FECHA (1)

Tarea: Pb 4 Guía 4. BoAs 11/06/21

Pb4) a) Demostrar ec 8.40 haciendo la Transformada de Fourier 8.38

b) Tomar la Transformada de Fourier de la ec 8.47 en los caso 2D y 3D.

Para la 3D TF usamos

$$f_q = \int \frac{d^3r}{L^3} f(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \qquad \sum_q e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} = L^3 \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

$$f(\vec{r}) = \sum_q f_q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \qquad \int \frac{d^3r}{L^3} e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}} = \delta_{\vec{q},\vec{q}'}$$

La ec 8.38 es el Hamiltoniano efectivo de una partícula

$$\mathcal{H} = \int d^3r\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right) \hat{\psi}(\vec{r}) + \int d^3r\, V_{eff}(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger_{(\vec{r})} \hat{\psi}_{(\vec{r})}$$

donde $V_{eff}(r) = V(r) + V_{ind}(r)$

$V(r)$: Potencial de Coulomb

$V_{ind}(r)$: Potencial inducido de las partículas apantalladas

ocupémonos del 1er sumando primero.

$\hat{\psi}^\dagger_s(\vec{r}), \hat{\psi}_s(\vec{r})$ creación y destrucción de un electrón en la posición $\vec{r}$ con spin s. Usando la expansión de onda plana:

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

asumiremos también el spin incluido en $\vec{k}$, así que no lo escribiremos

Con esta definición del operador ψ, tenemos

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2$$

$$\mathcal{H}_1 = \int d^3r\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right) \hat{\psi}(\vec{r})$$

$$\mathcal{H}_1 = \int d^3r\, \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}'} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right) \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} \hat{a}_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\mathcal{H}_1 = \int \frac{d^3r}{L^3} \sum_{\vec{k}'} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sum_{k} \hat{a}_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

ya que $\nabla^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = i^2k^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ y $\frac{\hbar^2k^2}{2m} = E_k$

$$\mathcal{H}_1 = \int \frac{d^3r}{L^3} E_k \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} \hat{a}_k e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}$$

podemos intercambiar $\int$ por $\sum$;

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} E_k \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} \hat{a}_{\vec{k}} \int \frac{d^3r}{L^3} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} E_k \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} \hat{a}_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}\vec{k}}$$

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{\vec{k}} E_k \hat{a}_{\vec{k}'} \hat{a}_{\vec{k}}$$

para $\mathcal{H}_2 = \int d^3r\, V_{eff}\, \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r})$ tenemos

$$\mathcal{H}_2 = \int \frac{d^3r}{L^3} V_{eff}(r) \sum_{\vec{k}'} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$\mathcal{H}_2 = \int \frac{d^3r}{L^3} V_{eff}(r) \sum_{\vec{k}'\vec{k}} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} \hat{a}_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}$$

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{\vec{k}'\vec{k}} V_{eff}(r) \int \frac{d^3r}{L^3} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'} \hat{a}_{\vec{k}}$$

Por otro lado, puede desarrollarse $V_{eff}(r)$ en series de Fourier

$$H_2 = \int \sum_{\vec{k}\,\vec{k}'} \sum_{\vec{q}} V_{eff}(q)\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, \hat{a}^{+}_{\vec{k}'}\, \hat{a}_{\vec{k}}\, \frac{d^3r}{L^3}$$

$$H_2 = \sum_{\vec{q}} V_{eff}(\vec{q}) \sum_{\vec{k}'\vec{k}} \int \frac{d^3r}{L^3}\, e^{i(\vec{k}+\vec{q}-\vec{k}')\cdot\vec{r}}\, \hat{a}^{+}_{\vec{k}'}\, \hat{a}_{\vec{k}}$$

la integral es no nula cuando $\vec{k}' = \vec{k}+\vec{q}$. Entonces $\delta_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}'} = 1$ si $\vec{k}' = \vec{k}+\vec{q}$

$$H_2 = \sum_{\vec{q}} V_{eff}(\vec{q}) \sum_{\vec{k}} \hat{a}^{+}_{\vec{k}+\vec{q}}\, \hat{a}_{\vec{k}}$$

Por lo tanto, obtenemos 8.40 como quería probarse.

$$H = \sum_{\vec{k}} E_k\, \hat{a}^{+}_{k}\, \hat{a}_{k} + \sum_{\vec{q}} V_{eff}(q) \sum_{\vec{k}} \hat{a}^{+}_{\vec{k}+\vec{q}}\, \hat{a}_{\vec{k}}$$

b) La ec 8.47 está dada por:

$$\nabla^2 V_{ind}(r) = \frac{4\pi|e|\,\rho(r)}{\epsilon_0}$$

caso 3D

Al lado izquierdo aplico la Transformada de Fourier TF

$$TF(\nabla^2 V_{ind}(r)) = \int \frac{d^3r}{L^3}\, \nabla^2 V_{ind}(r)\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

$$= \int \frac{d^3r}{L^3}\, \nabla^2 \Big(\sum_{q'} V_{ind}(q')\, e^{i\vec{q}'\cdot\vec{r}} \Big) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

recordemos que ∇^2 deriva en la coordenada r

$$= \int \frac{d^3r}{L^3} \Big(\sum_{q'} V_{ind}(q')\, \nabla^2 e^{i\vec{q}'\cdot\vec{r}} \Big) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

NOTA

$$= \int \frac{d^3r}{L^3} \sum_{q'} i^2 q'^2 V_{ind}(q') e^{i\vec{q}'\cdot\vec{r}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

intercambiamos $\int \leftrightarrow \sum$

$$= \sum_{q'} i^2 q'^2 V_{ind}(q') \int \frac{d^3r}{L^3} e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}} \Rightarrow$$ usando $$\int \frac{d^3r}{L^3} e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}} = \delta_{\vec{q},\vec{q}'}$$

desaparece las sumas en q' quedando el sumando $q'=q$

$$\Rightarrow TF(\nabla^2 V_{ind}(r)) = -q^2 V_{ind}(q)$$

Tomando valor esperado en ρ tenemos

$$-q^2 V_{ind}(q) = \frac{4\pi|e| TF(\rho)}{\epsilon_0}$$

$$V_{ind}(q) = -\frac{4\pi|e|}{q^2\epsilon_0} \rho_q$$

sustituyendo $\rho_q \to \langle \rho_q \rangle$ tenemos

$$V_{ind}(q) = -\frac{4\pi|e|\langle \rho_q \rangle}{q^2\epsilon_0}$$

usando ec 8.46 $\langle \rho_q \rangle = -\frac{|e|}{L^3} V_{eff}(q) P^1(q,\omega)$

llegamos a la prueba que queríamos llegar

$$V_{ind}(q) = -\frac{4\pi|e|}{q^2\epsilon_0}\left(-\frac{|e|}{L^3} V_{eff}(q) P^1(q,\omega)\right)$$

$$\boxed{V_{ind}(q) = \frac{4\pi|e|^2}{q^2\epsilon_0 L^3} V_{eff}(q) P^1(q,\omega)}$$

En 2D es sustituir $L^3 \to L^2$. (Duda)