

Rol de las interacciones

Prof. Alberto Camjayi

Introducción

Importancia de las interacciones

Hasta aquí hemos considerado la influencia de las interacciones en los fenómenos magnéticos y hemos visto que juegan un rol central.

Incluso en el caso del paramagnetismo, donde no se toman en cuenta las interacciones, las mismas se manifiestan indirectamente a través de las reglas de Hund.

Por supuesto, en los casos de orden magnético, la interacción de Coulomb (más el principio de exclusión de Pauli) son quienes dan origen a la interacción efectiva entre los momentos magnéticos.

Nos preguntaremos ahora qué sucede con los grados de libertad de carga.

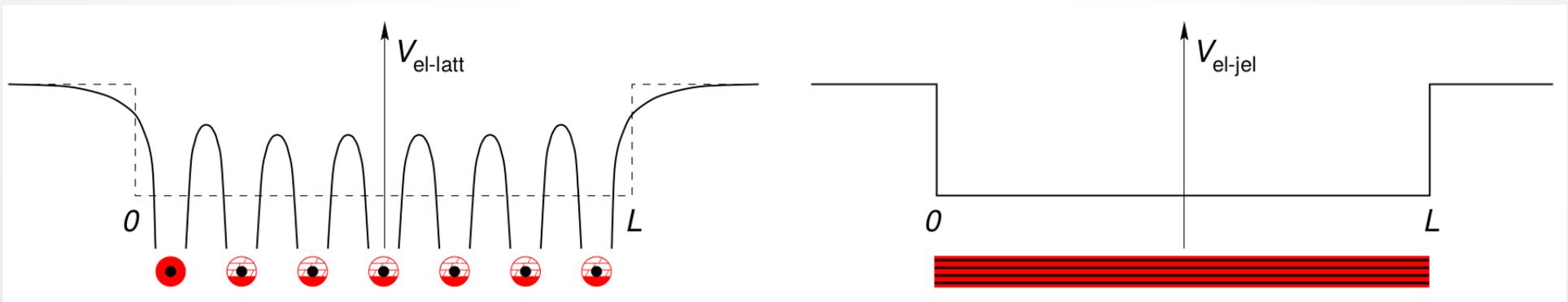
Introducción

Modelo de Jellium

Si incorporamos las interacciones entre electrones la descripción de los sólidos se hace muy difícil.

Muchas veces, para comprender el rol de las interacciones en los metales, se apela a un modelo simplificado donde la red de iones es reemplazada por un fondo uniforme de carga positiva, de manera tal de que el sistema total sea neutro. Este modelo se conoce como “*modelo de Jellium*”.

Pese a la simplificación introducida, su solución exacta nos es desconocida.



Introducción

Modelo de Jellium

En las primeras clases resolvimos el electrón libre. Ahora agregamos a estos la interacción de Coulomb entre ellos y con el fondo positivo. Como el sistema es uniforme, la base de una partícula de ondas planas sigue siendo adecuada.

Veamos primero cuales son los límites de interacción débil (electrones libres) y de interacción fuerte (alta correlación).

Podemos calcular la relación entre energías cinética y potencial:

$$\left. \begin{array}{l} E_{\text{cin.}} \propto n^{\frac{2}{3}} \\ E_{\text{pot.}} \simeq \frac{e^2}{a} \propto n^{\frac{1}{3}} \end{array} \right\} \frac{E_{\text{pot.}}}{E_{\text{cin.}}} \propto \frac{n^{\frac{1}{3}}}{n^{\frac{2}{3}}} = n^{-\frac{1}{3}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Introducción

Modelo de Jellium [Ashcroft, Sigríst]

En las primeras clases resolvimos el electrón libre. Ahora agregamos a estos la interacción de Coulomb entre ellos y con el fondo positivo. Como el sistema es uniforme, la base de una partícula de ondas planas sigue siendo adecuada.

Veamos primero cuales son los límites de interacción débil (electrones libres) y de interacción fuerte (alta correlación).

Habitualmente se introduce el parámetro r_S :

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{n} &= \frac{4\pi}{3} (r_S a_0)^3 = \frac{3\pi^2}{k_F^3} \\ a_0 &\text{ radio de Bohr} \end{aligned} \right\} \frac{E_{\text{pot.}}}{E_{\text{cin.}}} \propto r_S$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

Comencemos por el límite de interacción débil resolviendo el modelo en la aproximación de Hartree-Fock (**en este caso particular**, los mismos resultados se pueden obtener llevando a cabo simple teoría de perturbaciones a primer orden).

El hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = H_{\text{cin.}} + H_{e-e} + H_{e-i} + H_{i-i}.$$

Queremos calcular la energía del estado fundamental. En Hartree-Fock, el hamiltoniano efectivo es de una partícula y por lo tanto, la base de ondas planas y los estados producto de N-partículas son una buena base.

$$\hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

El término complicado, es el de interacción electrón-electrón.

