

Aici se folosește următoarea proprietate a polinoamelor Legendre, provenită din relația de ortogonalitate:

$$\int_0^\pi d\theta' \sin \theta' P_l(\cos \theta') = \begin{cases} 0, & l > 0 \\ 2, & l = 0 \end{cases}\quad (2.14)$$

Astfel, în expresia (2.13) vor rămâne doar termenii corespunzători lui $l = 0$:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{p_F} dk k^2 \cdot V_0(p, k)\quad (2.15)$$

Înlocuind expresia lui $V_0(p, k)$:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dr r^2 \cdot V(r) j_0(p \cdot r) \int_0^{p_F} dk k^2 \cdot j_0(k \cdot r)\quad (2.16)$$

În continuare, se folosește legătura dintre funcțiile Bessel sferice de speța întâi și funcțiile Bessel de speța întâi, cu care se prelucrează integrala după k :

$$j_\nu(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{\nu+\frac{1}{2}}(z)\quad (2.17)$$

Astfel:

$$\int_0^{p_F} dk k^2 \cdot j_0(k \cdot r) = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \int_0^{p_F} dk k^{3/2} J_{1/2}(k \cdot r)\quad (2.18)$$

Aici se folosește relația:

$$\int dx x^{p+1} J_p(x) = x^{p+1} J_{p+1}(x)\quad (2.19)$$

Cu care:

$$\int_0^{p_F} dk k^{3/2} J_{1/2}(k \cdot r) = \frac{p_F^{3/2}}{r} J_{3/2}(p_F \cdot r)\quad (2.20)$$

Punând aceste informații împreună, se rescrie expresia lui $\varepsilon_{\vec{p}}$:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot p_F^{3/2} \int_0^\infty dr r^{1/2} V(r) j_0(p \cdot r) J_{3/2}(p_F \cdot r)\quad (2.21)$$

Acum este din nou folosită legătura între funcțiile Bessel sferice de speța întâi și funcțiile Bessel de speța întâi. De asemenea, se particularizează expresia potențialului: $V(r) = A \cdot r^{-\eta}$,

unde A este o constantă care asigură dimensiunea potrivită a potențialului. Se observă că pentru $\eta = 1$ se regăsește cazul interacțiunii Coulombiene. Astfel:

$$\varepsilon_{\bar{p}} = \frac{p^2}{2m} - A \left(\frac{p_F^3}{p} \right)^{1/2} \int_0^\infty dr r^{-\eta} J_{1/2}(p \cdot r) J_{3/2}(p_F \cdot r) \quad (2.22)$$

Integrala de mai sus se calculează analitic cu restricția $\eta \in (0; 3)$, pe trei domenii de valori disjuncte ale lui p : $p < p_F$, $p = p_F$, și $p > p_F$. Pentru aceasta se folosesc trei formule diferite de calcul al integralei din (2.22), corespunzătoare celor trei domenii de valori ale lui p :

$$\int_0^\infty dt J_\nu(\alpha t) J_\mu(\beta t) t^{-\lambda} = \frac{\alpha^\nu \Gamma\left(\frac{\nu+\mu-\lambda+1}{2}\right)}{2^\lambda \beta^{\nu-\lambda+1} \Gamma\left(\frac{-\nu+\mu+\lambda+1}{2}\right) \Gamma(\nu+1)} \cdot F\left(\frac{\nu+\mu-\lambda+1}{2}, \frac{\nu-\mu-\lambda+1}{2}, \nu+1, \frac{\alpha^2}{\beta^2}\right) \quad (2.23)$$

[$\text{Re}(\nu + \mu - \lambda + 1) > 0$, $\text{Re}\lambda > -1$, $0 < \alpha < \beta$]

$$\int_0^\infty dt J_\nu(\alpha t) J_\mu(\alpha t) t^{-\lambda} = \frac{\alpha^{\lambda-1} \Gamma(\lambda) \Gamma\left(\frac{\nu+\mu-\lambda+1}{2}\right)}{2^\lambda \Gamma\left(\frac{-\nu+\mu+\lambda+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu+\mu+\lambda+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu-\mu+\lambda+1}{2}\right)} \quad (2.24)$$

[$\text{Re}(\nu + \mu + 1) > \text{Re}\lambda > 0$, $\alpha > 0$]

$$\int_0^\infty dt J_\nu(\alpha t) J_\mu(\beta t) t^{-\lambda} = \frac{\beta^\mu \Gamma\left(\frac{\mu+\nu-\lambda+1}{2}\right)}{2^\lambda \alpha^{\mu-\lambda+1} \Gamma\left(\frac{\nu-\mu+\lambda+1}{2}\right) \Gamma(\mu+1)} \cdot F\left(\frac{\nu+\mu-\lambda+1}{2}, \frac{-\nu+\mu-\lambda+1}{2}, \mu+1, \frac{\beta^2}{\alpha^2}\right) \quad (2.25)$$

[$\text{Re}(\nu + \mu - \lambda + 1) > 0$, $\text{Re}\lambda > -1$, $0 < \beta < \alpha$]

Aici, $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ reprezintă funcțiile Hipergeometrice. Cu aceste formule se găsesc expresiile lui $\varepsilon_{\bar{p}}$ pe domeniile de valori menționate anterior:

$$\varepsilon_{\bar{p}} = \begin{cases} \frac{p^2}{2m} - A \cdot p_F^\eta \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \cdot F\left(\frac{3-\eta}{2}, \frac{-\eta}{2}, \frac{3}{2}, \frac{p^2}{p_F^2}\right), & p < p_F \\ \frac{p_F^2}{2m} - A \cdot p_F^\eta \cdot \frac{\Gamma(\eta) \Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)}, & p = p_F \\ \frac{p^2}{2m} - A \cdot p_F^3 p^{\eta-3} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} \cdot F\left(\frac{3-\eta}{2}, \frac{2-\eta}{2}, \frac{5}{2}, \frac{p_F^2}{p^2}\right), & p > p_F \end{cases} \quad (2.26)$$

O observație care merită făcută în acest punct este aceea că în calculele de până acum nu apare în mod explicit concentrația de particule din sistem, care intuitiv ar trebui să aibă o influență asupra energiei particulelor. În formulele de mai sus, concentrația este prezentă în mod indirect, prin intermediul lui p_F .

