7/5/2022 - 1

Capítulo 8, Plasmones y apantallamiento del plasma

CLASE 14 del curso de Fenómenos Colectivos en Sólidos

OPERADOR DENSIDAD DE CARGA

Carga del electrón: $-e$

$$\hat{\rho}_e(\vec{r}) = -e\,\hat{n}(\vec{r}) = -e \sum_s \hat{\psi}_s^{+}(\vec{r})\,\hat{\psi}_s(\vec{r})$$

$$\hat{\psi}_s(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}s}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Reemplazando los operadores de campo en $\hat{\rho}_e(\vec{r})$:

$$\hat{\rho}_e(\vec{r}) = -\frac{e}{V} \sum_{\vec{k}\vec{k}'s} a^{+}_{\vec{k}'s}\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\, a_{\vec{k}s}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$= -\frac{e}{V} \sum_{\vec{k}\vec{k}'s} a^{+}_{\vec{k}'s}\, a_{\vec{k}s}\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}$$

Trabajamos con la transformada de Fourier (dejamos de escribir la e en ρ_e para simplificar la notación):

$$\hat{\rho}_{\vec{q}} = \frac{1}{V} \int d^3r\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, \hat{\rho}(\vec{r})$$

con inversa:

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

y reemplazamos $\hat{\rho}(\vec{r})$:

$$\hat{\rho}_{\vec{q}} = \frac{1}{V} \int d^3r\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, \frac{(-e)}{V} \sum_{kk's} a^{+}_{k's}\, a_{ks}\, e^{i(k-k')\cdot r}$$

$$= \frac{-e}{V} \sum_{k',ks} a^{+}_{k's}\, a_{ks} \underbrace{\int \frac{d^3r}{V}\, e^{i(k-k'-q)\cdot r}}_{\delta_{k,k'+q} = \delta_{k',k-q}}$$

$$\boxed{= -\frac{e}{V} \sum_{ks} a^{+}_{k-q,s}\, a_{ks}}$$

Ecuación de movimiento del operador densidad

Estudiamos la evolución dinámica de una fluctuación de la densidad de carga.
Trabajamos con el valor de expectación del operador densidad de carga:

$$\langle \hat{\rho}_{\vec{q}} \rangle = -\frac{e}{V} \sum_{\vec{k} s} \langle a^{+}_{\vec{k}-\vec{q},s} \, a_{\vec{k}s} \rangle$$

Donde: $\langle \cdots \rangle = \langle \Psi_{GS} | \cdots | \Psi_{GS} \rangle$

y trabajamos en la representación de Heisenberg.

En sistema espacialmente homogéneo: $\langle \hat{\rho}(\vec{r}) \rangle = \rho_0$

$$\Rightarrow \langle \hat{\rho}_{\vec{q}} \rangle = \frac{1}{V} \int d^3r \, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \underbrace{\langle \hat{\rho}(\vec{r}) \rangle}_{\rho_0}$$

$$= \frac{\rho_0}{V} \int d^3r \, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

$$= \frac{\rho_0}{V} \delta_{\vec{q},0}$$

$\Rightarrow$ Sólo la componente $\vec{q}=0$ es no nula en sistema homogéneo.

Queremos estudiar las fluctuaciones de $\langle \hat{\rho}_{\vec{q}} \rangle$ que ocurren para $\vec{q} \neq 0$.

Ecuación de movimiento para el gas de electrones:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a^{+}_{k-q,s} a_{ks} = \left[a^{+}_{k-q,s} a_{ks}, H \right]$$

con el Hamiltoniano del gas de electrones:

$$H = \sum_{k} E_k a^{+}_{k} a_{k} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{kk' \\ q\neq 0}} V_q a^{+}_{k-q} a^{+}_{k'+q} a_{k'} a_{k}$$

Notar que la forma del H no cambia al pasar a Heisenberg.

