

Libros de Cátedra

MATERIA CUÁNTICA

Una introducción a la teoría del sólido

Carlos A. Lamas y Aníbal Iucci

FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS

e
exactas


edulp
EDITORIAL DE LA UNLP



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

MATERIA CUÁNTICA

UNA INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DEL SÓLIDO

Carlos A. Lamas

Aníbal Iucci

Facultad de Ciencias Exactas



Índice

Prólogo	5
Capítulo 1	
Modelos en sólido	7
1.1. ¿Por qué estudiamos el estado sólido de la materia?	7
1.2. Aproximación de Born-Oppenheimer, o cómo encarar un problema tan complicado	10
1.3. Modelo de Einstein	13
1.4. Teoría del sólido de Debye	17
1.5. Modos normales para una red unidimensional monoatómica	22
1.6. Modos normales de la cadena diatómica. Ramas acústica y óptica	29
1.7. Teoría de Drude de los metales	33
1.8. Teoría de Sommerfeld de los metales	29
1.9. Partícula en una caja	42
1.10. Orbitales moleculares (Tight binding)	43
1.11. modelo de <i>Tight-binding</i> en una red periódica	46
Capítulo 2	
Estructura cristalina de los sólidos	51
2.1. Celda unidad y redes de Bravais	51
2.2. Redes en tres dimensiones	55
2.3. Electrones en potenciales periódicos	64
Capítulo 3	
Segunda cuantificación	71
3.1. Espacio de Fock	73
3.2. Operadores de creación y destrucción	75
3.3. Resolviendo con segunda cuantificación	94
3.4. Gas de Fermi	107
Capítulo 4	
Propiedades magnéticas de los sólidos	115
4.1. Magnetismo e interacción de intercambio	115
4.2. Propiedades magnéticas de los sólidos	122
4.3. Ruptura de simetría	129
4.4. teoría de Landau para el ferromagnetismo	130

4.5. Excitaciones en el ferromagneto: Ondas de espín	131
4.6. Ondas de espín y operadores de Holstein-Primakoff	133
Capítulo 5	
Superconductividad	143
5.1. Fenomenología	143
5.2. Un par de Cooper	148
5.3. Muchos pares de Cooper: estado BCS	151
5.4. La ecuación del gap	158
5.5. Ecuación de London y efecto Meissner	164
5.6. Modelo de Ginzburg-Landau	166
Capítulo 6	
Bosonización	173
6.1. Equivalencia entre operadores fermiónicos y bosónicos	173
6.2. Aplicaciones	184
Bibliografía	191
Autores	193

Prólogo

La física del estado sólido es un campo fascinante que profundiza en las propiedades, estructura y comportamiento de los sólidos. El mundo que nos rodea está hecho de materia, y el estudio de sus propiedades a nivel atómico y molecular nos ha permitido avanzar en la comprensión del universo.

La física del estado sólido se enfoca en las propiedades físicas de los sólidos, incluyendo sus propiedades eléctricas, magnéticas, ópticas y mecánicas, y trata de los principios fundamentales que rigen su comportamiento. Este campo utiliza disciplinas como la mecánica cuántica, la cristalograffía y el electromagnetismo.

Este libro proporciona una introducción a los conceptos y modelos que subyacen a la física del estado sólido, explorando el mundo de los cristales, aisladores y metales, discutiendo la física de los superconductores y estudiando las propiedades magnéticas de los sólidos.

En los primeros capítulos exploraremos algunos de los modelos tradicionales que se han utilizado para describir propiedades de los sólidos. La importancia de estos modelos subyace, no solo en la comprensión que ofrecen sobre las características de los materiales, sino también sobre la importancia de construir modelos efectivos en física que describan y permitan identificar los grados de libertad relevantes de un sistema.

Luego presentaremos algunas de las herramientas utilizadas para describir la estructura cristalina de los sólidos y una introducción a segunda cuantificación que luego utilizaremos para describir excitaciones magnéticas.

Haremos una recorrido por el estudio de las propiedades magnéticas de los sólidos dedicándole un lugar especial al fenómeno de superconductividad. Finalmente presentaremos una introducción a la técnica de bosonización.

Con este libro esperamos inspirar y motivar a los estudiantes de la licenciatura en física y carreras afines para que exploren más a fondo el mundo de la física del estado sólido. Sin embargo, esperamos que sea de utilidad tanto para estudiantes, investigadores o simplemente personas apasionadas por la física. Este libro pretende proporcionar herramientas y los conocimientos básicos para comprender y apreciar las complejidades del mundo

que nos rodea. Sin embargo, cada uno de los temas introducidos en este libro puede ser extendido y estudiado en mayor profundidad. Invitamos al lector a consultar la bibliografía específica de cada tema. Existen actualmente una gran variedad de libros que tratan algunos de los temas discutidos aquí [3, 4, 2, 7, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19].

Embarquémonos en este viaje de descubrimiento y exploración y adentrémonos en el mundo de la física del estado sólido.

Capítulo 1

Modelos en sólidos

Una de las herramientas más importantes de la física de la materia condensada es el uso de modelos para describir el comportamiento de los materiales. Estos modelos pueden ser desde simples e intuitivos hasta increíblemente complejos y abstractos, pero la simpleza en los modelos ha permitido comprender en muchos casos cuales son los grados de libertad relevantes a la hora de caracterizar el comportamiento de un sistema.

En este capítulo, exploraremos algunos de los modelos más tradicionales en la física de la materia condensada, como el modelo de Einstein, el modelo de Debye, el modelo de Drude y el modelo de Sommerfeld. También discutiremos sus puntos fuertes y sus limitaciones.

Esperamos que este capítulo le ayude a comprender mejor la belleza y complejidad de la física de la materia condensada y le inspire a explorar más a fondo este fascinante campo.

1.1. ¿Por qué estudiamos el estado sólido de la materia?

La física del estado sólido se enfoca en estudiar las fases sólidas de la materia mediante un enfoque microscópico y para ello se sirve de de herramientas provenientes de la mecánica cuántica, la física estadística y la termodinámica. Debido tanto a la diversidad de sistemas que estudia como a la relevancia de sus conceptos fundamentales, la física del estado sólido se ha convertido en una de las áreas más amplias de la física, con numerosas aplicaciones prácticas y tecnológicas. En la actualidad, nuestra capacidad para comprender la materia ha alcanzado niveles sin precedentes, permitiéndonos diseñar materiales de funcionalidades específica e incluso llevar a cabo simulaciones numéricas por computadora antes de proceder a su fabricación. Un ejemplo

1.1 ¿Por qué estudiamos el estado sólido de la materia?

de esta capacidad descriptiva son los materiales semiconductores, que son la base de la industria de la microelectrónica y de muchos dispositivos que nos rodean a diario (smartphones, laptops, memorias, etc.).

Una característica distintiva de los sistemas estudiados en la física del sólido y, en general, en la materia condensada, es la gran cantidad de partículas que intervienen. En un sólido, suele haber del orden de 10^{23} partículas (electrones e iones) que están en permanente interacción y movimiento, lo que resulta en una dinámica extremadamente compleja de describir. A menudo, incluso teniendo una compresión profunda de los mecanismos microscópicos de interacción (como la repulsión Coulombiana entre dos electrones), los fenómenos colectivos que emergen de la interacción de un número tan elevado de partículas son totalmente inesperados. Un ejemplo de esto son las transiciones de fase, donde un sistema puede volverse ferromagnético por debajo de cierta temperatura. Estos fascinantes fenómenos en los sistemas de materia condensada se conocen como *fenómenos emergentes*. Es justamente la gran cantidad de átomos involucrados lo que hace posible realizar una descripción cuantitativa de estos sistemas..

La física del estado sólido resulta una disciplina conceptualmente fundamental, ya que se sitúa en la intersección de diversas ramas de la física, desde áreas muy abstractas como la teoría cuántica de campos, hasta otras más aplicadas como la física de materiales y la electrónica. La universalidad de sus conceptos nos permite comprender y establecer conexiones que inicialmente pueden no ser evidentes. Por este motivo, los sólidos actúan como «laboratorios» donde se pueden validar teorías e ideas de diferentes ámbitos de la física. Por ejemplo, todos estamos familiarizados con el magnetismo (muchos de nosotros hemos manipulado imanes o tenemos alguno en nuestras heladeras). Sin embargo, algo menos evidente sobre esos simples imanes es que la teoría del magnetismo en sólidos (particularmente, la *teoría de campo medio* y el fenómeno de *ruptura espontánea de la simetría*, también ofrecen explicaciones para materiales más complejos y menos frecuentes, como los *superconductores*¹, que estudiaremos en el capítulo 5.

Consideremos, por ejemplo, los portadores de carga en un metal responsables del transporte eléctrico: los electrones y los *huecos*². En su teoría cuántica relativista para describir partículas de *spin 1/2* (como el electrón), el notable físico Paul Dirac propuso el concepto de *antimateria*, actualmente un elemento esencial en el Modelo Estándar. En la física del estado sólido, entendemos

¹Un superconductor es un material que, por debajo de cierta temperatura, pierde toda resistencia eléctrica, permitiendo el flujo de electricidad sin pérdida de energía.

²Un hueco se puede imaginar como una «burbuja» en un «océano de electrones», efectivamente comportándose como una partícula con carga positiva $+e$

Modelos en sólidos

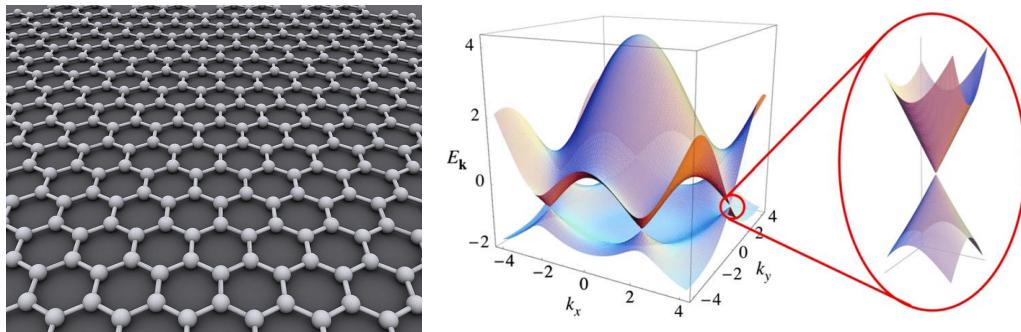


Figura 1.1: Izquierda: Imagen generada por computadora de una monocapa de grafeno, donde los átomos de carbono se disponen en una red de tipo «panal de abeja». Derecha: Estructura electrónica del grafeno, donde pueden verse los llamados conos de Dirac, cerca de los cuales los electrones se comportan de manera efectiva como si se movieran a velocidades relativistas.

a un hueco como la «antipartícula» del electrón dentro de un sólido.³

La física del estado sólido también nos ayuda a entender las propiedades de nuevos materiales con características innovadoras. Por ejemplo, se ha logrado avances significativos recientemente en la creación de materiales que prometen transformar la industria electrónica y la ciencia de materiales. Probablemente, el más relevante en las últimas décadas es el material denominado *grafeno*, que está formado por una única capa de átomos de carbono dispuesta en una estructura similar a un «panal de abejas» (ver Figura 1.1). Curiosamente, todos hemos estado en contacto con este material sin saberlo, ya que compone el grafito, que a su vez se encuentra en la punta de cualquier lápiz. Se puede imaginar el grafito como un conjunto de millones de capas de grafeno apiladas. Aunque el grafito es un material bastante común y no muy llamativo, el grafeno *sí* presenta propiedades excepcionales: es más fuerte que el acero (comparando una capa de igual espesor), y es uno de los mejores conductores de la electricidad y el calor hallados hasta el momento. Si bien su estructura y ciertas propiedades son conocidas desde hace tiempo, no fue sino recientemente que se lo logró aislar y caracterizar⁴. Además de sus significativas aplicaciones tecnológicas, a bajas temperaturas el comportamiento

³No obstante, de manera más precisa, se reconoce hoy en día que la «verdadera» antipartícula del electrón es el *positrón*, identificado en 1932.

⁴En 2004, André Geim y Konstantin Novoselov, lograron separar una monocapa de grafeno utilizando el método de *exfoliación* que consiste en aplicar repetidamente cinta adhesiva hasta conseguir una monocapa. Geim y Novoselov ganaron premio Nobel de física en 2010 por este descubrimiento.

1.2 Aproximación de Born-Oppenheimer, o cómo encarar un problema tan complicado

de los electrones en el grafeno simula el de electrones «sin masa» o electrones relativistas de Dirac, estableciendo conexiones con la física de altas energías.