Folosind aceste expresii, se poate reprezenta grafic dependența energiei $\varepsilon_{\vec{p}}$ de impulsul p . Deși în acest moment nu este evident, este utilă reprezentarea lui $\varepsilon_{\vec{p}}$ în două cazuri: $\eta < 1$ și $\eta > 1$. Aceste cazuri corespund unui potențial de interacțiune de rază mai lungă, respectiv mai scurtă decât cel Coulombian. Diferența între cele două situații va deveni clară în calculul densității de stări a sistemului. Dependența lui $\varepsilon_{\vec{p}}$ de raportul p/p_F este redată în Figura 2.2.

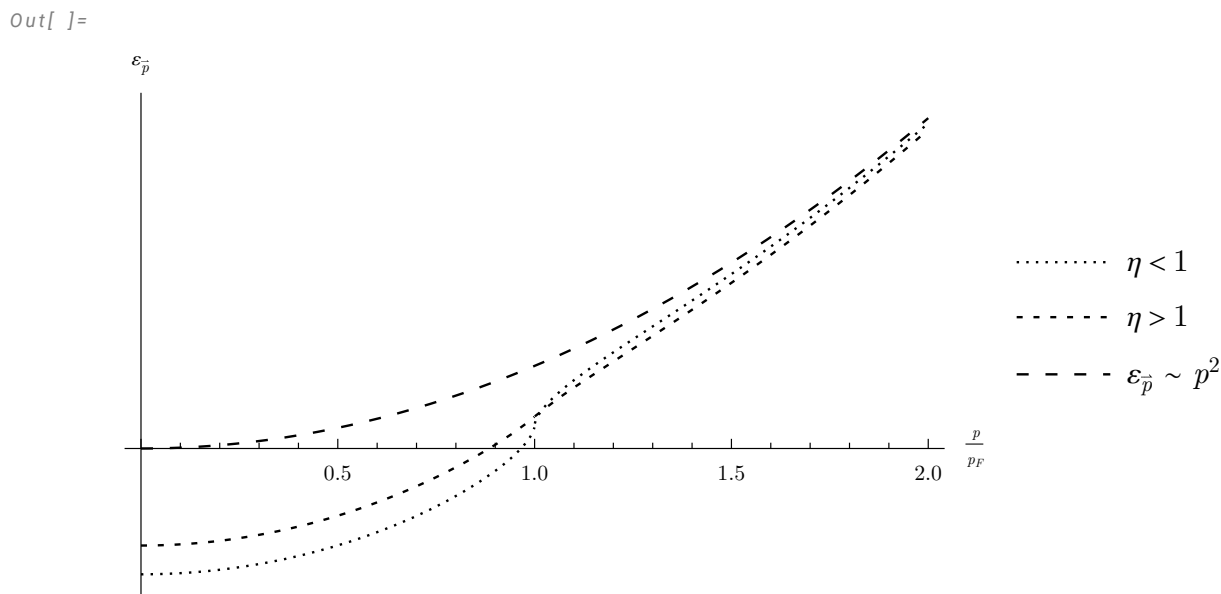


Figura 2.2: Dependența energiei $\varepsilon_{\vec{p}}$ de raportul p/p_F

Aici se poate observa cum atât în cazul $\eta < 1$, cât și pentru $\eta > 1$, pentru valori mari ale impulsului, energia se comportă ca o funcție pătratică, $\varepsilon_{\vec{p}} \sim p^2$. Această dependență nu este dificil de văzut ținând cont de expresia energiei pentru valori mai mari decât p_F ale impulsului din (2.26). Pentru $p \rightarrow \infty$, cel de-al patrulea argument al funcției Hipergeometrice tinde la 0, astfel că întreaga funcție F tinde la 1. Aceasta se poate vedea din scrierea sub formă de serie a funcției Hipergeometrice. De asemenea, ținând cont de restricția stabilită anterior, $\eta < 3$, puterea $\eta - 3$ a impulsului din partea de interacțiune a energiei va fi mai mică decât 0, ceea ce anulează întregul termen corespunzător interacțiunii la valori mari ale lui p . Astfel, din expresia energiei va rămâne dependența de p^2 pentru valori mari ale impulsului.

2.3 Energia Hartree-Fock a sistemului de multe particule la 0 K

Acest calcul se face în considerația $T = 0$ K, pentru fermioni cu două orientări posibile ale spinului (de exemplu electroni). Astfel, conform statisticii Fermi-Dirac, impulsul particulelor va fi mai mic sau egal decât p_F , deci din setul (2.26) se va folosi prima expresie pentru $\varepsilon_{\vec{p}}$, din care se preia partea corespunzătoare interacțiunii între particule, adică termenul negativ care

conține funcția Hipergeometrică. Acesta se notează cu $\varepsilon_{\vec{p},\text{sch}}$. Energia totală a sistemului este notată cu E_{HF} .

$$E_{\text{HF}} = \sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{\vec{p}}^0 n_{\vec{p},\sigma}^0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{\vec{p},\text{sch}} n_{\vec{p},\sigma}^0 \quad (2.27)$$

Aici, $\varepsilon_{\vec{p}}^0$ este componenta cinetică a energiei, $\frac{p^2}{2m}$, iar $n_{\vec{p},\sigma}^0$ este numărul de particule în starea de impuls \vec{p} și spin σ , și anume 1 conform statisticii Fermi-Dirac la $T = 0$ K. Factorul $1/2$ apare pentru a evita numărarea dublă a aceleiași interacții. Mai departe, se face trecerea de la sume la integrale. Prima sumă devine:

$$\sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{\vec{p}}^0 n_{\vec{p},\sigma}^0 = 2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \cdot \frac{p^2}{2m} \quad (2.28)$$