Evaluamos los conmutadores:

$$\frac{-i}{\hbar} \left[a^{+}_{k-q} a_{k}, \sum_{k'} E_{k'} a^{+}_{k'} a_{k'} \right] =$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \sum_{k'} E_{k'} \left[a^{+}_{k-q} a_{k}, a^{+}_{k'} a_{k'} \right]$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left(E_{|\vec{k}-\vec{q}|} - E_{k} \right) a^{+}_{k-q} a_{k}$$

$$= i \left(\epsilon_{|\vec{k}-\vec{q}|} - \epsilon_{k} \right) a^{+}_{k-q} a_{k}$$

donde $\epsilon_k = \frac{E_k}{\hbar}$, $\epsilon_{k-q} = \epsilon_{|\vec{k}-\vec{q}|} \equiv \frac{E_{\vec{k}-\vec{q}}}{\hbar}$

Término coulombiano:

$$-\frac{i}{2\hbar} \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ p \neq 0}} V_p \left[a^+_{k-q}\, a_k \,,\, a^+_{k_1-p}\, a^+_{k_2+p}\, a_{k_2}\, a_{k_1} \right] = (*)$$

Para trabajar este conmutador usamos la identidad:

$$\left[a^+_1 a_2 \,,\, a^+_3 a^+_4 a_5 a_6 \right] = \delta_{23}\, a^+_1 a^+_4 a_5 a_6$$

$$+ \delta_{24}\, a^+_3 a^+_1 a_5 a_6$$

$$- \delta_{16}\, a^+_3 a^+_4 a_5 a_2$$

$$- \delta_{15}\, a^+_3 a^+_4 a_2 a_6$$

$$(*) = \frac{-i}{2\hbar} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ p \neq 0}} \Big(\delta_{k, k_1-p}\, a^+_{k-q}\, a^+_{k_2+p}\, a_{k_2}\, a_{k_1}$$

$$+ \delta_{k, k_2+p}\, a^+_{k_1-p}\, a^+_{k-q}\, a_{k_2}\, a_{k_1}$$

$$- \delta_{k-q, k_1}\, a^+_{k_1-p}\, a^+_{k_2+p}\, a_{k_2}\, a_k$$

$$- \delta_{k-q, k_2}\, a^+_{k_1-p}\, a^+_{k_2+p}\, a_k\, a_{k_1} \Big) V_p$$

$$= \left(\frac{-i}{2\hbar} \right) \Big[\sum_{k_2 p}{}' V_p\, a^+_{k-q}\, a^+_{k_2+p}\, a_{k_2}\, a_{k+p} \qquad 3$$

$$+ \sum_{k_1 p}{}' V_p\, a^+_{k_1-p}\, a^+_{k-q}\, a_{k-p}\, a_{k_1} \qquad 4$$

$$- \sum_{k_2 p}{}' V_p\, a^+_{k-q-p}\, a^+_{k_2+p}\, a_{k_2}\, a_k \qquad 1$$

$$- \sum_{k_1 p}{}' V_p\, a^+_{k_1-p}\, a^+_{k-q+p}\, a_k\, a_{k_1} \Big] \qquad 2$$

$k_2, k_1 \longrightarrow p'$

$$= \frac{i}{2\hbar} \sum_{p'p}{}' V_p \, a^+_{k-q-p} \, a^+_{p'+p} \, a_{p'} \, a_k$$

$$+ \frac{i}{2\hbar} \sum_{p'p}{}' V_p \, a^+_{p'-p} \, a^+_{k-q+p} \, a_k \, a_{p'}$$

$p \to -p$

son iguales

$$+ \frac{i}{2\hbar} \sum_{p'p} V_p \, a^+_{k-q} \, a^+_{p'+p} \, a_{p'} \, a_{k+p}$$

$$- \frac{i}{2\hbar} \sum_{p'p} V_p \, a^+_{p'-p} \, a^+_{k-q} \, a_{k-p} \, a_{p'}$$

$p \to -p'$

son iguales

$$= \frac{i}{\hbar} \sum_{pp'}{}' V_p \, a^+_{k-q-p} \, a^+_{p+p'} \, a_{p'} \, a_k + V_p \, a^+_{k-q} \, a^+_{p'-p} \, a_{k-p} \, a_{p'} \quad \checkmark$$

