

UNIVERSITATEA “BABEȘ-BOLYAI” CLUJ-NAPOCA
FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZAREA FIZICĂ

LUCRARE DE LICENȚĂ

Coordonator științific

Prof. dr. Grosu Ioan

Absolvent

Lianu Ilinca

Cluj-Napoca

2024



UNIVERSITATEA „BABEŞ-BOLYAI” CLUJ-NAPOCA



FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZAREA FIZICĂ

LUCRARE DE LICENŢĂ

**Studiul sistemelor fermionice bidimensionale în
aproximația Hartree-Fock**

Coordonator științific

Prof. dr. Grosu Ioan

Absolvent

Lianu Ilinca

Cluj-Napoca

2024

Cuprins

Abstract	3
Rezumat.....	4
Introducere	5
Capitolul 1	
Cuantificarea a doua.....	7
Capitolul 2	
Interacțiunea biparticulă	14
Capitolul 3	
Metoda ecuației de mișcare.....	18
Capitolul 4	
Aproximația Hartree-Fock.....	21
Capitolul 5	
Studiul unui gaz fermionic bidimensional, cu interacțiuni long-range	25
5.1. Calculul energiei totale Hartree-Fock pentru un sistem fermionic 2D.....	25
5.2. Calculul vitezei fermionilor din stările de impuls \vec{p}	32
5.3. Calculul Densității de stări în apropierea suprafeței fermi	34
Concluzii	41
Bibliografie.....	43

Abstract

In this work, we aim to study two-dimensional fermionic systems where long-range interactions are present, using the Hartree-Fock approximation method. The study presented includes the theoretical foundation for calculating relevant quantities for the systems studied, as well as the methodology used to obtain these results.

The theoretical framework on which this work is based encompasses the basic concepts of second quantization, where operators and state spaces are quantized, introducing fermionic creation and annihilation operators, which are highly useful in the mathematical conversion of complex quantum physics phenomena. With the help of these operators, we mathematically describe the interaction between electrons in condensed matter, specifically the two-particle interaction potential, which we will subsequently use to write the system's Hamiltonian and determine certain characteristic physical quantities.

All calculations were performed using the Hartree-Fock approximation, which reduces the complexity of the calculations by making the following approximations: the total wave function of a system of N fermions is approximated by a Slater determinant, and the interactions between particles can be described by an average potential, assuming that fluctuations around the average value can be neglected. This latter approximation leads to the simplification of the Hamiltonian and implicitly of the equations of motion that describe the system.

Using this method, we calculated the total energy of the system, the fermion velocity as a function of their momentum, and the density of states near the Fermi momentum, also dependent on momentum. The results of the calculations are particularly useful in determining the electronic, magnetic, and thermal properties of quantum systems. These results can have applications in the design of new materials and the understanding of advanced quantum phenomena.

The mathematical relationships we derived demonstrate that the interactions between electrons in a material influence the physical quantities we determined and, implicitly, the physical properties of the material. The dependence of the density of states on the fermion momentum for different interactions qualitatively agrees with recent specialized studies that have used other methods to determine these quantities, confirming the efficiency and utility of our method.

Rezumat

În lucrarea de față ne-am propus studiul sistemelor fermionice bidimensionale, unde sunt prezente interacțiuni de tipul long-range, folosindu-ne de metoda de aproximație Hartree-Fock. Studiul prezentat cuprinde baza teoretică pentru realizarea calculelor mărimilor relevante sistemelor studiate, dar și metodologia utilizată pentru obținerea acestor rezultate.

Partea teoretică pe care se bazează elaborarea acestei lucrări cuprinde noțiunile de bază ale cuantificării a doua în care operatorii și spațiile de stare se cuantifică, introducând operatorii de creere și de anihilare fermionici, atât de utili în convertirea matematică a fenomenelor fizicii cuantice complexe. Cu ajutorul acestor operatori, se descrie matematic interacțiunea dintre electronii din materia condensată, mai precis potențialul de interacțiune biparticulă, pe care noi îl vom utiliza în continuare pentru scrierea hamiltonianului sistemului și ulterior pentru determinarea anumitor mărimi fizice caracteristice.

Toate calculele au fost realizate în aproximația Hartree-Fock, care reduce complexitatea calculelor, făcând următoarele aproximații: funcția de undă totală a unui sistem de N fermioni este aproximată cu un determinant de timp Slater, iar interacțiunile dintre particule pot fi descrise printr-un potențial mediu, presupunând că fluctuațiile din jurul valorii medii pot fi neglijate. Această ultimă aproximație duce la simplificarea hamiltonianului și implicit a ecuațiilor de mișcare care descriu sistemul.

Folosind această metodă, am calculat energia totală a sistemului, viteza fermionilor în funcție de impulsul acestora și densitatea de stări în apropierea impulsului fermi dependentă de asemenea de impuls. Rezultatele calculelor sunt deosebit de utile în determinarea proprietăților electronice, magnetice și termice ale sistemelor cuantice. Aceste rezultate pot avea aplicații în proiectarea de materiale noi și înțelegerea fenomenelor cuantice avansate.

Relațiile matematice la care am ajuns demonstrează faptul că interacțiunile între electronii dintr-un material influențează mărimile fizice pe care le-am determinat și, implicit, comportamentul proprietățile fizice ale acestuia.

Dependența densității de stări de impulsurile fermionilor pentru diferite interacțiuni sunt în concordanță din punct de vedere calitativ cu lucrările de specialitate recente, în care s-au utilizat alte metode de determinare a acestor mărimi, iar acest lucru ne confirmă eficiența și utilitatea metodei noastre.

Introducere

În ultimele decenii, progresele rapide în fizica materiei condensate au permis o înțelegere mai profundă a comportamentului sistemelor cuantice complexe. Printre acestea, sistemele fermionice bidimensionale au atras atenția datorită aplicațiilor lor potențiale în tehnologii avansate, cum ar fi computerele cuantice și materialele topologice. Studiul acestor sisteme necesită abordări teoretice sofisticate, pentru a descrie cu acuratețe interacțiunile și dinamica particulelor.

Prezenta lucrare se concentrează pe analiza unui sistem fermionic bidimensional în care avem interacțiuni de tipul long-range, folosind aproximația Hartree-Fock, un instrument esențial pentru studiul interacțiunilor particulelor într-un cadru cuantic. Aproximația Hartree-Fock este bine-cunoscută pentru capacitatea sa de a trata efectele de schimb și corelație în sisteme fermionice, oferind astfel o bază solidă pentru investigarea proprietăților de echilibru și a dinamicii neechilibrului în aceste sisteme.

Această lucrare cuprinde o prezentare a formalismului matematic de bază utilizat în realizarea calculelor unor mărimi fizice importante pentru sistemul nostru. Frumusețea tematicii acestei lucrări constă în puterea uimitoare a aparatului matematic de a descrie fenomenele fizice complexe, greu de modelat și intuit prin oricare alte mijloace.

Am prezentat principalele noțiuni din cuantificarea a doua introducând operatorii de creere și distrugere fermioni, care ulterior au fost utilizați în metoda ecuației de mișcare și în scrierea hamiltonianului unui sistem de N fermioni între care avem interacțiuni. Liniarizând un produs de operatori din ecuația de mișcare am ajuns la aproximația Hartree-Fock de care ne-am folosit pentru calculele următoare.

Studiile recente în domeniul fizicii materiei condensate au evidențiat importanța interacțiunilor long-range în comportamentul sistemelor cuantice. De exemplu, cercetări recente au arătat că în sisteme cu interacțiuni long-range, dinamica neechilibrului poate prezenta fenomene unice, cum ar fi răspândirea non-balistică a corelațiilor și încetinirea neașteptată a dinamicii entanglementului. Aceste descoperiri subliniază faptul că interacțiunile long-range pot modifica fundamental proprietățile sistemelor cuantice, deschizând calea pentru noi faze ale materiei și fenomene dinamice complexe.

În particular, studiul sistemelor fermionice bidimensionale este de mare interes datorită comportamentului lor exotic și potențialului de a dezvolta noi materiale și tehnologii. Rezultatele obținute în această lucrare, inclusiv energia totală a sistemului, viteza particulelor și densitatea de stări, oferă o bază solidă pentru înțelegerea acestor sisteme. De exemplu, forma densității de stări și viteza particulelor în funcție de impuls reflectă influența puternică a interacțiunilor long-range și pot oferi informații valoroase despre mecanismele fundamentale de transport și excitare în aceste sisteme.

În concluzie, această lucrare contribuie la înțelegerea modului în care interacțiunile long-range influențează proprietățile fundamentale ale sistemelor fermionice bidimensionale. Prin utilizarea

aproximării Hartree-Fock, am reușit să obținem rezultate relevante care nu doar validează metoda utilizată, dar și oferă noi perspective asupra comportamentului cuantic al materialelor avansate.

Aceste descoperiri pot ghida cercetări viitoare și pot avea implicații semnificative în dezvoltarea de noi tehnologii bazate pe proprietățile cuantice ale materiei.

Capitolul 1. Cuantificarea a doua

În teoria cuantică a câmpului, numărul de particule este o variabilă care evoluează în timp, fapt ce ne va ajuta să reprezentăm mai ușor sistemele complexe cu mai multe particule indiscernabile cum sunt fermionii. A doua cuantificare face abstracție de identitatea individuală a electronilor, fiind o unealtă extrem de utilă în calculele matematice pentru aceste sisteme.

Prima cuantificare face legătura dintre fizica clasică, și sisteme cuantice simple, cum ar fi atomii hidrogenoizi sau molecule simple, cu puțini electroni. Aceasta se referă la cuantificarea proprietăților observabile ale unui sistem cuantic, cele care pot fi determinate experimental, cum ar fi energia, impulsul, momentul cinetic etc.

Ca limbaj matematic, se introduc operatorii care înlocuiesc variabilele clasice, în timp ce paranteza Poisson, ce leagă variabilele conjugate canonic, se înlocuiește cu ceea ce se numește comutator cuantic.

Paranteza Poisson între două funcții f și g este definită ca:

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right) \quad (1.1)$$

unde q_i sunt variabilele de poziție și p_i sunt variabilele impulsului pentru particulele din sistem, iar suma se face pentru toate particulele. Paranteza Poisson măsoară cât de mult variază funcția f atunci când funcția g se modifică și invers.

Comutatorul cuantic este o măsură a gradului în care doi operatori nu comută între ei și este crucial în mecanica cuantică pentru a descrie relațiile de incertitudine între observabile și pentru a exprima principiul incertitudinii al lui Heisenberg.

Pentru două observabile A și B , comutatorul cuantic este definit ca:

$$[A, B] = AB - BA \quad (1.2)$$

Comutatorul cuantic ne oferă informații cu privire la cum se comportă observabilele în timp, atunci când asupra lor acționăm prin operația de “măsurare”.

Dacă comutatorul cuantic a doi operatori este zero, atunci aceștia se numesc operatori compatibili și pot fi mășurați simultan cu precizie arbitrară. Dacă comutatorul cuantic este diferit de zero, atunci există o limitare în precizia cu care cele două observabile pot fi măsurate simultan.

În tabelul 1.1 am prezentat câteva exemple pentru a vedea diferențele dintre mecanica clasică și prima cuantificare.