Lucrând în coordonate sferice, din partea unghiulară a integralei rezultă un factor 4π . Integrala radială după p se face între limitele 0 și p_{F} . Astfel:

$$\sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{\vec{p}}^0 n_{\vec{p},\sigma}^0 = \frac{p_{\text{F}}^2}{2m} \cdot \frac{p_{\text{F}}^3}{5\pi^2} \quad (2.29)$$

Este util aici să se calculeze expresia numărului total de particule din sistem:

$$N = \sum_{\vec{p},\sigma} n_{\vec{p},\sigma}^0 = 2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{p_{\text{F}}^3}{3\pi^2} \quad (2.30)$$

Astfel, se poate rescrie:

$$\sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{\vec{p}}^0 n_{\vec{p},\sigma}^0 = \frac{3}{5} \cdot \frac{p_{\text{F}}^2}{2m} \cdot N \quad (2.31)$$

Mai departe, în același mod se analizează contribuția de schimb la energia totală:

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{\vec{p},\text{sch}} n_{\vec{p},\sigma}^0 = \frac{-1}{2\pi^2} \cdot A \cdot p_{\text{F}}^\eta \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \int_0^{p_{\text{F}}} dp p^2 \cdot F\left(\frac{3-\eta}{2}, \frac{-\eta}{2}, \frac{3}{2}, \frac{p^2}{p_{\text{F}}^2}\right) \quad (2.32)$$

Integrala care apare se notează cu I și se calculează separat, considerând mai întâi schimbarea de variabilă $y = p/p_{\text{F}}$:

$$I = p_{\text{F}}^3 \cdot \int_0^1 dy y^2 \cdot F\left(\frac{3-\eta}{2}, \frac{-\eta}{2}, \frac{3}{2}, y^2\right) \quad (2.33)$$

Aici se face o nouă schimbare de variabilă, $y^2 = x$, astfel încât:

$$I = \frac{1}{2} \cdot p_{\text{F}}^3 \cdot \int_0^1 dx x^{1/2} \cdot F\left(\frac{3-\eta}{2}, \frac{-\eta}{2}, \frac{3}{2}, x\right) \quad (2.34)$$

Pentru calculul integralei după x se folosește următoarea formulă:

$$\int_0^1 dx x^{\gamma-1} (1-x)^{\rho-1} F(\alpha, \beta, \gamma, x) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\rho)\Gamma(\gamma+\rho-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma+\rho-\alpha)\Gamma(\gamma+\rho-\beta)} \quad (2.35)$$

Cu aceasta, expresia lui I devine:

$$I = \frac{\sqrt{\pi}}{4} p_F^3 \cdot \frac{\Gamma(\eta + 1)}{\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\eta+5}{2}\right)} \quad (2.36)$$

Astfel, se găsește formula contribuției energiei de schimb:

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{p}, \sigma} \varepsilon_{\vec{p}, \text{sch}} n_{\vec{p}, \sigma}^0 = -3N \cdot \frac{A \cdot p_F^\eta}{2^{\eta+2}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right) \Gamma(\eta + 1)}{[\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right)]^2 \Gamma\left(\frac{\eta+5}{2}\right)} \quad (2.37)$$

Introducând rezultatele (2.31) și (2.37) în (2.27), și raportând energia totală la numărul de particule, se obține:

$$\frac{E_{\text{HF}}}{N} = \frac{3}{5} \cdot \frac{p_F^2}{2m} - \frac{3A \cdot p_F^\eta}{2^{\eta+2}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right) \Gamma(\eta + 1)}{[\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right)]^2 \Gamma\left(\frac{\eta+5}{2}\right)} \quad (2.38)$$

2.4 Aproximații pentru energia unei particule în vecinătatea nivelului Fermi

Revenind la setul de relații (2.26), se notează $y = p/p_F$. În vecinătatea lui p_F , $y \rightarrow 1$. Astfel, este de dorit o aproximație pentru funcția Hipergeometrică $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ atunci când $z \rightarrow 1$.

Aceasta se poate obține în doi pași, considerând mai întâi formula:

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} F(\alpha, \beta, \alpha + \beta - \gamma + 1, 1 - z) + (1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} \cdot \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} F(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma - \alpha - \beta + 1, 1 - z) \quad (2.39)$$

Atunci când $z \rightarrow 1$, $1 - z \rightarrow 0$, astfel în (2.39) se folosește aproximația funcției Hipergeometrice în jurul lui 0:

$$F(a, b, c, x \rightarrow 0) \approx 1 + \frac{ab}{c} \cdot x \quad (2.40)$$

Cu aceste relații se obțin aproximațiile funcțiilor Hipergeometrice din (2.26):

$$F\left(\frac{3-\eta}{2}, \frac{-\eta}{2}, \frac{3}{2}, y^2\right) \approx \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left[\frac{\Gamma(\eta)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot \mathcal{F}_1 + (1 - y^2)^\eta \cdot \frac{\Gamma(-\eta)}{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{-\eta}{2}\right)} \cdot \mathcal{F}_2 \right] \quad (2.41)$$

$$F\left(\frac{3-\eta}{2}, \frac{2-\eta}{2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{y^2}\right) \approx \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \left[\frac{\Gamma(\eta)}{\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot \mathcal{F}_3 + \left(1 - \frac{1}{y^2}\right)^\eta \cdot \frac{\Gamma(-\eta)}{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{2-\eta}{2}\right)} \cdot \mathcal{F}_4 \right] \quad (2.42)$$

unde:

$$\mathcal{F}_1 = 1 - \frac{\eta(3-\eta)}{4(1-\eta)}(1 - y^2) \quad \mathcal{F}_2 = 1 + \frac{\eta(\eta+3)}{4(1+\eta)}(1 - y^2) \quad (2.43)$$

$$\mathcal{F}_3 = 1 + \frac{(\eta-3)(\eta-2)}{4(1-\eta)} \left(1 - \frac{1}{y^2}\right) \quad \mathcal{F}_4 = 1 + \frac{(\eta+2)(\eta+3)}{4(1+\eta)} \left(1 - \frac{1}{y^2}\right) \quad (2.44)$$