Y así llegamos a la ecuación de movimiento, por el momento sin aproximaciones adicionales:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle a^+_{k-q} \, a_k \rangle &= i \left(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k \right) \langle a^+_{k-q} \, a_k \rangle \\ &+ \frac{i}{\hbar} \sum_{p'p} V_p \left(\langle a^+_{k-q-p} \, a^+_{p'+p} \, a_{p'} a_k \rangle + \langle a^+_{k-q} a^+_{p'-p} \, a_{k-p} \, a_{p'} \rangle \right) \end{aligned}}$$

y queremos hacer: $\langle \rho_q \rangle = \left(\frac{-e}{V} \right) \sum_{k,s} \langle a^+_{k-q,s} \, a_{ks} \rangle$

Vemos que la derivada de la función de correlación de dos puntos depende de las de 4 puntos.
La derivada temporal de éstas depende de las de 6 puntos, y así sucesivamente.
Se implementan aproximaciones basadas en truncaciones de la jerarquía de ecuaciones de movimiento.
(Se supone que las correlaciones más altas se anulan.)

Buscamos una aproximación con ecuaciones cerradas para f.c. de 2 puntos:

$$\langle a^+_{k-q}\, a_k \rangle \ , \quad \langle a^+_k\, a_k \rangle = f_k$$

En problemas de respuesta lineal podremos decir que f_k es la distribución de equilibrio de Fermi-Dirac.

Primer término Coulombiano:

$$T_1 = \frac{i}{\hbar} \sum_{p'p} V_p \langle a^+_{k-q-p}\, a^+_{p'+p}\, a_{p'}\, a_k \rangle$$

Simplificamos la suma sobre $\vec{p}$ tomando solo el término $\vec{p} = -\vec{q}$ (aproximación RPA)

$$T_1 \approx \frac{i}{\hbar} V_q \sum_{p'} \langle a^+_k\, a^+_{p'-q}\, a_{p'}\, a_k \rangle \qquad \boxed{V_{\vec{q}} = V_{-\vec{q}}}$$

Reordenamos los operadores, llevo a_k hacia la izquierda:

$$T_1 \approx -\frac{i}{\hbar} V_q \sum_{p'} \langle a^+_k\, a^+_{p'-q}\, a_k\, a_{p'} \rangle$$

$$= \frac{-i}{\hbar} V_q \sum_{p'} \langle a^+_k \left(\delta_{p'-q,k} - a_k\, a^+_{p'-q} \right) a_{p'} \rangle$$

$$= \frac{-i}{\hbar} V_q \sum_{p'} \delta_{p'-q,k} \langle a^+_k\, a_{p'} \rangle - \langle a^+_k\, a_k\, a^+_{p'-q}\, a_{p'} \rangle$$

$$= -\frac{i}{\hbar} V_q \langle a^+_k\, a_{k+q} \rangle + \frac{i}{\hbar} V_q \sum_{p'} \langle a^+_k\, a_k\, a^+_{p'-q}\, a_{p'} \rangle$$

Factorizamos la f. de c. de 4 puntos:

$$T_1 \approx -\frac{i}{\hbar} V_q \langle a_k^+ a_{k+q} \rangle + \frac{i}{\hbar} V_q \sum_{p'} \langle a_k^+ a_k \rangle \langle a_{p'-q}^+ a_{p'} \rangle$$

Segundo término Coulombiano

$$T_2 = \frac{i}{\hbar} \sum_{p'p}' V_p \langle a_{k-q}^+ a_{p'-p}^+ a_{k-p} a_{p'} \rangle$$

Tomo $\vec{p} = \vec{q}$ y conmuto $a_{p'-p}^+$ y a_{k-p}:

$$T_2 \approx \frac{i}{\hbar} \sum_{p'} V_q \left(\langle a_{k-q}^+ a_{p'} \delta_{p'k} \rangle - \langle a_{k-q}^+ a_{k-q} a_{p'-q}^+ a_{p'} \rangle \right.$$

$$\approx \frac{i}{\hbar} V_q \left(\langle a_{k-q}^+ a_k \rangle - \sum_{p'} \langle a_{k-q}^+ a_{k-q} \rangle \langle a_{p'-q}^+ a_{p'} \rangle \right)$$