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

El término de Hartree:

$$H^H = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left(\langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \rangle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'} + \right. \\ \left. + \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'} \rangle - \langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \rangle \langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'} \rangle \right)$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

El término complicado, es el de interacción electrón-electrón.

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

El término de Hartree:

$$H^H = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left(\langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \rangle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'} + \right. \\ \left. + \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'} \rangle - \langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \rangle \langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'} \rangle \right)$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

El término complicado, es el de interacción electrón-electrón. Como el sistema es uniforme, tomaremos

$$\langle \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle = n_{\sigma} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \delta_{\sigma\sigma'} \text{ y } n_{\uparrow} = n_{\downarrow}.$$

El término de Hartree resulta:

$$H^{\text{H}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left(2n \sum_{\sigma} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} - n^2 \right)$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

El término complicado, es el de interacción electrón-electrón.

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

El término de Fock:

$$H^F = -\frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left(\langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'} \rangle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} + \right. \\ \left. + \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'} \langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \rangle - \langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'} \rangle \langle \hat{\Psi}_{\mathbf{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} \rangle \right)$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

El término complicado, es el de interacción electrón-electrón.
Como el sistema es uniforme, tomaremos

$$\langle \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle = n_{\sigma} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \delta_{\sigma\sigma'} \text{ y } n_{\uparrow} = n_{\downarrow}.$$

El término de Fock resulta:

$$H^{\text{F}} = -\frac{1}{2} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left(2n_{\sigma} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} - n_{\sigma}^2 \right)$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

Evaluemos ahora la energía en el fundamental $|\psi\rangle$. Recordemos que el mismo se escribe como un determinante de Slater de ondas planas (base de una partícula) y que debe ser tal que produzca la densidad n , a determinar de forma autoconsistente.

$$E_{\text{cin.}} = \langle \psi | H_{\text{cin.}} | \psi \rangle = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

$$E_{e-i} = - \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \langle \psi | \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} | \psi \rangle =$$
$$= - \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n^2 e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

$$E_{\text{cin.}} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

$$E_{e-i} = - \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n^2 e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad E_{i-i} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n^2 e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

$$E^{\text{H}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left(2n \sum_{\sigma} \langle \psi | \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} | \psi \rangle - n^2 \right)$$
$$= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n^2 e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

$$E_{\text{cin.}} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

$$E_{e-i} = - \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n^2 e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

$$E_{i-i} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n^2 e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

$$E^{\text{H}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left(2n \sum_{\sigma} \langle \psi | \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{\Psi}_{\mathbf{r}\sigma} | \psi \rangle - n^2 \right)$$

$$= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n^2 e_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

$$E_{e-i} + E_{i-i} + E^{\text{H}} = 0$$

Hartree-Fock

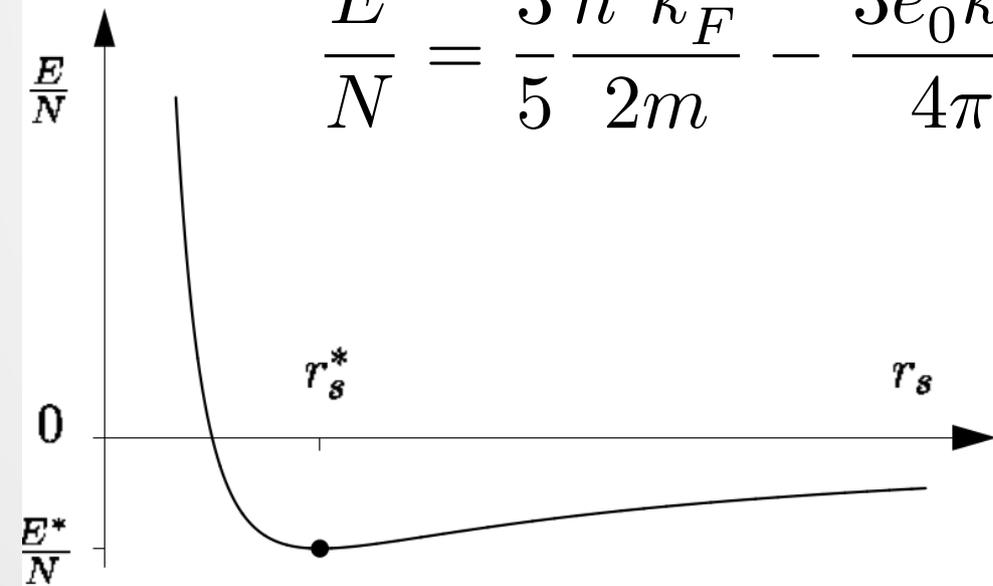
Modelo de Jellium en Hartree-Fock

La energía del fundamental es por lo tanto

$$E = \frac{3}{5} N \varepsilon_F + E^F.$$

La energía de Fock se puede evaluar y el resultado final es

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \frac{3e_0^2 k_F}{4\pi} = \left(\frac{2.21}{r_S^2} - \frac{0.916}{r_S} \right) \text{ Ry.}$$



