1)

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k C^\dagger_{k,\sigma} C_{k,\sigma}$$

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 K_f}{2m} \qquad K_f = (K_x^2 + K_y^2)$$

a)

Para un "circulo" de fermi:

$$N = \frac{A}{2\pi} K_f^2 \quad \to \quad \frac{N}{A} = \frac{K_f^2}{2\pi} = n$$

b)

$$K_f = (2\pi n)^{1/2}$$

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}(2\pi n) = E_0$$

$$\frac{E^0}{N} = \frac{\hbar^2 \pi n}{N m} = \frac{\hbar^2 \pi}{m A} = \frac{\varepsilon_k}{N}$$

2) La densidad de electrones se puede calcular como

$$n = \frac{N}{V}$$

Para un metal como el cobalto, consideramos que cada átomo contribuye sus electrones de valencia al mar de electrones.

La configuración electrónica del cobalto sugiere tener:

- 7 electrones en la capa 3d
- 2 electrones en la capa 4s

} 9 electrones

El volumen por celda de banda es $V \approx a^3$

$a = 3.54 \text{Å} = 3.54 \cdot 10^{-10} m$ → para el cobre

$V \approx (3.54 \cdot 10^{-10})^3 = 4.44 \cdot 10^{-29}$

La celda unitaria de una estructura FCC contiene 4 átomos

$N = 4 \cdot 9 = 36$

$\rightarrow n = \frac{N}{V} = \frac{36}{4.44 \cdot 10^{-29}} = 8.12 \cdot 10^{29}$ electrones/m^3

Para número de onda de Fermi: $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$

$K_F = (3\pi^2 \cdot 8.12 \cdot 10^{29})^{1/3} \approx 1.24 \cdot 10^{10} m^{-1}$

Energía de Fermi: $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e}$

$$E_F = \frac{(1.054 \cdot 10^{-34} \cdot 1.24 \cdot 10^{10})^2}{2 \cdot 9.109 \cdot 10^{-31}}$$

$E_F = 1.12 \cdot 10^{-18} J \rightarrow E_F = 7.03 \text{ eV}$

cribe

Longitud de onda de Fermi: $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{1.24 \cdot 10^{10}}$$

$$\lambda_F = 5.07 \cdot 10^{-10}\ \text{m} = 0.507\ \text{nm}$$

velocidad de Fermi:

$$E = \frac{1}{2} m_e V_F^2$$

$$\frac{\hbar^2 k_F^2}{2 m_e} = \frac{1}{2} m_e V_F^2$$

$$\sqrt{\frac{\hbar^2 k_F^2}{m_e^2}} = V_F = \frac{\hbar k_F}{m_e}$$

$$V_F = \frac{1.054 \cdot 10^{-34} \cdot 1.24 \cdot 10^{10}}{9.109 \cdot 10^{-31}}$$

$$V_F = 1.43 \cdot 10^{6}\ \text{m/s}$$

3) $$V(r_1-r_2) = \frac{e_0^2}{|r_1-r_2|}$$

sea $r=|r_1-r_2|$

$$V(r) = \frac{e_0^2}{r}$$

$$\tilde{V}(q) = \int e^{iqr} \cdot V\, d^3r$$

$$\tilde{V}(q) = e_0^2 \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} e^{iqr\cos\theta} \cdot r\sin\theta\, d\phi\, d\theta\, dr$$

$$\tilde{V}(q) = 2\pi e_0^2 \int_0^{\infty}\int_0^{\pi} e^{iqr\cos\theta} \cdot r\sin\theta\, d\theta\, dr$$

$u=\cos\theta \rightarrow du = -\sin\theta\, d\theta$

$$\tilde{V}(q) = 2\pi e_0^2 \int_0^{\infty}\int_0^{\pi} e^{iqru} \cdot r\, du\, dr$$

$$\tilde{V}(q) = 2\pi e_0^2 \int_0^{\infty} \frac{e^{iqr}-e^{-iqr}}{iqr} r\, dr = \frac{2\pi e_0^2}{iq}\int_0^{\infty}(e^{iqr}-e^{-iqr})\, dr$$

$$\tilde{V}(q) = \frac{4\pi e_0^2}{q}\int_0^{\infty} \sin(qr)\, dr = \frac{4\pi e_0^2}{q}\cdot\frac{1}{q}$$

$$\tilde{V}(q) = \frac{4\pi e_0^2}{q^2} \rightarrow \frac{4\pi e_0^2}{|(q_1-q_2)^2|}$$

