CLASE 14 - Viernes 14/05/2021

La clase pasada vimos:

Jellium model

Análisis de la interacción Coulombiana

Corrección de primer orden a la energía del estado fundamental: energía de intercambio (exchange energy)

Cristal de Wigner

En esta clase veremos:

Operador densidad de carga

Ecuación de movimiento del operador densidad

Aproximación RPA (Random Phase Approximation)

REPASO

Vimos la energía del estado fundamental del jellium model:

$$\frac{E}{N} \underset{r_s \to 0}{=} \frac{e^2}{2a_0}\left[\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + \cdots\right]$$

Energía cinética — Energía de intercambio — Energía de correlación ...

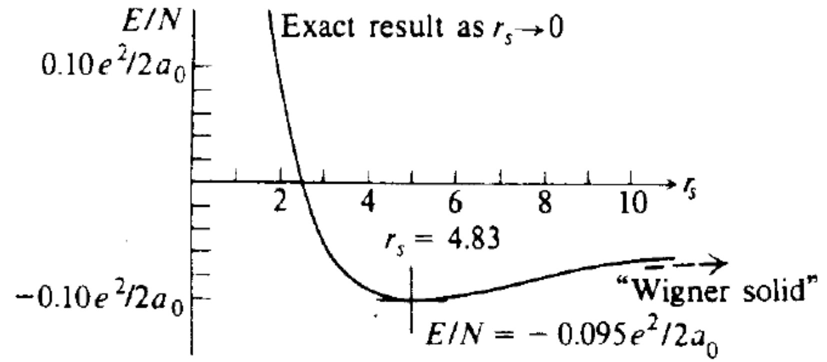
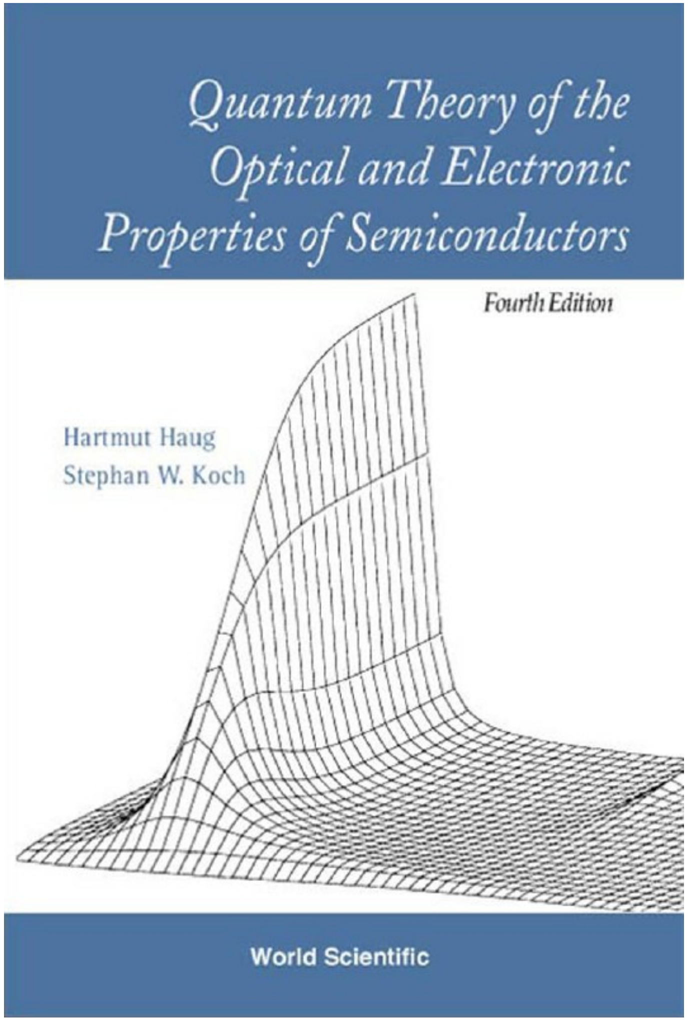


Fig. 3.2 Approximate ground-state energy [first two terms in Eq. (3.37)] of an electron gas in a uniform positive background.