Juntamos todos los términos:

$$\frac{d}{dt} \langle a_{k-q}^+ a_k \rangle \simeq i \left(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k \right) \langle a_{k-q}^+ a_k \rangle$$

$$+ \frac{i}{\hbar} V_q \left(- \langle a_k^+ a_{k+q} \rangle + f_k \sum_{p'} \langle a_{p'-q}^+ a_{p'} \rangle \right.$$

$$\left. \langle a_{k-q}^+ a_k \rangle - f_{k-q} \sum_{p'} \langle a_{p'-q}^+ a_{p'} \rangle \right)$$

H&K ahora omiten $\langle a_k^+ a_{k+q} \rangle$ y $\langle a_k^+ a_{k+q} \rangle$. Para mí sólo se cancelan al integrar sobre $\vec{k}$.

Bueno, siguiendo a H & K obtenemos Ec. (8.18):

$$\frac{d}{dt}\langle a^{+}_{k-q}\, a_k\rangle \cong i\left(\epsilon_{k-q}-\epsilon_k\right)\langle a^{+}_{k-q}\, a_k\rangle$$
$$+\, i\left(f_k - f_{k-q}\right)\sum_{p'}\langle a^{+}_{p'-q}\, a_{p'}\rangle$$

Dominio frecuencia, relación de dispersión

Proponemos el ansatz:

$$\langle a^{+}_{k-q}\, a_k\rangle(t) = e^{-i(\omega+i\delta)t}\langle a^{+}_{k-q}\, a_k\rangle(t=0)$$

donde $\omega = \omega(\vec{q})$ (y no de $\vec{k}$...)

$$\Rightarrow -\cancel{i}(\omega+i\delta)\langle a^{+}_{k-q}\, a_k\rangle(0) = \cancel{i}\left(\epsilon_{k-q}-\epsilon_k\right)\langle a^{+}_{k-q}\, a_k\rangle(0)$$
$$+\,\frac{\cancel{i}}{\hbar} V_q\left(f_k - f_{k-q}\right)\sum_{p'}\langle a^{+}_{p'-q}\, a_{p'}\rangle(0)$$

$$\Rightarrow \hbar\left(\omega+i\delta+\epsilon_{k-q}-\epsilon_k\right)\langle a^{+}_{k-q}\, a_k\rangle =$$
$$= V_q\left(f_{k-q}-f_k\right)\sum_{p'}\langle a^{+}_{p'-q}\, a_{p'}\rangle$$

$$\Rightarrow \langle a^{+}_{k-q}\, a_k\rangle = V_q\sum_{p'}\langle a^{+}_{p'-q}\, a_{p'}\rangle\frac{f_{k-q}-f_k}{\hbar\left(\omega+i\delta+\epsilon_{k-q}-\epsilon_k\right)}$$

$$\frac{-e}{V}\sum_k\langle a^{+}_{k-q}\, a_k\rangle = V_q\left(\frac{-e}{V}\right)\sum_{p'}\langle a^{+}_{p'-q}\, a_{p'}\rangle$$
$$\times\sum_k\frac{f_{k-q}-f_k}{\hbar\left(\omega+i\delta+\epsilon_{k-q}-\epsilon_k\right)}$$

Ahi apareció en ambos lados $\langle \hat{\rho}_q \rangle = -\frac{e}{V} \sum_k \langle a^+_{k-q} a_k \rangle$

$$\cancel{\langle \hat{\rho}_q \rangle} = V_q \cancel{\langle \hat{\rho}_q \rangle} \sum_k \frac{f_{k-q} - f_k}{\hbar(\omega + i\delta + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k)}.$$

$$\Rightarrow \boxed{1 = V_q \sum_k \frac{f_{k-q} - f_k}{\hbar(\omega + i\delta + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k)}}$$

Buscamos soluciones de $\omega(\vec{q})$ que satisfagan esta ec.

Función de polarización a primer orden:

$$P^1(q, \omega) = \sum_k \frac{f_{k-q} - f_k}{\hbar(\omega + i\delta + \epsilon_{k-q} - \epsilon_k)}$$