Mai departe, pe baza acestora se găsesc aproximațiile lui $\varepsilon_{\vec{p}}$ în jurul lui p_F :

$$\varepsilon_{\vec{p}} \approx \frac{p^2}{2m} - A \cdot \frac{p_F^\eta}{2^\eta} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right)} \left[\frac{\Gamma(\eta)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot \mathcal{F}_1 + \left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right)^\eta \cdot \frac{\Gamma(-\eta)}{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{-\eta}{2}\right)} \cdot \mathcal{F}_2 \right], \quad p \rightarrow p_F, \quad p < p_F \quad (2.45)$$

$$\varepsilon_{\vec{p}} \approx \frac{p^2}{2m} - A \cdot \frac{p^{\eta-3} p_F^3}{2^\eta} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)} \left[\frac{\Gamma(\eta)}{\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot \mathcal{F}_3 + \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right)^\eta \cdot \frac{\Gamma(-\eta)}{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{2-\eta}{2}\right)} \cdot \mathcal{F}_4 \right], \quad p \rightarrow p_F, \quad p > p_F \quad (2.46)$$

2.5 Densitatea de stări

Expresia generală a densității de stări pentru particule cu două orientări posibile ale spinului este dată de:

$$N(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla \varepsilon_{\vec{p}}|} \quad (2.47)$$

unde $dS = p^2 \sin \theta d\theta d\phi$. Atunci, cu notația $\nabla \varepsilon_{\vec{p}} = \frac{\partial \varepsilon_{\vec{p}}}{\partial p} = v_{\vec{p}}$, rezultă:

$$N(\varepsilon) = \frac{p^2}{\pi^2 \cdot |v_{\vec{p}}|} \quad (2.48)$$

Aici, $\varepsilon_{\vec{p}}$ este dat de setul (2.26). Se observă faptul că în formula de mai sus densitatea de stări este exprimată prin intermediul impulsului. În mod obișnuit, ar trebui găsită dependența densității de stări de energia $\varepsilon_{\vec{p}}$ prin exprimarea lui p în funcție de $\varepsilon_{\vec{p}}$ din setul de relații (2.26). Aruncând o privire la Figura 2.2, se observă că $\varepsilon_{\vec{p}}$ este o funcție strict crescătoare, deci este injectivă. Pentru o alegere corectă a domeniilor de valori ale lui p și $\varepsilon_{\vec{p}}$, funcția $\varepsilon_{\vec{p}}$ este și surjectivă. Astfel, pe baza graficului, $\varepsilon_{\vec{p}}$ pare a fi o funcție bijectivă, deci ea admite o funcție inversă. Cu alte cuvinte, p ar trebui să poată fi exprimat în funcție de $\varepsilon_{\vec{p}}$.

Cu toate acestea, în practică găsirea unei forme exacte pentru relația inversă dintre p și $\varepsilon_{\vec{p}}$ se dovedește a fi o sarcină dificilă. Din acest motiv vom calcula mai departe densitatea de stări exprimată în funcție de impuls.

Pentru a calcula $v_{\vec{p}}$ este nevoie de derivatele funcțiilor Hipergeometrice care apar în expresiile (2.26). Acestea se găsesc considerând scrierea sub formă de serie a funcțiilor Hipergeometrice:

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha \cdot \beta}{\gamma \cdot 1} z + \frac{\alpha(\alpha+1) \cdot \beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1) \cdot 1 \cdot 2} z^2 + \dots \quad (2.49)$$

În această expresie se derivează în raport cu z , identificându-se apoi o nouă funcție Hipergeometrică cu noi parametri, care are un factor multiplicativ în față. De interes în calculele următoare sunt aceste formule obținute în modul tocmai prezentat:

$$\frac{\partial}{\partial p} F\left(\alpha, \beta, \gamma, \frac{p^2}{p_F^2}\right) = \frac{2\alpha\beta}{\gamma} \cdot \frac{p}{p_F^2} \cdot F\left(\alpha + 1, \beta + 1, \gamma + 1, \frac{p^2}{p_F^2}\right) \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial p} F\left(\alpha, \beta, \gamma, \frac{p_F^2}{p^2}\right) = \frac{-2\alpha\beta}{\gamma} \cdot \frac{p_F^2}{p^3} \cdot F\left(\alpha + 1, \beta + 1, \gamma + 1, \frac{p_F^2}{p^2}\right) \quad (2.51)$$

Cazul 1, $p < p_F$:

Formula generală a vitezei $v_{\bar{p}}$, valabilă pentru $p < p_F$, se obține prin derivarea în raport cu p a lui $\varepsilon_{\bar{p}}$ din setul (2.26):

$$v_{\bar{p}} = \frac{p}{m} + \frac{2}{3}A \cdot p \cdot p_F^{\eta-2} \cdot \frac{\eta \cdot \Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)}{2\eta\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \cdot F\left(\frac{5-\eta}{2}, \frac{2-\eta}{2}, \frac{5}{2}, \frac{p^2}{p_F^2}\right) \quad (2.52)$$

Cu această expresie se poate reveni în (2.48) pentru a exprima densitatea de stări ca funcție de impuls. Totuși, formula care rezultă este destul de complicată și nu transmite foarte multe informații. În finalul secțiunii, pe baza acestei formule este reprezentată grafic densitatea de stări $N(p)$ pentru $p < p_F$.

