CLASE 11 - martes 04/05/2021

La clase pasada vimos:

Operadores de partícula única en segunda cuantización

Operador de energía cinética: forma diagonal

Operadores de dos partículas: interacciones

Sistemas con invariancia translacional

En esta clase veremos:

Operadores de dos partículas: interacciones

El elemento de matriz de v(x, x’)

Su transformada de Fourier

REPASO

Operadores de partícula única en segunda cuantización

for single-particle operators

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}(x_i) = \sum_{i,j=1}^{\infty} \langle i \mid \hat{h} \mid j \rangle \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_j$$

Elemento de matriz
del operador de partícula única

Operadores de creación
y destrucción

En primera cuantización
sumamos sobre las partículas,
de 1 a N

Operador en segunda cuantización

Operadores de partícula única
en primera cuantización

REPASO

Ejemplo importante

Sea el Hamiltoniano de una partícula libre: $$\hat{h} = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$$

Sus autoestados son: $$\phi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \eta_\lambda$$

Donde: estados de espín up y down en z: $$\eta_\uparrow = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \eta_\downarrow = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

(autoestados de S_z)

$$\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} \xrightarrow{\text{crea una partícula en}} \begin{cases} \phi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \eta_\lambda \\ |\mathbf{k}\lambda\rangle \end{cases}$$

REPASO

Operador de energía cinética en la base $|\mathbf{k}\lambda\rangle$

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}_1\lambda_1,\mathbf{k}_2\lambda_2} \langle \mathbf{k}_1\lambda_1 |\, \hat{t}\, | \mathbf{k}_2\lambda_2 \rangle\, \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2\lambda_2}$$

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\, a^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\, \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}$$

Operadores de dos partículas: interacciones

Base de **spin-orbitales** para sistemas con invariancia translacional

$$\phi_{\mathbf{k}\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_\sigma(s)$$

Notación del libro de Gross-Runge-Heinonen

$$x = (\mathbf{r}, s)$$

$$|x\rangle = |\mathbf{r}, s\rangle$$

$$\int dx = \sum_s \int d^3r$$

$$\chi_+(s) = \begin{cases} 1 & \text{for } s = +1/2 \\ 0 & \text{for } s = -1/2 \end{cases}$$

$$\chi_-(s) = \begin{cases} 0 & \text{for } s = +1/2 \\ 1 & \text{for } s = -1/2. \end{cases}$$

Ortonormalidad:

$$\langle \mathbf{k}'\sigma' | \mathbf{k}\sigma \rangle = \langle \mathbf{k}'\sigma' | \left(\int dx |x\rangle\langle x| \right) |\mathbf{k}\sigma\rangle = \int dx \langle \mathbf{k}'\sigma' | x \rangle \langle x | \mathbf{k}\sigma \rangle$$

$$= \int dx \phi^*_{\mathbf{k}'\sigma'}(x) \phi_{\mathbf{k}\sigma}(x) = \frac{1}{\Omega} \sum_s \int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \chi^*_{\sigma'}(s) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_\sigma(s)$$

$$= \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r}\, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \sum_s \chi^*_{\sigma'}(s) \chi_\sigma(s) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}$$

Operadores de dos partículas: interacciones

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N} \hat{v}(x_i, x_j) = \frac{1}{2} \sum_{ijk\ell=1}^{\infty} \langle ij \mid \hat{v} \mid k\ell \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_\ell \hat{c}_k$$

Operadores de dos partículas: interacciones

Elemento de matriz de dos partículas :

$$\begin{aligned}
\langle i,j|\hat{v}|k,l\rangle &= \langle i,j|\left(\iint dx\,dx'|x,x'\rangle\langle x,x'|\right)\hat{v}|k,l\rangle \\
&= \iint dx\,dx'\langle i,j|x,x'\rangle\langle x,x'|\hat{v}|k,l\rangle \\
&= \iint dx\,dx'\phi_i^*(x)\phi_j^*(x')v(x,x')\phi_k(x)\phi_l(x') \\
&= \sum_{s,s'}\iint d\mathbf{r}\,d\mathbf{r}'\phi_i^*(\mathbf{r},s)\phi_j^*(\mathbf{r}',s')v(\mathbf{r},\mathbf{r}')\phi_k(\mathbf{r},s)\phi_l(\mathbf{r}',s')
\end{aligned}$$

Operadores de dos partículas: interacciones

$$\langle i,j|\hat{v}|k,l\rangle = \sum_{s,s'} \iint d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}' \phi_i^*(\mathbf{r},s)\phi_j^*(\mathbf{r}',s')v(\mathbf{r},\mathbf{r}')\phi_k(\mathbf{r},s)\phi_l(\mathbf{r}',s')$$

Elegimos orbitales espín-momento: $\begin{cases} i = \mathbf{k}_1\sigma_1 \\ j = \mathbf{k}_2\sigma_2 \\ k = \mathbf{k}_3\sigma_3 \\ l = \mathbf{k}_4\sigma_4 \end{cases}$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2|\hat{v}|\mathbf{k}_3\sigma_3\mathbf{k}_4\sigma_4\rangle &= \sum_{s,s'} \iint d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}}\chi_{\sigma_1}(s)e^{-i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}'}\chi_{\sigma_2}(s')\,v(\mathbf{r},\mathbf{r}')\, e^{i\mathbf{k}_3\cdot\mathbf{r}}\chi_{\sigma_3}(s)e^{i\mathbf{k}_4\cdot\mathbf{r}'}\chi_{\sigma_4}(s') \\
&= \sum_s \chi_{\sigma_1}(s)\chi_{\sigma_3}(s)\sum_{s'}\chi_{\sigma_2}(s')\chi_{\sigma_4}(s') \iint d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}' v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}}e^{i(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}'} \\
&= \delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4} \iint d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}' v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}}e^{i(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}'}
\end{aligned}$$

