

Άσκηση 1

(1) Ναδειχθεί ότι οι ιδιοτιμές των εξισώσεων Hartree-Fock για βάση κυματοσυναρτήσεων επιπέδων κυμάτων είναι

$$\varepsilon_{\mathbf{k}s} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}' < k_F} \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2}. \quad (1)$$

(Δίδεται ο μετασχηματισμός Fourier του $1/r : \int d^3 r \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})/r = 4\pi/|\mathbf{k}|^2$).

(2) Ναδειχθεί ότι, στο όριο του άπειρου συστήματος, παίρνουμε

$$\varepsilon_{\mathbf{k}s} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2e^2 k_F}{\pi} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_F^2 - k^2}{4kk_F} \ln \left| \frac{k_F + k}{k_F - k} \right| \right]. \quad (2)$$

(3) Ναδειχθεί ότι $\varepsilon_{\mathbf{k}s} \xrightarrow{k \rightarrow 0} -\frac{2e^2 k_F}{\pi}$ και $\varepsilon_{\mathbf{k}s} \xrightarrow{k \rightarrow k_F} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{\pi}$.

(4) Να γίνει γραφική παράσταση της $\frac{2m\varepsilon_{\mathbf{k}s}}{\hbar^2 k_F^2}$ συναρτήσει του $\frac{k}{k_F}$ βάσει της Εξ. (2)

για το μεταλλικό νάτριο ($k_F = 0.91 \text{ \AA}^{-1}$, $1 \text{ au} = 0.529 \text{ \AA}$).

(5) Να γίνουν οι αντίστοιχοι υπολογισμοί και για θωρακισμένο δυναμικό Coulomb, $(e^2/r) \exp(-k_0 r)$, αντί για απλό δυναμικό Coulomb, e^2/r .