

La clase pasada vimos:

Segunda cuantización

Operadores de dos partículas: interacciones con invariancia traslacional

En esta clase veremos:

Jellium model

Cancelación de términos $q = 0$ (largo alcance)

Comparación energías cinética y potencial

REPASO

Operadores de dos partículas en segunda cuantización

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \hat{v}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{2} \sum_{ijkl=1}^{\infty} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_k$$

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

Elegimos orbitales espín-momento:

$$\left\{ \begin{array}{l} i = \mathbf{k}_1 \sigma_1 \\ j = \mathbf{k}_2 \sigma_2 \\ k = \mathbf{k}_3 \sigma_3 \\ l = \mathbf{k}_4 \sigma_4 \end{array} \right.$$

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

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

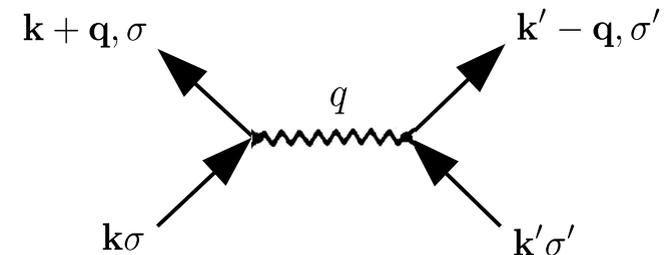
REPASO

Transformada de Fourier del potencial de interacción:

$$v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad \text{donde} \quad v_{\mathbf{q}} = \int_{\Omega} d^3 r v(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

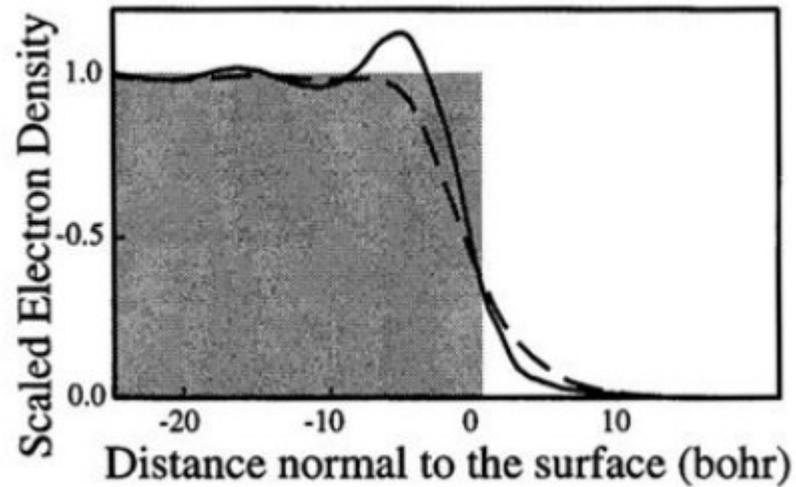
$$\hat{V} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \sum_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \sum_{\mathbf{k}_3 \sigma_3} \sum_{\mathbf{k}_4 \sigma_4} \langle \mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2 | e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} | \mathbf{k}_3 \sigma_3,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

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



Jellium Model

Gas de electrones: Jellium Model



Key: - - - $r_s = 2$ (Al) ——— $r_s = 5$ (Cs) ■ = Positive Charge

$$H = H_{el} + H_b + H_{el-b}$$

$$H_{el} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i \neq j}^N \frac{e^{-\mu |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

Electrones

$$H_b = \frac{1}{2} e^2 \iint d^3x d^3x' \frac{n(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}') e^{-\mu |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$$

Background

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{i=1}^N \int d^3x \frac{n(\mathbf{x}) e^{-\mu |\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|}$$

Electron-background

Gas de electrones: Jellium Model

“Limite termodinámico” $\left\{ \begin{array}{l} N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty \end{array} \right.$ Pero con $n = N/V$ constante

La interacción Coulombiana es de largo alcance, y entonces los 3 términos de arriba divergen por separado si no ponemos la exponencial (Yukawa).

Pero al final haremos: $L \rightarrow \infty$ and then $\mu \rightarrow 0$

O sea, siempre contamos con que en cada paso del cálculo: $\mu^{-1} \ll L$

La interacción Coulombiana del background positivo es algo clásico que se puede calcular:

$$H_b = \frac{1}{2}e^2 \iint d^3x d^3x' \frac{n(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}') e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$$

La densidad del background es uniforme en este modelo: $n(\mathbf{x}) = N/V$

$$\begin{aligned} \longrightarrow H_b &= \frac{1}{2}e^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 \iint d^3x d^3x' \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ &= \frac{1}{2}e^2 \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d^3x \int d^3z \frac{e^{-\mu z}}{z} \\ &= \frac{1}{2}e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2} \end{aligned}$$

$N^{-1} H_b$ diverge cuando $\mu \rightarrow 0$

La interacción de los electrones con el background también se puede tratar gracias a la invariancia traslacional del background:

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{i=1}^N \int d^3x \frac{n(\mathbf{x}) e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{r}_i|}$$

$$\begin{aligned}
 n(\mathbf{x}) = N/V \quad \longrightarrow \quad H_{el-b} &= -e^2 \sum_{i=1}^N \frac{N}{V} \int d^3x \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{r}_i|} \\
 &= -e^2 \sum_{i=1}^N \frac{N}{V} \int d^3z \frac{e^{-\mu z}}{z} \\
 &= -e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}
 \end{aligned}$$

Este término del Hamiltoniano también es un número, no un operador para electrones
Es igual al anterior pero con un signo – y sin el factor 1/2