În continuare, dorim să aflăm expresia densității de stări la nivelul Fermi, deoarece pe baza acesteia se pot calcula anumite mărimi macroscopice caracteristice sistemului. Primul pas este de a găsi o expresie mai sugestivă a lui $v_{\bar{p}}$ în apropierea lui p_F decât prin înlocuirea directă a lui p în formula de mai sus. Astfel, este nevoie de aproximația funcției Hipergeometrice în jurul lui p_F , calculată în același mod ca și în secțiunea 2.4. Pentru aceasta se găsește:

$$F\left(\frac{5-\eta}{2}, \frac{2-\eta}{2}, \frac{5}{2}, \frac{p^2}{p_F^2}\right) \approx \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma(\eta-1)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot Q_1 + \left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right)^{\eta-1} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma(1-\eta)}{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{2-\eta}{2}\right)} \cdot Q_2 \quad (2.53)$$

unde:

$$Q_1 = 1 + \frac{5-\eta}{4} \left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right) \quad Q_2 = 1 + \frac{\eta+3}{4} \left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right) \quad (2.54)$$

Înlocuind înapoi în expresia lui $v_{\bar{p}}$, rezultă:

$$v_{\bar{p}} \approx \frac{p}{m} + \frac{2}{3}A \cdot p \cdot p_F^{\eta-2} \cdot \frac{\eta \cdot \Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)}{2\eta\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \cdot \left\{ \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma(\eta-1)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot Q_1 + \left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right)^{\eta-1} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\Gamma(1-\eta)}{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{2-\eta}{2}\right)} \cdot Q_2 \right\}, \quad p \rightarrow p_F \quad (2.55)$$

Aici se diferențiază două noi cazuri, corespunzătoare lui $\eta > 1$ și $\eta < 1$, comportamentul termenului $\left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right)^{\eta-1}$ fiind complet diferit în cele două cazuri. Acesta tinde fie la valoarea 0 în primul caz, fie la infinit în cel de-al doilea.

Cazul 1.1, $p < p_F$ și $\eta > 1$: Acest caz corespunde unui potențial de interacțiune de rază mai scurtă decât cel Coulombian, prin valoarea parametrului η . Aici se neglijează termenul corespunzător lui $\left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right)^{\eta-1}$, care tinde la 0 pentru $p \rightarrow p_F$, astfel că se obține, după o serie de prelucrări:

$$v_{p \rightarrow p_F} \approx \frac{p_F}{m} + A \cdot \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-1} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right) \Gamma(\eta-1)}{\left[\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\right]^2 \Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \quad (2.56)$$

Pentru a ajunge la această formă s-a folosit proprietatea funcției Gamma, $x \cdot \Gamma(x) = \Gamma(x+1)$, și de asemenea s-a ținut cont de faptul că $Q_1 \rightarrow 1$ pentru $p \rightarrow p_F$. Mai departe, înlocuind în expresia (2.48), se obține pentru densitatea de stări:

$$N(p \rightarrow p_F) \approx \frac{2p_F}{\pi^2 \cdot \left\{ \frac{2}{m} + A \cdot \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-2} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right) \Gamma(\eta-1)}{\left[\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\right]^2 \Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \right\}} \quad (2.57)$$

Cazul 1.2, $p < p_F$ și $\eta < 1$: Pentru valori ale lui η mai mici decât 1, potențialul de interacțiune este de rază mai lungă decât cel Coulombian, tăria interacțiunii scăzând mai lent cu distanța. Aici termenul dominant din expresia lui $v_{\bar{p}}$ este cel corespunzător lui $\left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right)^{\eta-1}$, care tinde la infinit. Păstrându-l doar pe acesta, $v_{\bar{p}}$ devine, după o serie de prelucrări:

$$v_{p \rightarrow p_F} \approx \frac{A \cdot \Gamma(1-\eta)}{\pi} \cdot \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-1} \cdot \sin\left(\frac{\pi\eta}{2}\right) \cdot \left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right)^{\eta-1} \quad (2.58)$$

Pentru a ajunge la rezultatul acesta s-a folosit faptul că $Q_2 \rightarrow 1$, precum și următoarea formulă pentru funcțiile Gamma:

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \frac{\pi}{\sin(\pi x)} \quad (2.59)$$

Mai departe, înlocuind în (2.48), densitatea de stări în apropierea lui p_F capătă forma:

$$N(p \rightarrow p_F) \approx \frac{p_F^{3-\eta} \cdot 2^{\eta-1}}{\pi \cdot A \cdot \Gamma(1-\eta) \cdot \left|\sin\left(\frac{\pi\eta}{2}\right)\right|} \cdot \left(1 - \frac{p^2}{p_F^2}\right)^{1-\eta} \quad (2.60)$$

Cazul 2, $p > p_F$:

Formula generală a vitezei $v_{\bar{p}}$, valabilă pentru $p > p_F$, se obține prin derivarea în raport cu p a lui $\varepsilon_{\bar{p}}$ din setul (2.26):

$$v_{\bar{p}} = \frac{p}{m} + 2A \cdot p^{\eta-4} \cdot p_F^3 \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} \cdot F\left(\frac{3-\eta}{2}, \frac{2-\eta}{2}, \frac{5}{2}, \frac{p_F^2}{p^2}\right) + \\ + \frac{2}{5} A(2-\eta) \cdot p^{\eta-6} \cdot p_F^5 \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} \cdot F\left(\frac{5-\eta}{2}, \frac{4-\eta}{2}, \frac{7}{2}, \frac{p_F^2}{p^2}\right) \quad (2.61)$$

La fel ca în cazul 1, cu această expresie se poate reveni în (2.48), rezultând o formulă complicată a densității de stări $N(p)$ pentru $p > p_F$ care nu are rost să fie dată aici. Pe baza acesteia se trasează graficul densității de stări de la finalul secțiunii pentru $p > p_F$.

