

Gás de elétrons

Para mostrar a utilidade da segunda quantização, consideraremos um modelo simples que nos dá um primeira aproximação as características gerais de um metal. O modelo é formado por um gás de elétrons localizado sobre um fundo positivo de densidade uniforme que garante que o sistema completo seja neutro. Estamos interessados nas propriedades do sistema no limite termodinâmico, portanto, é conveniente considerar o sistema dentro de uma grande caixa cúbica de lado L e no final dos cálculos tomamos o limite $L \rightarrow \infty$. Em um meio uniforme e infinito, todas as propriedades físicas devem ser invariantes sob translações, isto sugere impor condições de contorno periódicas nas funções de onda de uma partícula, isto é

$$\psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{x}) = V^{-1/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \eta_{\lambda}, \quad \text{com} \quad \eta_{\uparrow} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \eta_{\downarrow} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (1)$$

e

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L}, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2)$$

$V \equiv L^3$ é o volume da caixa e η_{λ} é a componente do spin ao longo do eixo z . O hamiltoniano total pode ser escrito como

$$H = H_{el} + H_b + H_{el-b}, \quad (3)$$

onde

$$H_{el} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i \neq j}^N \frac{e^{-\mu|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (4)$$

é o Hamiltoniano para os elétrons,

$$H_b = \frac{1}{2} e^2 \int \int d^3x d^3x' \frac{n(\mathbf{x})n(\mathbf{x}')e^{-\mu|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (5)$$

é o Hamiltoniano do fundo positivo com densidade de carga $en(\mathbf{x})$, e

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{i=1}^N \int d^3x \frac{n(\mathbf{x})e^{-\mu|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|}, \quad (6)$$

é a interação entre os elétrons e o fundo positivo. Note que, por causa do longo alcance da interação de coulomb, cada um dos termos acima diverge se calculados em forma independente no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, mantendo $n = N/V$ constante, mas a soma dos três termos permanece finita nesse limite.

As únicas variáveis dinâmicas presentes neste modelo são as correspondentes aos elétrons, portanto, o termo H_b não tem caráter de operador e pode ser calculado diretamente para uma distribuição uniforme $n(\mathbf{x}) = N/V$

$$\begin{aligned} H_b &= \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^2 \int \int d^3x d^3x' \frac{e^{-\mu|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ &= \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^2 \int \int d^3x d^3r \frac{e^{-\mu r}}{r} \\ &= \frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} 4\pi \int_0^\infty r e^{-\mu r} = -\frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} 4\pi \frac{d}{d\mu} \int_0^\infty e^{-\mu r} = \frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

A grandeza $N^{-1}H_b$ diverge no limite $\mu \rightarrow 0$ por causa do longo alcance do potencial de coulomb. Observemos

agora o termo H_{el-b}

$$\begin{aligned}
H_{el-b} &= -e^2 \sum_{i=1}^N \frac{N}{V} \int d^3x \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}-\mathbf{r}_i|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{r}_i|} \\
&= -e^2 \sum_{i=1}^N \frac{N}{V} \int d^3r \frac{e^{-\mu r}}{r} \\
&= -e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}.
\end{aligned} \tag{8}$$

O Hamiltoniano total se reduz a

$$H = -\frac{1}{2}e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2} + H_{el}. \tag{9}$$

Agora vamos escrever o Hamiltoniano acima em termos dos operadores de criação e destruição na forma $\hat{H} = \sum_{rs} a_r^\dagger \langle r|T|s\rangle a_s + \frac{1}{2} \sum_{rstu} a_r^\dagger a_s^\dagger \langle rs|V|tu\rangle a_u a_t$. O termo de energia cinética requer o elemento de matriz

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 | T | \mathbf{k}_2 \lambda_2 \rangle &= \int d^3x \int d^3x' \langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | T | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{k}_2 \lambda_2 \rangle \\
&= \frac{1}{2mV} \int d^3x e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}} \eta_{\lambda_1}^\dagger (-\hbar^2 \nabla^2) e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}} \eta_{\lambda_2} \\
&= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2mV} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \int d^3x e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{x}} \\
&= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2},
\end{aligned}$$

onde foi usada a definição $\delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} = V^{-1} \int d^3x e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{x}}$. O operador de energia cinética fica

