FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS UNIVERSIDAD DE CHILE

# Introducción a la Física del Sólido
# Física de los Materiales

Tarea Nº 4
Publicada el 25 de septiembre de 2008

Profesor: Alvaro Nuñez
Auxiliar: Daniel Asenjo

1. (Ashcroft & Mermin 17.1) Como obtener las ecuaciones de Hartree a partir del principio variacional.

   *a*) Muestre que el valor promedio (o de expectación) del Hamiltoniano

   $$H\psi = \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\psi - Ze^2\sum_{\vec{R}}\frac{1}{|\vec{r}_i-\vec{R}|}\psi\right) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i-\vec{r}_j|}\psi = E\psi \qquad (17.2)$$

   es

   $$\langle H\rangle = \sum_i \int d\vec{r}\,d\vec{r}'\,\frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|}|\psi_i(\vec{r})|^2|\psi_j(\vec{r}')|^2$$

   dado que todos los $\psi_i$ están normalizados $\int d\vec{r}\,|\psi_i|^2 = 1$.

   *b*) Expresando cada restricción sobre los $\psi_i$, $\int d\vec{r}\,|\psi_i|^2 = 1$, con multiplicadores de Lagrange, $\varepsilon_i$ y tomando $\delta\psi_i$ y $\delta\psi_i^*$ como variaciones independientes, muestre que la condición estacionaria

   $$\delta_i\langle H\rangle = 0$$

   conduce directamente a las ecuaciones de Hartree (17.7).

2. (Ashcroft & Mermin 17.2) Como obtener las ecuaciones de Hartree-Fock a partir del principio variacional.

   *a*) Muestre que el valor promedio del Hamiltoniano (17.2), en un estado de la forma (17.13) está dado por (17.14).

   *b*) Muestre que al aplicar el procedimiento del problema 1.*b*) a la ecuación (17.14) llegamos a las ecuaciones de Hartree-Fock (17.15).

3. (Ashcroft & Mermin 17.3) Propiedades del potencial de Coulomb y el potencial apantallado de Coulomb.

   *a*) A partir de la representación integral de la función delta

   $$\delta(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

y el hecho que el potencial de Coulomb $\phi(\vec{r}) = -e/\vec{r}$ satisface la ecuación de Poisson

$$-\nabla^2\phi(\vec{r}) = -4\pi e\delta(\vec{r})$$

argumente que el potencial de a pares electrón-electrón, $V(\vec{r}) = -e\phi(\vec{r}) = e^2/r$ se puede escribir de la forma

$$V(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} V(\vec{k})$$

donde la transformada de Fourier está dada por

$$V(\vec{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2}$$

*b*) Muestre que la transformada de Fourier del potencial apantallado de Coulomb $V_s = (e^2/r)e^{-k_0 r}$ es

$$V_s = \frac{4\pi e^2}{k^2 + k_0^2}$$

sustituyendo (17.74) en la integral de Fourier

$$V_s(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} V_s(\vec{k})$$

y evaluando en coordenadas esféricas.

*c*) Deduzca de (17.74) que $V_s(\vec{r})$ satisface

$$(-\nabla^2 + k_0^2)V_s(\vec{r}) = 4\pi e^2\delta(\vec{r})$$

4. (Ashcroft & Mermin 17.4) Masa efectiva de Hartree-Fock cerca de $k = 0$.

   Muestre que cerca del mínimo de la banda (k=0) la energía Hartree-Fock de un electrón (17.19) es

$$\varepsilon(\vec{k}) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

donde

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{1 + 0{,}22(r_s/a_0)}$$

**Nota: Existe un respaldo del Ashcroft & Mermin en ucursos.**
Entrega el 9 de octubre del 2008, antes de las 10:15 a.m.