1.2. Aproximación de Born-Oppenheimer, o cómo encarar un problema tan complicado

Supongamos que tuviéramos una capacidad de cálculo sin límite y quiéramos describir el comportamiento de una sustancia formada por átomos que interactúan entre sí. Esta cuestión es pertinente no sólo para el estado sólido, sino para la materia en cualquiera de sus estados. El puntapié inicial en el que un físico pensaría (tal vez uno no demasiado experimentado) sería resolver la ecuación de Schrödinger para todo el sistema, compuesto de electrones y núcleos (a quienes trataríamos como una única partícula) y sujetos a las interacciones Coulombianas entre ellos,

$$H\Psi = E\Psi, \quad (1.1)$$

cuyo Hamiltoniano se escribe como una suma de términos

$$H = T_e + T_n + V_{ee} + V_{nn} + V_{en}, \quad (1.2)$$

y donde los términos de energías cinética y potencial son

$$T_e = \sum_{j=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m_e}, \quad T_n = \sum_{l=1}^{N_n} \frac{\mathbf{P}_l^2}{2m_n}, \quad (1.3)$$

$$V_{ee} = \sum_{j \neq j'=1}^{N_e} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'}|}, \quad V_{nn} = \sum_{l \neq l'=1}^{N_n} \frac{Z_l Z_{l'} e^2}{|\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}|}, \quad (1.4)$$

$$V_{en} = \sum_{j,l=1}^{N_e, N_n} \frac{e^2 Z_l}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_l|}. \quad (1.5)$$

Aquí \mathbf{r}_j se refiere a las coordenadas de los N_e electrones de masa m_e y \mathbf{R}_l a las N_n coordenadas de los núcleos, de masa m_n . Z_l son los correspondientes números atómicos. La función de onda depende de todas las coordenadas, lo cual anotamos en forma compacta en la forma

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_e}, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_n}) = \Psi(\{\mathbf{r}_j\}, \{\mathbf{R}_l\}). \quad (1.6)$$

Con la excepción de efectos de radiación e interacciones spin-órbita (ambos podrían incorporarse con facilidad en el Hamiltoniano), todos los fenómenos

Modelos en sólidos

de la materia condensada, y todos los fenómenos que ocurren en nuestra vida cotidiana, están contenidos en este Hamiltoniano y las correspondientes ecuaciones de movimiento. La “teoría del todo” en materia condensada está entonces bien establecida, y sólo nos queda resolverla (!). Sin embargo aquí es donde los problemas aparecen, el primero de ellos, y no menor, es que resolver estas ecuaciones es imposible tanto analíticamente como numéricamente para sistemas donde el número de constituyentes es mayor a una veintena de partículas, incluso en su versión clásica. La complejidad de estos sistemas crece exponencialmente con el número de partículas y rápidamente se alcanza el límite que es posible tratar computacionalmente⁵. Analíticamente sólo el problema de dos cuerpos posee solución exacta. Por otro lado, las aproximaciones usuales que podrían emplearse para tratar estas ecuaciones, tales como la teoría de perturbaciones, si bien permiten capturar ciertos fenómenos, como el comportamiento de los gases, no logran describir la mayor parte de los fenómenos conocidos de la materia condensada, tales como la superconductividad, superfluidez, efecto Hall cuántico fraccionario, etc, incluyendo la existencia misma de los sólidos. Para esto se debe cambiar el enfoque y utilizar razonamientos basados en la simetría y en el análisis inteligente de las escalas relevantes de tiempo y longitud. Esta forma de encarar el problema, es la que en última instancia permite comprenderlo. La “teoría del todo” es de poca utilidad para entender estos fenómenos complejos.

Volviendo al problema del sólido, para atacar el conjunto de ecuaciones (1.1)-(1.5) lo que haremos es analizar las escalas de energía del problema. Los núcleos son varios miles de veces más pesados que los electrones. El protón, en sí mismo, es aproximadamente 2000 veces más masivo que un electrón. En un sentido dinámico, los electrones pueden considerarse como partículas que siguen el movimiento nuclear adiabáticamente, lo que significa que son “arrastrados” junto con los núcleos sin requerir un tiempo de relajación finito. Esto, por supuesto, es una aproximación, ya que podría haber efectos no adiabáticos que no permitan que los electrones se muevan de esta manera “instantánea”, sin embargo, en muchos sistemas la separación adiabática entre electrones y núcleos es una excelente aproximación. Otra consecuencia de la diferencia de masa entre electrones y núcleos es que los componentes nucleares de la función de onda están espacialmente más localizados que el componente electrónico. En el límite clásico, los núcleos están completamente localizados y representan partículas puntuales clásicas. Vamos a explotar esta separación de escalas mediante un ansatz cuasi separable de la forma,

$$\Psi(\{\mathbf{r}_j\}, \{\mathbf{R}_l\}) = \phi_e(\{\mathbf{r}_j\}, \{\mathbf{R}_l\}) \phi_n(\{\mathbf{R}_l\}) \quad (1.7)$$

⁵Y que será posible tratar por cualquier computadora en un futuro.

1.2 Aproximación de Born-Oppenheimer, o cómo encarar un problema tan complicado

Al insertar este *ansatz* en la ecuación de Schrödinger, vemos que una posibilidad, consistente con la filosofía de la aproximación que buscamos implementar, es que el factor electrónico satisfaga una ecuación de Schrödinger más simple, para una configuración fija de los núcleos:

$$H_e \phi_e = E_e \phi_e \quad (1.8)$$

donde ahora

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{en}. \quad (1.9)$$

Esta ecuación adquiere sentido si pensamos que durante los intervalos de tiempo característicos en los que transcurre el movimiento electrónico, los núcleos se quedan fijos y por lo tanto se desprecia su energía cinética. Tampoco incluimos V_{nn} porque es una constante para la ecuación electrónica. Desde el punto de vista de los electrones, el potencial electrón-núcleo ahora juega el papel de un potencial externo,

$$V_{en} = \sum_{j=1}^{N_e} U(\mathbf{r}_j) \quad (1.10)$$

donde

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{N_n} \frac{e^2 Z_l}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_l|} \quad (1.11)$$

es un potencial de partícula simple, que depende de una serie de parámetros que son las posiciones de los núcleos \mathbf{R}_l . La ecuación (1.8) determina las energías propias del sistema electrónico, que dependen paramétricamente de las posiciones de los iones:

$$E_e = E_e(\{\mathbf{R}_l\}). \quad (1.12)$$

En una segunda etapa, volvemos al Hamiltoniano original (1.2) e insertamos la forma separada (1.7), y utilizando (1.8) llegamos a

$$(T_n + V_{nn} + E_e) \phi_e(\{\mathbf{r}_j\}, \{\mathbf{R}_l\}) \phi_n(\{\mathbf{R}_l\}) = E \phi_e(\{\mathbf{r}_j\}, \{\mathbf{R}_l\}) \phi_n(\{\mathbf{R}_l\}) \quad (1.13)$$

. Obsérvese que no hemos realizado hasta aquí ninguna aproximación, sólo hemos propuesto el ansatz (1.7) con ϕ_e satisfaciendo (1.8). Claro, el par de ecuaciones (1.8) y (1.13) resultan tan complicadas de resolver como el problema original. En especial la segunda: el operador que corresponde a la energía cinética actúa sobre los dos factores, ϕ_e y ϕ_n ya que ambos dependen de las coordenadas de los núcleos. Sin embargo, la dinámica rápida de los electrones comparada con la de los núcleos implica que el operador energía

Modelos en sólidos

cinética de los núcleos actuando sobre ϕ_e debe ser muy pequeño, y entonces suponemos que T_n únicamente actúa sobre ϕ_n . Luego, obtenemos la ecuación

$$(T_n + W(\{\mathbf{R}_l\})) \phi_n(\{\mathbf{R}_l\}) = E \phi_n(\{\mathbf{R}_l\}) \quad (1.14)$$

donde $W = V_{nn} + E_e$ es un potencial efectivo de interacción entre los núcleos, que tiene en cuenta la presencia de los electrones. Obtuvimos entonces dos ecuaciones: la ecuación (1.8) que representa una ecuación para los electrones en presencia de un potencial externo generado por los núcleos en posiciones fijas, y la ecuación (1.14) que describe el movimiento de los núcleos, que interactúan mediante un potencial efectivo influido por el movimiento electrónico a través de $E_e(\{\mathbf{R}_l\})$. Por supuesto, estas ecuaciones siguen acopladas y si bien son más simples que la ecuación original continúan siendo muy difíciles de resolver para 10^{23} variables. Sin embargo, hay una simplificación adicional importante, que da lugar a una teoría del estado sólido: los sólidos son estructuras periódicas formadas por una celda unidad que se repite muchas veces. Esta celda contiene solo unos pocos átomos y entonces el problema final es apenas más complicado que el de un molécula pequeña, con el tamaño de una sola celda.

Para explicar esta estructura periódica, supongamos que los núcleos son tan pesados que podemos despreciar su energía cinética. Entonces, la configuración de equilibrio de los núcleos será aquella que minimice el potencial efectivo W . Este típicamente exhibe una fuerte repulsión de corto alcance cuyo origen se encuentra en la repulsión Coulombiana entre núcleos, y una atracción de largo alcance, y un mínimo a una cierta distancia. Se puede mostrar, aun que aquí lo supondremos, que bajo condiciones muy generales, el mínimo del potencial efectivo ocurre cuando los núcleos se disponen en un arreglo regular sobre una red periódica, cuyas características geométricas dependen del detalle de las fuerzas efectivas entre los núcleos, lo cual, en última instancia está determinado por la naturaleza del material.

1.3. Modelo de Einstein

El calor específico de un sólido se define como la cantidad de calor que hay que suministrar por unidad de masa para elevar su temperatura en una unidad. El valor del calor específico depende del valor de la temperatura inicial, en general aumenta cuando aumentamos la temperatura y tiende a cero cuando la temperatura tiende a 0 K. A medida que la temperatura se hace más grande, el crecimiento del calor específico se hace cada vez más lento hasta que a grandes temperaturas satura a un valor fijo.

1.3 Modelo de Einstein

Material	C/k_B
cobre	2,94
oro	3,05
plata	2,99
aluminio	2,91
diamante	0,74

Cuadro 1.1: Calor específico por átomo para algunos materiales

Lo que es llamativo, es que el valor al que tiende el calor específico a temperaturas altas es aproximadamente el mismo para la mayoría de los sólidos. En base a esto, en 1819 los físicos franceses Pierre Louis Dulong y Alexis Thérèse Petit propusieron lo que hoy se conoce como “ley de Dulong-Petit”[8], la propuesta estaba basada en la observación experimental de que para muchos sólidos el calor específico por mol está dado por

$$C = 3k_B. \quad (1.15)$$

La “ley de Dulong-Petit” puede deducirse a partir de la estadística de Boltzman⁶. Aunque esta ley no siempre es del todo correcta, se tiene que $C/k_B \simeq 3$ se cumple aproximadamente bien a temperatura ambiente para muchos sólidos. A temperaturas más bajas, los materiales comienzan a desviarse de esta ley y C cae rápidamente por debajo de cierta temperatura.

Boltzmann construyó un modelo que explicaba bastante bien esta ley en el que cada átomo del sólido se encuentra unido a los átomos vecinos y posee grados de libertad de vibración[6]. Podemos suponer que cada átomo está en un pozo de potencial, que supondremos armónico formado por la interacción con sus vecinos. En un modelo mecánico estadístico clásico como el de Boltzmann, el calor específico del átomo es $3k_B$, de acuerdo con la ley de Dulong-Petit. El problema que surge del modelo de Boltzmann es que no logra describir el comportamiento del calor específico a bajas temperaturas. Para resolver esto, en 1907 Albert Einstein[9] propuso que, para describir los grados de libertad de vibración a bajas temperaturas era imprescindible un tratamiento cuántico. Einstein propuso un modelo simple análogo al de Boltzmann, suponiendo que cada átomo estaba sujeto a un potencial armónico generado por la interacción con sus vecinos, de manera que cada átomo representa un oscilador armónico cuántico. Las suposiciones del modelo de sólido de Einstein son básicamente dos:

- Cada átomo en la red es un oscilador armónico cuántico tridimensional

⁶Esto se deja como ejercicio práctico para el lector

Modelos en sólidos

independiente.

- Todos los átomos oscilan con la misma frecuencia ω

En el modelo de Einstein, cada átomo oscila en forma independiente y a la misma frecuencia. Einstein era consciente de que esta era una aproximación, sin embargo propuso su teoría como una demostración clara que la mecánica cuántica era necesaria para resolver el problema del calor específico a temperaturas bajas. El modelo de Einstein representa un claro ejemplo de la utilidad que tienen los modelos simples en física para identificar qué características son relevantes para describir las propiedades físicas de un sistema. Este tipo de enfoque es particularmente útil en física y está relacionado con el concepto de teoría efectiva. Una teoría efectiva debe incluir los grados de libertad apropiados para describir las propiedades de un sistema a una escala de longitud de energía determinada.

