Guía 3: Formalismo de segunda cuantización

20 de mayo de 2021

Ejercicio 5(b)

Escribir en segunda cuantización el hamiltoniano para el Jellium model en 2D (Obtener una expresión análoga a la ec. (3.19) de Fetter-Walecka).

Solución

Se considera un sistema de N electrones en un area $A = L^2$ ($L \to \infty$). Los estados de particula una son:

$$\psi_{\vec{k}\lambda}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\vec{k}.\vec{x}} \eta_\lambda \tag{1}$$

donde, de acuerdo a las condiciones de borde, $k_i = 2\pi n_i / L$ ($i = x, y$) y $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, ...$

El hamiltoniano del sistema, al igual que en el caso 3D, viene dado por:

$$H = H_{el} + H_b + H_{el-b} \tag{2}$$

donde el primer término corresponde a la energía de los electrones (cinética y de interacción), el segundo representa la energía del background de carga positiva y el tercero describe la interacción entre los electrones y el background. Las expresiones asociadas a cada término son:

$$H_{el} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j}^{N} \frac{e^{-\mu|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{3}$$

$$H_b = \frac{e^2}{2} \int \int d^2x d^2x' \frac{n(\vec{x}) n(\vec{x}') e^{-\mu|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \tag{4}$$

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_i \int \frac{n(\vec{x}) e^{-\mu|\vec{x} - \vec{r}_i|}}{|\vec{x} - \vec{r}_i|} \tag{5}$$

Las ecuaciones (4) y (5) se resuelven facilmente considerando $n(\vec{x} = N/A = cte)$:

$$H_b = \frac{e^2}{2}\int\int d^2x d^{x\prime}\frac{N^2}{A^2}e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}|\vec{x}-\vec{x}'| = \frac{e^2}{2}\frac{N^2}{A^2}\int d^2x \int d^z\frac{e^{-\mu z}}{z} = \frac{\pi e^2}{\mu}\frac{N^2}{A} \tag{6}$$

$$H_{el-b} = -e^2\sum_i\int d^2x\frac{N}{A}e^{-\mu|\vec{x}-\vec{r}_i|}|\vec{x}-\vec{r}_i| = -e^2\sum_i\frac{N}{A}\int d^2z\frac{e^{-\mu z}}{z} = -\frac{2\pi e^2}{\mu}\frac{N^2}{A} \tag{7}$$

Con estos resultados, el hamiltoniano del sistema se reduce a

$$H = -\frac{\pi e^2}{\mu}\frac{N^2}{A} + H_el \tag{8}$$

Ahora, se debe expresar esta ecuación en segunda cuantización. Para eso, partimos de la energía cinética y calculamos los elementos de matriz del operador $\hat{T}$ asociado a la misma como:

$$\begin{aligned}\langle\vec{k}_1\lambda_1|\hat{T}|\vec{k}_2\lambda_2\rangle &= (2mA)^{-1}\int d^2xe^{-i\vec{k}_1.\vec{x}}\eta_1^\dagger(-\hbar^2\nabla^2)e^{i\vec{k}_2.\vec{x}}\eta_{\lambda_2} \\ &= \frac{\hbar^2k_2^2}{2mA}\delta_{\lambda_1}\delta_{\lambda_2}\int d^2xe^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1).\vec{x}} = \frac{\hbar^2k_2^2}{2m}\delta_{\lambda_1\lambda_2}\delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\end{aligned} \tag{9}$$

$$\Longrightarrow \quad \hat{T} = \sum_{\vec{k}\lambda}\frac{\hbar^2k_2^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda} = \sum_{\vec{k}\lambda}\frac{\hbar^2k_2^2}{2m}\hat{n}_{\vec{k}\lambda} \tag{10}$$

Luego, para el potencial de interacción se tiene:

$$\langle\vec{k}_1\lambda_1,\vec{k}_2\lambda_2|\hat{V}|\vec{k}_3\lambda_3,\vec{k}_4\lambda_4\rangle = \frac{e^2}{A}\int\int d^2x_1d^2x_2e^{-i\vec{k}_1.\vec{x}_1}\eta^\dagger_{\lambda_1}e^{-i\vec{k}_2.\vec{x}_2}\eta^\dagger_{\lambda_2}\frac{e^-\mu|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}{|\vec{x}_1-\vec{x}_2|}e^{i\vec{k}_3.\vec{x}_1}\eta_{\lambda_3}e^{i\vec{k}_4.\vec{x}_2}\eta_{\lambda_4} \tag{11}$$

y haciendo $\vec{x} = \vec{x}_1$ e $\vec{y} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$ resulta

$$\begin{aligned}\langle\vec{k}_1\lambda_1,\vec{k}_2\lambda_2|\hat{V}|\vec{k}_3\lambda_3,\vec{k}_4\lambda_4\rangle &= \frac{e^2}{A}\int d^2xe^{-i(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3-\vec{k}_4).\vec{x}}\int d^2ye^{i(\vec{k}_3-\vec{k}_1).\vec{y}}\frac{e^{-\mu y}}{y}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4} \\ &= \frac{e^2}{A}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\delta_{\vec{k}_1+\vec{k}_2,\vec{k}_3+\vec{k}_4}\frac{2\pi}{\sqrt{\mu^2+(\vec{k}_1-\vec{k}_3)^2}}\end{aligned} \tag{12}$$