$$\frac{\partial E}{\partial r_S} = 0 \Rightarrow r_S^* = 4,83 \text{ ó } a \approx 4 \text{ \AA}$$

$$E(r_S^*) = -0,029 \text{ Ry} = -1,29 \text{ eV}$$

Hartree-Fock

Modelo de Jellium en Hartree-Fock

Este resultado nos muestra que, a primer orden, el gas de electrones es estable frente a las interacciones y que existe una densidad (o una distancia media) que minimiza la energía.

El espectro de HF presenta ciertas características no físicas que deben corregirse.

El problema es ir más allá de este resultado. Simple teoría de perturbaciones diverge a segundo orden.

Además, en metales $2 \lesssim r_S \lesssim 6$, por lo que el segundo término es comparable al primero.

¡La interacción no puede despreciarse!

Apantallamiento

Excitaciones de carga

En un metal, las excitaciones electrón-agujero son las excitaciones elementales del sistema por sobre la energía del fundamental.

Como las mismas pueden tener una energía arbitrariamente pequeña, no hay gap, el efecto que producen sobre la interacción de Coulomb es un fuerte apantallamiento (screening).

$$V(r) \propto \frac{1}{r} \rightarrow V'(r) \propto \frac{e^{-r\ell}}{r}$$

El potencial de Coulomb se modifica a otro de corto alcance: el potencial de Yukawa con una longitud de apantallamiento ℓ .

Apantallamiento

Potencial externo

Comencemos estudiando la respuesta del gas de electrones a un potencial externo.

$$\mathcal{H} = H_{\text{cin.}} + \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} V_{\text{ext.}}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$$

Nos concentraremos en respuesta lineal y tomaremos

$$V_{\text{ext.}}(\mathbf{r}, t) = V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} e^{\eta t},$$

donde $\eta \rightarrow 0^{+}$ introduce el “encendido adiabático” del potencial. Nos interesa la solución estacionaria, no la respuesta transitoria.

Apantallamiento

Potencial externo

Si transformamos Fourier

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) e^{-i\omega t} e^{\eta t} &= \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} V_{\text{ext.}} e^{-i\omega t} e^{\eta t} \\ &\equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma}^{\dagger} V_{\text{ext.}} e^{-i\omega t} e^{\eta t} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma}^{\dagger} V_{\text{ext.}} e^{-i\omega t} e^{\eta t}$$

Apantallamiento

Potencial externo, visión macro

El potencial externo induce un reacomodamiento de las carga, que introduce una pequeña (respuesta lineal) modulación en la densidad de carga

$$n_{\text{ext.}}(\mathbf{r}, t) = n_0 + \delta n_{\text{ext.}}(\mathbf{r}, t)$$

con

$$\delta n_{\text{ext.}}(\mathbf{r}, t) = \delta n_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, t) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - i\omega t}.$$

Por lo tanto, necesitamos calcular el valor medio del operador densidad para vincular el hamiltonano microscópico con la descripción macro (a lo Física 3).

Apantallamiento

Ecuación de movimiento

Para ello, escribamos la ecuación de movimiento del operador

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{n}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} = [\hat{n}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma}, \mathcal{H}] = (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \hat{n}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} + \\ + \left(\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} - \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \right) V_{\text{ext.}} e^{-i\omega t} e^{\eta t}$$

Tomando el promedio térmico $\langle \hat{A} \rangle = Z^{-1} \text{Tr}[\hat{A} e^{-\beta H}]$ y siguiendo en respuesta lineal (i.e. misma dependencia temporal)

$$(\hbar\omega + i\hbar\eta) \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} \rangle = (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} \rangle + \\ + (n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}) V_{\text{ext.}} e^{-i\omega t} e^{\eta t}$$

Apantallamiento

Ecuación de movimiento

Por lo tanto, encontramos que

$$\begin{aligned}\delta n_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} \rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - n_{\mathbf{k}\sigma}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega - i\hbar\eta} V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega)\end{aligned}$$

Introduciendo la función de respuesta (Lindhard)

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - n_{\mathbf{k}\sigma}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega - i\hbar\eta}$$

$$\Rightarrow \delta n_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) = \chi_0(\mathbf{q}, \omega) V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega)$$

Apantallamiento

Efecto de la interacción electrón-electrón

Hasta ahora solo tomamos en cuenta la interacción con un potencial externo. Incorporaremos ahora la interacción entre electrones.