Veamos qué se obtiene al aplicar las suposiciones de Einstein. En una dimensión, los autoestados de un oscilador armónico están dados por:

$$\epsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

donde ω es la frecuencia del oscilador armónico (a partir de ahora la llamaremos la frecuencia de Einstein).

Podemos entonces construir la función de partición de la siguiente manera

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} \\ &= e^{-\beta\hbar\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} \\ &= e^{-\beta\hbar\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\beta\hbar\omega})^n. \end{aligned}$$

Y usando que $\sum_{n=0}^{\infty} a^n = 1/(1-a)$ tenemos que

$$\begin{aligned} Z &= \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \\ Z &= \frac{1}{2 \sinh(-\beta\hbar\omega/2)} \end{aligned}$$

Calculamos el valor medio de la energía

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{\hbar\omega}{2} \coth(\beta\hbar\omega/2) \\ \langle E \rangle &= \hbar\omega \left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(n_B(\beta\hbar\omega) + \frac{1}{2} \right), \end{aligned}$$

1.3 Modelo de Einstein

donde $n_B(x) = 1/(e^x - 1)$ es la distribución de Bose. Derivando la expresión para la energía con respecto a la temperatura obtenemos

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = k_B(\beta \hbar \omega)^2 \frac{e^{\beta \hbar \omega}}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2}.$$

En el límite de alta temperatura $\beta \rightarrow 0$ tenemos que

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} C = K_B.$$

La generalización al caso en tres dimensiones es inmediata, la energía de un oscilador armónico simple en 3D está dada por

$$\epsilon_{nx,ny,nz} = \hbar \omega ((n_x + 1/2) + (n_y + 1/2) + (n_z + 1/2)).$$

Con esto podemos construir la función de partición y obtener

$$Z_{3D} = (Z)^3,$$

donde Z es la función de partición en 1D. De esta manera, al calcular el valor medio de la energía obtenemos

$$\langle E_{3D} \rangle = 3\langle E \rangle.$$

Luego, para el calor específico en tres dimensiones obtenemos

$$C_{3D} = 3k_B(\beta \hbar \omega)^2 \frac{e^{\beta \hbar \omega}}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2}$$

Es decir, en el límite $T \rightarrow \infty$ tenemos que

$$C_{3D} = 3k_B.$$

El modelo de Einstein recupera correctamente el límite de alta temperatura. De la figura 1.2 podemos ver que además funciona razonablemente bien a temperaturas intermedias, pudiendo explicar el calor específico a temperatura ambiente de materiales como el diamante, donde la teoría clásica no funcionaba. Sin embargo, aun falla a muy bajas temperaturas ya que el calor específico en la teoría de Einstein decrece exponencialmente mientras la mayoría de los materiales aislantes registran un comportamiento de tipo T^3 .

Aunque la teoría de Einstein logra describir razonablemente bien el calor específico de la mayoría de los sólidos en un rango de temperaturas alta, para eso se debe ajustar un parámetro libre de la teoría (ω). A veces es conveniente expresar la frecuencia de Einstein en términos de una temperatura, denominada “Temperatura de Einstein” $\hbar \omega = k_B T_{Einstein}$

Modelos en sólidos

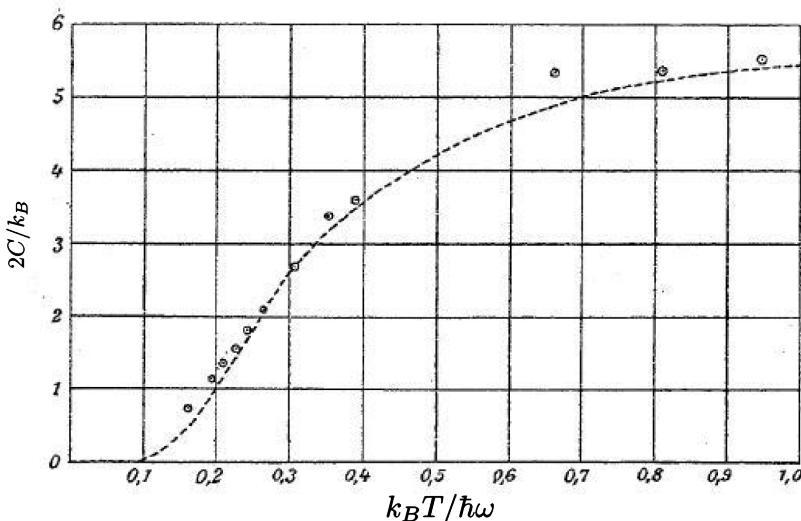


Figura 1.2: Gráfico del calor específico del diamante publicado en el trabajo original de Einstein de 1907[9].

1.4. Teoría del sólido de Debye

Si bien la teoría de Einstein describe exitosamente el calor específico de muchos materiales a temperatura ambiente, aun se requieren mejoras en el modelo si se quieren describir los rangos de baja temperatura. En la figura 1.2 se puede ver que a baja temperatura los datos experimentales están por encima de la curva teórica.

El poder mejorar el modelo para solucionar esta discrepancia resultaba importante ya que se sabía que a bajas temperaturas la mayoría de los materiales tienen un calor específico proporcional a T^3 . Además permite comprender que característica relevante se debe incluir en la teoría cuántica.

Se debe tener en cuenta también que no todos los materiales se comportan de la misma manera, ya que por ejemplo los metales también tienen un término adicional proporcional a T y los materiales magnéticos pueden presentar también otros términos adicionales.

Salvando estos casos, encontramos que los aislantes no magnéticos presentan generalmente a muy bajas temperaturas solo el comportamiento T^3 . En cualquier caso, el modelo de Einstein a bajas temperaturas decrece exponencialmente con T , por lo que no coincide con ninguna de las medidas del calor específico en materiales reales. Peter Debye[1], propuso una forma de mejorar el tratamiento cuántico de las oscilaciones de los átomos y así poder obtener el comportamiento a bajas temperaturas de tipo de tipo T^3 .

Debye se dio cuenta de que las oscilaciones de los átomos representan

1.4 Teoría del sólido de Debye

básicamente ondas de sonido, por lo que al buscar una teoría cuántica hay que buscar justamente la forma de cuantificar una onda. Una tarea similar ya había sido estudiada algunos años antes por Planck cuando cuantificó las ondas de luz.

Al intentar cuantificar las ondas de sonido de forma similar a la luz hay que tener en cuenta una diferencia entre luz y sonido: para la luz, hay dos polarizaciones para cada valor de k mientras que para el sonido, hay tres modos para cada k (un modo longitudinal, y dos modos transversales). La luz tiene solo los modos transversales. Para hacer el desarrollo más simple, asumiremos que los modos transversal y longitudinal tienen la misma velocidad, aunque en verdad el longitudinal es típicamente más grande que el modo transversal. Siguiendo esta idea, Debye asumió que los modos de oscilación eran ondas cuyas frecuencias estaban dadas por

$$\omega(\mathbf{k}) = v|\mathbf{k}|,$$

donde la constante v es la velocidad del sonido. Además en el cálculo debemos tener en cuenta que para cada k hay tres modos de oscilación posibles, uno para cada dirección de movimiento. Siguiendo estas suposiciones podemos escribir una expresión completamente análoga a la expresión de Einstein

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= 3 \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega(\mathbf{k}) \left(n_B(\beta \hbar \omega(\mathbf{k})) + \frac{1}{2} \right) \\ &= 3 \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \hbar \omega(\mathbf{k}) \left(n_B(\beta \hbar \omega(\mathbf{k})) + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Como tenemos simetría esférica podemos reducir la integral tridimensional a una integral en una variable.

$$\int d\mathbf{k} f(k) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta \int_0^\infty k^2 f(k) dk = 4\pi \int_0^\infty k^2 f(k) dk$$

Luego, tendremos que

$$\langle E \rangle = 3 \frac{4\pi L^3}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk k^2 \hbar \omega(\mathbf{k}) \left(n_B(\beta \hbar \omega(\mathbf{k})) + \frac{1}{2} \right).$$

Cambiamos la variable de integración de k a ω usando $\omega = vk$ y obtenemos

$$\langle E \rangle = 3 \frac{4\pi L^3}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{d\omega}{v^3} \omega^2 \hbar \omega \left(n_B(\beta \hbar \omega) + \frac{1}{2} \right).$$

Podemos agrupar el integrando de forma conveniente

Modelos en sólidos

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty d\omega \left(\frac{12\pi L^3 \omega^2}{(2\pi)^3 v^3} \right) (\hbar\omega) \left(n_B(\beta\hbar\omega) + \frac{1}{2} \right),$$

llamando $g(\omega) = \frac{12\pi L^3 \omega^2}{(2\pi)^3 v^3}$ tenemos que

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty d\omega g(\omega) (\hbar\omega) \left(n_B(\beta\hbar\omega) + \frac{1}{2} \right). \quad (1.16)$$

La función $g(\omega)$ en (1.16) se denomina **densidad de estados**. La cantidad de modos de vibración con frecuencias entre ω y $\omega + d\omega$ está dada por $g(\omega)d\omega$. De esta manera, la interpretación de la ecuación (1.16) es simplemente que debemos contar cuántos modos hay por frecuencia (este número está dado por la cantidad $g(\omega)$) y luego multiplicarlo por la energía del modo. Finalmente, se integra en todas las frecuencias.

Al trabajar con la densidad de estados es conveniente también usar la densidad de partículas

$$n = N/L^3$$

Despejando L^3 y reemplazando en la expresión para la densidad de estados tenemos que

$$g(\omega) = N \left(\frac{12\pi\omega^2}{(2\pi)^3 v^3 n} \right).$$

Es frecuente definir lo que se conoce como la **frecuencia de Debye** como $\omega_D^3 = 6\pi^2 n v^3$ y escribir la densidad de estados en términos de esta cantidad

$$g(\omega) = N \left(\frac{12\pi\omega^2}{(2\pi)^3 v^3 n} \right) = N \frac{9\omega^2}{\omega_D^3}.$$

De la ecuación (1.16) para el valor medio de la energía vemos que el factor $\frac{1}{2}$ nos dà una contribución independiente de la temperatura que no nos afectará en el cálculo del calor específico. Es decir que podemos calcular la parte dependiente de la temperatura como

$$\begin{aligned} \langle E(T) \rangle &= \int_0^\infty d\omega g(\omega) (\hbar\omega) n_B(\beta\hbar\omega) \\ \langle E(T) \rangle &= \frac{9N\hbar}{\omega_D^3} \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \end{aligned}$$

Si cambiamos variables haciendo $x = \beta\hbar\omega$ tenemos que

$$\langle E(T) \rangle = \frac{9N}{\omega_D^3 (\beta\hbar^3)} \int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1}$$

1.4 Teoría del sólido de Debye

La integral es independiente de la temperatura, de hecho el resultado es simplemente

$$\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}.$$

Luego

$$\langle E(T) \rangle = \frac{9N}{\omega_D^3(\beta\hbar^3)} \frac{\pi^4}{15} = \frac{9N(k_B T)^4}{\omega_D^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15}.$$

De donde obtenemos para el calor específico

$$C(T) = \frac{\partial \langle E(T) \rangle}{\partial T} = \frac{12N\pi^4 k_B^4}{5\omega_D^3 \hbar^3} T^3.$$

De esta manera se obtiene la esperada dependencia con T^3 . De la misma manera que hicimos para la teoría de Einstein, podemos definir la temperatura de Debye como

$$\hbar\omega_D = k_B T_{Debye}$$

y reescribir el calor específico como

$$C(T) = \frac{\partial \langle E(T) \rangle}{\partial T} = \frac{12N\pi^4 k_B}{5} \frac{T^3}{T_{Debye}^3}.$$

1.4.1. Problemas con la formulación

Ya se habrán dado cuenta que; si bien el modelo propuesto por Debye reproduce bien el comportamiento a bajas temperaturas, tiene un problema. En la expresión que encontramos para el calor específico, ¡el comportamiento es proporcional a T^3 a bajas y altas temperaturas!

Sabemos sin embargo, que el calor específico debe tender asintóticamente al valor $3k_B N$ para T suficientemente alta.

Debye intuyó que el problema con su aproximación es que contempla un número infinito de modos de vibración. Esto se ve ya que al calcular la energía la integral en k se realiza hasta valores de k arbitrariamente grandes. Para remediar esto trabajó bajo la suposición de que debería haber solo tantos modos de vibración como grados de libertad en el sistema. Para solucionar este problema, Debye decidió no considerar ondas por encima de cierta frecuencia máxima ω_{cutoff} .