Mecanica clasică	Prima cuantificare în mecanica cuantică
x	\hat{x}
p	$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
E	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
$\{x, p\} = \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial x} = 1$	$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$

Tabel.1.1. Comparația mărimilor fizice din mecanica clasică cu cele din mecanica cuantică, în prima cuantificare

În ceea ce privește cuantificarea a doua, aceasta se referă la cuantificarea operatorilor și a spațiilor de stare în teoria cuantică. În acest context, operatorii matematici care reprezintă observabilele, cum ar fi energie, impuls, moment cinetic etc., sunt cuantificați. De asemenea, spațiile de stare ale sistemelor cuantice sunt cuantificate.

Cuantificarea a doua este esențială pentru formularea mecanicii statistice cuantice, care studiază comportamentul colectiv al unui număr mare de particule cuantice. Din punct de vedere matematic, cuantificarea a doua transformă câmpurile clasice în operatori de câmp.

Să presupunem un sistem de N particule indiscernabile și setul de stări uniparticulă complet ortonormat de forma $|\phi_\alpha\rangle$ unde α reprezintă prescurtarea pentru întregul set de numere cuantice reprezentative acelei stări. Astfel, putem scrie funcția de undă pentru una dintre aceste stări ca și

$$\phi_\alpha(\vec{r}, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{r}\vec{p}} \quad (1.3)$$

unde \vec{r} este coordonata particulei din sistem, aflată în această stare, σ reprezintă spinul acesteia, iar V volumul total al sistemului. Vrând să dezvoltăm o teorie care să nu țină cont de identitatea particulelor individual, trebuie să scăpăm de dependența de coordonata spațială.

Astfel, vom alege o altă bază pentru spațiul stărilor sistemului și anume considerând că sistemul poate fi descris prin specificarea numărului de particule n_α , care se află într-o stare uniparticulă α . O astfel de reprezentare permite generalizarea metodei pentru o singură particulă.

Starea din spațiul N dimensional al sistemului, va putea fi scrisă sub forma:

$$|n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle \quad (1.4.1)$$

unde n_1 este numărul de particule din starea $|\phi_1\rangle$, n_2 este numărul de particule din starea $|\phi_2\rangle$ etc.

Ne vom referi în continuare la astfel de stări (3) sub denumirea de *stări Fock*.

Să presupunem că fiecărei stări îi asociem o undă plană de impuls \vec{p} (fără a lua în considerare spinul). Atunci baza pentru spațiul stărilor sistemului poate fi scrisă:

$$|n_1, n_2, \dots, n_{\vec{p}}, \dots\rangle \quad (1.4.2)$$

$n_1, n_2, \dots, n_{\vec{p}}, \dots$ se numesc numere de ocupare și pot lua orice valoare întreagă pozitivă. Cunoașterea tuturor valorilor acestora este echivalent cu cunoașterea stării întregului sistem. Starea totală a sistemului, așadar, este un produs (simetrizat sau antisimetrizat, depinzând de felul particulelor) de unde plane, specific fiecărei particule individuale. Este trivial faptul că suma tuturor numerelor de ocupare trebuie să fie numărul total de particule din sistem N .

Se știe faptul că funcția de undă pentru bosoni trebuie să fie simetrică iar pentru fermioni antisimetrică. Așadar, numerele de ocupare pentru bosoni pot lua valorile $0, 1, 2, \dots$ adică putem avea mai multe particule în aceeași stare cuantică, dar pentru fermioni numerele de ocupare pot fi doar 0 și 1 , adică ori avem ori nu avem un electron în respectiva stare, neputând exista simultan mai mulți fermioni cu aceeași stare cuantică. Această proprietate importantă este cunoscută sub denumirea de *Principiul de excluziune a lui Pauli*.

Ceea ce este remarcabil pentru această reprezentare este faptul că stările Fock sunt vectori proprii ai observabilelor $\widehat{N}_1, \widehat{N}_2, \dots$ care măsoară numărul de particule din starea $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots$

Valorile proprii ale acestor observabile fiind în principiu măsurabile experimental, înseamnă că vectorii din spațiul Hilbert din ecuația (4) formează o bază completă ce descrie în totalitate sistemul multiparticulă.

În continuare, vom studia sistemele fermionice de N particule indiscernabile aflate în stările $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\}$.

Introducem operatorii de creere și distrugere fermionici care vor acționa asupra stării unui sistem fermionic cu scopul de a crea sau distruge o particulă dintr-o anumită stare cuantică. Acești operatori sunt cruciali în cuantificarea a doua deoarece permit studiul sistemelor cu număr variabil de particule.

Definim astfel *operatorul de creere* $a_{\vec{p}}^\dagger$ pentru starea uniparticulă $|\phi_\alpha\rangle$ de impuls \vec{p} care trebuie să creeze un fermion în starea aceasta prin următoarea relație:

$$a_{\vec{p}}^\dagger | \dots n_{\vec{p}} \dots \rangle = \sqrt{n_{\vec{p}} + 1} | \dots n_{\vec{p}} + 1 \dots \rangle \quad (1.5)$$

Analog definim complex conjugatul operatorului de creere și anume *operatorul de distrugere* $a_{\vec{p}}$ prin următoarea relație:

$$a_{\vec{p}} | \dots n_{\vec{p}} \dots \rangle = \sqrt{n_{\vec{p}}} | \dots n_{\vec{p}} - 1 \dots \rangle \quad (1.6)$$

Acest lucru înseamnă că $(a_{\vec{p}}^\dagger)^\dagger = a_{\vec{p}}$.

Scopul nostru final este de a determina toate mărimile măsurabile ale sistemului prin intermediul acestor operatori de creere, respective de distrugere.

În cazul fermionilor, funcția de undă a acestora este antisimetrică la interschimbarea a două particule. Acest lucru se observă din relația (7) unde funcția de undă totală a sistemului a fost scrisă ca și determinant Slater, liniile acestui determinant reprezentând o particulă din sistem. Interschimbarea oricăror linii duce la modificarea semnului determinantului, așadar și a funcției de undă totală. De asemenea se observă că nu pot exista doi electroni în aceeași stare cuantică deoarece acest lucru ar însemna că două linii ale determinantului ar fi identice, așadar determinantul ar da 0.

$$\Psi_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N}(\vec{r}_j, \sigma_j) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det[\phi_{\alpha_i}(\vec{r}_j, \sigma_i)] \quad (1.7)$$

$$i = \overline{1, N}$$

$$j = \overline{1, N}$$

Pentru operatorii de creere și distrugere acest lucru înseamnă că anticomută.

Anticomutatorul a doi operatori este de forma:

$$\{A, B\} = AB + BA$$

Relațiile de anticomutare pentru operatorii de creere și distrugere sunt:

$$\{a_{\vec{p}}, a_{\vec{p}'}\} = \{a_{\vec{p}}^\dagger, a_{\vec{p}'}^\dagger\} = 0 \quad (1.8)$$

$$\{a_{\vec{p}}^\dagger, a_{\vec{p}'}\} = \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \quad (1.9)$$

Din relația (1.8) se deduce imediat faptul că $a_{\vec{p}}^2 = 0$ și $a_{\vec{p}}^{\dagger 2} = 0$. Acest lucru înseamnă că aplicarea repetată a acestor operatori pentru a adăuga sau a îndepărta particule din aceeași stare cuantică va duce la anularea funcției de undă și, prin urmare, la imposibilitatea de a avea două particule în aceeași stare cuantică în același sistem fizic.

În plus, operatorul număr de ocupare fermionic se supune relațiilor:

$$\widehat{N}_{\vec{p}} = a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}} \quad (1.10)$$

$$1 - \widehat{N}_{\vec{p}} = a_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^\dagger \quad (1.11)$$

$\widehat{N}_{\vec{p}}$ este un proiector deoarece

$$\widehat{N}_{\vec{p}}^2 = a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}} = a_{\vec{p}}^\dagger (1 - a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}}) a_{\vec{p}} = a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}} - (a_{\vec{p}}^\dagger)^2 (a_{\vec{p}})^2 = a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}} = \widehat{N}_{\vec{p}} \quad (1.12)$$

$\widehat{N}_{\vec{p}}$ este un operator care proiectează o anumită stare a sistemului într-o stare cu un număr specific de particule cu impulsul p . Dacă aplicăm acest operator unei anumite stări a sistemului, obținem o altă stare a sistemului în care numărul de particule cu impulsul p este fixat la o anumită valoare.

Este momentul propice pentru a introduce operatorii de câmp de creere și de distrugere.

Acești operatori de câmp pot fi definiți utilizând un set complet de stări uniparticulă, folosindu-ne de operatorii deja introduși în felul următor:

$$\widehat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \phi_{\alpha}(\vec{r}, \sigma) a_{\vec{p}} \quad (1.13)$$

Acesta este operatorul de câmp de distrugere fermionic, și analog se definește și cel de creere, conjugatul hermitic al primului.

$$\widehat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r})^{\dagger} = \sum_{\vec{p}} \phi_{\alpha}(\vec{r}, \sigma) a_{\vec{p}}^{\dagger} \quad (1.14)$$

Aceste relații arată cum putem construi operatorul de câmp electronic în funcție de operatorii de creere/distrugere și funcțiile de undă asociate stărilor individuale ale particulelor. Acestea sunt relații fundamentale în teoria câmpurilor cuantice și sunt esențiale pentru înțelegerea comportamentului fermionic în sistemele cu mai multe particule.

Desigur, ca și în cazul anterior, relațiile de anticomutare sunt valabile și pentru acești noi operatori de câmp.

$$\{\widehat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}), \widehat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\} = \{\widehat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}), \widehat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}')\} = 0 \quad (1.15)$$

$$\{\widehat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}), \widehat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}')\} = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.16)$$

Scopul nostru initial, atunci când am introdus operatorii de câmp și operatorii de creere și distrugere, a fost să vedem cum acești operatori acționează asupra unor mărimi fizice observabile, pentru a putea înțelege din punct de vedere fizic modul în care se va comporta un sistem complex fermionic.

Așadar, ne vom concentra atenția în continuare asupra exprimării unor mărimi fizice observabile, cu ajutorul acestor unelte matematice în cuantificarea a doua. Dorim să găsim numărul total de particule dintr-un sistem 2D:

$$N = \sum_{\sigma} \int d^2r \hat{\rho}(\vec{r}, \sigma) \quad (1.17)$$

Unde

$$\hat{\rho}(\vec{r}, \sigma) = \widehat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \widehat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}) \quad (1.18)$$

unde $\hat{\rho}$ este operatorul densității de fermioni dependent de spinul σ și de vectorul de poziție \vec{r} .

Folosindu-ne de relațiile de definiție ale operatorilor de câmp (1.13) și (1.14) și de forma funcției de undă (1.3), cu coeficienți diferiți pentru fiecare operator de câmp, se găsește relația:

$$N = \sum_{\vec{p}, \sigma} a_{\vec{p}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{p}, \sigma} = \sum_{\vec{p}, \sigma} N_{\vec{p}, \sigma} \quad (1.19)$$

Aici am notat
$$N_{\vec{p}, \sigma} = a_{\vec{p}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{p}, \sigma} \quad (1.20)$$

Relația (1.20) reprezintă operatorul număr de ocupare pentru particule fermionice.