4. El operador de la interacción de Coulomb (segunda cuantización) en representación de posición está dado por:

$$V_{e-e} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma_1,\sigma_2}\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{e_0^2}{|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|}\Psi^\dagger_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1)\Psi^\dagger_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2)\Psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2)\Psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \tag{2}$$

Donde $\Psi^\dagger_\sigma(\mathbf{r})$ y $\Psi_\sigma(\mathbf{r})$ se conocen como operadores cuánticos de campo. Muestre que la representación en espacio de momento de la interacción de Coulomb está dada por:

$$V_{e-e} = \frac{1}{2\mathcal{V}}\sum_{\sigma_1,\sigma_2}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{q}} V(q) a^\dagger_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1} a^\dagger_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2} a_{\mathbf{k}_2,\sigma_2} a_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} \tag{3}$$

Donde $\mathcal{V}$ es el volumen del sistema. *Hint:* Recuerde que $\int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}} = \mathcal{V}\delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$, y $f(q) = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} f(r)$

Partimos de Ve-e en espacio de posición

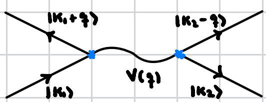
$$V_{e-e} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\int d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \frac{e_0^2}{|\bar{r}_2-\bar{r}_1|}\Psi^\dagger_{\sigma_1}(\bar{r}_1)\Psi^\dagger_{\sigma_2}(\bar{r}_2)\Psi_{\sigma_2}(\bar{r}_2)\Psi_{\sigma_1}(\bar{r}_1)$$

Ahora, si:

$$\Psi^\dagger_\sigma(\bar{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\sum_k e^{-i\bar{k}\cdot\bar{r}} a^\dagger_{k,\sigma}$$

$$\Psi_\sigma(\bar{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}}\sum_k e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} a_{k,\sigma}$$

Entonces:



$$\Psi^\dagger_{\sigma_1}(\bar{r}_1)\Psi_{\sigma_1}(\bar{r}_1) = \frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{k_1 q} e^{-i\underbrace{(\bar{k}_1+\bar{q})}_{\text{intercambio de momento}}\cdot\bar{r}_1} e^{i\bar{k}_1\cdot\bar{r}_1} a^\dagger_{k_1+q,\sigma_1} a_{k_1,\sigma_1}$$

De forma similar:

$$\Psi^\dagger_{\sigma_2}(\bar{r}_2)\Psi_{\sigma_2}(\bar{r}_2) = \frac{1}{\mathcal{V}}\sum_{k_2 q} e^{-i(\bar{k}_2-\bar{q})\cdot\bar{r}_2} e^{i\bar{k}_2\cdot\bar{r}_2} a^\dagger_{k_2-q,\sigma_2} a_{k_2,\sigma_2}$$

Entonces, si $\bar{r} = \bar{r}_2 - \bar{r}_1$ y $V(\bar{r}) = e_0^2/r$:

$$V_{e-e} = \frac{1}{2\mathcal{V}^2}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{k_1k_2q}\Big[\int d\bar{r}\, V(\bar{r})\, e^{-i(\bar{k}_2-\bar{q})\cdot\bar{r}_2} e^{i\bar{k}_2\cdot\bar{r}_2} e^{-i(\bar{k}_1+\bar{q})\cdot\bar{r}_1} e^{i\bar{k}_1\cdot\bar{r}_1} a^\dagger_{k_1+q,\sigma_1} a^\dagger_{k_2-q,\sigma_2} a_{k_2,\sigma_2} a_{k_1,\sigma_1}\Big]$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{2\mathcal{V}}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{k_1k_2q}\Big[\int d\bar{r}\, V(\bar{r})\, e^{i\bar{q}\cdot\bar{r}_2} e^{-i\bar{q}\cdot\bar{r}_1} a^\dagger_{k_1+q,\sigma_1} a^\dagger_{k_2-q,\sigma_2} a_{k_2,\sigma_2} a_{k_1,\sigma_1}\Big]$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{2\mathcal{V}}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{k_1k_2q}\int d\bar{r}\, V(\bar{r})\, e^{i\bar{q}\cdot\bar{r}} a^\dagger_{k_1+q\,\sigma_1} a^\dagger_{k_2-q\,\sigma_2} a_{k_2\sigma_2} a_{k_1\sigma_1}$$