Energía Coulombiana (e-e) a primer orden:

- Término **directo** ($q = 0$), se canceló con $H_b + H_{el\text{-}b}$
- Término de **intercambio** (exchange energy), es negativo.

Siguiente tema … plasmones



Operador densidad de carga

Densidad de carga de electrones:

$$\rho_e(\mathbf{r}) = -|e| \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

$$\Rightarrow \quad \rho_{e,\mathbf{q}} = -\frac{|e|}{L^3} \sum_{i=1}^{N} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}$$

Verificar usando:

$$f_{\mathbf{q}} = \int \frac{d^3r}{L^3} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

Operador densidad de carga de electrones:

$$\hat{\rho}_e(\mathbf{r}) = -|e|\ \hat{n}(\mathbf{r}) = -|e| \sum_s \hat{\psi}_s^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_s(\mathbf{r})$$

Operadores de campo:
crean y destruyen una partícula en {**r**,s}

Operador densidad de carga

$$\hat{\rho}_e(\mathbf{r}) = -|e|\ \hat{n}(\mathbf{r}) = -|e| \sum_s \hat{\psi}_s^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}_s(\mathbf{r})$$

Se puede ver que el operador de campo está dado por:

$$\hat{\psi}_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k},s} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \longleftrightarrow \hat{\psi}_s^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}',s}^\dagger e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$$

Entonces:

$$\hat{\rho}_e(\mathbf{r}) = -\frac{|e|}{L^3} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',s} \hat{a}_{\mathbf{k}',s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},s} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \xrightarrow{\text{F.T.}} \boxed{\hat{\rho}_{e,\mathbf{q}} = -\frac{|e|}{L^3} \sum_{\mathbf{k},s} \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},s}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},s}}$$