Esta frecuencia de corte, debe ser elegida de forma que la cantidad de modos de vibración sea exactamente $3N$.

Tenemos, entonces que

$$3N = \int_0^{\omega_{cutoff}} g(w) dw.$$

Modelos en sólidos

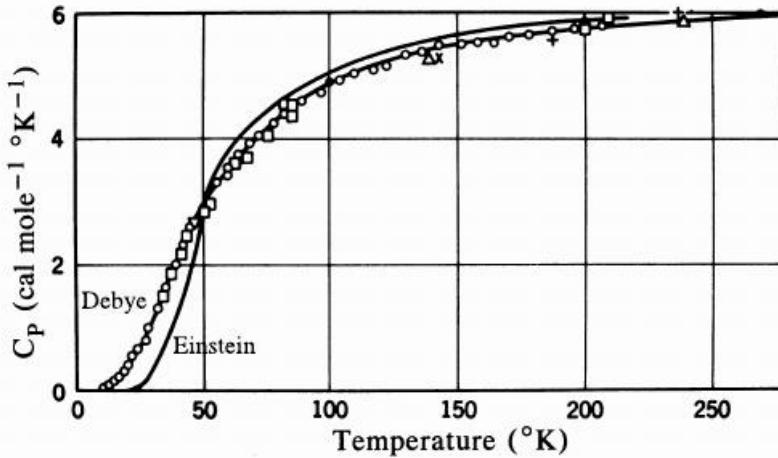


Figura 1.3: Gráfico del calor específico para Ag (Plata). Los puntos son diferentes medidas experimentales, las líneas continuas representan las predicciones teóricas de Debye y Einstein

Así, tenemos que reescribir la ecuación (1.16) como

$$\langle E \rangle = \int_0^{\omega_{cutoff}} d\omega g(\omega) (\hbar\omega) \left(n_B(\beta\hbar\omega) + \frac{1}{2} \right). \quad (1.17)$$

Esta expresión mantiene el comportamiento a bajas temperaturas, pero la presencia de una frecuencia de corte (cutoff) cambia por completo el comportamiento a altas temperaturas.

Para T grande tenemos que $\beta \ll 0$ y por lo tanto podemos escribir

$$n_B(\beta\hbar\omega) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \simeq \frac{1}{\beta\hbar\omega}$$

Luego podemos escribir para la energía

$$\langle E \rangle \simeq \int_0^{\omega_{cutoff}} d\omega g(\omega) (\hbar\omega) \left(\frac{1}{\beta\hbar\omega} + \frac{1}{2} \right)$$

y para la parte dependiente de la temperatura (que es la que nos interesa para calcular el calor específico) tenemos

$$\langle E \rangle \simeq \frac{1}{\beta} \int_0^{\omega_{cutoff}} d\omega g(\omega) = \frac{1}{\beta} 3N = 3Nk_B T.$$

Es decir, que al calcular el calor específico $C = \partial\langle E \rangle / \partial T$ recuperamos la ley de Dulong-Petit $C = 3Nk_B$.

1.5 Modos normales para una red unidimensional monoatómica.

Si queremos hacer el cálculo para una temperatura arbitraria, tenemos que calcular la integral (1.17), la cual tiene que ser calculada numéricamente.

Podemos ver una comparación entre las predicciones hechas por los modelos de Einstein y Debye con datos experimentales en la figura 1.3

1.5. Modos normales para una red unidimensional monoatómica.

Consideremos una cadena de átomos idénticos de masa m y supongamos que la distancia de equilibrio entre átomos es una cantidad a . Entonces, la posición de equilibrio del enésimo átomo es $x_n^{eq} = na$.

Si permitimos que los átomos puedan desviarse de su posición de equilibrio y moverse solo en la dirección de x (esto es, en nuestro modelo el movimiento es puramente en una dimensión) y llamamos x_n a la posición del enésimo átomo, la desviación de la posición a partir de su posición de equilibrio puede escribirse como

$$\delta x_n = x_n - x_n^{eq}$$

Consideremos la energía potencial de un átomo, digamos el átomo n . Podemos escribir los primeros términos de su desarrollo de Taylor como

$$V(x_n) \simeq V(x_n^{eq}) + \frac{dV}{dx_n}(x_n^{eq})(x_n - x_n^{eq}) + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dx_n^2}(x_n^{eq})(x_n - x_n^{eq})^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3V}{dx_n^3}(x_n^{eq})(x_n - x_n^{eq})^3$$

La posición de equilibrio x_n^{eq} debe corresponder a un extremo de la energía potencial, por lo que tendremos que

$$\frac{dV}{dx_n}(x_n^{eq}) \equiv 0.$$

Luego, si llamamos $K = \frac{d^2V}{dx_n^2}(x_n^{eq})$ y $K_3 = \frac{d^3V}{dx_n^3}(x_n^{eq})$ tenemos que

$$V(x_n) \simeq V(x_n^{eq}) + \frac{1}{2} K \delta x_n^2 + \frac{1}{3!} K_3 \delta x_n^3 + \dots$$

Si solo consideramos pequeñas desviaciones de la posición x_n^{eq} los términos de mayor grado son mucho mucho más pequeños que el término cuadrático y podemos descartarlos. En general cualquier potencial suave, cuando es estudiado lo suficientemente cercano a su mínimo, puede aproximarse como cuadrático. Consideremos ahora una cadena de átomos cuyo potencial de-

Modelos en sólidos

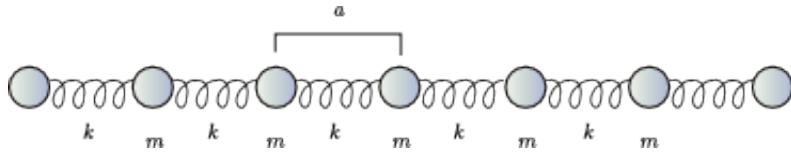


Figura 1.4: Esquema de una cadena monoatómica

pende de la distancia entre átomos consecutivos. De esta manera podemos escribir la energía potencial para la cadena como

$$V_{tot} = \sum_j V(x_j - x_{j+1}) \simeq V_{eq} + \sum_j \frac{K}{2} (\delta x_j - \delta x_{j+1})^2$$

Podemos calcular la fuerza que actúa sobre el átomo n como

$$F_n = \frac{-\partial V_{tot}}{\partial \delta x_n} = K(\delta x_{n+1} - \delta x_n) + K(\delta x_{n-1} - \delta x_n)$$

Y la segunda ley de Newton queda en la forma

$$m \ddot{\delta x}_n = K(\delta x_{n+1} + \delta x_{n-1} - 2\delta x_n) \quad (1.18)$$

Obtenemos así, un sistema de ecuaciones acopladas. Llamaremos **modo normal** de vibración a las soluciones de este sistema donde todos los átomos de la cadena oscilen con la misma frecuencia. Para encontrar los modos normales propondremos una solución de la forma

$$\delta x_n = A e^{i\omega t - i k x_n^{eq}} = A e^{i\omega t - i k a n}$$

Donde proponemos una expresión compleja por conveniencia, pero al final consideraremos la parte real como la solución física. Reemplazamos esta propuesta en la ecuación (1.18) y obtenemos

$$-m\omega^2 A e^{i\omega t - i k a n} = K A e^{i\omega t} \left(e^{-i k a (n+1)} + e^{-i k a (n-1)} - 2 e^{-i k a n} \right)$$

que podemos escribir como

$$m\omega^2 = 2K (1 - \cos(ka)) = 4K \sin^2(ka/2) \quad (1.19)$$

De donde obtenemos ω

$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{m}} |\sin(ka/2)| \quad (1.20)$$

1.5 Modos normales para una red unidimensional monoatómica.

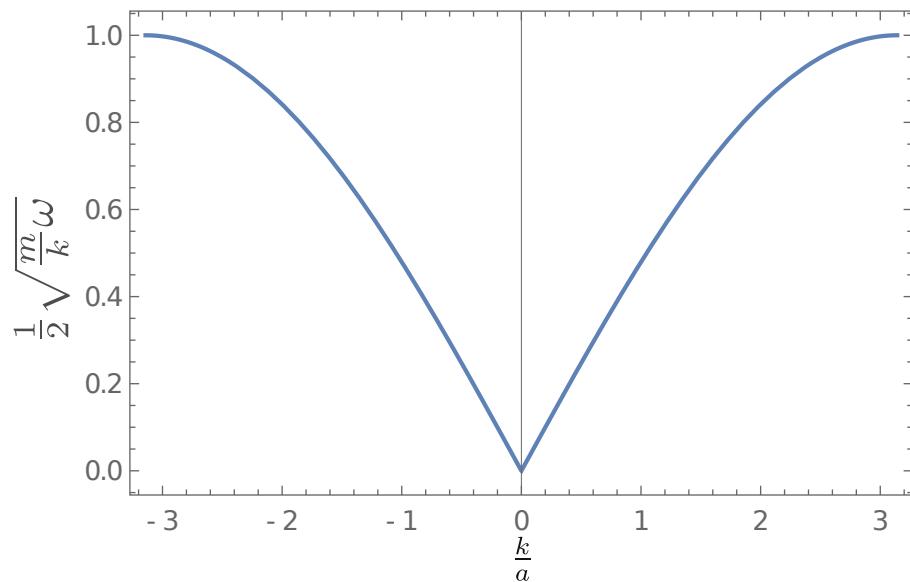


Figura 1.5: Relación de dispersión para una cadena monoatómica

A la relación entre energía (recordemos que $E = \hbar\omega$) y momento de lo denominamos *relación de dispersión*. Vamos a estudiar un poco las propiedades de la relación de dispersión que encontramos.

Cuasimomento

Lo primero que debemos observar es que esta relación de dispersión es periódica, con período $2\pi/a$. Esta periodicidad ya estaba implícita en nuestra propuesta de solución. Notemos que si hacemos un shift en momentos $k \rightarrow k + 2\pi/a$ tenemos que

$$\delta x_n = Ae^{i\omega t - i(k + \frac{2\pi}{a})an} = Ae^{i\omega t - ikan}$$

Esta periodicidad en el espacio de momentos viene heredada de la periodicidad de la red real. A la zona del espacio de momento que se repite periódicamente se la denomina “zona de Brillouin” y representa un concepto muy importante en materia condensada.

Grandes longitudes de onda

En el límite de grandes longitudes de onda ⁷ podemos hacer un desarrollo de la relación de dispersión alrededor de $k = 0$ y encontramos que la relación

⁷Entenderemos a una onda de sonido como una vibración que tiene una longitud de onda larga en comparación con la interatómica.

Modelos en sólidos

de dispersión es aproximadamente lineal de la forma $\omega(k) \simeq vk$ con $v = a\sqrt{\frac{K}{m}}$. Entonces vemos que la conjetura de Debye al poner $\omega = vk$ es muy razonable para el caso de grandes longitudes de onda (k pequeño), sin embargo para valores de k cercanos a $\pm\pi/a$ la aproximación de Debye no es correcta.

La otra suposición fuerte que realizó Debye fue la de introducir una frecuencia de corte (cutoff) en la integral bajo el argumento de que no podía haber más modos de vibración que grados de libertad del sistema. Debye impuso que el sistema debía tener exactamente $3N$ modos normales para el caso 3D (N si consideráramos solo vibraciones en 1D). Si bien la suposición es razonable ahora podemos intentar calcular la cantidad de modos de vibración.

Para realizar este cálculo debemos considerar que condiciones de contorno impondremos en los bordes de la cadena. Por simplicidad, consideraremos condiciones de contorno periódicas. Esto es, asumiremos que $x_{n+N} = x_n$ (donde N es el número de átomos en la cadena).

Al hacer esto debemos tener cuidado de que la onda que propusimos como solución cumpla con la condición de contorno. Por eso debemos tener

$$e^{i\omega t - ika(n+N)} = e^{i\omega t - ikan}$$

Para que esto se cumpla debemos tener que

$$e^{ikNa} = 1$$

Esto solo es posible si el momento cumple que

$$k = \frac{2\pi q}{Na} = \frac{2\pi q}{L}$$

donde $L = Na$ y q es un número entero. Entonces k está cuantificado y ya no es más una cantidad continua. El espacio entre dos valores consecutivos de k es $\frac{2\pi}{Na}$.

Contemos cuántos modos tenemos. La relación de dispersión toma todos sus valores en el intervalo $-\pi < k \leq \pi$. Como la relación de dispersión es periódica, la relación de dispersión evaluada en cualquier valor de k fuera de ese intervalo puede obtenerse evaluándola en un valor de k dentro del intervalo a un valor del momento que difiera de k en $\frac{2\pi q}{Na}$. Por esta razón, el sistema se describe completamente con valores de k dentro de dicho intervalo⁸.