El Hamiltoniano quedó reducido a:

$$H = -\frac{1}{2}e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2} + H_{el}$$

$$H_{el} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}e^2 \sum_{i \neq j}^N \frac{e^{-\mu|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad \longrightarrow$$

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

Pasando el Hamiltoniano a segunda cuantización:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{e^2 N^2 4\pi}{V \mu^2} + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}$$

Ahora vemos que el término $q = 0$ se cancela con el primer término (constante)

Gas de electrones: Jellium Model

Término de interacción Coulombiana:

$$\frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} \sum_{\lambda_1\lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}$$

Separemos el término $\mathbf{q} = 0$:

$$\frac{e^2}{2V} \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} \sum_{\lambda_1\lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1} \\ + \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \sum_{\lambda_1\lambda_2} \frac{4\pi}{\mu^2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}$$

Para lo que viene:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1} &= -a_{\mathbf{k}\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda_1} a_{\mathbf{p}\lambda_2} = \\ &= -a_{\mathbf{k}\lambda_1}^\dagger (-a_{\mathbf{k}\lambda_1} a_{\mathbf{p}\lambda_2}^\dagger + \delta_{\mathbf{k}\lambda_1, \mathbf{p}\lambda_2}) a_{\mathbf{p}\lambda_2} = \\ &= a_{\mathbf{k}\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda_1} a_{\mathbf{p}\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} - \delta_{\mathbf{k}\lambda_1, \mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} = \\ &= n_{\mathbf{k}\lambda_1} n_{\mathbf{p}\lambda_2} - \delta_{\mathbf{k}\lambda_1, \mathbf{p}\lambda_2} n_{\mathbf{k}\lambda_1} \end{aligned}$$

Gas de electrones: Jellium Model

El término de $q = 0$ se puede escribir como:

$$\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{k}\lambda_1} \sum_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda_1} (a_{\mathbf{p}\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \delta_{\lambda_1\lambda_2}) = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} (\hat{N}^2 - \hat{N})$$

Número fijo de partículas: $\hat{N} \longrightarrow N$



$$\frac{e^2 N^2 4\pi}{2V \mu^2} - \frac{e^2 N 4\pi}{2V \mu^2}$$

Se cancela con el otro término de H

$$-\frac{1}{2} 4\pi e^2 (V \mu^2)^{-1} \quad \text{por partícula}$$

Se va a cero al hacer: $L \rightarrow \infty$

Y después: $\mu \rightarrow 0$

Gas de electrones: Jellium Model

Y así obtenemos:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}' \sum_{\lambda_1\lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}$$

Adimensionalización. Introducimos r_0 distancia entre partículas: $V \equiv \frac{4}{3}\pi r_0^3 N$

Radio de Bohr: $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \longrightarrow r_s \equiv \frac{r_0}{a_0}$

$$\bar{V} = r_0^{-3} V \quad \bar{\mathbf{k}} = r_0 \mathbf{k} \quad \bar{\mathbf{p}} = r_0 \mathbf{p} \quad \bar{\mathbf{q}} = r_0 \mathbf{q}$$

$$\hat{H} = \frac{e^2}{a_0 r_s^2} \left(\sum_{\bar{\mathbf{k}}\lambda} \frac{1}{2} \bar{k}^2 a_{\bar{\mathbf{k}}\lambda}^\dagger a_{\bar{\mathbf{k}}\lambda} + \frac{r_s}{2\bar{V}} \sum_{\bar{\mathbf{k}}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{q}}}' \sum_{\lambda_1\lambda_2} \frac{4\pi}{\bar{q}^2} a_{\bar{\mathbf{k}}+\bar{\mathbf{q}},\lambda_1}^\dagger a_{\bar{\mathbf{p}}-\bar{\mathbf{q}},\lambda_2}^\dagger a_{\bar{\mathbf{p}}\lambda_2} a_{\bar{\mathbf{k}}\lambda_1} \right)$$

$$\hat{H} = \frac{e^2}{a_0 r_s^2} \left(\sum_{\vec{k}\lambda} \frac{1}{2} \vec{k}^2 a_{\vec{k}\lambda}^\dagger a_{\vec{k}\lambda} + \frac{r_s}{2V} \sum_{\vec{k}\vec{p}\vec{q}}' \sum_{\lambda_1\lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}\lambda_2} a_{\vec{k}\lambda_1} \right)$$

Esta expresión muestra un resultado anti-intuitivo: a alta densidad, o sea cuando $r_s \rightarrow 0$ la energía potencial se vuelve una perturbación de la energía cinética. Entonces, a densidad alta se puede intentar un desarrollo perturbativo de, por ejemplo, la energía del estado fundamental (ground state).

Se obtiene:

$$E = \frac{Ne^2}{a_0 r_s^2} (a + br_s + cr_s^2 \ln r_s + dr_s^2 + \dots)$$

Por ahora podemos calcular a y b. El siguiente término ya requiere técnicas perturbativas como los diagramas de Feynman.

Gas de electrones: Jellium Model

Volvamos al Hamiltoniano con unidades físicas:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}$$

Electrones no interactuantes:
exclusión de Pauli, esfera de Fermi

$$\hat{H}_1 = \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}' \sum_{\lambda_1\lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}$$

Si expandimos la energía:

$$E^{(0)} + E^{(1)} + \dots$$

$|F\rangle$

Estado fundamental
no interactuante

Order zero,
no interactuante

Corrección a primer orden,
debida a la interacción e-e

Resumen de la clase 12

Jellium model

Cancelación de términos $q = 0$ (largo alcance)

Comparación energías cinética y potencial