Valoarea așteptată a acestui operator reprezintă de fapt, din punct de vedere fizic, numărul de fermioni din starea de impuls \vec{p} și spin σ . Este trivial faptul că valorile acestuia pot fi doar 0 sau 1, ținând cont de principiul de excluziune a lui Pauli.

$$n_{\vec{k}, \sigma'}^0 = \begin{cases} 1 & , p < p_F \\ 0 & , p > p_F \end{cases} \quad (1.21)$$

Minunat! Cu ajutorul operatorului număr de ocupare se poate exprima și energia cinetică a sistemului.

$$T = \sum_{\vec{p}, \sigma} \frac{p^2}{2m} N_{\vec{p}, \sigma} = \sum_{\vec{p}, \sigma} \varepsilon_{\vec{p}}^0 a_{\vec{p}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{p}, \sigma} \quad (1.22)$$

$\varepsilon_{\vec{p}}^0 = \frac{p^2}{2m}$ fiind energia cinetică a unei particule de impuls p .

Capitolul 2. Interacțiunea biparticulă

Să nu uităm scopul final al acestei lucrări și anume studiul sistemelor cu multe particule ce interacționează între ele. Cu operatorii deja introduși în capitolul unu, vrem să vedem în continuare interacțiunea biparticulă și mai exact, vrem să calculăm energia potențială de interacțiune dintre doi fermioni, asemănător mărimilor fizice din relațiile (1.19) și (1.22). Toate calculele vor fi realizate în 2D, deși nu există diferențe consistente față de cazul 3D.

Plecăm de la energia potențială între două particule care presupunem că depinde doar de pozițiile relative ale celor două.

$$V_b = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (2.1)$$

Densitatea de particule dintr-un gaz fermionic, a căror dimensiune se neglijează, poate fi scrisă sub formă de sumă de funcții delta a lui Dirac:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.2)$$

Pentru a scrie sub formă integrală potențialul din relația (2.1), mai trebuie să ținem cont că o particulă nu interacționează cu ea însăși. De aceea, se scade termenul $\rho(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ din produsul densităților.

$$V_b = \frac{1}{2} \int \int V(\vec{r} - \vec{r}') [\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}') - \rho(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}')] d^2r d^2r' \quad (2.3)$$

Densitățile dependente doar de coordonată le putem scrie ca o sumă după spinii particulelor, de densități dependente atât de coordonată cât și de spin. Acest lucru îl facem pentru ca mai apoi să putem introduce operatorii de câmp cu ajutorul relației (1.18).

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\sigma} \rho(\vec{r}, \sigma) = \sum_{\sigma} \widehat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \widehat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}) \quad (2.4)$$

În calculul nostru ne folosim și de relația de anticomutare (1.16) și efectuăm calculele folosind interpretarea funcției delta, unde este necesar. Vom obține un rezultat dependent de operatorii de câmp pentru potențialului de interacțiune:

$$V_b = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int \int V(\vec{r} - \vec{r}') \widehat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \widehat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \widehat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \widehat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}) d^2r d^2r' \quad (2.5)$$

Operatorii de creare și de distrugere sunt mai simpli din punct de vedere al algebrei lor și al relațiilor de comutare. Aceasta face ca manipularea și calculul cu acești operatori să fie mai ușoară decât cu operatorii de câmp, care sunt funcționale de câmpuri cuantice. De asemenea, operatorii de creare și de distrugere sunt mai ușor de interpretat fizic. Ei descriu procesul de adăugare și eliminare al unei particule dintr-un sistem cuantic, ceea ce face înțelegerea și interpretarea rezultatelor mai directă.

Prin urmare, vom încerca să găsim potențialul în funcție de $a_{\vec{p}, \sigma}$ mai degrabă decât de $\widehat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r})$. Pentru asta ne folosim de relația (1.13) scriind explicit forma funcției de undă din ecuația (1.3).

Pentru descrierea sistemelor complexe din punct de vedere matematic, trebuie să ne folosim de componentele Fourier ale mărimilor fizice, deoarece calculele în spațiul impulsului sunt mult mai la îndemână față de cele din spațiul real (al pozițiilor), legile de conservare fiind mai ușor de aplicat. De aceea folosim transformata Fourier pentru potențialul de interacțiune și anume:

$$V_{\vec{q}} = \int d^3r V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \quad (2.6)$$

De unde putem scrie forma potențialului în spațiul real al coordonatelor \vec{r} și \vec{r}' în felul următor:

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (2.7)$$

Ne întoarcem în relația (2.5) și înlocuim forma potențialului de interacțiune cu cea din relația (2.7) și de asemenea, operatorii de câmp cu relațiile (1.13) și (1.4). Trebuie ținut cont de faptul că fiecărui operator de câmp îi corespunde o particulă de un impuls diferit, astfel că în expresie vor apărea 4

impulsuri, fiind 4 operatori. La final, dependența de unul dintre aceste impulsuri nu va mai exista datorită aparițiilor funcțiilor delta δ care vor filtra rezultatele. Am notat cele trei impulsuri cu $\vec{p}, \vec{q}, \vec{k}$.

$$V_b = \frac{1}{2V} \sum_{\sigma, \sigma', \vec{p}, \vec{q}, \vec{k}} V_{\vec{q}} a_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma}^+ a_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma'}^+ a_{\vec{k}, \sigma} a_{\vec{p}, \sigma} \quad (2.8)$$

Aceasta nu este o formulă tocmai frumoasă pentru potențialul de interacțiune biparticulă, însă semnificația sa fizică poate fi înțeleasă mai ușor cu ajutorul diagramei Feynman reprezentată în figura 2.1.

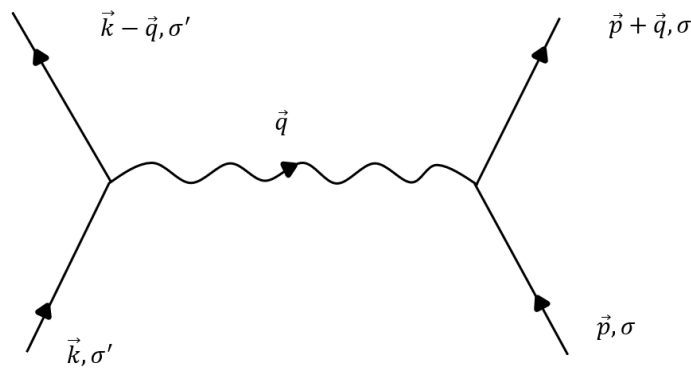


Figura 2.1. Diagrama Feynman corespunzătoare ecuației (2.8).

Diagrama din figura 2.1 prezintă interacțiunea dintre o particulă de impuls \vec{p} și spin σ cu o altă particulă de impuls \vec{k} și spin σ' . La mijlocul diagramei se află vertex-ul unde interacțiunea are loc. Aici, potențialul V_q mediază schimbul de impuls q între fermioni, rezultând o particulă de impuls $\vec{k} - \vec{q}$ și spinul σ' și alta de impuls $\vec{p} + \vec{q}$ și spinul σ . În calculele ce vor urma în capitolul 5 al acestei lucrări, ne vom folosi de aceste rezultate și vom particulariza forma potențialului de interacțiune biparticulă $V(r) = \frac{A}{r^\eta}$ cu restricția $0 < \eta < 2$ impusă de calcul. Pentru cazul bidimensional unde dimensiunea spațiului este $d=2$, se poate observa că $\eta < d$. Aceasta este o interacțiune de tipul long range, referindu-se la interacțiuni între particule care nu scad rapid cu distanța. Exemple de astfel de interacțiuni pot fi interacțiunea gravitațională (unde $d=3$) și $\eta = 2$ sau interacțiunea coulombiană unde $\eta = 1$.

În sistemele cuantice cu interacțiuni long-range, corelațiile cuantice și entanglement-ul pot să se răspândească mai rapid și pe distanțe mai mari comparativ cu sistemele cu interacțiuni de scurtă distanță. Acest lucru poate duce la fenomene non-balistice în răspândirea corelațiilor și la o încetinire neașteptată a dinamicii entanglement-ului.

De asemenea, sistemele cu interacțiuni long-range pot rămâne în stări de neechilibru pentru perioade lungi de timp. Acest comportament este relevant în studiul materiei active și al sistemelor cuantice departe de echilibru.

O altă trăsătură interesantă a sistemelor cu astfel de interacțiuni o reprezintă capacitatea lor de a stabili faze de neechilibru, în care sistemul nu atinge niciodată un echilibru termodinamic tradițional. Aceste faze sunt interesante pentru că pot prezenta proprietăți exotice care nu sunt observabile în sistemele cu interacțiuni locale.

Studiul acestor sisteme este, așadar, justificat nu doar de frumusețea și eleganța relațiilor matematice, cât și de necesitatea dezvoltării tehnologiei cuantice cum ar fi calculul cuantic sau criptografia cuantică.

Capitolul 3. Metoda ecuației de mișcare

Pentru studiul sistemelor cu multe particule este mai convenabil să se urmărească evoluția în timp a operatorilor de creere și distrugere a particulelor, mai degrabă decât evoluția în timp a stării întregului sistem, pentru a determina mărimile observabile ale acestuia. Dependența temporală a operatorilor se poate determina cu ajutorul ecuației de mișcare.

În mecanica cuantică, metoda ecuației de mișcare (sau metoda Heisenberg) este o abordare folosită pentru a descrie evoluția temporală a operatorilor de observabile în cadrul formalismului mecanicii matriciale. Spre deosebire de formalismul Schrödinger, în care starea cuantică a unui sistem evoluează în timp și operatorii de observabile rămân constanți, în formalismul Heisenberg, operatorii de observabile sunt cei care evoluează în timp, iar starea cuantică rămâne fixă.

În formalismul Heisenberg evoluția în timp a unui operator $\widehat{O}_H(t)$ este dată de ecuația:

$$-i\frac{\partial}{\partial t}\widehat{O}_H = [\widehat{H}, \widehat{O}_H] \quad (3.1)$$

În continuare vom prezenta pașii de urmat pentru a ajunge la relația (3.1).

În formalismul Schrödinger evoluția în timp a funcției de undă este dată de bine-cunoscuta relație:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (3.2)$$

Soluția acestei ecuații este dată de $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$ (3.3)

Operatorii \widehat{O}_S din formalismul Schrödinger sunt constanți în timp. În formalismul Heisenberg operatorii $\widehat{O}_H(t)$ depind de timp. Dorim să găsim o relație între cei doi.

Observabila măsurată la timpul t în reprezentarea Schrödinger este:

$$\langle\psi(t)|\widehat{O}_S|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|e^{\frac{iHt}{\hbar}}\widehat{O}_S e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle \quad (3.4)$$

De unde putem deduce: $\widehat{O}_H(t) = \psi(0)|e^{\frac{iHt}{\hbar}}\widehat{O}_S e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ (3.5)

Derivând temporal această expresie, obținem relația (3.1).