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda}. \tag{10}$$

Para a energia potencial o elemento de matriz necessário é

$$\langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 | V | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle = \int \int \int \int \langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 | \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 \rangle \langle \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 | V | \mathbf{x}_3 \mathbf{x}_4 \rangle \langle \mathbf{x}_3 \mathbf{x}_4 | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle d^3x_1 d^3x_2 d^3x_3 d^3x_4$$

o elemento de matriz da interação na representação de coordenadas é

$$\langle \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 | V | \mathbf{x}_3 \mathbf{x}_4 \rangle = V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_4)$$

e também sabemos que

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \lambda \rangle = V^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \eta_\lambda,$$

substituímos estas expressões e obtemos

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 | V | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle &= \frac{1}{V^2} \int \int \int \int e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}_1} \eta_{\lambda_1}^\dagger(1) e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}_2} \eta_{\lambda_2}^\dagger(2) \langle \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 | V | \mathbf{x}_3 \mathbf{x}_4 \rangle \\
&\quad \times e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{x}_3} \eta_{\lambda_3}(1) e^{i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{x}_4} \eta_{\lambda_4}(2) d^3x_1 d^3x_2 d^3x_3 d^3x_4 \\
&= \frac{e^2}{2V^2} \int \int e^{i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{x}_1} \eta_{\lambda_1}^\dagger(1) \eta_{\lambda_3}(1) e^{i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}_2} \eta_{\lambda_2}^\dagger(2) \eta_{\lambda_4}(2) \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} d^3x_1 d^3x_2,
\end{aligned}$$

os produtos entre as funções de spin resultam em $\eta_{\lambda_1}^\dagger(1) \eta_{\lambda_3}(1) = \delta_{\lambda_1 \lambda_3}$ e $\eta_{\lambda_2}^\dagger(1) \eta_{\lambda_4}(1) = \delta_{\lambda_2 \lambda_4}$. A integral acima fica mais simples fazendo a substituição $\mathbf{x} = \mathbf{x}_2$ e $\mathbf{y} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$,

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 | V | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle &= \frac{e^2}{2V^2} \int \int e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{y}} \frac{e^{-\mu y}}{y} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} d^3x d^3y \\
&= \frac{e^2}{2V} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \frac{4\pi}{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)^2 + \mu^2},
\end{aligned} \tag{11}$$

onde a integral em $\mathbf{x}$ deu como resultado um função delta que garante a conservação de momento e a integral em $\mathbf{y}$ corresponde a

$$\begin{aligned} \int e^{i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{y}} \frac{e^{-\mu y}}{y} d^3 y &= 2\pi \int_0^\infty dy y e^{-\mu y} \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{i|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3| y \cos \theta} \\ &= -2\pi \int_0^\infty dy y e^{-\mu y} \left(\frac{e^{-i|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3| y} - e^{i|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3| y}}{i|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3| y} \right) \\ &= \frac{-2\pi}{i|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3|} \left(\frac{1}{\mu + i|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3|} - \frac{1}{\mu - i|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3|} \right) \\ &= \frac{4\pi}{\mu^2 + (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)^2}. \end{aligned}$$

Podemos escrever agora em segunda quantização o operador de energia potencial

$$\hat{V} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} \sum_{\mathbf{k}_2 \lambda_2} \sum_{\mathbf{k}_3 \lambda_3} \sum_{\mathbf{k}_4 \lambda_4} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \frac{4\pi}{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)^2 + \mu^2} a_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_4 \lambda_4} a_{\mathbf{k}_3 \lambda_3}$$

observe que a conservação do momento permite reduzir o número de somas em k de 4 para 3, então, as definições $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} + \mathbf{q}$, $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}$, $\mathbf{k}_2 = \mathbf{p} - \mathbf{q}$, $\mathbf{k}_4 = \mathbf{p}$, garantem a conservação do momento e permitem escrever a energia potencial como

$$\hat{V} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{p} \mathbf{q}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p} - \mathbf{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p} \lambda_2} a_{\mathbf{k} \lambda_1}. \quad (12)$$

