

Guía 3 - Ejercicio 3

Gas de Electrones en 2D

1. Enunciado

Partiendo del Hamiltoniano obtenido en el problema 2(b) para el jellium model en dos dimensiones, continúe el análisis en forma análoga al realizado a partir de la Ec. (3.19) en el libro de Fetter y Walecka. El estudio consta de 4 pasos:

- (a) Adimensionalizar el Hamiltoniano y hacer un análisis como el que sigue a la Ec. (3.24).
- (b) Calcular el vector de Fermi como en (3.27) y la energía cinética como en (3.30).
- (c) Calcular el shift de energía a primer orden debido a la interacción Coulombiana, análogo a la Ec. (3.36).
- (d) Juntar los dos términos de la energía obtenidos [como en (3.37)] y graficar como en la Fig. 3.2.

Hamiltoniano en 2D (Ejercicio 2b)

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{\pi e^2}{Aq} a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}^\dagger a_{(\vec{p}-\vec{q})\sigma'}^\dagger a_{\vec{p}\sigma'} a_{\vec{k}\sigma}$$

1.1. (a)

Introducimos variables adimensionales

$$A = 4\pi r_0^2 N \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \qquad r_s = \frac{r_0}{a_0}$$

Donde r_0 se define en términos de área por partícula, siendo el espacio entre partículas. a_0 es el radio de Bohr, y r_s una magnitud que relaciona a las anteriores.

* * * Me faltó terminar este inciso * * *

$$\bar{A} = r_0^{-2} A \qquad \bar{\mathbf{k}} = r_0 \mathbf{k} \qquad \bar{\mathbf{p}} = r_0 \mathbf{p} \qquad \bar{\mathbf{q}} = r_0 \mathbf{q}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{2} a_0 \bar{k}^2 e^2 a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{r_s^2 a_0^2 \bar{A}} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{\pi e^2}{\bar{q}} a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}^\dagger a_{(\vec{p}-\vec{q})\sigma'}^\dagger a_{\vec{p}\sigma'} a_{\vec{k}\sigma}$$

...

1.2. (b)

Vector de Fermi

$$\frac{1}{\Delta k^2} \sum_k \Delta k^2 \longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^2} \int_k d^2 k$$

$$N = \langle F | \hat{N} | F \rangle = \sum_{k\sigma} \langle F | \hat{n}_{k\sigma} | F \rangle = \sum_{k\sigma} \Theta(k_f - k)$$

$$N = 2 \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty dk k \Theta(k_f - k)$$

$$N = \frac{A k_f^2}{2\pi} \longrightarrow k_f = \sqrt{\frac{2\pi N}{A}} = \sqrt{\frac{2\pi N}{4\pi r_0^2 N}}$$

$$k_f = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{r_0} \approx \frac{0,71}{r_0}$$

Energía cinética

$$\begin{aligned} E^{(0)} &= \langle F | \hat{\mathcal{H}}_0 | F \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k\sigma} k^2 \langle F | \hat{n}_{k\sigma} | F \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k\sigma} k^2 \Theta(k_f - k) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_\sigma \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2 k k^2 \Theta(k_f - k) = 2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{k_f} dk k k^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2A}{(2\pi)^2} \frac{2\pi k_f^4}{4} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2}{(2\pi)^2} \left(\frac{2\pi N}{k_f^2} \right) \frac{2\pi k_f^4}{4} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} N \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{r_0^2} \right) N = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 e^2}{4me^2} \frac{1}{r_0^2} N = \frac{1}{2} a_0 e^2 \frac{1}{4a_0^2 r_s^2} N = \frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{4} \frac{N}{r_s^2} \end{aligned} \quad (1)$$

$$E^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0} N \frac{0,25}{r_s^2}$$

$$\frac{E^{(0)}}{N} = \frac{1}{2} \epsilon_f^0 \quad (\text{la enregía del F por partícula es la mitad de la energía de Fermi})$$