Pentru a lucra mai ușor cu ecuația de mișcare în sistemele cu mai multe particule, vom trece în spațiul Fourier. Vom face înlocuirile:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega_{\vec{q}} \quad (3.6.1)$$

$$\widehat{O}_H(t) \rightarrow \widehat{O}_{\vec{q}} \quad (3.6.2)$$

În această situație $\omega_{\vec{q}}$ este o frecvență caracteristică sistemului, care poate descrie diverse fenomene fizice, în funcție de sistemul specific pe care îl studiem, cum ar fi: vibrațiile unei rețele cristaline, excitațiile colective (plasmonii) dintr-un solid sau energiile asociate excitonilor (perechilor electron-gol) dintr-un semiconductor.

Ecuația de mișcare din reprezentarea Heisenberg, în spațiul Fourier va fi:

$$[H, \widehat{O}_{\vec{q}}] = -\omega_{\vec{q}} \widehat{O}_{\vec{q}} \quad (3.7)$$

Conjugata complexă a relației (3.7):

$$[H, \widehat{O}_{\vec{q}}^{\dagger}] = \omega_{\vec{q}} \widehat{O}_{\vec{q}}^{\dagger} \quad (3.8)$$

Ne vom folosi de relația (3.8) pentru a studia evoluția în timp a operatorului de creere introdus în capitolul 1, $a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger}$.

Pentru asta, considerăm un sistem format din mai multe particule într-un mediu cu interacții descris de hamiltonianul (din relațiile 1.22 și 2.8 unde am considerat $V=1 \text{ m}^3$):

$$H = \sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} a_{\vec{p},\sigma} + \sum_{\sigma,\sigma',\vec{p},\vec{q},\vec{k}} \frac{V_{\vec{q}}}{2} a_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^{\dagger} a_{\vec{k},\sigma} a_{\vec{p},\sigma} \quad (3.9)$$

Frecvența caracteristică sistemului $\omega_{\vec{q}}$ va fi botezată cu $\varepsilon_{\vec{p}}$, ea reprezentând o frecvență de excitație care poate fi asociată cu energii de cvasiparticule sau moduri colective. Aceasta reprezintă din punct de vedere fizic energia cu care o particulă creată de operatorul $a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger}$ contribuie la energia totală a sistemului, descrisă de hamiltonian.

Așadar, din relația:

$$[H, a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger] = \varepsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger \quad (3.10)$$

căutăm să determinăm $\varepsilon_{\vec{p}}$.

$$\begin{aligned} [H, a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger] &= \sum_{\vec{p}', \sigma'} \varepsilon_{\vec{p}'}^0 [a_{\vec{p}', \sigma'}^\dagger a_{\vec{p}', \sigma'} a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger] \\ &+ \sum_{\sigma', \sigma'', \vec{p}', \vec{q}, \vec{k}} \frac{V_{\vec{q}}}{2} [a_{\vec{p}'+\vec{q}, \sigma''}^\dagger a_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma'}^\dagger a_{\vec{k}, \sigma'} a_{\vec{p}', \sigma''} a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger] \end{aligned} \quad (3.11)$$

Pentru calculul celor doi comutatori cuantici din relația (3.11) se folosește relația matematică:

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] = \{A, B\}C - B\{A, C\} \quad (3.12)$$

și se ține cont de relațiile de anticomutare (1.8) și (1.9).

Ecuția de mișcare devine:

$$[H, a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger] = \varepsilon_{\vec{p}}^0 a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger + \sum_{\sigma', \vec{k}, \vec{q}} V_{\vec{q}} a_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma'}^\dagger a_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma'}^\dagger a_{\vec{k}, \sigma'} \quad (3.13)$$

Primul termen din ecuația (3.13) reprezintă energia de bază a particulei create, ca și cum aceasta ar fi liberă. Cel de-al doilea termen reprezintă contribuția interacțiunilor dintre particula nou formată și restul sistemului, la hamiltonian. Aici este descris un proces de distrugere a unei particule de impuls \vec{k} și spin σ' (sau în alte cuvinte de creere a unui gol) și de creere a altor două particule, una de impuls $\vec{p} + \vec{q}$ și spin σ , iar alta de impuls $\vec{k} - \vec{q}$ și spin σ' .

Din nefericire relația (3.13) nu este de forma relației (3.10), deci nu putem identifica încă $\varepsilon_{\vec{p}}$ după cum ne-am propus. Acest lucru s-ar putea face dacă scriem o ecuație de mișcare pentru produsul de trei operatori (cei doi de creere și unul de distrugere), obținând în final un set de ecuații de mișcare cuplate extrem de dificil de rezolvat exact. De aceea, în continuare vom folosi aproximațiile pentru a ne ajuta să găsim contribuția $\varepsilon_{\vec{p}}$ a unei particule la hamiltonianul sistemului.

Capitolul 4. Aproximația Hartree-Fock

Aproximația Hartree-Fock este o metodă fundamentală în mecanica cuantică folosită pentru descrierea sistemelor multielectronice. Aceasta permite reducerea complexității problemelor cu mai multe particule prin transformarea lor în probleme cu o singură particulă, cu un potențial efectiv care include interacțiunea cu celelalte particule. În acest capitol vom explora această metodă pornind de la ecuația de mișcare (3.13).

Premisele acestei aproximații sunt:

1. Funcția de undă a unui sistem de N electroni poate fi aproximată printr-un determinant Slater, care este o combinație antisimetrizată de funcții de undă monoelectronice (orbitale).

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1) & \phi_1(\vec{r}_2) & \dots & \phi_1(\vec{r}_N) \\ \phi_2(\vec{r}_1) & \phi_2(\vec{r}_2) & \dots & \phi_2(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(\vec{r}_1) & \phi_N(\vec{r}_2) & \dots & \phi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (4.1)$$

2. Presupunem că interacțiunile electronice pot fi descrise printr-un potențial mediu, ceea ce duce la o simplificare a hamiltonianului și, implicit, a ecuațiilor de mișcare. Din punct de vedere matematic acest lucru s-ar traduce prin liniarizarea produsului de trei operatori $a_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k},\sigma}$ din termenul de interacțiune al ecuației de mișcare (3.13).

Liniarizarea operatorilor înseamnă înlocuirea produselor complexe de operatori de creare și distrugere cu combinații ale acestor operatori și valorile lor așteptate, ceea ce corespunde utilizării unei medii statistice pentru a descrie sistemul. Aceasta se bazează pe ideea că fluctuațiile în jurul valorilor medii sunt mici și pot fi neglijate. Potențialul mediu este calculat pe baza densităților de probabilitate a electronilor, care sunt valorile așteptate ale operatorilor de densitate. Astfel, fiecare electron vede o medie a efectelor celorlalți electroni, în loc să interacționeze direct cu fiecare dintre ei în mod explicit.

$$c_1^+ c_2^+ c_3 \cong c_1^+ \langle c_2^+ c_3 \rangle - c_2^+ \langle c_1^+ c_3 \rangle \quad (4.2)$$

Întorcându-ne la ecuația de mișcare (3.13), ne folosim de relația (4.2) pentru a liniariza, așadar, produsul de operatori. Știm de asemenea că valoarea așteptată a unui produs de doi operatori, unul de creere altul de distrugere, în starea lui fundamentală este:

$$\langle c_{\vec{k},\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}',\sigma'} \rangle = n_{\vec{k},\sigma}^0 \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (4.3)$$

Făcând calculele obținem:

$$[H, a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger}] = \varepsilon_{\vec{p}}^0 a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} + \sum_{\vec{k},\sigma'} n_{\vec{k},\sigma'}^0 (V_0 - V_{\vec{p}-\vec{k}} \delta_{\sigma,\sigma'}) a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} \quad (4.4)$$

Uitându-ne la relația (3.10), putem identifica într-un final contribuția la energia sistemului a particulei create de operatorul $a_{\vec{p},\sigma}^{\dagger}$ și anume:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}}^0 + V_0 \sum_{\vec{k},\sigma'} n_{\vec{k},\sigma'}^0 - \sum_{\vec{k},\sigma'} V_{\vec{p}-\vec{k}} n_{\vec{k},\sigma'}^0 \delta_{\sigma,\sigma'} = \varepsilon_{\vec{p},\sigma}^{HF} \quad (4.5)$$

Relația (4.5) este deosebită. Am ajuns la ea prin aproximația Hartree-Fock, fiecărui termen corespunzându-i câte o interpretare fizică pe care o vom detalia în continuare.

Primul dintre cei trei termeni ai relației de mai sus reprezintă energia asociată unei particule din sistem, dacă aceasta ar fi considerată liberă.

Al doilea termen din expresie este termenul Hartree, care reprezintă energia medie de interacțiune a particulei cu tot restul sistemului. Putem să considerăm acest termen ca fiind constant, fără să greșim prea tare, deoarece dacă sistemul este invariant în raport cu translațiile spațiale, atunci distribuția medie a particulelor $n_{\vec{k},\sigma}^0$ nu depinde de impulsurile particulare \vec{k} . Acest lucru conduce la faptul că suma peste toate impulsurile \vec{k} se reduce la o constantă, deoarece numărul total de particule este constant.

Al treilea termen din relație este termenul Fock, fiind o corecție a energiei de interacțiune și fiind diferit de 0, atâta timp cât spinii sunt paraleli. $V_{\vec{p}-\vec{k}}$ este elementul matricei de potențial care descrie interacțiunea.

În practică, determinarea precisă a potențialului de interacțiune poate fi o sarcină dificilă, mai ales în sisteme complicate. De aceea se recurge la aproximări, în cele mai multe cazuri.

În continuare vom considera că termenul al doilea este absorbit în potențialul chimic. Această absorbție este motivată de faptul că termenul este o contribuție constantă la energia sistemului și, prin urmare, poate fi inclus într-o redefinire a nivelului de energie de referință. Totodată ținem cont că pentru fermioni, valoarea numărului de ocupare este dat de relația (1.21).

Energia cu care o particulă de impuls p și spin σ contribuie la energia sistemului este așadar:

$$\varepsilon_{\vec{p},\sigma}^{HF} \equiv \varepsilon_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}}^0 - \sum_{\vec{k}, (k < p_F)} V_{\vec{p}-\vec{k}} \quad (4.6)$$

Putem trece de la sumarea contribuțiilor interacțiunilor dintre particule la integrală pentru $k < p_F$. Relația de mai jos este pentru un sistem 2D, deoarece în cele ce urmează ne propunem studiul unor astfel de sisteme. Pentru sistemele 3D, avem o relație similară, modificându-se doar exponentul de la numitor din 2 în 3.

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \int_{\vec{k}}^{k < p_F} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} V_{\vec{p}-\vec{k}} \quad (4.7)$$

Al doilea termen din relația (4.7) reprezintă energia de schimb, pe care o notăm:

$$\varepsilon_{p\ sch}^0 = - \int_{\vec{k}}^{k < p_F} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} V_{\vec{p}-\vec{k}} \quad (4.8)$$

Așadar, putem scrie:

$$\varepsilon_{\vec{p},\sigma}^{HF} \equiv \varepsilon_{\vec{p}} = \varepsilon_{\vec{p}}^0 + \varepsilon_{p\ sch}^0 \quad (4.9)$$

Această energie se mai numește și energie Hartree-Fock, fiind o aproximație a energiei unui electron individual care face parte dintr-un sistem fermionic în care există interacțiuni. Acest electron are un impuls p și spinul σ , energia sa fiind legată de potențialul de interacțiune biparticulă $V_{\vec{p}-\vec{k}}$ care determină tăria interacțiunii dintre doi fermioni în acest caz.