Analisemos o caso particular $\mathbf{q} = 0$, nesta situação, o potencial fica

$$\begin{aligned} \hat{V}(\mathbf{q} = 0) &= \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{p}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{\mu^2} a_{\mathbf{k} \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p} \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p} \lambda_2} a_{\mathbf{k} \lambda_1} \\ &= \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{p}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} a_{\mathbf{k} \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k} \lambda_1} \left(a_{\mathbf{p} \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p} \lambda_2} - \delta_{\mathbf{k} \mathbf{p}} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \right) = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} (N^2 - N), \end{aligned} \quad (13)$$

observe que o primeiro termo de (13) cancela com o primeiro termo de (9) eliminando as divergências inde-sejadas, pois a energia por partícula derivada do segundo termo, se anula no limite termodinâmico $V \rightarrow \infty$. Assim, finalmente encontramos o Hamiltoniano adequado para um gás de elétrons num meio positivo de densidade uniforme,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k} \lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k} \lambda}^\dagger a_{\mathbf{k} \lambda} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q} \neq 0} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p} - \mathbf{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p} \lambda_2} a_{\mathbf{k} \lambda_1}.$$

Agora, resolveremos o problema proposto na lista de exercícios:

- Considere o sistema descrito pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

com

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k} \lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\mathbf{k} \lambda}^\dagger a_{\mathbf{k} \lambda} \\ \hat{H}_1 &= \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q} \neq 0, \sigma_1, \sigma_2} \frac{4\pi}{q^2} a_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}, \end{aligned}$$

onde, V é o volume do sistema, e é a carga do elétron, $\hat{H}_0$ é o hamiltoniano não perturbado que representa o gás de elétrons não interagente, e $\hat{H}_1$ pode ser considerado como uma perturbação. Mostre que a correção em primeira ordem da energia do estado fundamental do sistema é

$$\Delta E^{(1)} = -\frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \text{Ryd} \quad (14)$$

Solução: Segundo a descrição feita acima, o valor esperado no estado fundamental da interação Coulombiana do gás é

$$\langle \hat{H}_1 \rangle_0 = \frac{1}{2V} (4\pi e^2) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q} \neq 0, \sigma_1, \sigma_2} \frac{1}{q^2} \left\langle a_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \right\rangle_0, \quad (15)$$

onde V sem chapéu representa o volume do sistema. Inicialmente vamos calcular o elemento de matriz em (15). Note que o estado com $\mathbf{k}_1, \sigma_1$ e o estado com $\mathbf{k}_2, \sigma_2$ deve estar ocupado no estado fundamental à direita do elemento matricial. Igualmente o estado com $\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1$ e o estado com $\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2$ devem estar ocupados no estado fundamental transposto à esquerda do elemento matricial. Além disto, os dois operadores de criação devem preencher os buracos deixados pelos operadores de aniquilação, portanto

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1 &= \mathbf{k}_1, \sigma_1 \\ \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2 &= \mathbf{k}_2, \sigma_2 \end{aligned} \quad (16)$$

ou

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1 &= \mathbf{k}_2, \sigma_2 \\ \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2 &= \mathbf{k}_1, \sigma_1 \end{aligned} \quad (17)$$

A primeira possibilidade não é permitida porque a soma exclui o elemento $\mathbf{q} = 0$. Assim, o elemento matricial se reduz a

$$\begin{aligned} \left\langle a_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \right\rangle_0 &= \delta_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_1} \delta_{\sigma_2 \sigma_1} \left\langle a_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \right\rangle_0 \\ &= \delta_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \mathbf{k}_2} \delta_{\sigma_2 \sigma_1} \left\langle a_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_1, \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \right\rangle_0 \\ &= -\delta_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \mathbf{k}_2} \delta_{\sigma_2 \sigma_1} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1} \hat{n}_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \rangle_0. \end{aligned} \quad (18)$$