Finalmente :

$$\boxed{V_{e-e} = \frac{1}{2\mathcal{V}}\sum_{\sigma_1\sigma_2}\sum_{k_1k_2q} V(q)\, a^\dagger_{k_1+q\,\sigma_1} a^\dagger_{k_2-q\,\sigma_2} a_{k_2\sigma_2} a_{k_1\sigma_1}}$$

5. Considere un gas de electrones en 3 dimensiones con interacción de Coulomb cuyo Hamiltoniano está dado por $H = H_0 + V_{e-e}$. La corrección a primer orden perturbativo a la energía del gas de electrones al incluir la interacción electrón-electrón está dada por $E^{(1)} = \langle FS|V_{e-e}|FS\rangle$, donde $|FS\rangle$ es el vector de estado correspondiente a la esfera de Fermi. La ecuación 3 tiene 2 operadores que aniquilan electrones en los estados $|\mathbf{k}_1, \sigma_1\rangle$ y $|\mathbf{k}_2, \sigma_2\rangle$ para luego crear electrones en los estados $|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1\rangle$ y $|\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, \sigma_2\rangle$ con una amplitud $V(q)$.

(a) Mencione cuáles son las dos posibles formas en las que esta interacción puede ocurrir. ¿Cuál es la transferencia de momentum q en cada caso? ¿Ambos tipos de interacción contribuyen a $E^{(1)}$?

(b) Calcule la contribución de la interacción de intercambio a $E^{(1)}$.

(c) ¿Por qué $E^{(1)}$ es negativo y qué implicaciones tiene esto para el comportamiento del gas de electrones?

(d) Realice nuevamente el cálculo para un gas de electrones en 2 dimensiones y comente sobre sus resultados.

a) Ahora la superficie de Fermi (SF) se define como:

$$|SF\rangle \equiv a^\dagger_{k_{\frac{N}{2}},\uparrow} a^\dagger_{k_{\frac{N}{2}},\downarrow} \cdots a^\dagger_{k_1,\uparrow} a^\dagger_{k_1,\downarrow} |0\rangle$$

Con esto podemos hallar la primera corrección a la E^0. Para ello:

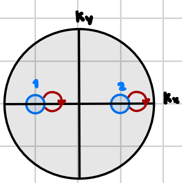
$$E^{(1)} = \langle SF | V_{e-e} | SF \rangle$$

$$E^{(1)} = \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{k_1 k_2 q} \frac{4\pi e_0^2}{q^2} \langle SF | a^\dagger_{k_1+q\,\sigma_1} a^\dagger_{k_2-q\,\sigma_2} a_{k_2\sigma_2} a_{k_1\sigma_1} | SF \rangle$$

Note que para que esta corrección sea no nula, se deben crear dos huecos en la SF (tal que $|\bar{k}_1|, |\bar{k}_2| < k_F$) y volverlos a llenar (tal que $|\bar{k}_1 + \bar{q}|, |\bar{k}_2 - \bar{q}| < k_F$). Note que si no se llenan los huecos $\langle SF | SF' \rangle = 0$.

Hay dos formas de llenar los huecos:

Direct interaction

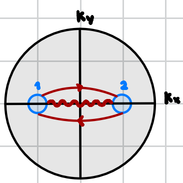


$|k_1, \sigma_1\rangle \to |k_1, \sigma_1\rangle$

$|k_2, \sigma_2\rangle \to |k_2, \sigma_2\rangle$

$q = 0$

Exchange interaction



$|k_1, \sigma_1\rangle \to |k_1 + q, \sigma_1\rangle$

$|k_2, \sigma_2\rangle \to |k_2 - q, \sigma_2\rangle$

$q = k_2 - k_1$

y cualquiera de estas dos interacciones hace que $\langle SF | SF \rangle \neq 0$. Por tanto $E^{(1)} \neq 0$ para cualquiera de los dos casos.

b)

$$E^{(1)} = \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{k_1 k_2 q} \frac{4\pi e_0^2}{q^2} \langle SF | a^\dagger_{k_1+q\,\sigma_1} a^\dagger_{k_2-q\,\sigma_2} a_{k_2\sigma_2} a_{k_1\sigma_1} | SF \rangle$$