În continuare ne vom folosi de această relație pentru a determina anumite mărimi fizice specifice unui sistem fermionic bidimensional în care avem interacțiuni între particule și care ar fi deosebit de complicat de abordat matematic fără aproximații de acest fel.

O primă mărime caracteristică unui sistem cu interacțiuni ar fi energia totală a sistemului de fermioni care ia în considerare atât energiile fiecărui fermion în parte, ca și cum ar face parte dintr-un sistem fără interacțiuni (primul termen din relația (4.8)), cât și energia de schimb dintre ei (al doilea termen) datorat interacțiunilor.

$$E_{HF} = \sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_p^0 n_{\vec{p},\sigma}^0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p},\sigma} \varepsilon_{p\ sch}^0 n_{\vec{p},\sigma}^0 \quad (4.10)$$

În relația (4.10) ne-am folosit de (4.9), însumând contribuțiile tuturor fermionilor, după numărul de ocupare dat de relația (1.21), a fiecărei stări din sumă. Termenul al doilea are un factor de $\frac{1}{2}$ care provine dintr-o interacțiune de tip pereche.

Capitolul 5. Studiul unui gaz fermionic bidimensional, cu interacțiuni long-range

Calcululele pe care ni le propunem în acest capitol vor să studieze comportamentul unui gaz fermi 2D bidimensional, în care avem interacțiuni de tipul long-range, deoarece înțelegerea complexă a acestui sistem este extrem de utilă în diverse aplicații și domenii științifice, cum ar fi: conducția electrică și termică în conductori sau dispozitive cu semiconductori, fenomene de stare solidă cum ar fi supraconductibilitatea sau feromagnetismul, fizica materiei condensate, tehnologiile cuantice și nanotehnologiile.

5.1. Calculul energiei totale Hartree-Fock pentru un sistem fermionic 2D

Primul lucru pe care dorim să îl calculăm este energia unei particule, în acest caz fermion, aflat într-un mediu cu interacțiuni, $\varepsilon_{\vec{p},\sigma}^{HF} = \varepsilon_{\vec{p}}$, folosindu-ne de aproximația Hartree-Fock detaliată în capitolul 4. Pentru aceasta avem nevoie să explicităm forma potențialului de interacțiune în spațiul Fourier $V_{\vec{p}-\vec{k}}$, din relația (2.6).

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \int d^2r e^{-i(\vec{p}-\vec{k})\vec{r}} V(r) \quad (5.1)$$

Pentru a înțelege mai bine această relație ne vom folosi de următoarea diagramă:

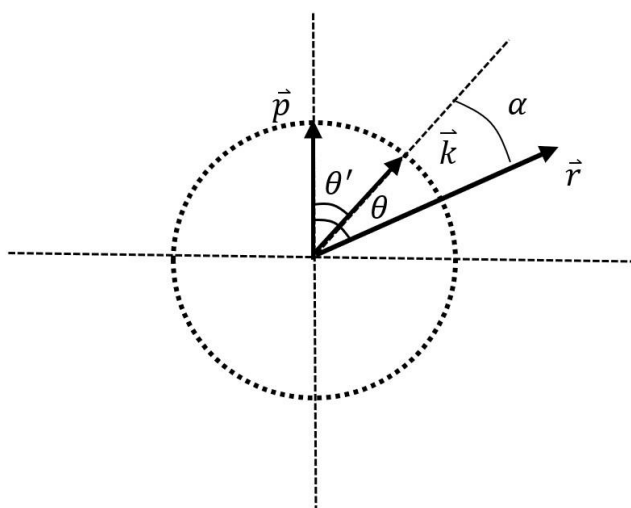


Figura 5.1.1. Diagrama vectorilor poziție și impuls cu unghiurile specifice dintre ele

Considerăm deocamdată potențialul real în forma $V(r)$ cu o dependență oarecare de coordonata r .

Elementul de volum este de forma:

$$d^2r = r d\theta dr \quad (5.2)$$

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \int_0^\infty dr r V(r) \int_0^{2\pi} d\theta e^{-ipr \cos\theta} e^{ikr \cos(\theta-\theta')} \quad (5.3)$$

În figura 5.1.1:

$$\alpha = \theta - \theta'$$

În continuare vom calcula integrala după θ din relația (5.3) pe care am notat-o cu I.

$$I = \int_0^{2\pi} d\theta e^{-ipr \cos\theta} e^{ikr \cos(\theta-\theta')} \quad (5.4)$$

Ne vom folosi de relația:

$$e^{iz \cos\varphi} = I_0(z) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} i^n I_n(z) \cos(n\varphi) \quad (5.5)$$

Unde $I_0(z)$ și $I_n(z)$ sunt funcțiile Bessel de ordin 0 și respective n.

Pentru cele două exponențiale din integrala (5.4) se găsesc relațiile:

$$e^{-ipr \cos\theta} = I_0(-pr) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} i^n I_n(-pr) \cos(n\theta) \quad (5.6.1)$$

$$e^{ikr \cos(\theta-\theta')} = I_0(kr) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} i^n I_n(kr) \cos(n(\theta-\theta')) \quad (5.6.2)$$

Introducem relațiile (5.6.1) și (5.6.2) în (5.4) și facem înmulțirile. Obținem:

$$\begin{aligned}
I &= I_0(-pr)I_0(kr)2\pi + 2I_0(-pr) \sum_{n=1}^{\infty} i^n I_n(kr) \int_0^{2\pi} \cos(n(\theta - \theta')) d\theta \\
&\quad + 2I_0(kr) \sum_{n=1}^{\infty} i^n I_n(-pr) \int_0^{2\pi} \cos(n\theta) d\theta \\
&\quad + 4 \sum_{n,m} i^n i^m I_n(-pr) I_m(kr) \int_0^{2\pi} \cos(n\theta) \cos(n(\theta - \theta')) d\theta \quad (5.7)
\end{aligned}$$

Calculăm pe rând cele 3 integrale din (5.7) și obținem:

$$I_1 = \int_0^{2\pi} \cos(n(\theta - \theta')) d\theta = 0 \quad (5.8.1)$$

$$I_2 = \int_0^{2\pi} \cos(n\theta) d\theta = 0 \quad (5.8.2)$$

$$I_3 = \int_0^{2\pi} \cos(n\theta) \cos(n(\theta - \theta')) d\theta = \pi \cos(m\theta') \delta_{n,m} \quad (5.8.3)$$

Înlocuim relațiile (5.8.1), (5.8.2) și (5.8.3) în (5.7) și ne folosim de relația matematică:

$$I_n(-z) = (-1)^n I_n(z) \quad (5.9)$$

În final obținem relația:

$$I = 2\pi \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon_l I_l(pr) I_l(kr) \cos(l\theta') \quad (5.10)$$

unde $\varepsilon_l = \begin{cases} 1, & l = 0 \\ 2, & l = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$ iar I_l sunt funcții Bessel

Revenim la relația (5.3) pentru potențialul de interacțiune și înlocuim integrala I calculată din relația (5.10).

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \int_0^{\infty} dr r V(r) 2\pi \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon_l I_l(pr) I_l(kr) \cos(l\theta')$$

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \sum_{l=0}^{\infty} 2\pi \varepsilon_l \int_0^{\infty} dr r V(r) I_l(pr) I_l(kr) \cos(l\theta')$$

Așadar:

$$V_{\vec{p}-\vec{k}} = \sum_{l=0}^{\infty} V_l(p, k) \cos(l\theta') \quad (5.11)$$

Aici am notat:

$$V_l(p, k) = 2\pi \varepsilon_l \int_0^{\infty} dr r V(r) I_l(pr) I_l(kr) \quad (5.12)$$

Până acum am calculat potențialul de interacțiune biparticulă în coordonate polare (fiind mai ușor de lucrat din punct de vedere matematic), obținând relația (5.11). Cu acest potențial vom calcula energia Hartree-Fock, care ne va ajuta ulterior să găsim și alte mărimi caracteristice sistemului fermionic 2D.

Pornind de la relația (4.7), înlocuim rezultatele pentru potențialul de interacțiune găsit mai sus în (5.11) și (5.12) și obținem :

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \int_0^{p_F} \int_0^{2\pi} k dk d\theta' \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} V_l(p, k) \cos(l\theta') \quad (5.13)$$

Explicităm suma:

$$\sum_{l=0}^{\infty} V_l(p, k) \cos(l\theta') = V_0(p, k) + V_1(p, k) \cos \theta' + V_2(p, k) \cos 2\theta' + \dots \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{p_F} k dk \left\{ V_0(p, k) \int_0^{2\pi} d\theta' + V_1(p, k) \int_0^{2\pi} \cos \theta' d\theta' \right. \\ \left. + V_2(p, k) \int_0^{2\pi} \cos 2\theta' d\theta' \right. \\ \left. + \dots \right\} \quad (5.15) \end{aligned}$$

Se observă faptul că a doua și a treia integrală sunt egale cu 0, iar prima este egală cu 2π . Așadar:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2\pi} \int_0^{p_F} k V_0(p, k) dk \quad (5.16)$$

Explicităm termenul V_0 cu ajutorul relației (5.12).

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2\pi} \int_0^{p_F} k dk \int_0^\infty dr r V(r) I_0(pr) I_0(kr) \quad (5.17)$$

Aceasta este energia unui singur fermion într-un mediu cu interacții, cu un potențial biparticulă $V(r)$ cu o dependență oarecare de r . În continuare vom particulariza această dependență studiind cazul în care potențialul de interacțiune are următoarea formă:

$$V(r) = \frac{A}{r^\eta} \quad (5.18)$$

Unde η este un număr real cuprins în intervalul $(0, 2]$. Această restricție este pusă din cauza integralelor pe care le vom folosi ulterior, fiind valabile doar dacă impunem această limitare a exponentului.