O operador número atua sobre o estado fundamental. Portanto, se o estado com $\mathbf{k}_1, \sigma_1$ estiver ocupado o efeito do operador número é simplesmente multiplicar o estado pela unidade, se o estado estiver vazio, o efeito será multiplicar o estado por zero, portanto o elemento matricial pode ser substituído por um produto de funções degrau da forma

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_1} \hat{n}_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \rangle_0 = \theta(k_F - |\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k}_1|). \quad (19)$$

Agora substituímos os elementos matriciais na soma (15),

$$\langle \hat{H}_1 \rangle_0 = -\frac{1}{2V} (4\pi e^2) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q} \neq 0, \sigma_1, \sigma_2} \frac{1}{q^2} \delta_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \mathbf{k}_2} \delta_{\sigma_2 \sigma_1} \theta(k_F - |\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k}_1|),$$

as deltas são eliminadas somando em $\mathbf{k}_2$ e σ e trocamos as somas por integrais fazendo a substituição usual $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k$,

$$\langle \hat{H}_1 \rangle_0 = -\frac{V}{2(2\pi)^6} (4\pi e^2) \sum_{\sigma_1} \int \int d^3k_1 d^3q \frac{1}{q^2} \theta(k_F - |\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k}_1|), \quad (20)$$

fazemos a troca de variáveis de $\mathbf{k}$ para $\mathbf{P} = \mathbf{k}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{q}$, assim

$$\langle \hat{H}_1 \rangle_0 = -\frac{V}{2(2\pi)^6} (4\pi e^2) 2 \int \int d^3P d^3q \frac{1}{q^2} \theta(k_F - \left| \mathbf{P} - \frac{1}{2}\mathbf{q} \right|) \theta(k_F - \left| \mathbf{P} + \frac{1}{2}\mathbf{q} \right|), \quad (21)$$

o fator 2 vem da soma no spin. A integral em P corresponde a calcular o volume definido pela intersecção de duas esferas de raio k_F e cujos centros estão separados uma distância $|\mathbf{q}|$ como pode ser visto na figura

O volume de uma calota esférica de raio R e altura h é dado por

$$V(R, h) = \frac{1}{3} \pi h^2 (3R - h) \quad (22)$$

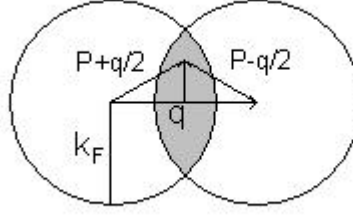


Figure 1: Região de integração

(<http://mathworld.wolfram.com/Sphere-SphereIntersection.html>). Em nosso caso, $R = k_F$ e $h = k_F - q/2$. Assim,

$$\begin{aligned}
 \int d^3P \theta(k_F - \left| \mathbf{P} - \frac{1}{2}\mathbf{q} \right|) \theta(k_F - \left| \mathbf{P} + \frac{1}{2}\mathbf{q} \right|) &= 2V(R, h) \\
 &= \frac{2\pi}{3} (k_F - q/2)^2 (2k_F + q/2) \\
 &= \frac{2\pi}{3} k_F^3 \left(2 - \frac{3q}{2k_F} + \frac{q^3}{8k_F^3} \right) \\
 &= \frac{4\pi}{3} k_F^3 \left(1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3 \right), \tag{23}
 \end{aligned}$$

Com $x \equiv q/(2k_F)$, como q varia desde 0 até $2k_F$, x varia de 0 até 1. Substituímos em (21) e obtemos

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H}_1 \rangle_0 &= -\frac{2V}{3\pi^3} e^2 k_F^4 \int_0^1 dx \left(1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3 \right) \\
 \langle \hat{H}_1 \rangle_0 &= -\frac{V}{4\pi^3} e^2 k_F^4. \tag{24}
 \end{aligned}$$

Esta expressão pode ser escrita na forma (14), usando as definições

$$-\frac{V}{4\pi^3} e^2 k_F^4 = -\frac{V}{4\pi^3} 2a_0 k_F^4 \text{Ryd} = -\frac{V}{4\pi^3} 2 \left(\frac{3V}{4\pi N} \right)^{1/3} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{4/3} \frac{\text{Ryd}}{r_s}$$

e finalmente, simplificando temos

$$\langle \hat{H}_1 \rangle_0 = -\frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \text{Ryd}, \tag{25}$$

com $r_s \equiv r_0/a_0$ e r_0 definido em termos do volume por partícula $V \equiv \frac{4}{3}\pi r_0^3 N$.