Luego, podemos calcular el número total de modos normales de vibración como

⁸A este intervalo se lo denomina *primer zona de Brillouin*. Definiremos este concepto con más detalle más adelante

1.5 Modos normales para una red unidimensional monoatómica.

$$\#\text{modos} = \frac{2\pi/a}{2\pi/(Na)} = N$$

Hay precisamente un modo normal por átomo en la cadena, es decir, un modo normal por grado de libertad. Esto es justamente lo que Debye supuso para resolver el problema con la integral.

Cuantos de sonido: Fonones

Ahora que tenemos una expresión para las frecuencias de vibración de una cadena podemos seguir los pasos de Debye y tratar las vibraciones con una teoría cuántica. Para eso, asociaremos a cada modo de vibración $\omega(k)$ con un oscilador cuyo espectro de energía es

$$E_n = \hbar\omega(k)(n + \frac{1}{2})$$

La gran diferencia con el tratamiento clásico que hicimos antes es que nuestros osciladores armónicos pueden tener excitaciones colectivas y no se reduce simplemente al movimiento de una sola partícula.

Ahora tenemos que, dado un valor del cuasimomento k , existen muchos posibles autoestados (indexados por el número n), de los cuales el estado de mínima energía (ground state) corresponde a $n = 0$ con energía $\hbar\omega(k)/2$. El siguiente estado con energía mayor al ground state (es decir el primer estado excitado) corresponderá a $n = 1$ y la diferencia de energía entre el ground state y el primer excitado es $\hbar\omega(k)$. Se pueden crear tantas excitaciones con energía $\hbar\omega(k)$ como se desee, y cada una de estas excitaciones es lo que se conoce como un fonón. En esta descripción cuántica de las vibraciones, las excitaciones de energía están cuantizadas y a cada cuanto de vibración se lo denomina fonón. Esta descripción nos permite describir la creación de excitaciones en términos de partículas (fonones) de la misma manera que ya lo sabemos hacer para los cuantos de luz (fotones).

Como nada nos prohíbe crear dos fonones en el mismo estado debemos tratar estas nuevas partículas como bosones (de la misma manera que lo hacemos para los fotones). Luego a temperatura finita tendremos que el número de fonones está descripto por la estadística de Bose.

$$n_B(\beta\hbar\omega) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

Con esto podemos escribir el valor medio de la energía de los fonones con cuasimomento k como

Modelos en sólidos

$$E_k = \hbar\omega(k) \left(n_B(\beta\hbar\omega(k)) + \frac{1}{2} \right)$$

y si queremos calcular la energía total tendremos que sumar sobre los valores del cuasimomento

$$E_{total} = \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \hbar\omega(k) \left(n_B(\beta\hbar\omega(k)) + \frac{1}{2} \right)$$

donde k solo puede tomar los valores permitidos $k = \frac{2\pi q}{Na}$. Donde q toma valores enteros. Para fines prácticos (por ejemplo, si queremos implementar la suma en una computadora (**Ejercicio**)) es conveniente escribir la suma en términos de un índice entero, por lo que podríamos escribir

$$E_{total} = \sum_{q=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hbar\omega\left(\frac{2\pi q}{Na}\right) \left(n_B\left(\beta\hbar\omega\left(\frac{2\pi q}{Na}\right)\right) + \frac{1}{2} \right)$$

Si tenemos una gran cantidad de partículas podemos usar el viejo truco de aproximar la suma por una integral. Esto se puede pensar de la siguiente manera. Si tuviéramos que calcular la integral de una función $f(k)$ en el intervalo $[-\pi/a, \pi/a]$ podríamos aproximar esta integral por su suma de Riemman

$$\int_{-\pi/a}^{\pi/a} f(k) \simeq \sum_k \Delta k f(k)$$

En nuestro caso, como el cuasimomento esta cuantizado debemos tomar $\Delta k = \frac{2\pi q}{aN}$ y podríamos escribir

$$\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hbar\omega(k) \left(n_B(\beta\hbar\omega(k)) + \frac{1}{2} \right) \simeq \frac{2\pi}{aN} \sum_{q=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \hbar\omega\left(\frac{2\pi q}{Na}\right) \left(n_B\left(\beta\hbar\omega\left(\frac{2\pi q}{Na}\right)\right) + \frac{1}{2} \right)$$

Es decir que podemos aproximar la suma por la integral de manera que

$$E_{total} \simeq \frac{aN}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \hbar\omega(k) \left(n_B(\beta\hbar\omega(k)) + \frac{1}{2} \right) dk$$

Podemos usar esta aproximación en términos de una integral para contar el número total de modos en el sistema

$$\sum_k 1 = \frac{aN}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk = N$$

1.5 Modos normales para una red unidimensional monoatómica.

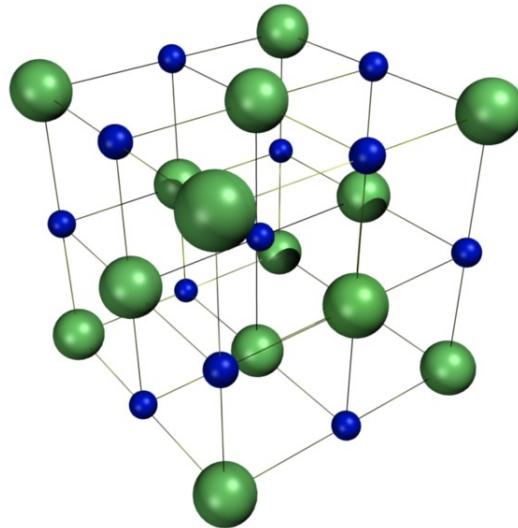


Figura 1.6: Estructura molecular del NaCl.

Es decir, de esta manera vemos que la suposición de Debye de que teníamos exactamente N modos normales era correcta.

Frecuentemente es útil reemplazar la integral sobre k con una integral en frecuencias ω . Al hacer esto sabemos que podemos contar la cantidad de estados integrando la función *densidad de estados* y esto debe dar el mismo resultado que obtengamos con la integral en k y por lo tanto tendremos

$$\int g(\omega) d\omega = \frac{aN}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk$$

Para que esta igualdad sea cierta, al realizar el cambio de variables debemos tener que

$$g(\omega) = \frac{Na}{2\pi} \left| \frac{dk}{d\omega} \right|$$

En la versión unidimensional del modelo de Debye esta densidad de estados era constante mientras que en nuestro caso no. En el modelo de Einstein, la densidad de estados es una delta en la frecuencia de Einstein ya que no hay estados con otra frecuencia.

La expresión que obtuvimos para la energía (y por ende la que obtendríamos para el calor específico) son muy similares a las que Debye utilizó en sus cálculos. La única diferencia radica en nuestra expresión para la frecuencia $\omega(k)$. Aparte de este cambio en la relación de dispersión, nuestro cálculo del calor específico es idéntico al de Debye.

Modelos en sólidos

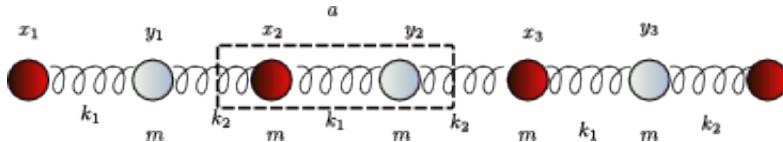


Figura 1.7: Esquema de una cadena diatómica.

1.6. Modos normales de la cadena diatómica. Ramas acústica y óptica

Anteriormente discutimos en detalle un modelo unidimensional de un sólido en el todos los átomos eran idénticos entre sí. Esto nos dió una buena base para comprender los grados de libertad de vibración de un sólido, pero claramente no representa el caso más general. Basta pensar en materiales iónicos como el NaCl donde tenemos dos tipos de átomos que no son equivalentes.

En esta sección generalizaremos el estudio anterior a una cadena con dos tipos de átomos. Gran parte de lo que hagamos seguirá pasos similares a los que ya realizamos para el caso de una cadena monoatómica, pero veremos que ahora surgirán nuevas características.

Consideremos el sistema esquematizado en la figura 1.7, el cual representa un arreglo periódico de dos tipos diferentes de átomos con masas m_1 y m_2 que se alternan a lo largo de la cadena. Estos “átomos” están sujetos a un potencial que modelaremos por medio de resortes. Los resortes que conectan estos átomos tienen constantes elásticas K_1 y K_2 .

Notemos que en la figura se observa que podemos generar toda la cadena completa si repetimos periódicamente la parte de la cadena que está recuadrada. Esta es la unidad mínima de información que debemos tener para poder reproducir toda la cadena, algo así como la información genética de la estructura que queremos estudiar. A esta celda mínima de red se la denomina **celda unidad o celda unitaria**.

A la longitud de la celda unitaria en una dimensión se conoce como **constante de red** y nosotros la denotaremos usualmente con la letra a . La elección de la celda unidad no es única, sin embargo lo importante para definir un sistema periódico es elegir una celda unitaria que permita construir el sistema completo reproduciendo la misma celda unidad una y otra vez.

Para poder construir el sistema periódico completo por medio de translaciones de la celda unidad es útil seleccionar un punto de referencia dentro de cada celda. A partir de este punto de referencia se pueden escribir las posiciones de los átomos dentro de cada celda.

Para hacer los cálculos más simples, estudiaremos el caso especial en el

1.6 Modos normales de la cadena diatómica. Ramas acústica y óptica

que todas las masas son iguales (es decir $m_1 = m_2$) pero las constantes elásticas son diferentes. Esta suposición simplificará bastante los cálculos y no cambiará las conclusiones. Se deja como ejercicio al lector resolver el caso más general con $m_1 \neq m_2$

Podemos escribir las ecuaciones de movimiento de manera análoga a como lo hicimos para el caso monoatómico para las desviaciones de las posiciones respecto de sus posiciones de equilibrio.

$$m \ddot{\delta x}_n = K_2(\delta y_n - \delta x_n) + K_1(\delta y_{n-1} - \delta x_n) \quad (1.21)$$

$$m \ddot{\delta y}_n = K_1(\delta x_{n+1} - \delta y_n) + K_2(\delta x_n - \delta y_n) \quad (1.22)$$

donde llamamos x_n e y_n a las posiciones cada uno de los átomos no equivalentes dentro de la enésima celda unidad. (es decir tenemos átomos tipo x y átomos tipo y)

De la misma manera que lo hicimos antes proponemos soluciones de la forma

$$\delta x_n = A_x e^{i\omega t - ikna} \quad (1.23)$$

$$\delta y_n = A_y e^{i\omega t - ikna} \quad (1.24)$$

donde, como antes, nuestra solución física será tomar la parte real y de la misma manera que pasaba antes, los valores de k que difieren en $2\pi/a$ son equivalentes y utilizaremos solo valores del cuasimomento en la primer zona se Brillouin (es decir $-\pi/a < k \leq \pi/a$).

De la misma manera que encontramos antes si imponemos condiciones de contorno periódicas a nuestro sistema de N celdas unitarias (por lo tanto la longitud total de la cadena será, $L = Na$) entonces el cuasimomento k se cuantificará valores discretos $2\pi/(Na)$.

Aquí hay que tener en cuenta un detalle muy importante, la cuantificación del cuasimomento depende del número de celdas N y no del número de átomos ($2N$) ya que la estructura periódica que se repite es la celda. Dividiendo el rango de k en la primera zona de Brillouin por el espacio entre las k vecinas, obtenemos exactamente N diferentes valores posibles de k exactamente como antes.

En otras palabras, solo podemos tener exactamente un valor de k por celda unitaria, o de otra manera, tendremos tantos valores del cuasimomento como celdas unitarias tenga nuestro sistema. Esta es una propiedad fundamental que estudiaremos en más detalle al discutir las estructuras periódicas de los sólidos.