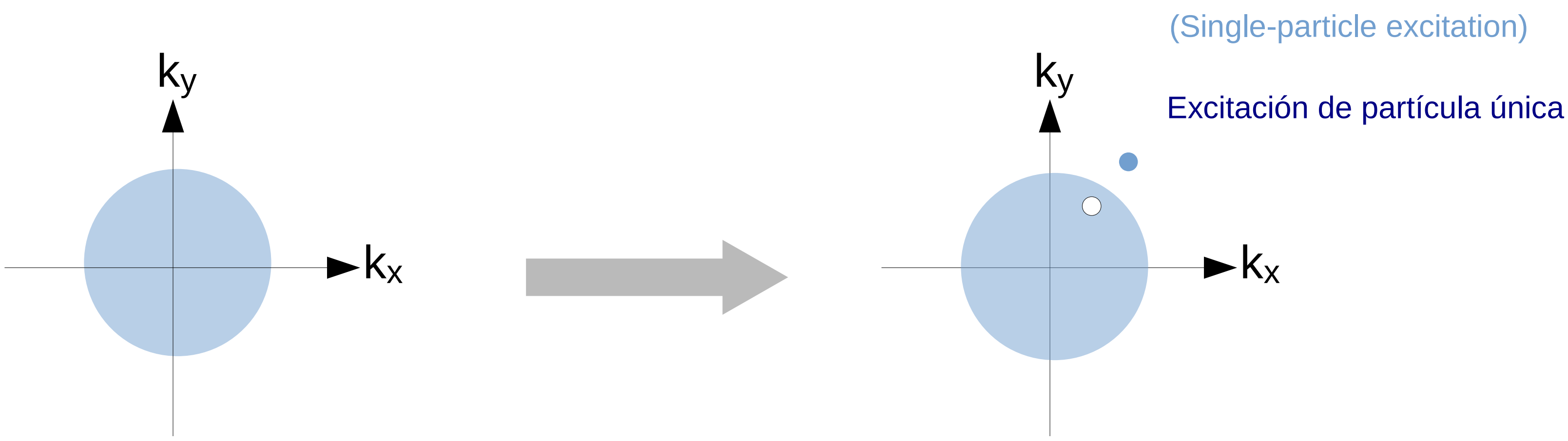
Operador densidad de carga

$$
\begin{aligned}
\hat{\rho}_{e,\mathbf{q}} &= \int \frac{d\mathbf{r}}{V} \hat{\rho}_e(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\
&= \int \frac{d\mathbf{r}}{V} \left(\frac{-|e|}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'s} a^\dagger_{\mathbf{k}'s} a_{\mathbf{k}s} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} \right) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{-|e|}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'s} a^\dagger_{\mathbf{k}'s} a_{\mathbf{k}s} \int \frac{d\mathbf{r}}{V} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{-|e|}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'s} a^\dagger_{\mathbf{k}'s} a_{\mathbf{k}s} \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}',\mathbf{q}} \\
&= \frac{-|e|}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'s} a^\dagger_{\mathbf{k}'s} a_{\mathbf{k}s} \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}'} \\
&= \frac{-|e|}{V} \sum_{\mathbf{k}s} a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q},s} a_{\mathbf{k}s} \qquad (7.24)
\end{aligned}
$$

Excitaciones colectivas del gas de electrones

Excitaciones de partícula única

En el gas de electrones **sin interacción**, las **excitaciones elementales** son del tipo de **“partícula única”**:



Esfera de Fermi: $|F\rangle$

Estado fundamental

Estado excitado

Valor de expectación de la densidad de carga

Ahora estudiamos excitaciones colectivas de la densidad de carga del gas de electrones: **plasmones**

Para ello, estudiamos la dinámica de las fluctuaciones de carga.
Consideremos el valor de expectación del operador densidad de carga :

$$\langle \hat{\rho}_{e,\mathbf{q}} \rangle = -\frac{|e|}{L^3} \sum_{\mathbf{k},s} \langle \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},s} \hat{a}_{\mathbf{k},s} \rangle$$

Miramos a la componente de Fourier asociada al momento **q**

Si el sistema estuviera en equilibrio, esta cantidad sería cero para todo **q** no nulo

Notación simplificada: $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle$

Ecuación de movimiento de Heisenberg

$$\frac{d}{dt} a^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H},\, a^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}]$$

Ecuación de movimiento de Heisenberg
(en representación de Heisenberg)

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

Hamiltoniano del gas de electrones

$$\frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} E_{k'} [a^{\dagger}_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'},\, a^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}] = i(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k) a^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}$$

Término de
energía cinética

Definimos las frecuencias:

$$\left\{ \begin{aligned} \epsilon_k &= E_k/\hbar \\ \epsilon_{k-q} &= \epsilon_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} = E_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}/\hbar \end{aligned} \right.$$

Ecuación de movimiento de Heisenberg

Término de interacción Coulombiana:

$$\sum_{\mathbf{k}',\mathbf{p}',\mathbf{p}} \frac{iV_p}{2\hbar} \left[a^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}'+\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{k}'} \ , \ a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}\right] =$$

$$= \sum_{\mathbf{k}',\mathbf{p}',\mathbf{p}} \frac{iV_p}{2\hbar} \Big(a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}'+\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{k}} - a^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}$$
$$+ a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}'} - a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}'+\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{p}} \Big)$$

Usando:

$\mathbf{p}$ to - $\mathbf{p}$

$V_{-p} = V_p$

Ecuación de movimiento de la densidad de carga

Juntando todos los términos y tomando el valor medio obtenemos:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}\rangle &= i(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k)\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}\rangle \\ &+ \frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{p}',\mathbf{p}} V_p \left(\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}'+\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{k}}\rangle + \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'}\rangle\right)\end{aligned} \tag{8.8}$$

Recordar que estamos interesados en:

$$\langle \rho_{\mathbf{q}}\rangle = -\frac{|e|}{L^3}\sum_{\mathbf{k}}\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}\rangle$$

Tendríamos que resolver (8.8) y sumar sobre **k**. Es posible resolver (8.8) ?