- Considere um sistema de férmions ou bósons criados pelo campo $\psi^\dagger(\mathbf{r})$ interagindo através do potencial

$$V(r) = \begin{cases} U, & (r < R) \\ 0, & (r > R) \end{cases}$$

a) Escreva a interação usando o formalismo de segunda quantização em termos dos operadores de criação e destruição.

b) Escreva a expressão final do item a) na base dos momentos. Verifique que $[\phi_{\mathbf{k}}, \phi_{\mathbf{k}'}^\dagger]_\pm = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$.
Faça um gráfico da interação no espaço de momento.

Solução:

a) Sabemos que em segunda quantização, o Hamiltoniano de interação é escrito como

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma' \sigma'' \sigma''' \sigma''''} \int \int \int \int \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \psi_{\sigma''}^\dagger(\mathbf{r}'') \psi_{\sigma'''}(\mathbf{r}''') \psi_{\sigma''''}(\mathbf{r}''') \langle \mathbf{r}' \sigma', \mathbf{r}'' \sigma'' | V | \mathbf{r}''' \sigma''', \mathbf{r}'''' \sigma'''' \rangle d^3 r' d^3 r'' d^3 r''' d^3 r''''$$

neste caso particular, o elemento de matriz tem uma forma bem simples

$$\langle \mathbf{r}' \sigma', \mathbf{r}'' \sigma'' | V | \mathbf{r}''' \sigma''', \mathbf{r}'''' \sigma'''' \rangle = U \theta(R - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}''') \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''') \delta_{\sigma' \sigma'''} \delta_{\sigma'' \sigma''''},$$

o que nos dá

$$\mathcal{V} = \frac{U}{2} \sum_{\sigma' \sigma''} \int \int \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \psi_{\sigma''}^\dagger(\mathbf{r}'') \psi_{\sigma''}(\mathbf{r}'') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \theta(R - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) d^3 r' d^3 r'' \quad (26)$$

b) Agora, reescreveremos (26) na representação dos momentos. Inserimos as unidades

$$\int \int |\mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \rangle \langle \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j | d^3 k_i d^3 k_j = \mathbf{1} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \frac{1}{2} \int \int \int \int \psi^\dagger(\mathbf{r}') \psi^\dagger(\mathbf{r}'') \psi(\mathbf{r}''') \psi(\mathbf{r}''') \\ &\times \int \int \int \int \langle \mathbf{r}', \mathbf{r}'' | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle \langle \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 | V | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \mathbf{r}''', \mathbf{r}'''' \rangle d^3 r' d^3 r'' d^3 r''' d^3 r'''' d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 k_3 d^3 k_4 \end{aligned}$$

rearranjando termos

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \frac{1}{2} \int \int \int \int \int \int \int \int \langle \mathbf{r}' | \mathbf{k}_3 \rangle \psi^\dagger(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}'' | \mathbf{k}_4 \rangle \psi^\dagger(\mathbf{r}'') \langle \mathbf{k}_2 | \mathbf{r}''' \rangle \psi(\mathbf{r}''') \langle \mathbf{k}_1 | \mathbf{r}'''' \rangle \psi(\mathbf{r}''') \\ &\times \langle \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 | V | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle d^3 r' d^3 r'' d^3 r''' d^3 r'''' d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 k_3 d^3 k_4, \end{aligned}$$

notemos que os produtos do tipo $\langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \psi(\mathbf{r})$ integrados na variável de posição correspondem à mudança de base dos operadores de campo, da base de posição para a base de momento, ou seja,

$$\phi(\mathbf{k}) = \int \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \psi(\mathbf{r}) d^3 r,$$

e o operador de energia potencial na representação dos momentos fica

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \int \int \int \int \phi^\dagger(\mathbf{k}_3) \phi^\dagger(\mathbf{k}_4) \phi(\mathbf{k}_2) \phi(\mathbf{k}_1) \langle \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 | V | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 k_3 d^3 k_4, \quad (28)$$