Modelos en sólidos

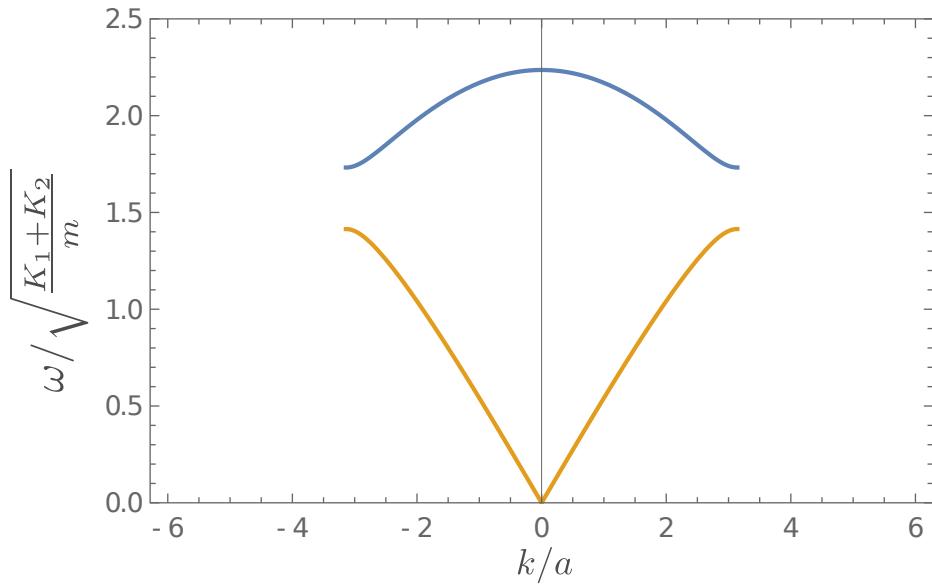


Figura 1.8: Relación de dispersión para la cadena diatómica. Tenemos dos ramas en la primera zona de Brillouin

Esto podría confundirnos un poco ya que sería razonable esperar tener tantos modos de oscilación como grados de libertad en el sistema (y el sistema tiene 2 grados de libertad por celda). Esto es cierto y es la razón por la que encontraremos que habrá dos modos de oscilación posibles para cada cuasimomento k . Para ver esto reemplazamos nuestra propuesta de solución en las ecuaciones de movimiento y simplificando obtenemos

$$\begin{aligned} -m\omega^2 A_x &= K_2 A_y - (K_1 + K_2) A_x + K_1 A_y e^{ika} \\ -m\omega^2 A_y &= K_2 A_x - (K_1 + K_2) A_y + K_1 A_x e^{-ika} \end{aligned}$$

Para encontrar la solución de este sistema de ecuaciones es conveniente escribir el sistema en forma matricial

$$m\omega^2 \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (K_1 + K_2) & -K_2 - K_1 e^{ika} \\ -K_2 - K_1 e^{-ika} & (K_1 + K_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$$

Ejercicio: Resolver el sistema de ecuaciones

Resolviendo el sistema de ecuaciones encontramos que

$$\omega_{\pm} = \sqrt{\frac{K_1 + K_2}{m} \pm \frac{1}{m} \sqrt{K_1^2 + K_2^2 + 2K_1 K_2 \cos(ka)}} \quad (1.25)$$

1.6 Modos normales de la cadena diatómica. Ramas acústica y óptica

Como habíamos adelantado, por cada valor del cuasimomento tenemos dos modos normales de vibración. Si tenemos N celdas, tendremos N valores del cuasimomento y por lo tanto $2N$ modos normales.

En la figura anterior se muestran las dos ramas de dispersión en la primera zona de Brillouin ($|k| \leq \pi/a$). A esta forma de mostrar las dispersiones se lo suele llamar *esquema de zona reducida*. Notese que de las dos ramas de dispersión solo una toma valores pequeños de energía. Para esta rama tenemos que la relación de dispersión es lineal para k pequeño. A esta rama se la denomina **rama acústica**. En general se denomina *rama acústica* a cualquier modo de vibración que tenga una relación de dispersión lineal cuando k tiende a cero. A la rama de energía más alta se la denomina **rama óptica**. La razón por la que se la llama rama óptica es porque esta rama es la que interviene en el proceso de escattering de luz en el sólido. Por ahora nos concentraremos en la rama acústica y dejaremos el estudio de la rama óptica para cuando estudiemos la interacción de la luz con los sólidos.

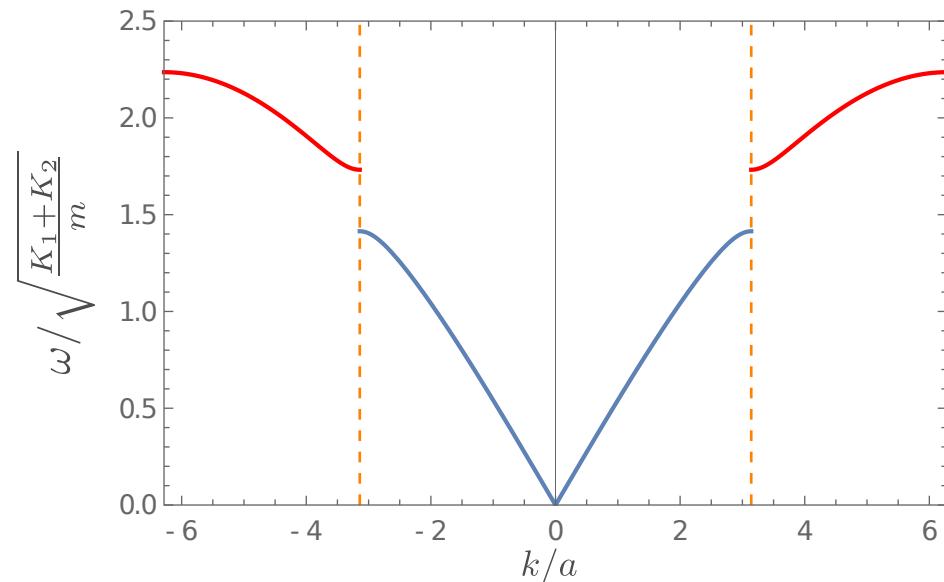


Figura 1.9: Relación de dispersión para la cadena diatómica en el esquema de zona extendida. La rama acústica sobre la primera zona de Brillouin ($|k| \leq \pi/a$, mientras que la rama óptica está graficada en la segunda zona ($\pi/a < |k| \leq 2\pi/a$))

Alternativamente al esquema de zona reducida (donde se grafican todas las ramas en la primera zona de Brillouin) se puede también usar el *esquema de zona extendida* que consiste en graficar una rama en la primera zona y la

Modelos en sólidos

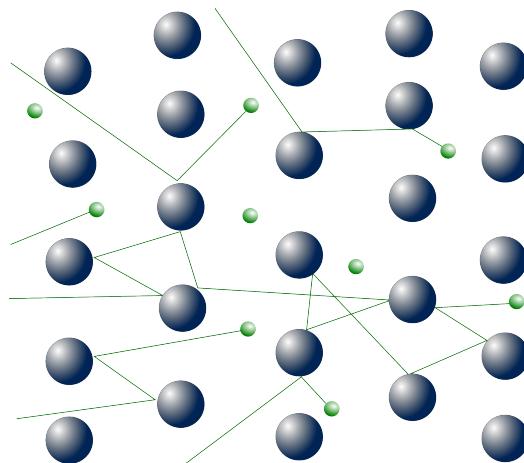


Figura 1.10: Esquema del movimiento de los electrones en la teoría de Drude

siguiente en la segunda zona⁹

1.7. Teoría de Drude de los metales

La principal característica de los metales es que conducen electricidad por medio de electrones móviles en el material. Discutiremos más adelante porqué algunos materiales presentan electrones móviles y otros no. Por ahora, asumiremos que hay movilidad de electrones estudiaremos modelos que nos ayuden a comprender algunas de sus propiedades.

Drude construyó una teoría simple para los metales aplicando la teoría cinética de los gases a los metales considerándolos como un gas de electrones. La teoría cinética trata a las partículas como esferas rígidas que se mueven en una trayectoria rectilínea hasta que chocan con otra partícula. El tiempo que dura una colisión es despreciado, considerando a las colisiones como procesos instantáneos.

Drude asume que los electrones de valencia están desacoplados del resto del átomo y pueden moverse libremente a través del metal, mientras los iones positivos permanecen inmóviles en el metal. Esta situación está esquematisada en la figura 1.10, donde las esferas verdes representan a los electrones de valencia y las esferas azules representan a los iones.

Las suposiciones básicas del modelo de Drude son las siguientes:

⁹Si hubiera mas ramas se graficaría también en la tercera zona de Brillouin y así. El objetivo del esquema de zona extendida es que tengamos un solo modo por cada valor de k . Es decir trabajar con la gráfica de una función.

1.7 Teoría de Drude de los metales

- Entre colisiones, la interacción que siente un electrón, tanto con los demás electrones, como con los núcleos es despreciable. La aproximación de despreciar la interacción electrón-electrón se conoce como **aproximación de electrón independiente** y el hecho de despreciar la interacción electrón-ion, se conoce como **aproximación de electrón libre**.
- Las colisiones, en el modelo de Drude, se consideran instantáneas y su efecto consiste en cambiar la velocidad de el electrón. Veremos que la interacción electrón-electrón es una de las menos importantes al estudiar el scattering de electrones en un metal.
- Se asume que un electrón efectúa una colisión en un tiempo dt con probabilidad dt/τ
- Los electrones realizan choques elásticos, por lo tanto se conserva tanto el momento como la energía cinética en las colisiones. Como no hay una dirección preferencial, la partícula saldrá luego del choque en cualquier dirección con igual probabilidad. Por lo tanto, el valor medio del momento será $\langle \mathbf{p} \rangle = \mathbf{0}$
- Entre dos choques, los electrones (que asumimos son partículas cargadas de carga $-e$) responden al campo eléctrico y magnético.

Notese que τ representa un tiempo medio entre dos choque sucesivos, de manera que un valor pequeño entre choques nos dà una alta probabilidad (dt/τ) de que el electrón choque en un período de tiempo dt , mientras que el límite $\tau \rightarrow \infty$ es el límite donde los electrones nunca chocan.

Consideremos un electrón que a tiempo t tiene momento \mathbf{p} . Luego de transcurrido un tiempo dt supondremos que hay dos opciones excluyentes: O el electrón chocó (suponemos que este evento ocurre con probabilidad dt/τ) o el electrón no chocó. Este segundo evento tiene asociada una probabilidad $1 - dt/\tau$ si despreciamos la probabilidad de que el electrón choque dos veces en un tiempo tan corto.

Modelos en sólidos

Luego tendremos que a tiempo $t + dt$ el valor medio del momento estará dado por

$$\mathbf{p}(t + dt) = \mathbf{0} dt/\tau + (1 - dt/\tau)(\mathbf{p}(t) + \mathbf{F}dt)$$

Luego tenemos

$$d\mathbf{p}/dt = \mathbf{F} - \mathbf{p}/\tau + O(dt)$$

Notese que en el límite $\tau \rightarrow \infty$ recuperamos la segunda ley de Newton.

$$d\mathbf{p}/dt = \mathbf{F}$$

La fuerza \mathbf{F} que actúa sobre los electrones es la fuerza de Lorentz.

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

En ausencia de campos magnéticos y eléctricos está fuerza es cero, la ecuación para $\mathbf{p}(t)$ es

$$d\mathbf{p}/dt = -\mathbf{p}/\tau$$

y la solución es de la forma

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}_0 e^{-t/\tau}$$

Es decir que en ausencia de fuerzas externas, en este modelo simple para las colisiones de los electrones con los iones de la red el momento $\mathbf{p}(t)$ decrece exponencialmente con el tiempo. Además la solución estacionaria (es decir cuando $\mathbf{p}(t)$ no depende del tiempo y por lo tanto $d\mathbf{p}/dt = \mathbf{0}$) es $\mathbf{p} = \mathbf{0}$.

1.7 Teoría de Drude de los metales

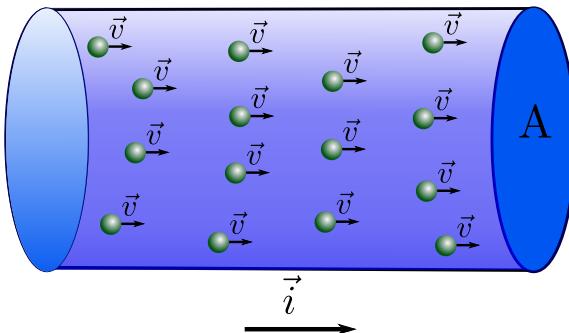


Figura 1.11: Esquema del movimiento de los electrones sometidos a un campo eléctrico en la teoría de Drude

Electrones en un campo eléctrico

Consideremos ahora el caso en el que el campo eléctrico es distinto de cero pero el campo magnético es cero. La ecuación de movimiento queda entonces

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e\mathbf{E} - \frac{\mathbf{p}}{\tau}$$

En un estado estacionario tendremos que $d\mathbf{p}/dt = 0$, luego

$$\mathbf{p} = -e\tau\mathbf{E}$$

$$m\mathbf{v} = -e\tau\mathbf{E}$$

Es decir que podemos escribir la siguiente expresión para la velocidad media de los electrones

$$\mathbf{v} = -\frac{e\tau}{m}\mathbf{E} \quad (1.26)$$

Supongamos ahora que los electrones se mueven a esa velocidad media por un conductor de sección A y recordemos que la corriente se define convencionalmente en término de la carga positiva.