Pensemos que la fluctuación de densidad que calculamos puede ser pensada como una fuente adicional del potencial de Coulomb, que puede determinarse a partir de la ecuación de Poisson:

$$\nabla^2 V_\delta(\mathbf{r}, t) = -4\pi e^2 \delta n(\mathbf{r}, t) \rightarrow V_\delta(\mathbf{q}, \omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \delta n(\mathbf{q}, \omega)$$

Apantallamiento

Efecto de la interacción electrón-electrón

El potencial total, será entonces

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}, \omega) &= V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) + V_{\delta}(\mathbf{q}, \omega) = \\ &= V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{4\pi e^2}{q^2} \delta n(\mathbf{q}, \omega) = \\ &= V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_0(\mathbf{q}, \omega) V(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned}$$

Así encontramos que $V(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega)}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)}$

donde definimos la **función dieléctrica**

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_0(\mathbf{q}, \omega)$$

Apantallamiento

Efecto de la interacción electrón-electrón

Alternativamente

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}, \omega) &= V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) + V_{\delta}(\mathbf{q}, \omega) = \\ &= V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{4\pi e^2}{q^2} \delta n(\mathbf{q}, \omega) = \\ &= V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\mathbf{q}, \omega) V_{\text{ext.}}(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned}$$

Así encontramos que

donde definimos la **función dieléctrica**

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)}$$

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_0(\mathbf{q}, \omega)$$

Contenido físico

Excitaciones electrón-agujero

Analicemos el contenido físico de las funciones de respuesta que hemos hallado.

Comencemos con la respuesta al potencial externo, todavía sin interacción electrón-electrón:

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - n_{\mathbf{k}\sigma}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega - i\hbar\eta}$$

Cuando aplicamos un potencial externo, la densidad inducida es proporcional a la función de Lindhard. Esta es distinta de cero solo si $n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \neq n_{\mathbf{k}\sigma}$.

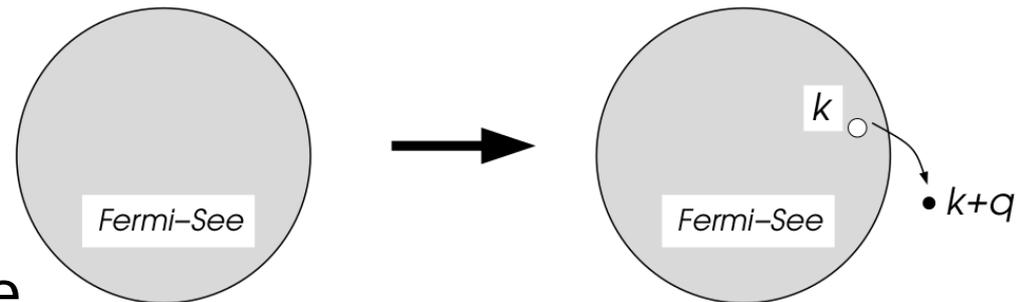
Contenido físico

Excitaciones electrón-agujero

Comencemos con la respuesta al potencial externo, todavía sin interacción electrón-electrón:

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - n_{\mathbf{k}\sigma}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega - i\hbar\eta}$$

Al aplicar el campo, un electrón pasa de un estado $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}$.