Și în acest caz dorim să aflăm densitatea de stări la nivelul Fermi pentru calculul eventual al unor mărimi măsurabile specifice sistemului de față. De fapt, ne așteptăm să regăsim expresiile din cazul 1, adică ca densitatea de stări să fie continuă în p_F pentru fiecare din cele două cazuri $\eta > 1$ și $\eta < 1$. Din nou, mai întâi trebuie găsită expresia lui $v_{\vec{p}}$ în apropierea lui p_F , prin aproximarea funcțiilor Hipergeometrice de forma $F(\alpha, \beta, \gamma, z \rightarrow 1)$. Aceste aproximații sunt obținute cu cele două formule prezentate în secțiunea 2.4 și sunt date de:

$$F\left(\frac{3-\eta}{2}, \frac{2-\eta}{2}, \frac{5}{2}, \frac{p_F^2}{p^2}\right) \approx \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \left[\frac{\Gamma(\eta)}{\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot R_1 + \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right)^\eta \cdot \frac{\Gamma(-\eta)}{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{2-\eta}{2}\right)} \cdot R_2 \right] \quad (2.62)$$

$$F\left(\frac{5-\eta}{2}, \frac{4-\eta}{2}, \frac{7}{2}, \frac{p_F^2}{p^2}\right) \approx \Gamma\left(\frac{7}{2}\right) \left[\frac{\Gamma(\eta-1)}{\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot S_1 + \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right)^{\eta-1} \cdot \frac{\Gamma(1-\eta)}{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{4-\eta}{2}\right)} \cdot S_2 \right] \quad (2.63)$$

unde:

$$R_1 = 1 + \frac{(\eta-3)(\eta-2)}{4(1-\eta)} \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right) \quad R_2 = 1 + \frac{(\eta+2)(\eta+3)}{4(1+\eta)} \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right) \quad (2.64)$$

$$S_1 = 1 + \frac{(5-\eta)(4-\eta)}{4(2-\eta)} \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right) \quad S_2 = 1 + \frac{(\eta+2)(\eta+3)}{4\eta} \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right) \quad (2.65)$$

Se observă că toate cele patru funcții $R_1, R_2, S_1, S_2 \rightarrow 1$ pentru $p \rightarrow p_F$, fapt care va fi folosit pentru a simplifica expresiile vitezei și densității de stări în apropierea lui p_F . Revenind la $v_{\vec{p}}$, expresia lui va fi dată de:

$$v_{\vec{p}} \approx \frac{p}{m} + 2A \cdot p^{\eta-4} \cdot p_F^3 \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} \cdot \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \left[\frac{\Gamma(\eta)}{\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot R_1 + \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right)^\eta \cdot \frac{\Gamma(-\eta)}{\Gamma\left(\frac{3-\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{2-\eta}{2}\right)} \cdot R_2 \right] + \frac{2}{5} A (2-\eta) \cdot p^{\eta-6} \cdot p_F^5 \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} \cdot \Gamma\left(\frac{7}{2}\right) \cdot \left[\frac{\Gamma(\eta-1)}{\Gamma\left(\frac{\eta+2}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \cdot S_1 + \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right)^{\eta-1} \cdot \frac{\Gamma(1-\eta)}{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{4-\eta}{2}\right)} \cdot S_2 \right], \quad p \rightarrow p_F \quad (2.66)$$

Din nou, trebuie făcută distincția între cele două cazuri corespunzătoare lui $\eta > 1$ și $\eta < 1$: **Cazul 2.1**, $p > p_F$ și $\eta > 1$: Termenii înmulțiți cu $\left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right)^\eta$, respectiv $\left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right)^{\eta-1}$, vor tinde la 0 pentru $p \rightarrow p_F$. Atunci, din $v_{\vec{p}}$ va rămâne, după o serie de prelucrări:

$$v_{p \rightarrow p_F} \approx \frac{p_F}{m} + A \cdot \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-1} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)\Gamma(\eta-1)}{\left[\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\right]^2 \Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \quad (2.67)$$

Se observă că această expresie coincide cu cea din cazul 1.1, unde $p < p_F$ și $\eta > 1$, deci $v_{\vec{p}}$ este continuă în p_F . La fel, și pentru densitatea de stări se găsește aceeași formulă ca în cazul 1.1, deci și aceasta este continuă:

$$N(p \rightarrow p_F) \approx \frac{2p_F}{\pi^2 \cdot \left\{ \frac{2}{m} + A \cdot \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-2} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{5-\eta}{2}\right)\Gamma(\eta-1)}{[\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)]^2 \Gamma\left(\frac{\eta+3}{2}\right)} \right\}} \quad (2.68)$$

Cazul 2.2, $p > p_F$ și $\eta < 1$: Termenul dominant în acest caz va fi cel care tinde la infinit.

Expresia lui $v_{\vec{p}}$ se aproximează ca:

$$v_{p \rightarrow p_F} \approx \frac{A \cdot \Gamma(1-\eta)}{\pi} \cdot \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-1} \cdot \sin\left(\frac{\pi\eta}{2}\right) \cdot \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right)^{\eta-1} \quad (2.69)$$

Înlocuind în formula (2.48), densitatea de stări în apropierea lui p_F este:

$$N(p \rightarrow p_F) \approx \frac{p_F^{3-\eta} \cdot 2^{\eta-1}}{\pi \cdot A \cdot \Gamma(1-\eta) \cdot \left|\sin\left(\frac{\pi\eta}{2}\right)\right|} \cdot \left(1 - \frac{p_F^2}{p^2}\right)^{1-\eta} \quad (2.70)$$

Se observă deci că și pentru $\eta < 1$ densitatea de stări este continuă în $p = p_F$, tinzând la 0.

Faptul că pentru interacțiunea de rază lungă în $p = p_F$ viteza este infinită, iar densitatea de stări este nulă este nerealist. Pentru a obține valori finite, respectiv nenule ale acestor mărimi ar trebui luate în considerare efectele de ecranare ale interacțiunii de rază lungă, însă aceasta depășește scopul lucrării de față.