El operador $\hat{V}$ resulta:

$$\hat{V} = \frac{e^2}{2A}\sum_{k_1\lambda_1}\sum_{k_2\lambda_2}\sum_{k_3\lambda_3}\sum_{k_4\lambda_4}\delta_{\lambda_1\lambda_3}\delta_{\lambda_2\lambda_4}\delta_{\vec{k}_1+\vec{k}_2,\vec{k}_3+\vec{k}_4}\frac{2\pi}{\sqrt{\mu^2+(\vec{k}_1-\vec{k}_3)^2}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_{11}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}_{22}}\hat{a}_{\vec{k}_{33}}\hat{a}_{\vec{k}_{44}} \tag{13}$$

Ahora, realizamos los siguientes cambios de variable:

$$\vec{k}_1 = \vec{k}+\vec{q}, \quad \vec{k}_2 = \vec{p}-\vec{q}, \quad \vec{k}_3 = \vec{k}, \quad y \quad \vec{k}_4 = \vec{p} \tag{14}$$

de donde

$$\hat{V} = \frac{e^2}{2A}\sum_{kqp}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{2\pi}{\sqrt{\mu^2+q^2}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k},\lambda_1} \tag{15}$$

Separamos la ec. (15) en dos terminos, uno con $q \neq 0$ y otro con $q = 0$:

$$\hat{V} = \frac{e^2}{2A}\sum_{kqp,q\neq 0}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{2\pi}{\sqrt{\mu^2+q^2}}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k},\lambda_1} + \frac{e^2}{2A}\sum_{kp}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{2\pi}{\mu}\hat{a}^\dagger_{\vec{k},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k},\lambda_1} \tag{16}$$

donde el segundo término es igual a $\frac{\pi e^2}{\mu A}(\hat{N}^2 - \hat{N})$. La primera parte (con N^2) se cancela con el primer término de H (ec. 8) y el término con N representa una energía por partícula que se anula al considerar $L \to \infty$ y luego $\mu \to 0$ (siendo $\mu^{-1} \ll L$).

Finalmente, tomando $\mu \to 0$ en el primer término de (16), el hamiltoniano en segunda cuantización para el *Jellium model* en 2D viene dado por:

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{\vec{k}\lambda}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda} + \frac{e^2}{2A}\sum_{kqp,q\neq 0}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{2\pi}{q}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k},\lambda_1}} \tag{17}$$

Ejercicio 6

Partiendo del resultado obtenido en el problema anterior

(a) Adimensionalizar el hamiltoniano y hacer un análisis como el que sigue a las ec. (3.24) de Fetter-Walecka.

(b) Calcular el vector de Fermi como en (3.27) y la energía cinética como en (3.30).

(c) Calcular el shift de la energía a primer orden debido a la interacción Coulombiana.

(d) Sumar los dos términos de la energía obtenidos y graficar.

Solución

(a) Usamos las relaciones:

$$\bar{A} = \frac{A}{r_0^2},\quad \bar{\vec{k}} = \frac{\vec{k}}{r_0},\quad \bar{\vec{p}} = \frac{\vec{p}}{r_0},\quad \bar{\vec{q}} = \frac{\vec{q}}{r_0}\quad \textit{donde}\quad A = N\pi r_0^2\quad y\quad r_0 = a_0 r_s\quad (a_0 = \hbar^2/me^2)$$

y reescribimos el hamiltoniano (17) como:

$$\hat{H} = \frac{e^2}{a_0 r_s^2}\left(\sum_{\vec{k}\lambda}\frac{\bar{\vec{k}}^2}{2}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}\lambda}\hat{a}_{\vec{k}\lambda} + \frac{r_s}{2\bar{A}}\sum_{\bar{k}\bar{q}\bar{p},\bar{q}\neq 0}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{2\pi}{\bar{q}}\hat{a}^\dagger_{\bar{\vec{k}}+\bar{\vec{q}},\lambda_1}\hat{a}^\dagger_{\bar{\vec{p}}-\bar{\vec{q}},\lambda_2}\hat{a}_{\bar{\vec{p}},\lambda_2}\hat{a}_{\bar{\vec{k}},\lambda_1}\right) \tag{18}$$

En el límite de alta densidad ($r_s \to 0$), el segundo término de H puede considerarse como una pequeña perturbación. Podemos escribir $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ y hallar mediante teoría de perturbaciones la energía corregida a primer orden $E = E^{(0)} + E^{(1)} + ...$