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - A \int_0^\infty r^{1-\eta} I_0(pr) dr \int_0^{p_F} k I_0(kr) dk \quad (5.19)$$

Se face următoarea notație, pentru a rezolva integrala notată cu I:

Notăm $x = \frac{k}{p_F}$.

$$I = \int_0^\infty r^{1-\eta} I_0(pr) dr \int_0^1 x p_F^2 I_0(x r p_F) dx \quad (5.20)$$

A doua integrală este calculată folosind referința [5] pag.683-[6.561-5].

$$I = p_F \int_0^\infty r^{-\eta} I_0(pr) I_1(r p_F) dr \quad (5.21)$$

Notăm $y = \frac{p}{p_F}$ și $z = r p_F$.

$$I = p_F^\eta \int_0^\infty z^{-\eta} I_0(yz) I_1(z) dz \quad (5.22)$$

Această integrală se găsește în referința [5] pag 683-[6.574-1,2,3]. Într-un final, se găsește o formă pentru energia Hartree-Fock pentru o singură particulă:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - A \begin{cases} \left(\frac{p_F}{2}\right)^\eta \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)} F\left(1 - \frac{\eta}{2}, \frac{-\eta}{2}, 1, y^2\right), & \mathbf{y} < \mathbf{1} \\ \left(\frac{p_F}{2}\right)^\eta \frac{\Gamma(\eta)\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{\left[\Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)\right]^2 \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)}, & \mathbf{y} = \mathbf{1} \\ \left(\frac{p_F}{2}\right)^\eta \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{y^{2-\eta}\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)} F\left(1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2, \frac{1}{y^2}\right), & \mathbf{y} > \mathbf{1} \end{cases} \quad (5.23)$$

Pentru a studia un sistem 2D de N fermioni într-un potențial de forma (5.18), trebuie să găsim mai întâi energia Hartree-Fock pentru întregul sistem. Ne folosim de relația (4.10), pe care o scriem sub formă integrală.

$$E_{HF} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int \varepsilon_p^0 d\vec{p} + \frac{1}{(2\pi)^2} \int \varepsilon_{p\ sch}^0 d\vec{p} \quad (5.24)$$

Notăm primul termen cu $E_{HF}^{(1)}$ iar al doilea cu $E_{HF}^{(2)}$ și calculăm integralele.

$$E_{HF}^{(1)} = 2 \int \frac{p^2}{2m} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} = \frac{p_F^4}{8m\pi} \quad (5.25)$$

Ținem cont de faptul că numărul de particule pentru un sistem fermionic bidimensional este:

$$N = 2 \int_0^{p_F} \frac{2\pi p dp}{(2\pi)^2} = \frac{p_F^2}{2\pi} \quad (5.26)$$

$$E_{HF}^{(1)} = \frac{N p_F^2}{4m} = \frac{N \varepsilon_F}{2} \quad (5.27)$$

$$E_{HF}^{(2)} = 2 \frac{1}{2} \int_0^{p_F} \frac{2\pi p dp}{(2\pi)^2} (-A p_F^\eta) \zeta(\eta, y) \quad (5.28)$$

Unde am notat:

$$\zeta(\eta, y) = \begin{cases} \frac{1}{2^\eta} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)} F\left(1 - \frac{\eta}{2}, \frac{-\eta}{2}, 1, y^2\right), & \mathbf{y} < \mathbf{1} \\ \frac{1}{2^\eta} \frac{\Gamma(\eta)\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{\left[\Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)\right]^2 \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)}, & \mathbf{y} = \mathbf{1} \\ \frac{1}{2^\eta} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{y^{2-\eta}\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)} F\left(1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2, \frac{1}{y^2}\right), & \mathbf{y} > \mathbf{1} \end{cases} \quad (5.29)$$

$$E_{HF}^{(2)} = \frac{-A}{2\pi} p_F^{\eta+2} \int_0^1 y \zeta(\eta, y) dy \quad (5.30)$$

Vom calcula această integrală doar pentru cazul $y < 1$ ($p < p_F$), deoarece doar aceste stări contribuie la energia totală a sistemului la $T=0K$.

$$E_{HF}^{(2)} = -A \left(\frac{p_F}{2}\right)^\eta \frac{p_F^2}{2\pi} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)} Y_\eta \quad (5.31)$$

Unde

$$Y_\eta = \int_0^1 y F\left(1 - \frac{\eta}{2}, \frac{-\eta}{2}, 1, y^2\right) dy \quad (5.32)$$

Ținând cont de relațiile (5.26), (5.27) și (5.31), putem scrie următoarea relație:

$$\frac{E_{HF}}{N} = \frac{E_{HF}^{(1)}}{N} + \frac{E_{HF}^{(2)}}{N} = \frac{1}{2} \frac{p_F^2}{2m} - A \left(\frac{p_F}{2}\right)^\eta \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)} Y_\eta \quad (5.33)$$

În continuare, vom calcula integrala Y_η .

Facem schimbarea de variabilă $x = y^2$

$$Y_\eta = \int_0^1 \frac{dx}{2} F\left(1 - \frac{\eta}{2}, \frac{-\eta}{2}, 1, x\right) dy \quad (5.34)$$

Aceasta se găsește în referința [5] pag.813 [7.512-4].

$$Y_\eta = \frac{1}{2} \frac{\Gamma(1 + \eta)}{\Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(2 + \frac{\eta}{2}\right)} \quad (5.35)$$

În final, obținem:

$$\frac{E_{HF}}{N} = \frac{1}{2} \frac{p_F^2}{2m} - A \left(\frac{p_F}{2}\right)^\eta \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right) \Gamma(\eta)}{\left(1 + \frac{\eta}{2}\right) \left(\frac{\eta}{2}\right)^2 \left[\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\right]^3} \quad (5.36)$$

Relația (5.36) reprezintă energia Hartree-Fock per electron în sistemul nostru.

Primul termen din relația (5.36) reprezintă contribuția cinetică la energia totală a sistemului, iar al doilea termen, fiind o funcție dependentă de η , reprezintă corecția adusă de interacțiunile de tip long-range energiei totale a sistemului, esențială pentru a descrie proprietățile fizice ale materialelor.

Componenta $\left(\frac{p_F}{2}\right)^\eta$ din termenul al doilea indică modul în care interacțiunile se scalează cu distanța. Valoarea exponențială η controlează gradul de influență al acestor interacțiuni, sugerând că, pe măsură ce η crește, efectul interacțiunilor long-range devine mai pronunțat.

Componenta gama Γ din cel de-al doilea termen evidențiază contribuțiile complexe ale interacțiunilor long-range, conducând la anomalii în spectrul de energie al sistemului. Aceste anomalii sunt importante pentru a înțelege fenomene precum răspândirea non-balistică a corelațiilor și încetinirea dinamicii entanglement-ului.

5.2. Calculul vitezei fermionilor din stările de impuls \vec{p}

O altă mărime fizică de interes pe care ne propunem să o calculăm este viteza unei particule care se află în starea de impuls \vec{p} . Calculăm viteza particulei în toate trei cazuri ($y < 1$, $y = 1$, $y > 1$) $p < p_F$, $p = p_F$, $p > p_F$, deoarece vom avea mai departe nevoie de toate aceste rezultate în calcularea densității de stări în apropierea suprafeței fermi.

Viteza unei particule din starea de impuls \vec{p} poate fi scrisă conform relației (5.37).

$$v_{\vec{p}} = \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p} \quad (5.37)$$

Derivata funcției hipergeometrice o calculăm folosind relația:

$$\frac{\partial F(a, b, c, z)}{\partial z} = \frac{ab}{c} F(a+1, b+1, c+1, z) \quad (5.38)$$

Cazul $y < 1$

Facem schimbarea de variabilă $z=y^2$ și obținem:

$$v_{\vec{p}} = \frac{p}{m} + A p \frac{p_F^{\eta-2} \Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right) \eta}{2^{\eta-1} \Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta}{2}\right) F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2, \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right) \quad (5.39.1)$$

Cazul $y=1$

$$v_{\vec{p}} = \frac{p}{m} \quad (5.39.2)$$

Cazul $y > 1$

$$v_{\vec{p}} = \frac{p}{m} + A \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)} \frac{\partial}{\partial p} \left[y^{\eta-2} F\left(1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2, \frac{1}{y^2}\right) \right]$$

Pentru calculul derivatei parțiale facem schimbarea de variabilă $z=\frac{1}{y^2}$ și aplicăm relația (5.38).

$$v_{\vec{p}} = \frac{p}{m} + A \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-1} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)} \left(\frac{p_F}{p}\right)^3 \left[\left(1 - \frac{\eta}{2}\right) \left(\frac{p}{p_F}\right)^{\eta} F\left(1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2, \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{p}{p_F}\right)^{\eta-2} \left(1 - \frac{\eta}{2}\right)^2 F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 2 - \frac{\eta}{2}, 3, \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right) \right] \quad (5.39.3)$$

Relația finală pentru viteza unei particule este:

$$v_{\vec{p}} = \frac{p}{m} + \begin{cases} A p \frac{p_F^{\eta-2} \Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right) \eta}{2^{\eta-1} \Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta}{2}\right) F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2, \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right), & p < p_F \\ 0, & p = p_F \\ A \frac{p_F^2 \Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{2^{\eta-1} \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)} \left(1 - \frac{\eta}{2}\right) p^{\eta-3} F\left(1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2, \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right) + & \\ + A \frac{p_F^4 \Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)}{2^{\eta-2} \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)} \left(1 - \frac{\eta}{2}\right)^2 p^{\eta-5} F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 2 - \frac{\eta}{2}, 3, \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right), & p > p_F \end{cases} \quad (5.40)$$

Termenul $\frac{p}{m}$ reprezintă componenta clasică a vitezei unei particule, iar termenii adiționali reflectă contribuția interacțiunilor de tip long-range la viteză. Interacțiunile de tip long-range joacă un rol esențial în modularea dinamicii particulelor. Prezența termenilor de corecție bazate pe p_F și η indică faptul că viteza particulelor nu urmează un comportament liniar simplu, ci este influențată de efectele cuantice ale interacțiunilor long-range.

5.3. Calculul Densității de stări în apropierea suprafeței fermi

În continuare dorim să calculăm densitatea de stări de impuls p , $N(p)$, și mai exact, să vedem ce se întâmplă în apropierea p_F . Deoarece ne este mai la îndemână calculul densității de stări în funcție de impulsurile p , mai degrabă decât în funcție de energiile $\varepsilon_{\vec{p}}$, vom proceda astfel:

$$N(\varepsilon_{\vec{p}}) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int \frac{dL}{|\nabla \varepsilon_{\vec{p}}|} \quad (5.41)$$

Unde dL este elementul de linie din spațiul impulsurilor:

$$dL = p d\theta \quad (5.42)$$

Iar gradientul energiilor:

$$|\nabla \varepsilon_{\vec{p}}| = |v_{\vec{p}}| \quad (5.43)$$

Densitatea de stări în funcție de impulsuri are, deci, forma următoare:

$$N(p) = \frac{1}{\pi} \frac{p}{|v_{\vec{p}}|} \quad (5.44)$$

Urmează să calculăm valoarea vitezei fermionilor când $p \rightarrow p_F$, pe care ulterior să o înlocuim în relația (5.44) și să obținem într-un final densitatea de stări în apropierea suprafeței Fermi. Prima dată aproximăm valorile funcțiilor hipergeometrice din relația (5.40), iar mai apoi calculăm limitele acestora pentru $p \rightarrow p_F$, prin dezvoltarea lor în serie Taylor.