Caculemos agora o elemento matricial $\langle \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 | V | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle$ para esta interação. Inserindo um conjunto completo de autokets de posição temos

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 | V | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle &= \int \int \langle \mathbf{k}_3 | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{k}_1 \rangle \langle \mathbf{k}_4 | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \mathbf{k}_2 \rangle V(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) d^3 x d^3 x' \\ &= \frac{U}{(2\pi)^6} \int \int e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{x}'} \theta(R - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) d^3 x d^3 x', \end{aligned}$$

onde foi usado

$$\langle \mathbf{k}_3 | \mathbf{x} \rangle = \frac{e^{-i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}}; \quad \langle \mathbf{x} | \mathbf{k}_1 \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}}; \quad \langle \mathbf{k}_4 | \mathbf{x}' \rangle = \frac{e^{-i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}}; \quad \langle \mathbf{x}' | \mathbf{k}_2 \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}}.$$

Definimos a nova variável $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}'$,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 | V | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle &= \frac{U}{(2\pi)^6} \int \int e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{x}'} e^{-i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \theta(R - r) d^3 x' d^3 r, \\ &= \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \frac{U}{(2\pi)^3} \int \theta(R - r) e^{-i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} d^3 r, \end{aligned}$$

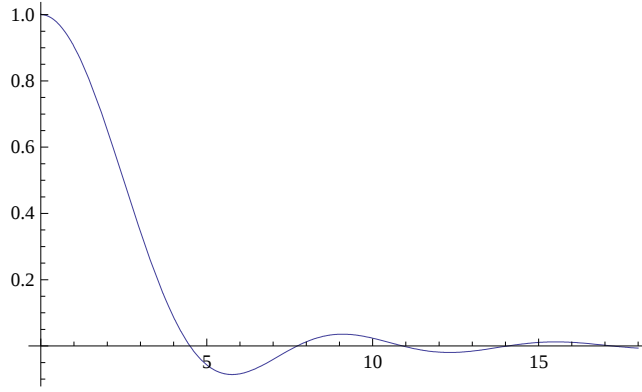


Figure 2: Função $F(x)$

a integral pode ser resolvida diretamente, com $\mathbf{q} = \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1$

$$\begin{aligned} \int \theta(R-r) e^{-i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} d^3 r &= 2\pi \int_0^\infty \theta(R-r) r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{-iqr \cos \theta} \\ &= 4\pi \int_0^R r^2 \frac{\sin(qr)}{qr} dr \\ &= \frac{4\pi R^3}{3} F(qR) \end{aligned}$$

e

$$F(x) = \frac{3}{x^2} \left(\frac{\sin x}{x} - \cos x \right).$$

A função $F(x)$ é mostrada na figura(2)

Finalmente o elemento de matriz na representação de momentos corresponde a

$$\langle \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 | V | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \rangle = \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \frac{U}{(2\pi)^3} \frac{4\pi R^3}{3} F(qR),$$

e o operador de energia potencial na representação de momento adquire a sua forma final

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \frac{1}{2} \int \int \int \int \phi^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}) \phi^\dagger(\mathbf{k}_4) \phi(\mathbf{k}_2) \phi(\mathbf{k}_1) \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} - \mathbf{k}_4) \frac{U}{(2\pi)^3} \frac{4\pi R^3}{3} F(qR) d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 q d^3 k_4 \\ &= \frac{UR^3}{3(2\pi)^2} \int \int \int \int \phi^\dagger(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}) \phi^\dagger(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) \phi(\mathbf{k}_2) \phi(\mathbf{k}_1) F(qR) d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 q \end{aligned}$$