1.3. (c)

Energía del primer orden

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = \frac{\pi e^2}{A} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{1}{q} a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}^\dagger a_{(\vec{p}-\vec{q})\sigma'}^\dagger a_{\vec{p}\sigma'} a_{\vec{k}\sigma}$$

$$E^{(1)} = \langle F | \hat{\mathcal{H}}_1 | F \rangle = \frac{\pi e^2}{A} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{1}{q} \langle F | a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}^\dagger a_{(\vec{p}-\vec{q})\sigma'}^\dagger a_{\vec{p}\sigma'} a_{\vec{k}\sigma} | F \rangle$$

$$(\vec{k} + \vec{q})\sigma = \vec{k}\sigma \quad y \quad (\vec{p} - \vec{q})\sigma' = \vec{p}\sigma' \quad (\vec{q} = 0)$$

$$(\vec{k} + \vec{q})\sigma = \vec{p}\sigma' \quad y \quad (\vec{p} - \vec{q})\sigma' = \vec{k}\sigma \quad (\vec{q} \neq 0)$$

$$E^{(1)} = \langle F | \hat{\mathcal{H}}_1 | F \rangle = \frac{\pi e^2}{A} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{1}{q} \langle F | a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma} a_{\vec{k}\sigma} | F \rangle$$

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij} = -\{a_j^\dagger, a_i\}$$

$$\langle F | a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma} a_{\vec{k}\sigma} | F \rangle = -\delta_{(\vec{k}+\vec{q})\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma'} \langle F | a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma}^\dagger a_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} | F \rangle$$

$$= -\delta_{(\vec{k}+\vec{q})\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma'} \langle F | n_{(\vec{k}+\vec{q})\sigma} n_{\vec{k}\sigma} | F \rangle = -\delta_{(\vec{k}+\vec{q})\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma'} \Theta(k_f - |\vec{k} - \vec{q}|) \Theta(k_f - k)$$

$$E^{(1)} = \frac{\pi e^2}{A} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{1}{q} \left(-\delta_{(\vec{k}+\vec{q})\vec{p}} \delta_{\sigma\sigma'} \Theta(k_f - |\vec{k} - \vec{q}|) \Theta(k_f - k) \right)$$

$$= -\frac{\pi e^2}{A} \sum_{\vec{k}\vec{q}} \sum_{\sigma} \frac{1}{q} \Theta(k_f - |\vec{k} - \vec{q}|) \Theta(k_f - k) = -2 \frac{\pi e^2}{A} \frac{A^2}{(2\pi)^4} \int d^2q d^2k \frac{1}{q} \Theta(k_f - |\vec{k} - \vec{q}|) \Theta(k_f - k)$$

Es conveniente hacer el cambio de variables $\vec{P} = \vec{k} + \frac{1}{2}\vec{q}$ para resolver una integral simetrizada

$$\int d^2q d^2k \frac{1}{q} \Theta(k_f - |\vec{k} - \vec{q}|) \Theta(k_f - k) = \int d^2q d^2P \frac{1}{q} \Theta\left(k_f - \left|\vec{P} + \frac{1}{2}\vec{q}\right|\right) \Theta\left(k_f - \left|\vec{P} - \frac{1}{2}\vec{q}\right|\right)$$

$$= \int d^2q d^2P \frac{1}{q} \Theta\left(k_f - \left|\vec{P} + \frac{1}{2}\vec{q}\right|\right) \Theta\left(k_f - \left|\vec{P} - \frac{1}{2}\vec{q}\right|\right) = \int d^2q \frac{1}{q} \int d^2P \Theta\left(k_f - \left|\vec{P} + \frac{1}{2}\vec{q}\right|\right) \Theta\left(k_f - \left|\vec{P} - \frac{1}{2}\vec{q}\right|\right)$$

La región de integración sobre P es la superficie de intersección de dos circunferencias de radio k_f ,