Ne folosim de următoarea relație pentru a aproxima valorile funcțiilor hipergeometrice, deoarece ne interesează ca a patra variabilă din funcția hipergeometrică să tindă spre 0, când $p \rightarrow p_F$.

$$\begin{aligned} F(\alpha, \beta, \gamma, z) &= \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} F(\alpha, \beta, \alpha + \beta - \gamma + 1, 1 - z) \\ &+ (1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} F(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma - \alpha - \beta + 1, 1 - z) \end{aligned} \quad (5.45)$$

Atunci, cele trei funcții hipergeometrice din expresia vitezei vor deveni

- $F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2, \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right) = \frac{\Gamma(\eta-1)}{\Gamma(\frac{\eta}{2})\Gamma(1+\frac{\eta}{2})} F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2 - \eta, 1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right) + \left[1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right]^{\eta-1} \frac{\Gamma(1-\eta)}{\Gamma(2-\frac{\eta}{2})\Gamma(1-\frac{\eta}{2})} F\left(\frac{\eta}{2}, 1 + \frac{\eta}{2}, \eta, 1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right)$
- $F\left(1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2, \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right) = \frac{\Gamma(\eta)}{[\Gamma(1+\frac{\eta}{2})]^2} F\left(1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \eta, 1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right) + \left[1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right]^{\eta} \frac{\Gamma(-\eta)}{[\Gamma(1-\frac{\eta}{2})]^2} F\left(1 + \frac{\eta}{2}, 1 + \frac{\eta}{2}, 1 + \eta, 1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right)$
- $F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 2 - \frac{\eta}{2}, 3, \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right) = \frac{2\Gamma(\eta-1)}{[\Gamma(1+\frac{\eta}{2})]^2} F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 2 - \frac{\eta}{2}, 2 - \eta, 1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right) + \left[1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right]^{\eta-1} \frac{2\Gamma(1-\eta)}{[\Gamma(2-\frac{\eta}{2})]^2} F\left(1 + \frac{\eta}{2}, 1 + \frac{\eta}{2}, \eta, 1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right)$

(5.46)

Vom dezvolta în serie Taylor în jurul valorii p_F fiecare funcție hipergeometrică din membrul drept și vom lua în considerare doar primii doi termeni. Vom nota fiecare termen în parte, pentru a face calculul ulterior mai ușor.

$$\begin{aligned}
& \circ F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 2 - \eta, 1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right) \cong 1 + \frac{4-\eta}{4} \left[1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right] = T_1 \\
& \circ F\left(\frac{\eta}{2}, 1 + \frac{\eta}{2}, \eta, 1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right) \cong 1 + \frac{2+\eta}{4} \left[1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right] = T_2 \\
& \circ F\left(1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \frac{\eta}{2}, 1 - \eta, 1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right) \cong 1 + \frac{(2-\eta)^2}{4(1-\eta)} \left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right] = T_3 \\
& \circ F\left(1 + \frac{\eta}{2}, 1 + \frac{\eta}{2}, 1 + \eta, 1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right) \cong 1 + \frac{(2+\eta)^2}{4(1+\eta)} \left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right] = T_4 \\
& \circ F\left(2 - \frac{\eta}{2}, 2 - \frac{\eta}{2}, 2 - \eta, 1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right) \cong 1 + \frac{(4-\eta)^2}{4(2-\eta)} \left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right] = T_5 \\
& \circ F\left(1 + \frac{\eta}{2}, 1 + \frac{\eta}{2}, \eta, 1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right) \cong 1 + \frac{(2+\eta)^2}{4\eta} \left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right] = T_6
\end{aligned} \tag{5.47}$$

Așadar, în urma aproximărilor, viteza unei particule dintr-o stare de impuls p este:

$$v_{p \rightarrow p_F} = \frac{p_F}{m} + \left\{ \begin{array}{ll} A p_F^{\eta-1} \frac{\eta \Gamma\left(2 - \frac{\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)} \left\{ \frac{\Gamma(\eta-1)}{\left(\frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)} T_1 + \right. \\ \left. \left[1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right]^{\eta-1} \frac{\Gamma(1-\eta)}{\Gamma\left(2 - \frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)} \frac{\Gamma(\eta-1)}{\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)} T_2 \right\} & p < p_F \\ 0, & p = p_F \\ 2A \frac{p_F^{\eta-1} \Gamma\left(2 - \frac{\eta}{2}\right)}{2^\eta \Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)} \left\{ \frac{\Gamma(\eta)}{\left[\Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)\right]^2} T_3 + \left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right]^\eta \frac{\Gamma(-\eta)}{\left[\Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right)\right]^2} T_4 + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta}{2}\right) \left[\frac{2\Gamma(\eta-1)}{\left[\Gamma\left(1 + \frac{\eta}{2}\right)\right]^2} T_5 + \left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right]^{\eta-1} \frac{2\Gamma(1-\eta)}{\left[\Gamma\left(2 - \frac{\eta}{2}\right)\right]^2} T_6 \right] \right\} & p > p_F \end{array} \right. \tag{5.48}$$

Acum este momentul să calculăm limitele pentru fiecare caz.

I. Pentru $p \rightarrow p_F$, $p < p_F$

Dacă $y=1 \Leftrightarrow p = p_F$ deci $T_1 = T_2 = 1$

În ceea ce privește termenul $\left[1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right]^{\eta-1} \rightarrow 0$ pentru $\eta > 1$

$$\left[1 - \left(\frac{p}{p_F}\right)^2\right]^{\eta-1} \rightarrow \infty \text{ pentru } \eta < 1$$

a) $\eta < 1$

În acest caz, termenul al doilea din paranteză predomină. Așadar, viteza va fi aproximativ de forma

$$v_{p \rightarrow p_F} \underset{\substack{p < p_F \\ \eta < 1}}{\cong} \frac{A\Gamma(1-\eta)}{\pi} \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-1} \left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right]^{\eta-1} \sin\left(\frac{\pi\eta}{2}\right) \quad (5.49.1)$$

Am ținut cont de relația

$$\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right) \Gamma\left(1 - \frac{\eta}{2}\right) = \frac{\pi}{\sin\left(\frac{\pi\eta}{2}\right)} \quad (5.50)$$

b) $\eta > 1$

În acest caz, primul termen din paranteză predomină. Așadar, viteza va fi aproximativ de forma

$$v_{p \rightarrow p_F} \underset{\substack{p < p_F \\ \eta > 1}}{\cong} \frac{p_F}{m} + A \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-1} \frac{2\Gamma\left(2 - \frac{\eta}{2}\right)\Gamma(\eta-1)}{\eta \left[\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\right]^3} \quad (5.49.2)$$

II. Pentru $p \rightarrow p_F$, $p > p_F$

Dacă $y=1 \Leftrightarrow p = p_F$ deci $T_3 = T_4 = T_5 = T_6 = 1$

În ceea ce privește termenul $\left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right]^{\eta-1} \rightarrow 0$ pentru $\eta > 1$

$$\left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right]^{\eta-1} \rightarrow \infty \text{ pentru } \eta < 1$$

a) $\eta < 1$

$$v_{\substack{p \rightarrow p_F \\ p > p_F \\ \eta < 1}} \cong \frac{p_F}{m} + A \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-1} \frac{\Gamma(1-\eta)}{\pi} \left[1 - \left(\frac{p_F}{p}\right)^2\right]^{\eta-1} \sin\left(\frac{\pi\eta}{2}\right) \quad (5.51.1)$$

b) $\eta > 1$

$$v_{\substack{p \rightarrow p_F \\ p > p_F \\ \eta > 1}} \cong \frac{p_F}{m} + A \left(\frac{p_F}{2}\right)^{\eta-1} \frac{2}{\eta} \frac{\Gamma\left(2 - \frac{\eta}{2}\right) \Gamma(\eta - 1)}{\left[\Gamma\left(\frac{\eta}{2}\right)\right]^3} \quad (5.51.2)$$

În final, putem scrie relațiile pentru densitatea de stări în apropierea impulsului Fermi, pentru valori ale impulsului mai mici sau mai mari decât p_F folosindu-ne de relațiile (5.49.1), (5.49.2), (5.51.1), (5.51.2).

$$N_{\substack{(p \rightarrow p_F) \\ p < p_F}} \cong \begin{cases} \left(\frac{p}{\pi} \left| \begin{array}{l} v_{p \rightarrow p_F} \\ p < p_F \\ \eta < 1 \end{array} \right. \right)^{-1}, & \eta < 1 \\ \left(\frac{p}{\pi} \left| \begin{array}{l} v_{p \rightarrow p_F} \\ p < p_F \\ \eta > 1 \end{array} \right. \right)^{-1}, & \eta > 1 \end{cases} \quad (5.52)$$

$$N_{\substack{(p \rightarrow p_F) \\ p > p_F}} \cong \begin{cases} \left(\frac{p}{\pi} \left| \begin{array}{l} v_{p \rightarrow p_F} \\ p > p_F \\ \eta < 1 \end{array} \right. \right)^{-1}, & \eta < 1 \\ \left(\frac{p}{\pi} \left| \begin{array}{l} v_{p \rightarrow p_F} \\ p > p_F \\ \eta > 1 \end{array} \right. \right)^{-1}, & \eta > 1 \end{cases} \quad (5.53)$$

Graficele din Figurile 5.3.1, 5.3.2 și 5.3.3 prezintă dependențele densităților de stări de impuls din relațiile (5.52) și (5.53), pentru diferite valori ale lui η . Se observă faptul că dependența densității

de stări se schimbă în funcție de interacțiune, adică de valoarea lui η . Scăderea densității de stări la p_F apare din cauza unei modificări în comportamentul vitezei particulelor. La p_F , viteza particulelor suferă o schimbare abruptă, ceea ce duce la o scădere a densității de stări (punctul de inflexiune).

În graficul din figura 5.3.3, pentru $\eta=1.5$, observăm că densitatea de stări crește aproximativ liniar cu impulsul pentru $p > p_F$ și nu prezintă aceleași variații abrupte ca și în cazurile anterioare. Acest lucru se întâmplă deoarece interacțiunea dintre particule este mai puternică, conducând la o creștere mai uniformă a densității de stări cu impulsul.

În cazul graficului din figura 5.3.1, pe de altă parte, creșterea densității de stări este semnificativ mai abruptă pentru $p > p_F$. Acest lucru se întâmplă datorită interacțiunii mai slabe care face ca viteza particulelor să se schimbe brusc. Viteza particulei se stabilizează când interacțiunile sunt mai slabe, iar acest lucru se observă prin apariția unei dependențe aproximativ constante a densității de stări de impuls.