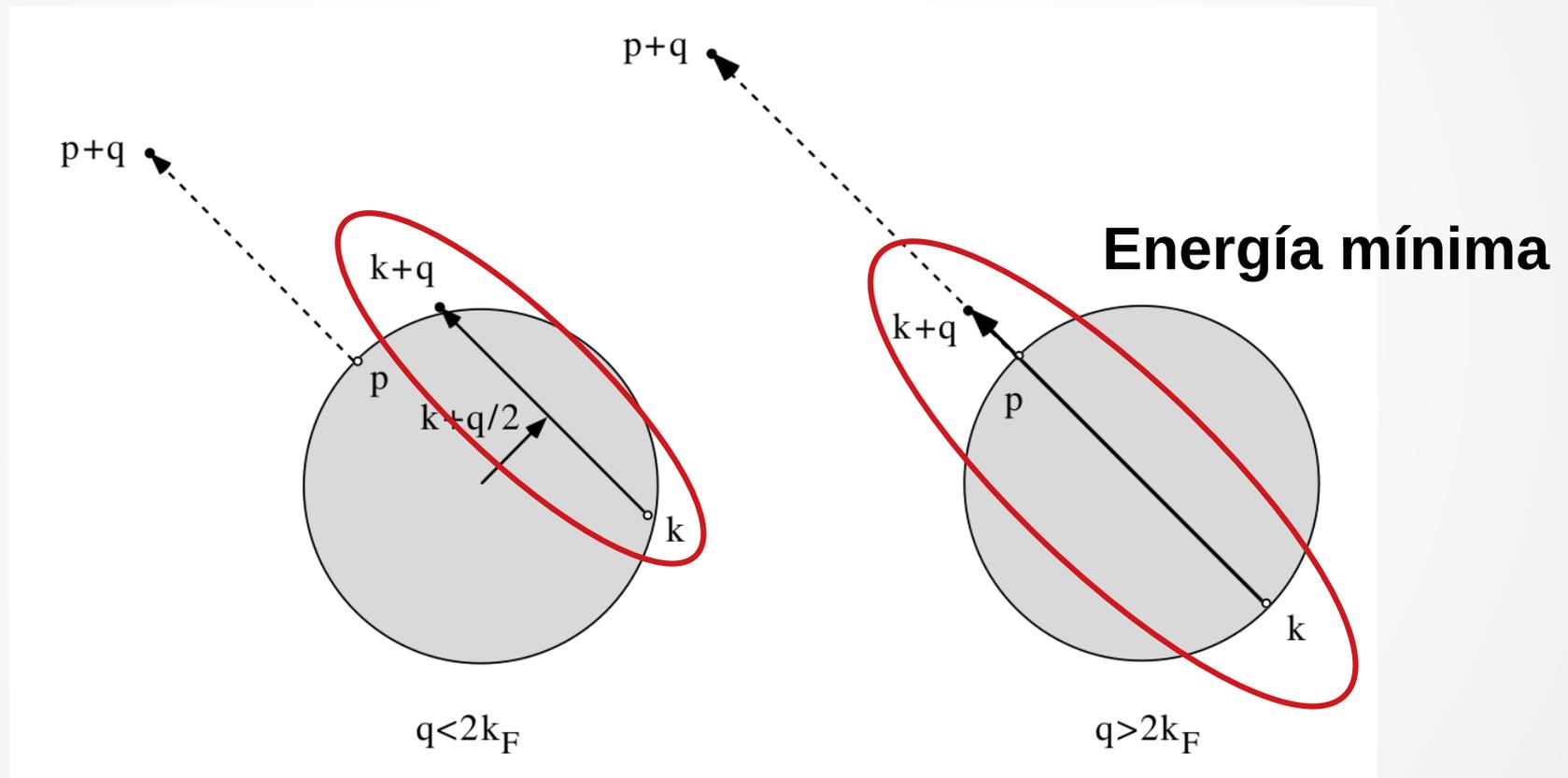


Por exclusión el estado final debe estar por sobre la energía de Fermi.

Contenido físico

Excitaciones electrón-agujero

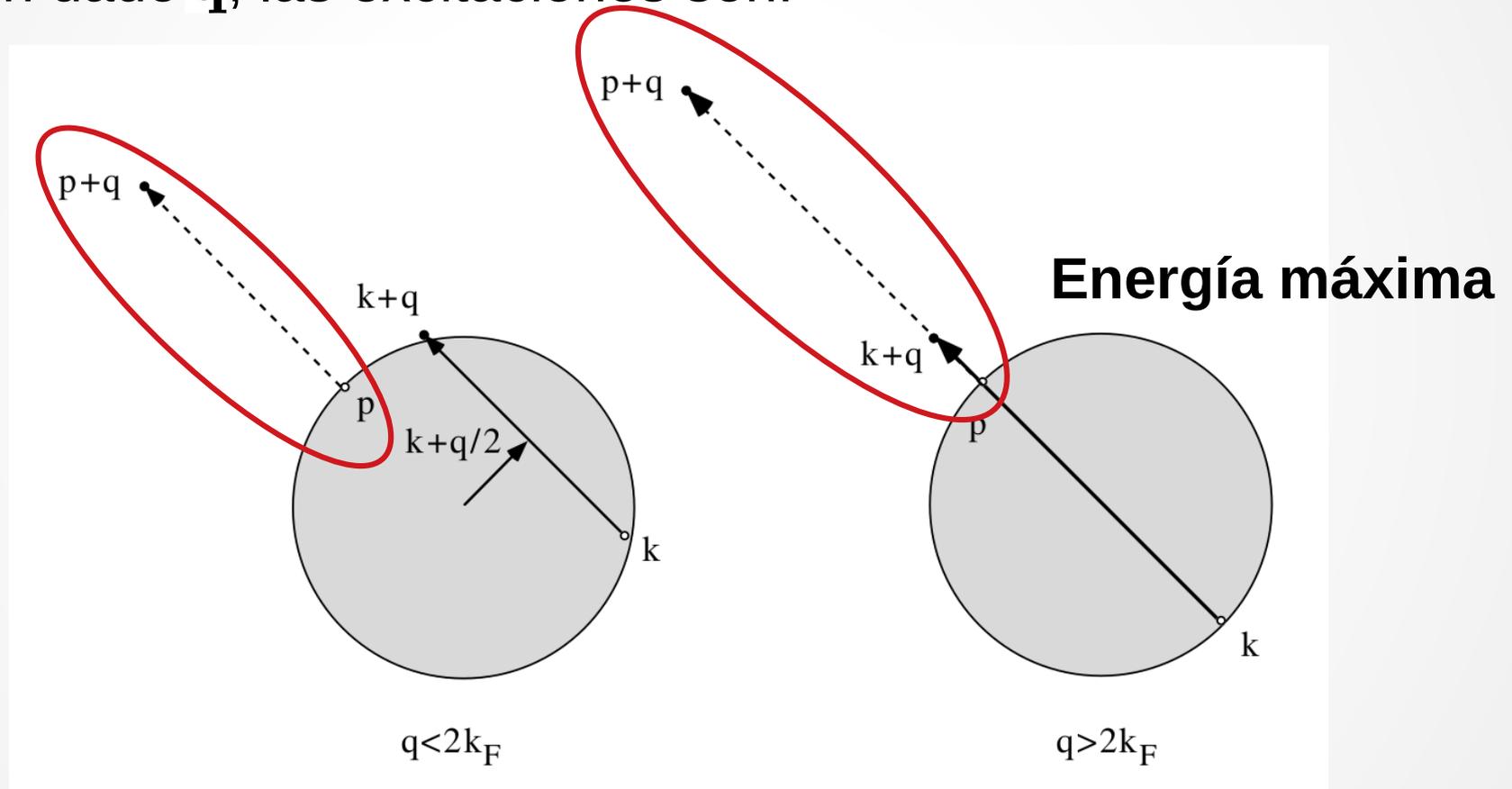
Para un dado q , las excitaciones son:



Contenido físico

Excitaciones electrón-agujero

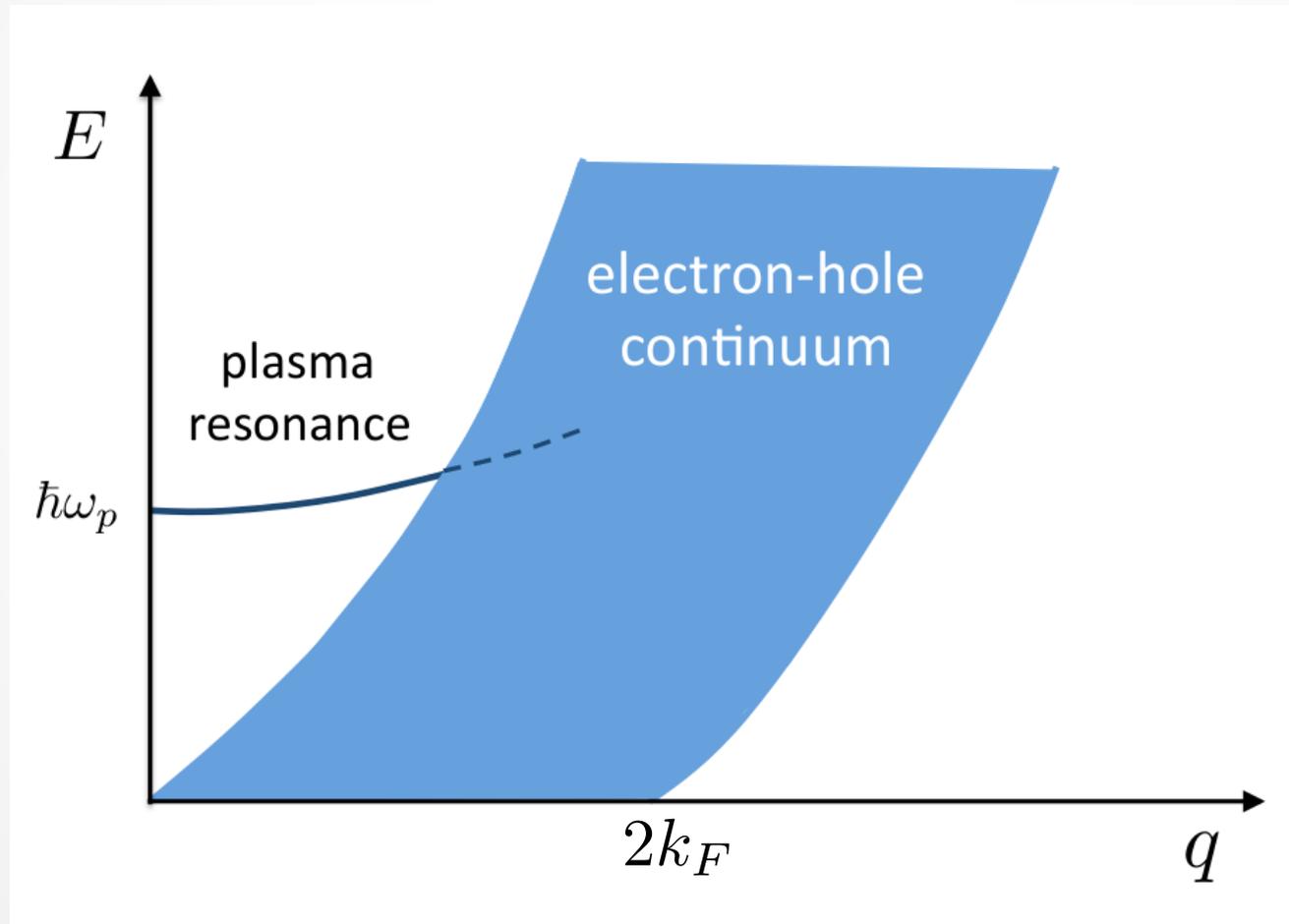
Para un dado q , las excitaciones son:



Contenido físico

Excitaciones electrón-agujero

Espectro continuo de excitaciones partícula-agujero.



Contenido físico

Incluyendo las interacciones. Plasmones.

Comencemos por el **límite de onda larga** (campos uniformes), y tomemos $|\mathbf{q}| \ll k_F$ para expandir en serie de Taylor

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} + \dots$$

$$\chi_0 \approx -2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_F \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}{\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_F - \hbar\omega - i\hbar\eta}$$

$$n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = n_{\mathbf{k}} + \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} + \dots$$

Así se obtiene $\lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$

con la *frecuencia de plasma* igual a $\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m}$

Contenido físico

Incluyendo las interacciones. Plasmones.

Comencemos por el **límite de onda larga** (campos uniformes).

$$\lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m}$$

Modo colectivo de oscilación

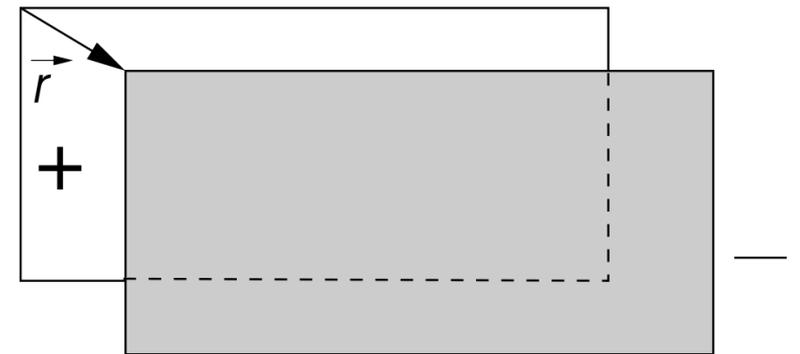
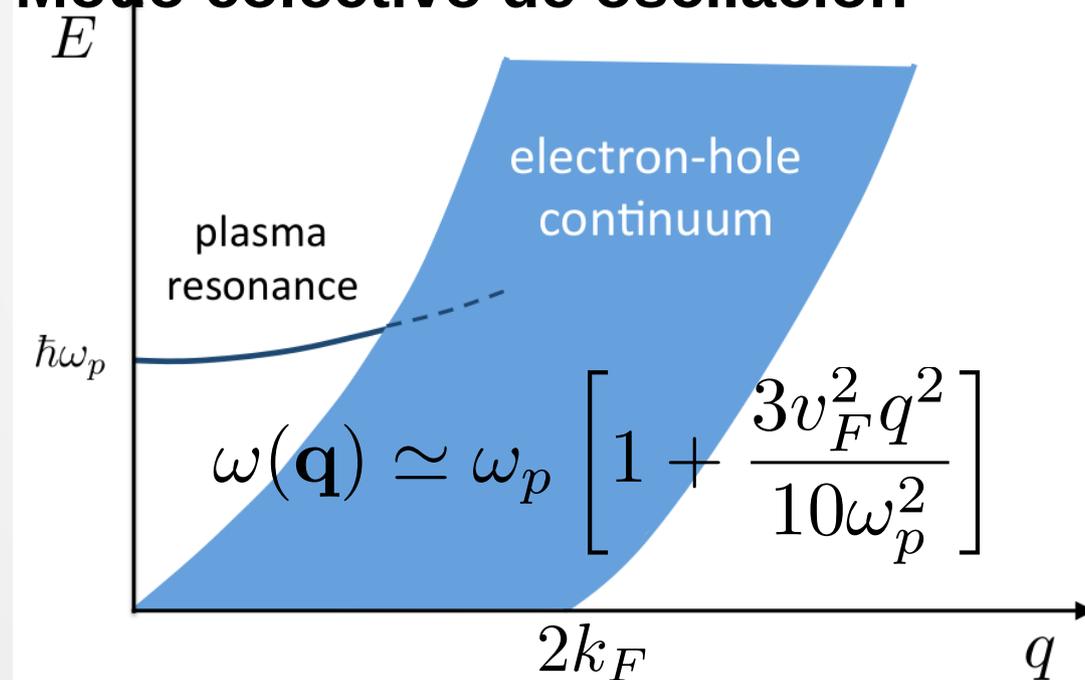


Imagen clásica

Contenido físico

Incluyendo las interacciones. Screening.