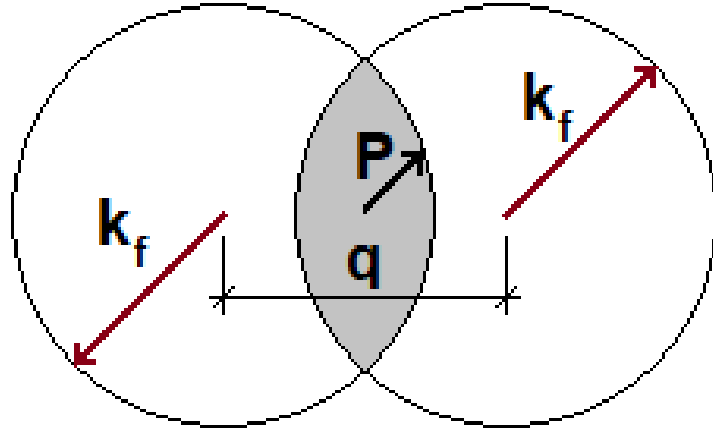


Figura 1: Intersección de circunferencias de Fermi.

por lo que la integral a resolver es un problema geométrico:

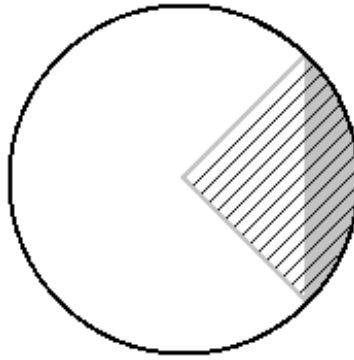


Figura 2: Mitad de la región a integrar, media lente esférica

Media lente esférica (I_1) = Sector circular (I_2) - Triángulo (I_3)

$$I_2 = \int_0^\theta d\theta \int_0^{k_f} dk k = \frac{k_f^2 \theta}{2}$$

$$I_2 = \frac{k_f^2}{2} \arccos(x) \quad I_3 = k_f^2 x \sqrt{1-x^2} \quad x = \frac{q}{2k_f}$$

$$\int d^2P \Theta(k_f - |\vec{P} + \frac{1}{2}\vec{q}|) \Theta(k_f - |\vec{P} - \frac{1}{2}\vec{q}|) = 2I_1 = 2(k_f^2 \arccos(x) - k_f^2 x \sqrt{1-x^2})$$

Ahora atacamos la integral sobre q

$$\int d^2q \frac{1}{q} = 2\pi \int dq q \frac{1}{q} = 2\pi \int 2k_f dx \longrightarrow (2\pi)(2k_f) \int dx 2I_1(x)$$

Recapitulando

$$E^{(1)} = -2 \frac{\pi e^2}{A} \frac{A^2}{(2\pi)^4} (2\pi)(2k_f) 2 \int dx I_1(x) \Theta(1-x) = -A \frac{4k_f e^2}{(2\pi)^2} \int_0^1 dx k_f^2 (\arccos(x) - x \sqrt{1-x^2})$$

$$= -\left(\frac{2\pi N}{k_f^2}\right) \frac{4k_f^3 e^2}{(2\pi)^2} \int_0^1 dx \left(\arccos(x) - x\sqrt{1-x^2} \right) = -N \frac{4k_f e^2}{2\pi} \left(\int_0^1 dx \arccos(x) - \int_0^1 dx x\sqrt{1-x^2} \right)$$

Resolvemos la primer integral por partes

$$\int_0^1 dx \arccos(x) = x \arccos(x) \Big|_0^1 - \int_0^1 dx \frac{-x}{\sqrt{1-x^2}} = - \int_0^1 dx \frac{-x}{\sqrt{1-x^2}} = -\sqrt{1-x^2} \Big|_0^1 = 1$$