Ecuación de movimiento de la densidad de carga

$$\frac{d}{dt}\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}\rangle = i(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k)\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}\rangle$$
$$+\frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{p}',\mathbf{p}} V_p \left(\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}'+\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{k}}\rangle + \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'}\rangle\right)$$

Para calcular la derivada en el LHS (lado izquierdo) se necesita saber el RHS (lado derecho) a cada tiempo. En principio, al RHS lo conocemos a t = 0, y después?

Necesitamos ecuaciones de movimiento de los términos con cuatro operadores $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}\hat{a}\rangle$

La derivada temporal de $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}\hat{a}\rangle$ dependerá de términos con seis operadores $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}\hat{a}\hat{a}\rangle$

Se genera una jerarquía infinita de ecuaciones.
En principio podemos plantear las ecuaciones de movimiento, pero habría que truncar.

Random-phase approximation (RPA)

$$\frac{d}{dt}\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}\rangle = i(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k)\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}\rangle + \frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{p}',\mathbf{p}} V_p \left(\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}'+\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{k}}\rangle + \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'}\rangle \right)$$

Aproximación: quedarnos con términos de sólo **2 operadores**.

Hay que partir o **factorizar** los términos con 4 operadores.

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}\rangle \\ \langle a^\dagger_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}\rangle = f_k \end{array} \right.$$

Veamos el primer término:

$$T_1 = \frac{i}{\hbar}\sum_{\mathbf{p}',\mathbf{p}\neq 0} V_p \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}'+\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{k}}\rangle$$

Random-phase approximation (RPA)

$$T_1 = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}',\mathbf{p}\neq 0} V_p \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}} a^\dagger_{\mathbf{p}'+\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{k}} \rangle$$

En la suma sobre **p**, nos quedamos con el término **p** = - **q**

Usamos

$$V_q = V_{-q}$$

$$T_1 \simeq \frac{iV_q}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}'} \langle a^\dagger_{\mathbf{k}} a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{k}} \rangle$$

Moviendo $a_{\mathbf{k}}$ dos veces para la izquierda:

factorizar

$$T_1 \simeq \frac{iV_q}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}'} \left(-\langle a^\dagger_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}'} \rangle \delta_{\mathbf{p}'-\mathbf{q},\mathbf{k}} + \langle a^\dagger_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}'} \rangle \right)$$

$$\langle a^\dagger_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \rangle = f_k$$

$$\Rightarrow \quad T_1 \simeq \frac{iV_q}{\hbar} \left(-\langle a^\dagger_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rangle + f_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p}'} \langle a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}'} \rangle \right)$$

Random-phase approximation (RPA)

Segundo término:

$$T_2 = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}',\mathbf{p}\neq 0} V_p \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'} \rangle$$

En la suma sobre **p**, nos quedamos con el término **p** = **q** y movemos $a_{\mathbf{k}}$ hacia la izquierda:

$$T_2 \simeq \frac{iV_q}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}'} \left(\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}'} \rangle \delta_{\mathbf{p}',\mathbf{k}} - \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}'} \rangle \right)$$

Factorizando:

$$T_2 \simeq \frac{iV_q}{\hbar} \left(\langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} \rangle - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p}'} \langle a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}'} \rangle \right)$$

Juntando los dos términos:

$$\frac{d}{dt} \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} \rangle \simeq i(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k) \langle a^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{iV_q}{\hbar} (f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \sum_{\mathbf{p}'} \langle a^\dagger_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}'} \rangle$$

Resumen de la clase 14

Operador densidad de carga

Ecuación de movimiento del operador densidad

Aproximación RPA (Random Phase Approximation)