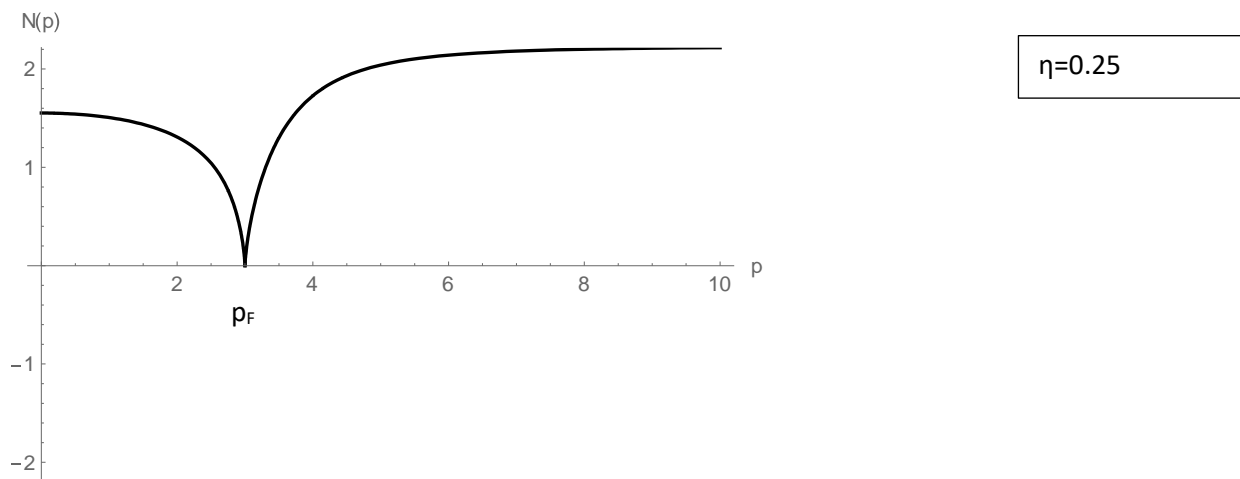


Figura 5.3.1. Dependența densității de stări pentru un sistem fermionic bidimensional, de impulsurile particulelor pentru o interacțiune de forma $\frac{A}{r^{1/4}}$

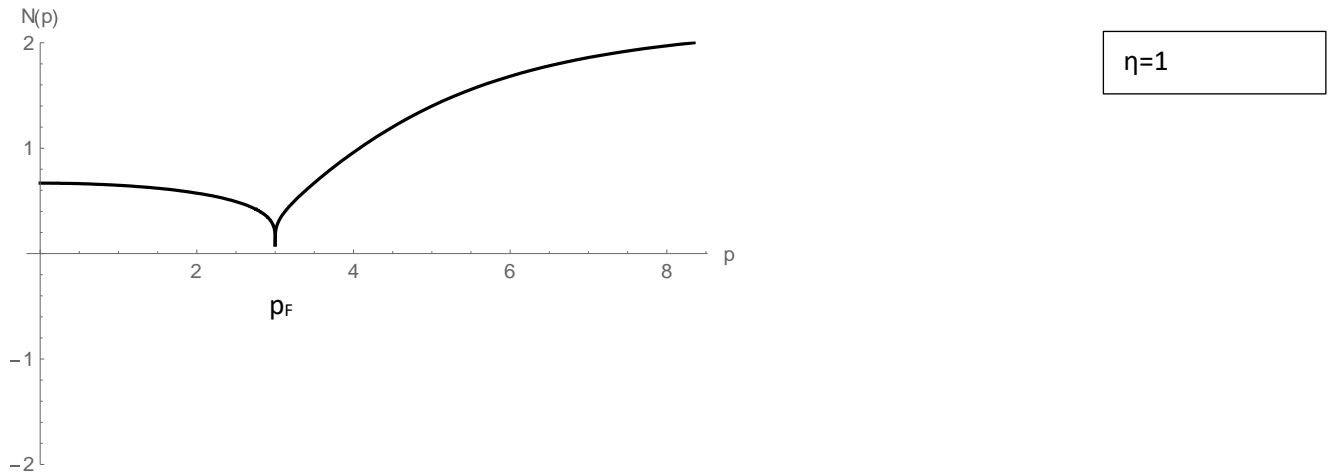


Figura 5.3.2. Dependența densității de stări pentru un sistem fermionic bidimensional, de impulsurile particulelor pentru o interacțiune de forma $\frac{A}{r}$ (coulombiană)

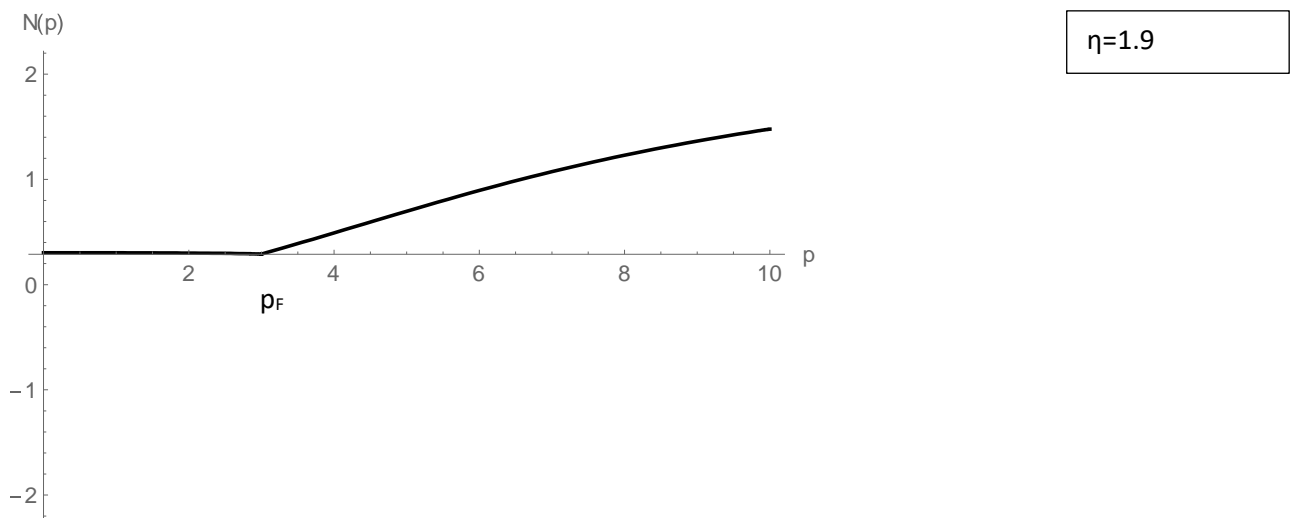


Figura 5.3.3. Dependența densității de stări pentru un sistem fermionic bidimensional, de impulsurile particulelor pentru o interacțiune de forma $\frac{A}{r^{1.9}}$

Concluzii

Studiul comportamentului unui gaz de fermioni bidimensional (2D) cu un potențial de interacțiune de forma $V(r) = \frac{A}{r^\eta}$ are mai multe motivații și semnificații în fizica teoretică și a materiei condensate.

În 2D, electronii de pe suprafața Fermi pot manifesta comportamente non-triviale din cauza interacțiunilor și corelațiilor puternice. Potențialele de forma $V(r) = \frac{A}{r^\eta}$ permit explorarea modului în care aceste interacțiuni modifică distribuția de densitate electronică și implicit conductivitatea și mobilitatea electronilor în materiale bidimensionale.

La temperatura de zero absolut, majoritatea proprietăților electronice și de transport ale unui gaz de fermioni sunt determinate de electronii de pe suprafața Fermi. Studiind comportamentul în apropierea impulsului Fermi, putem înțelege mai bine aceste proprietăți.

În capitolul 5.1 am calculat energia totală a unui sistem fermionic în care avem interacțiuni de tipul long-range. Forma complexă a energiei indică faptul că sistemul fermionic cu interacțiuni long-range prezintă o dinamică complexă, ce nu poate fi redusă la modele simple de interacțiuni locale. Aceasta include fenomene precum răspândirea corelațiilor într-un mod non-balistic și variațiile neașteptate ale dinamicii entanglement-ului.

În capitolul 5.2 am calculat viteza fermionilor din stările de impuls p și am găsit o dependență non-liniară și non-trivială, ceea ce era de așteptat în contextul interacțiunilor long-range. Termenii de corecție complicați sugerează o dinamică complexă, iar studiul vitezei particulelor este relevant atât pentru calculul ulterior al densității de stări, cât și pentru explicarea anumitor fenomene de transport cum ar fi conductivitatea electrică, termică sau difuzia în materiale.

După calculul vitezei, am obținut valori diferite pentru $p < p_F$, $p = p_F$ și $p > p_F$, pe care le-am folosit în aproximarea densității de stări în apropierea impulsului fermi în capitolul 5.3. Pentru dependența obținută pentru $\eta=1$, adică pentru potențialul coulombian, avem suprapunere de rezultate cu cele obținute în anii 70 din referința [2], fapt care susține corectitudinea calculelor noastre.

Densitatea de stări este crucială pentru înțelegerea proprietăților electronice și de transport ale materialului. O densitate de stări mare în vecinătatea lui p_F poate conduce la o conductivitate mai mare, deoarece există mai multe stări disponibile pentru transportul de sarcină. Capacitatea calorică este de asemenea influențată de densitatea de stări și de aceea este util studiul teoretic al acesteia.

Aceste rezultate, nu doar că îmbunătățesc înțelegerea fundamentelor fizicii sistemelor fermionice bidimensionale, dar oferă și un cadru teoretic pentru investigarea și prezicerea comportamentelor dinamice neconvenționale în sisteme similare. Astfel, ele pot ghida dezvoltarea unor noi experimente și simulări numerice menite să exploreze fenomene emergente în materie activă și sisteme cuantice cu interacțiuni long-range.

Bibliografie

- [1] I. Țifrea, I. Grosu, M. Crișan, *Metode cuantice pentru studiul sistemelor cu multe particule. Aplicații la sisteme fermionice și Bosonice*, Presa Universitară Clujeană, 2005
- [2] Gabriele Giuliani, Giovanni Vignale, *QUANTUM THEORY OF THE ELECTRON LIQUID*, Cambridge University Press, New York, 2005
- [3] David Pines, Philippe Nozières, *THE THEORY OF QUANTUM LIQUIDS- Volume I: Normal Fermi Liquids*, W.A. Benjamin. Inc., New York, Amsterdam, 1966
- [4] Altland, A., & Simons, B. (n.d.). *Second quantization. Condensed Matter Field Theory*, 39–93. Cambridge University Press, New York, 2010
- [5] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products- Seventh edition*, Academic Press, United States of America, 2007
- [6] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, Second Revised Printing, John Wiley, 1987
- [7] Orion Ciftja, *Hartree–Fock energy of a finite two-dimensional electron gas system in a jellium background*, Physica B: Condensed Matter, Volume 458, 2015, Pages 92-97
- [8] Alexander M. Gabovich, Mai Suan Li, Henryk Szymczak, Alexander I. Voitenko, *Non-Coulombic behavior of electrostatic charge-charge interaction in three-layer heterostructures*, Journal of Electrostatics, Volume 102, 2019
- [9] Livio Nicola Carenza, Josep-Maria Armengol-Collado, Dimitrios Krommydas, Luca Giomi, *Quasi long-ranged order in two-dimensional active liquid crystals*, Instituut-Lorentz, Universiteit Leiden, P.O. Box 9506, 2300 RA Leiden, The Netherlands 2Department of Physics, Koç University, Rumelifeneri Yolu, 34450 Sarıyer, Istanbul, Türkiye (Dated: November 7, 2023)
- [10] Defenu, Nicolò & Lerose, Alessio & Pappalardi, Silvia. (2023). *Out-of-equilibrium dynamics of quantum many-body systems with long-range interactions*.

- [11] Jinglu Liu, Yiran Ding, Mengqi Zeng, Lei Fu, *Chemical insights into two-dimensional quantum materials*, *Matter*, Volume 5, Issue 7, 2022, Pages 2168-2189
- [12] Mahan, G. D. (2000). *Many-Particle Physics (3rd ed.)*. Kluwer Academic/Plenum Publishers.
- [13] Gell-Mann, Murray, Brueckner, Keith A., *Correlation Energy of an Electron Gas at High Density*, American Physical Society, 1957

DECLARAȚIE PE PROPRIE RĂSPUNDERE

Subsemnata, Lianu Ilinca, declar că Lucrarea de licență pe care o voi prezenta în cadrul examenului de finalizare a studiilor la Facultatea de Fizică, din cadrul Universității Babeș-Bolyai, în sesiunea iunie 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,

17.06.2024

Nume,

Lianu Ilinca