Si tenemos una densidad de electrones (de carga $-e$) n moviéndose por el metal con velocidad \mathbf{v} , podemos escribir la densidad de corriente como

$$\mathbf{j} = -en\mathbf{v}$$

Reemplazando por la expresión que encontramos para la velocidad de los electrónes tenemos que

$$\mathbf{j} = \frac{e^2 n \tau}{m} \mathbf{E}$$

Modelos en sólidos

Encontramos entonces que en la teoría de Drude la densidad de corriente es proporcional al campo eléctrico. Es decir, recuperamos la ley de Ohm.

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$

donde la conductividad está dada por

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m} \quad (1.27)$$

Para el caso simple de un cable uniforme de largo L podemos recuperar la forma macroscópica de la ley de Ohm a partir de la ecuación

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$

La intensidad de la corriente I podemos escribirla como $jA = I$, donde $j = |\mathbf{j}|$ y A es el área transversal del cable. Suponiendo un campo eléctrico constante, la diferencia de potencial en los extremos del cable estará dada por

$$V = EL$$

y podemos escribir

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \sigma \mathbf{E} \\ \frac{I}{A} &= \frac{1}{\rho} \frac{V}{L} \\ I \left(\frac{\rho L}{A} \right) &= V \\ I R &= V \end{aligned}$$

donde $\rho = \frac{1}{\sigma}$ es la resistividad del material y hemos llamado definido la resistencia del cable como $R = \frac{\rho L}{A}$.

Electrones en un campo magnético

Consideremos ahora el caso de un conductor sujeto a un campo eléctrico y un campo magnético. Como antes tenemos que

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} - \frac{\mathbf{p}}{\tau}$$

Pero ahora usamos la expresión para la fuerza de Lorentz

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

1.7 Teoría de Drude de los metales

Luego

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{\mathbf{p}}{\tau}$$

Y en el estado estacionario tendremos que

$$0 = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{\mathbf{p}}{\tau}$$

usando que $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ y $\mathbf{j} = -en\mathbf{v}$ podemos escribir que $\mathbf{p} = -\frac{m}{en}\mathbf{j}$ y reemplazando en la ecuación anterior tenemos

$$0 = -e(\mathbf{E} - \frac{1}{en}\mathbf{j} \times \mathbf{B}) + \frac{m}{e\tau n}\mathbf{j} \quad (1.28)$$

$$\mathbf{E} = \left(\frac{1}{ne}(\mathbf{j} \times \mathbf{B}) + \frac{m}{e^2\tau n}\mathbf{j} \right) \quad (1.29)$$

En este caso la relación entre la densidad de corriente y el campo eléctrico es un poco mas compleja que antes, pero veremos que tiene una estructura similar. Para simplificar un poco las expresiones supongamos que el campo eléctrico esta orientado en la dirección z . En ese caso podremos escribir

$$\mathbf{E} = \tilde{\rho}\mathbf{j}$$

donde $\tilde{\rho}$ es una matriz de 3×3 de la forma

$$\tilde{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{m}{n\tau e^2} & \frac{B}{ne} & 0 \\ -\frac{B}{ne} & \frac{m}{n\tau e^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{m}{n\tau e^2} \end{pmatrix} \quad (1.30)$$

Es decir, podemos definir las componentes diagonales de un tensor de resistividad

$$\rho_{xx} = \rho_{yy} = \rho_{zz} = \frac{m}{n\tau e^2} = \frac{1}{\sigma}$$

donde σ es la conductividad que calculamos en el caso donde solo teníamos campo eléctrico. Fuera de la diagonal tenemos

$$\rho_{xy} = -\rho_{yx} = \frac{B}{ne}$$

Esta componente de la resistividad fuera de la diagonal se conoce como la resistividad Hall y nos indica que, cuando un campo magnético es aplicado perpendicular al flujo de corriente, puede medirse un voltaje en la dirección perpendicular tanto al flujo de corriente como al campo magnético.

Modelos en sólidos

Normalmente se define el coeficiente Hall como

$$R_H = \frac{\rho_{yx}}{|B|}$$

que en el caso de la teoría de Drude es $R_H = -\frac{1}{ne}$

1.8. Teoría de Sommerfeld de los metales

Sommerfeld se dio cuenta de que la teoría de los metales de Drude podía fácilmente generalizarse para incorporar la mecánica cuántica por medio de la estadística de Fermi para los electrones, que es lo que discutiremos a continuación.

Como habrán visto en el curso de mecánica estadística, dado un sistema de electrones libres con potencial químico μ , la probabilidad de que un electrón ocupe un estado de energía E está dada por el factor Fermi

$$n_F(\beta(E - \mu)) = \frac{1}{e^{\beta(E - \mu)} + 1}$$

Supongamos que los electrones están en una caja de tamaño $V = L^3$ y, de la misma manera que hicimos antes, supondremos condiciones de contorno periódicas. Podemos escribir las funciones de onda plana en la forma $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ donde \mathbf{k} debe tomar el valor $\frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3)$ con n_i enteros. Estos estados de onda plana tienen energías.

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m}$$

Podemos calcular el número total de electrones de la siguiente manera

$$N = 2 \sum_{\mathbf{k}} n_F(\beta(E - \mu)) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} n_F(\beta(E - \mu))$$

En general usaremos este tipo de ecuación conociendo el número de electrones en el metal y así poder calcular el potencial químico en función de la temperatura. A temperatura cero el factor de Fermi se transforma en una función escalón y el potencial químico es el valor de la energía que separa los estados ocupados de los desocupados. Llamaremos a esta energía la *energía de Fermi* E_F .

Los estados que están ocupados a $T = 0$ forman lo que se conoce como el *mar de Fermi*. A partir de la energía de Fermi podemos definir el k_F como

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

1.8 Teoría de Sommerfeld de los metales

También puede ser útil definir una temperatura de Fermi $T_F = E_F/k_B$ y la velocidad de Fermi $v_F = \hbar k_F/m$

Con estas definiciones podemos calcular el número de electrones en el metal

$$\frac{N}{V} = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \theta(E_F - \epsilon(\mathbf{k})) = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int^{|k| < k_F} d\mathbf{k} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right)$$

Muchas veces es conveniente realizar estas integrales en energía en vez de integrar en cuasimomentos. Para esto despejamos k de la energía

$$k = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}$$

y el diferencial queda en la forma

$$dk = \sqrt{\frac{m}{2\epsilon\hbar^2}} d\epsilon$$

Con esto podemos reescribir la integral para la densidad de electrones como

$$\frac{N}{V} = \int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) n_F(\beta(\epsilon - \mu))$$

de la misma manera, la energía por unidad de volumen puede escribirse como

$$\frac{E}{V} = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \epsilon(k) n_F(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu)) = 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty 4\pi k^2 dk \epsilon(k) n_F(\beta(\epsilon(k) - \mu))$$

$$\frac{E}{V} = \int_0^\infty g(\epsilon) \epsilon d\epsilon n_F(\beta(\epsilon - \mu))$$

donde la densidad de estados esta dada por

$$g(\epsilon) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{\epsilon}$$

La cantidad $g(\epsilon)d\epsilon$ representa la cantidad de estados con energía entre ϵ y $\epsilon + d\epsilon$. A la función $g(\epsilon)$ se la conoce como la *densidad de estados* por unidad de volumen.

Notemos que la expresión para la densidad de electrones puede considerarse como la definición del potencial químico en función de la densidad de electrones en el sistema y la temperatura.

Modelos en sólidos

Una vez que con esta ecuación fijamos el potencial químico, podemos usar la integral para la energía. Luego de calculada la energía podemos derivar con respecto a la temperatura para obtener el calor específico.

Desafortunadamente, no hay manera de hacer este cálculo analíticamente. Sin embargo, como la temperatura de Fermi de los metales está muy por arriba de la temperatura ambiente es razonable pensar que la función de Fermi solo se apartará levemente de la función escalón. Este fué el cálculo que realizó Sommerfeld y se deja como ejercicio práctico.¹⁰

¹⁰El lector puede consultar el libro de Ashcroft[3].

1.9 Partícula en una caja

Vamos a usar un modelo simple pero exitoso para el átomo de hidrógeno, esto es, lo modelaremos como una caja de tamaño L para un electrón. Aquí, para hacer las cosas mas simples estudiaremos el caso unidimensional, pero ustedes pueden imaginar fácilmente la extensión a 3D.

La energía de un solo electrón en una caja de tamaño L es

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

Ahora supongamos que tenemos dos de estos átomos y los acercamos uno al otro. Si estos átomos comparten un electrón, entonces los átomos ahora se pueden deslocalizar y moverse a lo largo de los dos átomos, por lo tanto, ahora el electrón está en una caja de tamaño $2L$ y su energía será

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2m(2L)^2}$$

que es una energía menor a la que tenía antes. Es decir, que el electrón al deslocalizarse se encuentra en un estado de menor energía.

Esta reducción de energía que ocurre al deslocalizar el electrón es en parte lo que logra formar algunos de los enlaces químicos. Este nuevo estado fundamental se conoce como *bonding orbital*.

Si acercamos dos átomos que poseen un solo electrón cada uno (es decir, son átomos de hidrógeno), entonces cuando se unen para formar un orbital de menor energía (lo que denominaremos *enlace*), ambos electrones pueden ocupar este mismo orbital ya que el electrón puede tener dos estados de espín diferentes. Sin embargo, esta reducción de la energía deberá competir contra la energía debida a la repulsión Coulombiana de los dos núcleos, y la repulsión de ambos electrones entre sí. Sin embargo no realizaremos este cálculo aquí ya que es complejo.

Pero, ¿cómo cambiará la situación si en vez de dos átomos de hidrógeno comenzamos con dos átomos de helio donde cada átomo tiene dos electrones?

En este caso, cuando los dos átomos se unan, no habrá suficientes niveles en el estado fundamental y dos de los cuatro electrones deberán ocupar el primer orbital excitado. Estos estados excitados tienen la misma energía que el orbital del estado fundamental original (ya que el factor 2 del segundo nivel se compensa con el 2 del $2L$) Como estos electrones no obtienen energía cuando los dos átomos se juntan, estos orbitales se conocen como *antibonding orbitals*.

Modelos en sólidos

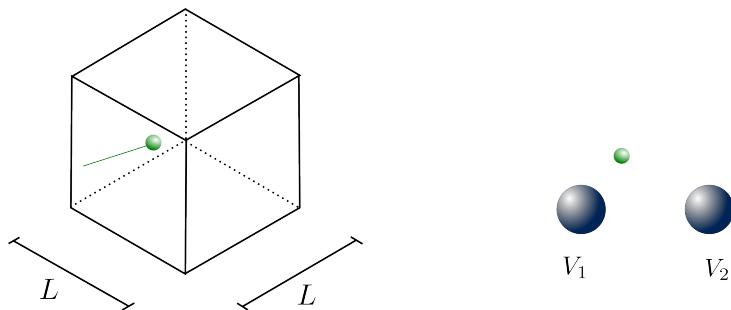


Figura 1.12: Esquema del movimiento de los electrones en la aproximación de *tight-binding*.

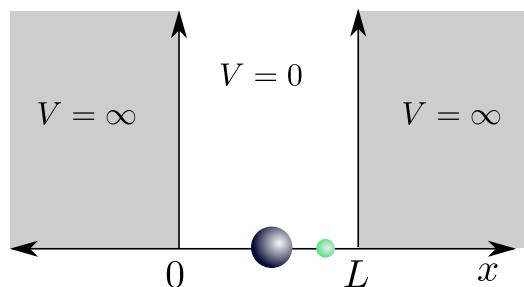


Figura 1.13: Esquema del movimiento de los electrones en la aproximación de *tight-binding*

1.10. Orbitales moleculares (Tight binding)

Escribamos un Hamiltoniano para los dos átomos de hidrógeno de los que hablamos anteriormente. Dado que los núcleos son pesados en comparación con los electrones, no es descabellado suponer que las posiciones de los núcleos no cambiarán mucho en comparación con los electrones. Supondremos entonces que los núcleos se encuentran en reposo y resolveremos la ecuación de Schroedinger para los electrones como función de la distancia entre los núcleos. Esta suposición de los núcleos fijos se conoce como la aproximación de “Born-Oppenheimer”. Nuestro objetivo es calcular la energía del sistema como función de la distancia entre los núcleos.