Oricum, rezultatele obținute pentru interacțiunea de rază scurtă, cu $\eta > 1$, indică spre direcția corectă. Mai exact, efectele de ecranare reduc raza de interacțiune, iar rezultatul total este similar cu un potențial în mod intrinsec de distanță mai scurtă. Astfel, se poate intui că, la fel ca în cazul interacțiunii de rază scurtă, atunci când sunt luate în considerare efectele de ecranare pentru potențialul de rază lungă, viteza și densitatea de stări în p_F devin finite și nenule.

În finalul acestei secțiuni sunt prezentate graficele vitezei $v_{\vec{p}}$ și densității de stări $N(p)$ obținute din expresiile (2.52) și (2.61) pentru viteza, la care se adaugă și (2.48) pentru reprezentarea densității de stări.

În Figura 2.3 se regăsește comportamentul divergent al vitezei în jurul lui p_F pentru $\eta < 1$ dat de expresiile (2.58) și (2.69), ceea ce conduce la densitatea de stări nulă din Figura 2.4. În cazul $\eta > 1$, conform (2.56) și (2.67), viteza este finită în p_F , ceea ce duce la o densitate de stări nenulă în p_F .

De asemenea, în Figura 2.3 se observă că pentru valori mari ale lui p , viteza $v_{\vec{p}}$ are un comportament liniar, atât în cazul $\eta < 1$, cât și în cazul $\eta > 1$. Aceasta se poate vedea din expresia (2.61), ținând cont de faptul că pentru valori mari ale lui p funcțiile Hipergeometrice tind la 1, iar $p^{\eta-4}$ și $p^{\eta-6}$ tind la 0 datorită restricției impuse în secțiunea 2.2, $\eta < 3$.

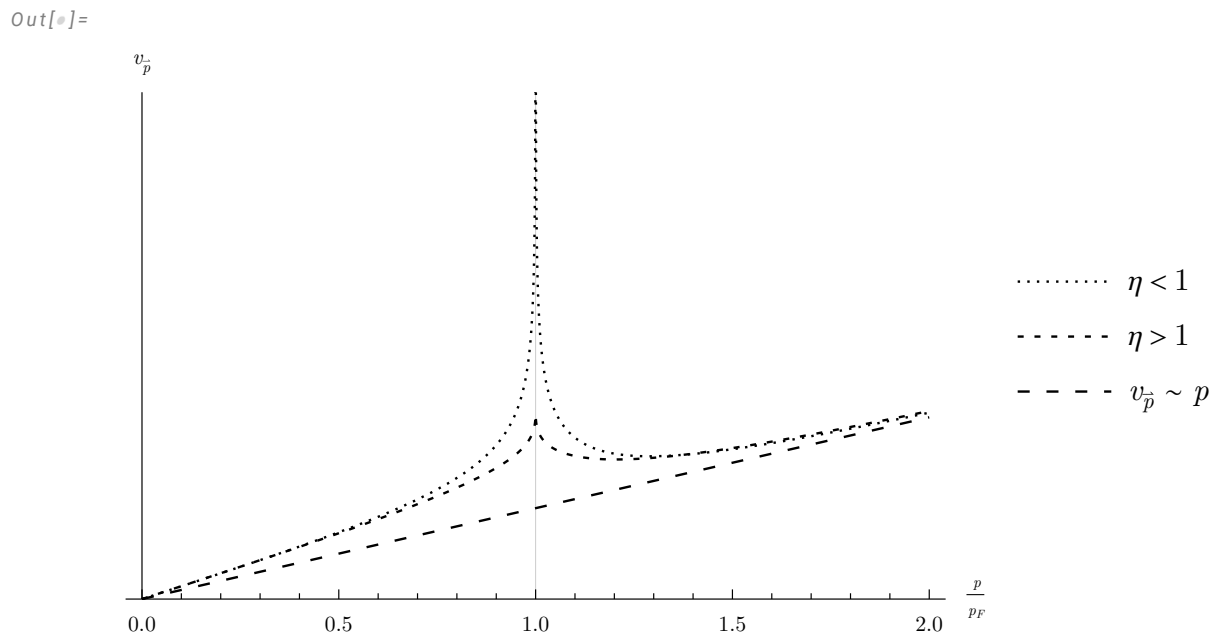


Figura 2.3: Dependența vitezei $v_{\vec{p}}$ de raportul p/p_F

În Figura 2.4 se poate vedea că densitatea de stări $N(p)$ are, de asemenea, un comportament liniar pentru valori mari ale impulsului. Din expresia (2.48) se cunoaște că $N(p) \sim \frac{p^2}{|v_{\vec{p}}|}$, iar cum $v_{\vec{p}} \sim p$, rezultă că și $N(p) \sim p$.