Resolvemos la segunda integral por sustitución

$$\int_0^1 dx x\sqrt{1-x^2} = - \int_1^0 du \frac{1}{2} \sqrt{u} = \frac{1}{2} \frac{2}{3} u^{3/2} \Big|_0^1 = \frac{1}{3}$$

Finalmente obtenemos la energía del primer orden

$$E^{(1)} = -N \frac{4k_f e^2}{2\pi} \left(\frac{2}{3} \right) = -\frac{4k_f e^2}{3\pi} N = -\frac{4e^2}{3\pi} N \left(\frac{1}{\sqrt{2} r_0} \right)$$

$$E^{(1)} = -\frac{4\sqrt{2}e^2}{3\pi} \frac{N}{2r_0} = -\frac{4\sqrt{2}e^2}{3\pi} \frac{N}{2r_0} = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{4\sqrt{2}}{3\pi} N \frac{1}{r_s}$$

$$E^{(1)} \approx -\frac{e^2}{2a_0} N \frac{0,60}{r_s}$$

1.4. (d)

Gráfico de los primeros dos términos de la energía

$$\frac{E}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left[\frac{0,25}{r_s^2} - \frac{0,60}{r_s} + \dots \right] \quad (r_s \rightarrow 0, \text{ altas densidades})$$

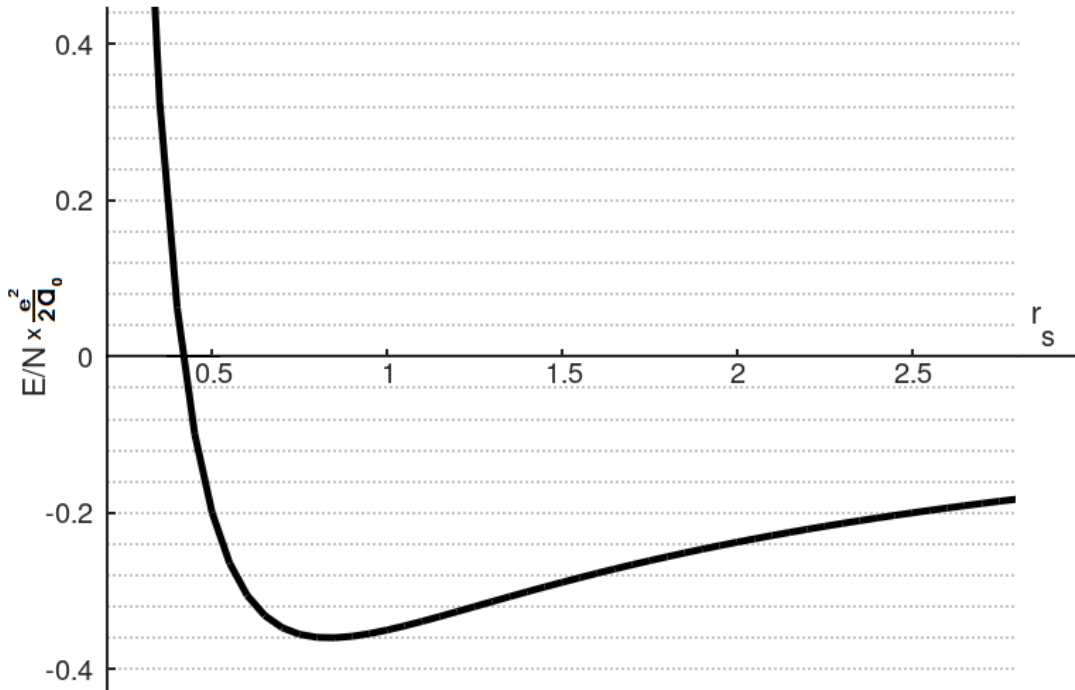


Figura 3: Aproximación de la energía del estado fundamental para un gas de electrones en un background positivo. El primer término corresponde a la energía cinética, el segundo a la energía de exchange y los puntos a la energía de correlación.