(b) El estado fundamental $|F\rangle$ se obtiene llenando los estados de momento hasta el valor $p_F = \hbar k_F$ (k de Fermi). Cuando $L \to \infty$ esta suma pasa al continuo como

$$\sum_{\vec{k}\lambda} f_\lambda(\vec{k}) = \sum_{n_x n_y}\sum_{\lambda} f_\lambda\left(\frac{2\pi n_i}{L}\right) \;\to\; \frac{L^2}{(2\pi)^2}\sum_{\lambda}\int d^2k f_\lambda(\vec{k}) \tag{19}$$

Luego, el valor de k_F se obtiene a partir del valor esperado de $\hat{N}$ en $|f\rangle$:

$$N = \langle F|\hat{N}|F\rangle = \sum_{k\lambda}\langle F|\hat{n}_{\vec{k}\lambda}|F\rangle = \sum_{k\lambda}\Theta(k_F - k) = \frac{A}{(2\pi)^2}\sum_{\lambda}\int d^2k\Theta(k_F - k) = \frac{A}{2\pi}k_F^2 \tag{20}$$

Despejando k_F de este resultado se obtiene

$$k_F = \sqrt{\frac{2\pi N}{A}} = \sqrt{2}r_0^{-1} \tag{21}$$

(c) Ahora calculamos la energia cinetica (valor esperado de $\hat{H}_0$):

$$\begin{aligned}\langle F|\hat{H}_0|F\rangle &= \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{k\lambda}k^2\langle F|\hat{n}_{\vec{k}\lambda}|F\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{k\lambda}k^2\Theta(k_F - k) = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\lambda}\frac{A}{(2\pi)^2}\int d^2k k^2\Theta(k_F - k)\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{A}{\pi}\int k^3\Theta(k_F - k)dk = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{A}{\pi}\frac{k_F^4}{4} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{k_F^2}{2}N\end{aligned} \tag{22}$$

y expresando (22) en términos de a_0 y r_s resulta

$$E^{(0)} = \langle F|\hat{H}_0|F\rangle = \frac{e^2}{2a_0}\frac{N}{r_s^2} \tag{23}$$

Luego, la corrección de la energía a primer orden se obtiene a partir de

$$E^{(1)} = \langle F|\hat{H}_1|F\rangle = \frac{e^2}{2A}\sum_{kpq,q\neq 0}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\frac{2\pi}{q}\langle F|\hat{a}^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\lambda_1}\hat{a}^{\dagger}_{\vec{p}-\vec{q},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{p},\lambda_2}\hat{a}_{\vec{k},\lambda_1}|F\rangle \tag{24}$$

Siguiendo el mismo procedimiento que en las ec. (3.31) a (3.33) del libro resulta:

$$\begin{aligned}\langle F|\hat{H}_1|F\rangle &= -\frac{e^2}{2A}\sum_{\lambda_1}\sum_{kq,q\neq 0}\frac{2\pi}{q}\Theta(k_F-|\vec{k}+\vec{q}|)\Theta(k_F-k)\\ &= -\frac{e^2A}{(2\pi)^3}\int d^2q q^{-1}\int d^2k\Theta(k_F-|\vec{k}+\vec{q}|)\Theta(k_F-k)\end{aligned} \tag{25}$$

donde la primera integral es igual a $2\pi q$ y la segunda puede expresarse de acuerdo al cambio de variable $\vec{P} = \vec{k} + \vec{q}/2$ como:

$$\int d^2k\Theta(k_F-|\vec{k}+\vec{q}|)\Theta(k_F-k) = \int d^2P\Theta(k_F-|\vec{P}+\vec{q}/2|)\Theta(k_F-|\vec{k}-\vec{q}/2|)$$

En analogía al caso 3D, donde esta integral representa el volumen de la intersección entre las esferas de la Figura 3.1, para 2D la solución está asociada al área de intersección entre dos circunferencias de radio k_F y separadas una distancia q. Entonces,

$$\int d^2P\Theta(k_F-|\vec{P}+\vec{q}/2|)\Theta(k_F-|\vec{k}-\vec{q}/2|) = 2k_F^2(cos^{-1}x - x\sqrt{1-x^2})\Theta(1-x)$$

$$con \quad x = q/2k_F$$

Reemplazando los resultados de ambas integrales en (25) se obtiene

$$\begin{aligned}E^{(1)} = -\frac{e^2A}{8\pi^3}2\pi 2k_F 2k_F^2\int_0^1(cos^{-1}x - x\sqrt{1-x^2})dx &= -\frac{2e^2A}{3\pi^2}k_F^3\\ &= -\frac{e^2}{2a_0}N\frac{1{,}2}{r_s}\end{aligned} \tag{26}$$