Analicemos ahora el caso de **frecuencia cero** (campos estáticos) y momentos de módulo mucho menor al momento de Fermi.

$$\epsilon(\mathbf{q}, 0) = 1 + \frac{6\pi e^2 n / \epsilon_F}{q^2} \equiv 1 + \frac{k_{\text{TF}}^2}{q^2}$$

¿Qué implica esto? Supongamos que el potencial externo es el de una carga puntual. Entonces

$$V(\mathbf{q}) = \frac{V_{\text{ext.}}(\mathbf{q})}{\epsilon(\mathbf{q}, 0)} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{\text{TF}}^2} \Rightarrow V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} \exp(-k_{\text{TF}} r)$$

Contenido físico

Incluyendo las interacciones. Screening.

Analicemos ahora el caso de **frecuencia cero** (campos estáticos) y momentos de módulo mucho menor al momento de Fermi.

$$V(\mathbf{q}) = \frac{V_{\text{ext.}}(\mathbf{q})}{\epsilon(\mathbf{q}, 0)} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{\text{TF}}^2} \Rightarrow V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} \exp(-k_{\text{TF}} r)$$

La nueva escala de longitud k_{TF}^{-1} se conoce como longitud de apantallamiento de Thomas-Fermi.

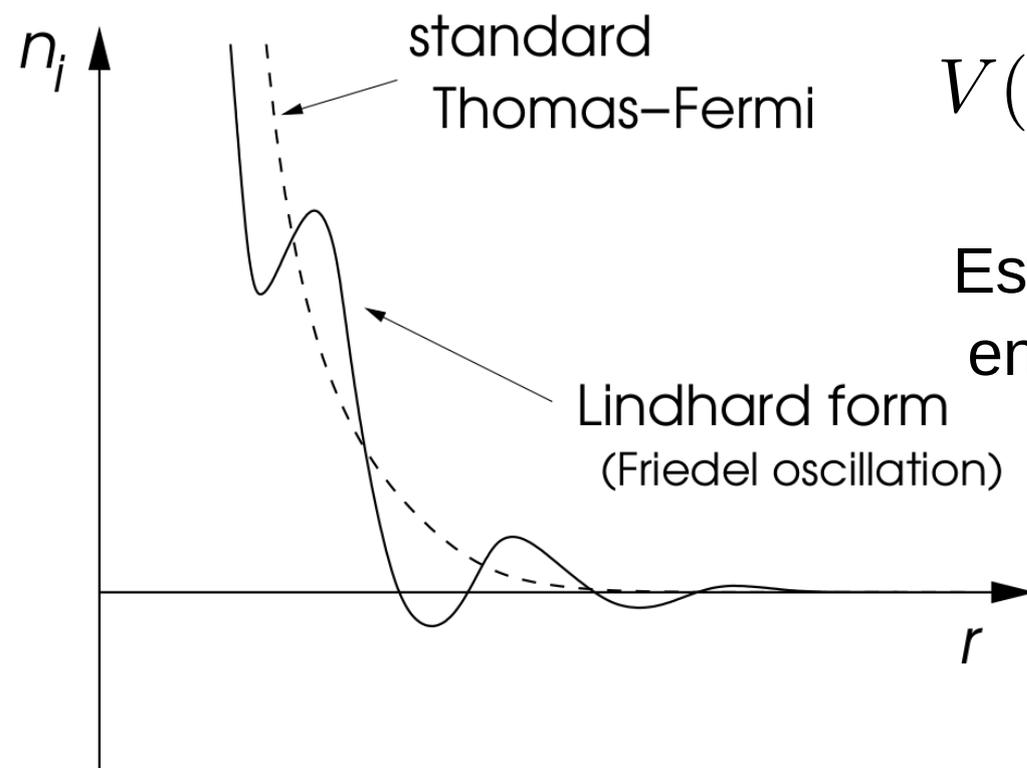
En metales comunes $\sim 5 \text{ \AA}$, comparable a la distancia interatómica. Debido a esto, los campos eléctricos externo no pueden penetrar en los metales, siendo apantallados en longitudes mayores a k_{TF}^{-1} .

Contenido físico

Incluyendo las interacciones. Screening.

Si, a **frecuencia cero**, incluimos toda la escala de momentos, la función de Lindhard se puede integrar exactamente.

El potencial efectivo en este caso tiene mayor estructura que el de Thomas-Fermi y se puede ver que a distancias largas



$$V(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{r^3} \cos(2k_F r)$$

Esto induce oscilaciones espaciales en la densidad de carga, conocidas como oscilaciones de Friedel.

Fin de la clase

¡Muchas gracias!