Operadores de dos partículas: interacciones

$$\langle \mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2|\hat{v}|\mathbf{k}_3\sigma_3\mathbf{k}_4\sigma_4\rangle = \delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}\iint d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}'\, v(\mathbf{r}-\mathbf{r}')e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}}e^{i(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}'}$$

Consideremos la transformada de Fourier del potencial de interacción:

$$v(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{\Omega}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}$$

donde

$$v_{\mathbf{q}} = \int_{\Omega} d^3 r\, v(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2\Omega}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1\sigma_1}\sum_{\mathbf{k}_2\sigma_2}\sum_{\mathbf{k}_3\sigma_3}\sum_{\mathbf{k}_4\sigma_4} \langle \mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2 \mid e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \mid \mathbf{k}_3\sigma_3, \mathbf{k}_4\sigma_4\rangle \times \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}_1\sigma_1}\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}_2\sigma_2}\hat{c}_{\mathbf{k}_4\sigma_4}\hat{c}_{\mathbf{k}_3\sigma_3}.$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{N} \hat{v}(x_i, x_j) = \frac{1}{2}\sum_{ijk\ell=1}^{\infty} \langle ij \mid \hat{v} \mid k\ell\rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_\ell \hat{c}_k$$

Operadores de dos partículas: interacciones

De nuevo, el elemento de matriz es:

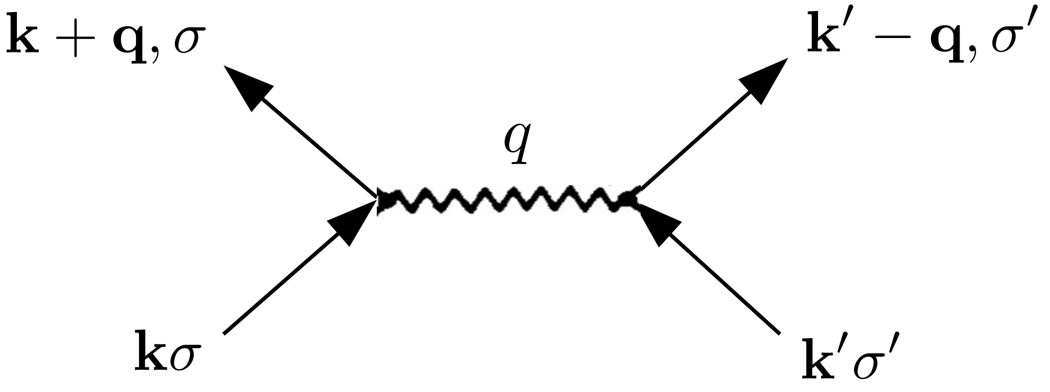
$$
\begin{aligned}
&\langle \mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2 \mid e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \mid \mathbf{k}_3\sigma_3, \mathbf{k}_4\sigma_4 \rangle \\
&\qquad = \delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}\frac{1}{\Omega}\int d^3r\, e^{i[(\mathbf{k}_3+\mathbf{q})-\mathbf{k}_1]\cdot\mathbf{r}}\frac{1}{\Omega}\int d^3r'\, e^{i[(\mathbf{k}_4-\mathbf{q})-\mathbf{k}_2]\cdot\mathbf{r}'} \\
&\qquad = \delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}\delta_{(\mathbf{k}_3+\mathbf{q}),\mathbf{k}_1}\delta_{(\mathbf{k}_4-\mathbf{q}),\mathbf{k}_2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{V} = \frac{1}{2\Omega}\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1\sigma_1}\sum_{\mathbf{k}_2\sigma_2}\sum_{\mathbf{k}_3\sigma_3}\sum_{\mathbf{k}_4\sigma_4} \langle \mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2 \mid e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \mid \mathbf{k}_3\sigma_3, \mathbf{k}_4\sigma_4 \rangle \\
\times \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}_1\sigma_1}\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}_2\sigma_2}\hat{c}_{\mathbf{k}_4\sigma_4}\hat{c}_{\mathbf{k}_3\sigma_3}.
\end{aligned}
$$

$$\sigma \equiv \sigma_1 \qquad \sigma' \equiv \sigma_2 \qquad \mathbf{k} \equiv \mathbf{k}_3 \qquad \mathbf{k}' \equiv \mathbf{k}_4$$

Hamiltoniano invariante translacional con interacción

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + u \right) \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma \\ \mathbf{k}'\sigma'}} v_{\mathbf{q}} \hat{c}^\dagger_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})\sigma} \hat{c}^\dagger_{(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$$



Resumen de la clase 10

Operadores de dos partículas: interacciones

El elemento de matriz del potencial de interacción

Expresión final del Hamiltoniano con invariancia
translacional e interacción