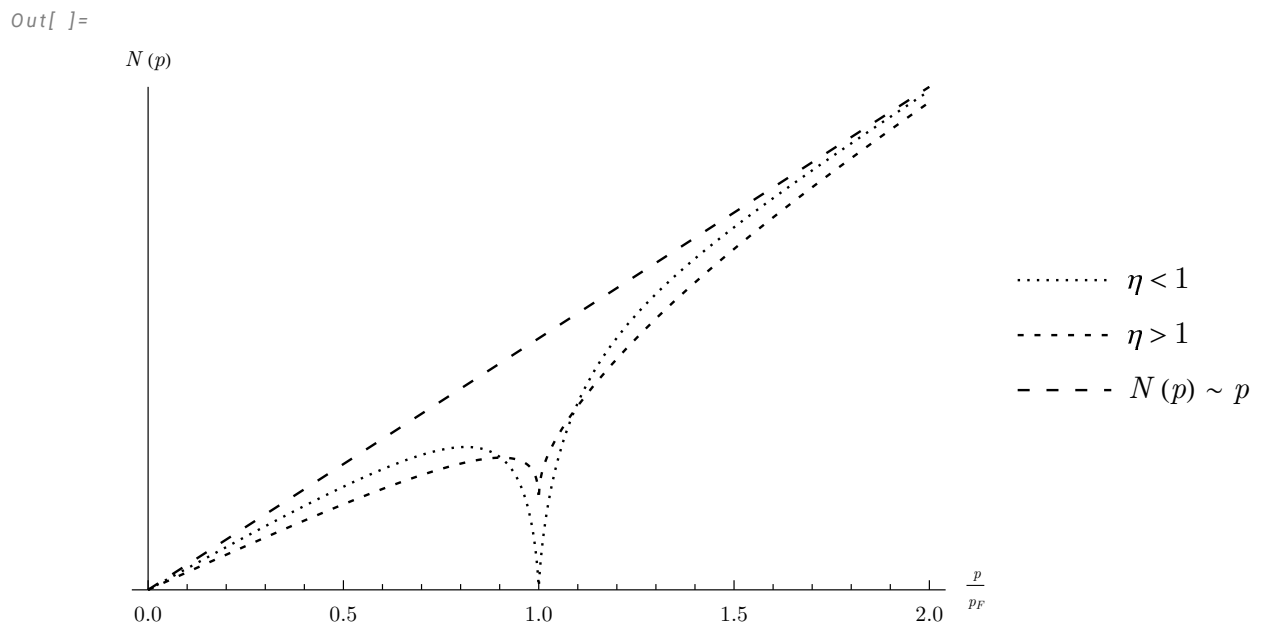


Figura 2.4: Dependența densității de stări $N(p)$ de raportul p/p_F

Concluzii

În cadrul lucrării de față s-au găsit o serie de informații noi în legătură cu sistemele tridimensionale de mulți fermioni în care interacțiunile dintre aceștia sunt de rază fie mai lungă, fie mai scurtă decât cea Coulombiană. Aceste rezultate și-ar putea găsi aplicația în studiul anumitor structuri semiconductoare sau al gazelor atomice și moleculare ultra-reci. Concret, pe baza formalismului cuantificării a doua și a metodei ecuației de mișcare a lui Heisenberg, alături de aproximația Hartree-Fock, au fost calculate: energia unei particule în sistemul de mulți fermioni, energia întregului sistem la 0 K, precum și densitatea de stări, atât ca formă generală pe întreg domeniul de valori ale impulsului, cât și punctual la nivelul Fermi. De asemenea, s-au găsit și o serie de rezultate secundare: forma intermediară a transformatei Fourier a potențialului non-Coulomb, împreună cu aproximații pentru energia unei particule în jurul lui p_F .

În ceea ce privește punerea în aplicare a celor obținute, calculele ar putea fi continuate în diferite direcții. Pe de o parte, pe baza densității de stări ar fi posibil calculul energiei sistemului de mulți fermioni la orice temperatură. Aceasta s-ar face prin integrarea după impuls între 0 și infinit a densității de stări înmulțite cu funcția Fermi-Dirac și energia $\varepsilon_{\vec{p}}$. În practică, aceasta ar fi o problemă dificilă pentru a fi rezolvată analitic, însă cu ajutorul calculatorului dependența s-ar putea găsi numeric. Odată ce acest rezultat este cunoscut, nu ar trebui să fie prea greu de calculat capacitatea calorică a sistemului, o mărime macroscopică măsurabilă, prin derivarea energiei interne în raport cu temperatura. Alte cantități potențial calculabile sunt compresibilitatea sistemului, precum și susceptibilitatea magnetică. Acestea se pot calcula pornind de la expresia densității de stări la nivelul Fermi, pe baza unor formule prezentate în cartea [6].

Bibliografie

- [1] A.M. Gabovich, M.S. Li, H. Szymczak, A.I. Voitenko, *Non-Coulombic behavior of electrostatic charge-charge interaction in three-layer heterostructures*, Journal of Electrostatics, **102**, 2019
- [2] R. Vangara, K. Stoltzfus, M.R. York, F. van Swol, D.N. Petsev, *Coulombic and non-Coulombic effects in charge-regulating electric double layers*, Materials Research Express, **6**, 2019
- [3] N. Defenu, A. Lerose, S. Pappalardi, *Out-of-equilibrium dynamics of quantum many-body systems with long-range interactions*, arXiv:2307.04802v1, 2023
- [4] L. Radzihovsky, J. Toner, *Coulomb universality*, arXiv:2401.04761v1, 2024
- [5] I. Țifrea, I. Grosu, M. Crișan, *Metode cuantice pentru studiul sistemelor cu multe particule. Aplicații la sisteme fermionice și bosonice*, Presa Universitară Clujeană, Cluj-Napoca, 2005
- [6] D. Pines, P. Nozières, *Theory of Quantum Liquids, Volume I: Normal Fermi Liquids*, Westview Press, 1994
- [7] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Seventh Edition, Elsevier, 2007

DECLARAȚIE PE PROPRIE RĂSPUNDERE

Subsemnatul, Ene Vlad-Mihai, declar că lucrarea de licență/diplomă/disertație pe care o voi prezenta în cadrul examenului de finalizare a studiilor la Facultatea de Fizică, din cadrul Universității Babeș-Bolyai, în sesiunea iulie 2024, sub îndrumarea Prof. Dr. Grosu Ioan, reprezintă o operă personală. Menționez că nu am plagiat o altă lucrare publicată, prezentată public sau un fișier postat pe Internet. Pentru realizarea lucrării am folosit exclusiv bibliografia prezentată și nu am ascuns nici o altă sursă bibliografică sau fișier electronic pe care să le fi folosit la redactarea lucrării.

Prezenta declarație este parte a lucrării și se anexează la aceasta.

Data,

14.06.2024

Numele,

Ene Vlad-Mihai