Usando que

$$\langle SF | a^\dagger_{k_1+q\,\sigma_1} a^\dagger_{k_2-q\,\sigma_2} a_{k_2\sigma_2} a_{k_1\sigma_1} | SF \rangle$$

$$\parallel$$

$$\delta_{k_2, k_1+q}\, \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \langle SF | a^\dagger_{k_1+q,\sigma_1} a^\dagger_{k_1,\sigma_1} a_{k_1+q,\sigma_1} a_{k_1,\sigma_1} | SF \rangle$$

$$\parallel$$

$$-\delta_{k_2, k_1+q}\, \delta_{\sigma_1 \sigma_2}\, \Theta(k_F - |\bar{k}_1 + \bar{q}|)\, \Theta(k_F - |\bar{k}_1|)$$

Siendo Θ la función Heavyside. Estos aparecen debido a que por encima de k_F no hay e^- exitados. Con esto, hacemos Fourier para $\Sigma \to \int$:

$$E^{(1)} = -\frac{1}{2\mathcal{V}} 2(4\pi e_0^2) \left(\frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \right)^2 \int_{\mathbb{R}^3} d\bar{q} \int_{\mathbb{R}^3} d\bar{k}\, \frac{1}{q^2} \Theta(k_F - |\bar{k}_1 + \bar{q}|)\, \Theta(k_F - |\bar{k}_1|)$$

Note que los delta colapsan las suma sobre k_2 y $\sum_\sigma \to 2$. Ahora:

$$E^{(1)} = -\mathcal{V} (4\pi e_0^2) \frac{1}{(2\pi)^6} \int_{\mathbb{R}^3} d\bar{q} \int_{\mathbb{R}^3} d\bar{k}\, \frac{1}{q^2} \Theta(k_F - |\bar{k}_1 + \bar{q}|)\, \Theta(k_F - |\bar{k}_1|)$$

$$E^{(1)} = -\frac{e_0^2}{2} \mathcal{V} \frac{1}{2^3 \pi^5} \int_{\mathbb{R}^3} d\bar{q} \int_{\mathbb{R}^3} d\bar{k}\, \frac{1}{q^2} \Theta(k_F - |\bar{k}_1 + \bar{q}|)\, \Theta(k_F - |\bar{k}_1|)$$

$$E^{(1)} = -\frac{e_0^2}{2} \mathcal{V} \frac{1}{2^3 \pi^5} (4\pi^2 k_F^4)$$

$$\boxed{E^{(1)} = -\frac{e_0^2}{2} \mathcal{V} \frac{k_F^4}{2\pi^3}}$$

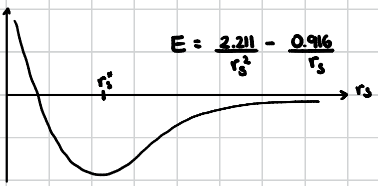
Esta corrección por partícula es:

$$\frac{E^{(1)}}{N} = -\frac{e_0^2}{2}\frac{\nu}{N}\frac{k_F^4}{2\pi^3}$$

$$\boxed{\frac{E^{(1)}}{N} = -\frac{0.916}{r_s}\,R_y}$$

Siendo $r_s = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{1}{a_0 k_F}$ y $a_0 = \frac{\hbar^2}{m e_0^2}$

c) Que esta energía sea negativa, se debe a que es una energía de ligadura. Lo que forma un potencial efectivo:



Esto es anti-intuitivo para un gas de electrones, pues entre electrones hay una fuerza repulsiva. Esto quiere decir que el gas no requiere un potencial externo para tener una energía estable ($E(r_s^*)$).

d) Para el caso 2D debemos volver a hacer la integral:

$$E^{(1)} = -\frac{e_0^2}{2}\nu\frac{1}{2^3\pi^5}\int_{\mathbb{R}^2} d\bar{q}\int_{\mathbb{R}^2} d\bar{k}\,\frac{1}{q^2}\,\Theta(k_F - |\bar{k}_1 + \bar{q}|)\,\Theta(k_F - |\bar{k}_1|)$$

$$E^{(1)} = -\frac{e_0^2}{2}\nu\frac{1}{2^3\pi^5}(2\pi k_F^4)$$

$$\boxed{E^{(1)} = -\frac{e_0^2}{2}\nu\frac{k_F^4}{4\pi^4}}$$