El problema más sencillo que podemos encarar es la de un electrón en presencia de dos nucleos positivos idénticos.

$$H = K + V_1 + V_2$$

Donde el término de energía cinética del electrón está dado por

1.10 Orbitales moleculares (Tight binding)

$$K = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

y la interacción Coulombiana entre el electrón con posición \mathbf{r} y el núcleo i con posición \mathbf{R}_i está dada por

$$V_i = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}$$

Aunque podríamos resolver este problema de un electrón exactamente, intentaremos resolverlo de manera variacional. Es decir, propondremos una solución de la forma

$$|\psi\rangle = \phi_1|1\rangle + \phi_2|2\rangle$$

donde los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$ son lo que se conoce como “orbitales atómicos” en indican que el electrón se encuentra en el estado fundamental del átomo 1 o 2 respectivamente.

Con el estado $|\psi\rangle$ estamos proponiendo que el electrón se encuentra en una combinación lineal de orbitales atómicos. Al tomar los orbitales como el estado fundamental de cada átomo tendremos que

$$(K + V_1)|1\rangle = \epsilon_0|1\rangle \quad (1.31)$$

$$(K + V_2)|2\rangle = \epsilon_0|2\rangle \quad (1.32)$$

Supondremos que los dos orbitales son ortonormales.

$$\langle i|j\rangle = \delta_{i,j}$$

Buscamos autoestados del Hamiltoniano $H = K + V_1 + V_2$

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

y es fácil mostrar (hacerlo como ejercicio) que esto es equivalente a

$$\sum_i H_{i,j} \phi_j = E \phi_i$$

donde $H_{i,j} = \langle i|H|j\rangle$ son los elementos de una matriz de 2x2 de la forma

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 + V_{12} & -t \\ -t^* & \epsilon_0 + V_{12} \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

donde $V_{12} = \langle 1|V_2|1\rangle = \langle 2|V_1|2\rangle$ y $t = -\langle 1|V_1|2\rangle = \langle 1|V_2|2\rangle$

Modelos en sólidos

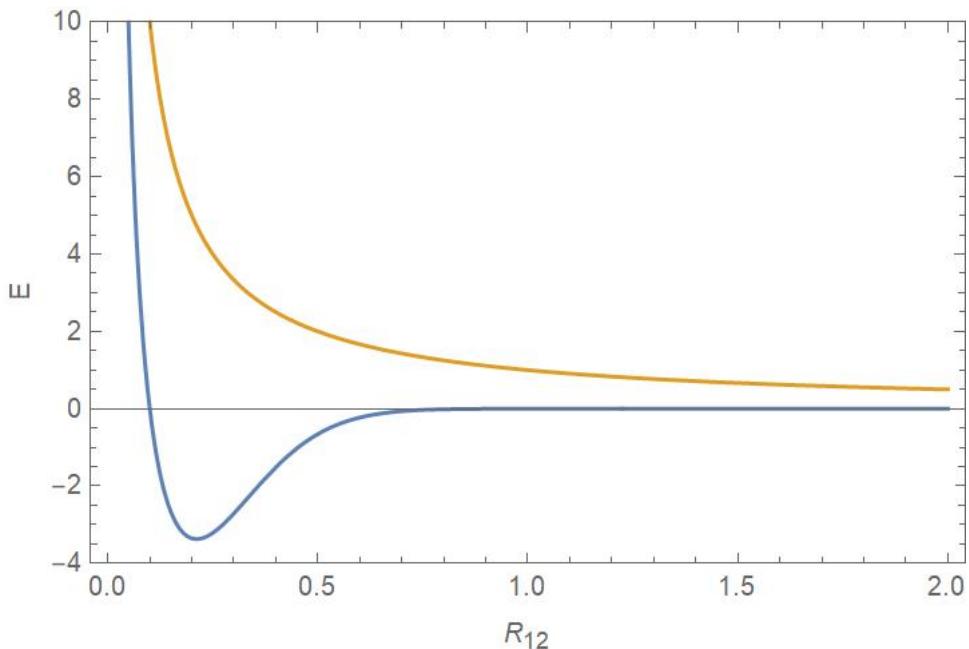


Figura 1.14: Energías de los orbitales

es el potencial Coulombiano que siente un electrón en el orbital $|1\rangle$ generado por el nucleo 2.

La interpretación del Hamiltoniano es que los orbitales $|1\rangle$ y $|2\rangle$ tienen energías ϵ_0 que es incrementada por la presencia del otro núcleo. Además, el electrón puede “saltar” de un orbital al otro y a este proceso tiene una energía t asociado al elemento fuera de diagonal.

Si pensamos en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, si la matriz del Hamiltoniano fuera diagonal una función de onda que comenzó en orbital $|1\rangle$ permanecería en ese orbital todo el tiempo sin ninguna probabilidad de saltar al otro orbital. Sin embargo, con el término fuera de diagonal, la función de onda dependiente del tiempo puede oscilar entre los dos orbitales con probabilidad t .

Para simplificar suponemos que $t > 0$ (el caso $t < 0$ es análogo y solo deben ajustarse los signos correspondientes). Diagonalizando el Hamiltoniano obtenemos

$$E\pm = \epsilon_0 + V_{12} \pm t$$

Al estado de mínima energía se lo denomina *bonding orbital*, mientras que el estado de energía superior se lo llama *anti-bonding orbital*.

1.11 Modelo de *Tight-binding* en una red periódica

Las autofunciones correspondientes tienen la forma

$$\psi_{bonding} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2) \quad (1.34)$$

$$\psi_{anti-bonding} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2) \quad (1.35)$$

A medida que los núcleos se acercan, el término de *hopping* t aumenta, y la energía de los orbitales cambia dándonos un diagrama similar al de la figura siguiente.

Noten que la energía diverge a medida que los núcleos se juntan (como debe ser con la energía de Coulomb entre los núcleos). Esto da una energía mínima cuando los núcleos se encuentran a una distancia de equilibrio.

1.11. Modelo de *Tight-binding* en una red periódica

Ahora vamos a generalizar lo que hicimos antes considerando una cadena de orbitales moleculares para representar los orbitales en un sólido macroscópico¹¹.

En este caso consideraremos un solo orbital por átomo. Al orbital correspondiente al átomo n lo denotaremos por $|n\rangle$. Para poder trabajar con un sistema con simetría de traslación impondremos condiciones de contorno periódicas. También asumiremos que los orbitales son ortogonales unos con otros.

$$\langle n|m \rangle = \delta_{n,m}$$

y como antes propondremos una función de onda que sea combinación lineal de los orbitales de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle$$

y de la misma manera que para el caso de dos átomos obtenemos que la ecuación de autovalores puede escribirse como

$$\sum_m H_{n,m} \phi_m = E \phi_n$$

¹¹En este caso consideraremos un modelo unidimensional por simplicidad, pero la cuenta se generaliza sin problemas más dimensiones.

Modelos en sólidos



Figura 1.15: Esquema del movimiento de los electrones en la aproximación de *tight-binding*

Como antes esta ecuación es en realidad una aproximación variacional. Con esta ecuación no estamos encontrando el estado fundamental exacto sino el mejor estado posible que se pueda escribir como combinación lineal de los orbitales que hemos puesto en el modelo.

Se puede mejorar la aproximación variacional agrandando el espacio de Hilbert al considerar más orbitales en el modelo.

Por ejemplo, en lugar de tener solo un orbital en un dado sitio, podríamos considerar muchos $|n_{\alpha,i}\rangle$ donde α va de 1 a algún número l (l es la cantidad de orbitales que estamos considerando). A medida que aumenta l el enfoque se vuelve cada vez más preciso y, finalmente, es esencialmente exacto.

Nosotros usaremos por ahora la aproximación de tener un solo orbital por sitio. Escribiremos el Hamiltoniano como

$$H = K + \sum_j V_j$$

donde $K = \frac{p^2}{2m}$ es la energía cinética y V_j representa al término de interacción Coulombiana del electrón con el núcleo situado en el sitio j . Esta interacción es de la forma $V_j = V(r - r_j)$, donde r es la posición de electrón y r_j es la posición del j -esimo núcleo. Con esto tenemos que

$$H|m\rangle = (K + V_m)|m\rangle + \sum_{j \neq m} V_j|m\rangle$$

El primer término corresponde a la energía de un electrón tendría si hubiera un solo núcleo, es decir que podemos escribir

$$(K + V_m)|m\rangle = \epsilon_0|m\rangle$$

donde interpretaremos a ϵ_0 como la energía de un electrón en el núcleo m en ausencia de otros núcleos. Podemos escribir entonces

$$\langle n|H|m\rangle = \epsilon_0 \delta_{n,m} + \sum_{j \neq m} \langle n|V_j|m\rangle$$

El segundo término del lado derecho esta asociado con la energía correspondiente al proceso de un electrón que se encontraba en el orbital del sitio

1.11 Modelo de Tight-binding en una red periódica

m efectúe una transición al orbital se sitio n mediado por la interacción Coulombiana con los núcleos que forman la cadena. Supondremos que esta transición o **salto** solo es posible si los sitios están lo suficientemente cerca. El modelo más simple es suponer que solo puede haber saltos entre primeros vecinos por lo cual escribiremos los elementos de matriz como

$$\sum_{j \neq m} \langle n | V_j | m \rangle = \begin{cases} V_0 & n = m \\ -t & n = m \pm 1 \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (1.36)$$

Si llamamos $\epsilon = \epsilon_0 + V_0$ podemos escribir los elementos de matriz del Hamiltoniano como

$$H_{n,m} = \epsilon \delta_{n,m} - t(\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1}). \quad (1.37)$$

Notemos que esto nos dice que la representación matricial del Hamiltoniano es una matriz tri-diagonal. Numéricamente, este tipo de matrices es mas simple de diagonalizar. Nosotros encontraremos los autovalores analíticamente.

Para encontrar la solución a la ecuación de autovalores procederemos de forma similar a lo que hicimos para el caso de las vibraciones de una cadena. Primero proponemos una solución que tenga la invarianza traslacional de la cadena. Propongamos algo de la forma

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikna}$$

Donde el factor $\frac{1}{\sqrt{N}}$ es solo una normalización conveniente. Igual que para el caso de las vibraciones es obvio que si cambiamos k por $k + 2\pi/a$ obtenemos la misma solución y al imponer condiciones de contorno periódicas obtenemos que los valores permitidos para el cuasimomento están cuantizados en unidades de $2\pi/L$ (donde $L = Na$)

Reemplazando nuestra propuesta en la ecuación de Schrodinger $\sum_m H_{n,m} \phi_m = E \phi_n$ tenemos que

$$\begin{aligned} E \phi_n &= \sum_m H_{n,m} \phi_m = \sum_m (\epsilon \delta_{n,m} - t(\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1})) \phi_m \\ E \phi_n &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\epsilon e^{-ikna} - t(e^{-ik(n-1)a} + e^{-ik(n+1)a}) \right) \\ E \phi_n &= \left(\epsilon - t(e^{ika} + e^{-ika}) \right) \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}} \\ E \phi_n &= (\epsilon - 2t \cos(ka)) \phi_n \end{aligned} \quad (1.38)$$

Modelos en sólidos

Luego

$$E = \epsilon - 2t \cos(ka)$$

Esta relación de dispersión

A diferencia del caso de electrones libres, la dispersión de electrones en una red tiene una energía máxima y energía mínima. Los electrones solo pueden tener energías dentro de una determinada banda de energía. La diferencia de energía desde la parte inferior de la banda hasta la parte superior se conoce como *ancho de banda*.

El ancho de banda (que en este modelo es $4|t|$) depende de la magnitud de la constante de *hopping* t , y esta depende de la distancia entre los núcleos.

Cerca del mínimo de la banda, podemos hacer un desarrollo de Taylor (alrededor de $k = 0$) y obtener

$$E(k) = cte + ta^2 k^2$$

Es decir, la relación de dispersión es aproximadamente parabólica de forma similar a lo que tenemos para electrones libres.

$$E_{libre} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

De esta manera se puede, por analogía con el caso libre, definir una masa efectiva para los electrones de forma que

$$ta^2 k^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{eff}}$$

Obtenemos entonces

$$m_{eff} = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$$

En otras palabras, la masa efectiva m_{eff} se define de tal manera que la relación de dispersión alrededor del mínimo de la banda es exactamente como la dispersión de partículas libres de masa m_{eff} . Sin embargo, es importante recordar que esta masa efectiva no tiene nada que ver con la masa real del electrón, sino que depende de la probabilidad de salto t .

Ahora imaginamos que nuestro *tight-binding* está compuesto de átomos y cada átomo aporta un electrón a la banda. Como hay N posibles estados en la banda, y los electrones son fermiones, hay dos posibles estados de espín para un electrón en cada k , entonces solo llenaremos la banda hasta la mitad. Los estados ocupados están ocupados tanto por espines *up* como espines *down*.

1.11 Modelo de Tight-binding en una red periódica

Los puntos donde se encuentran los dos estados ocupados de mayor energía constituyen la superficie de Fermi¹².

Si se aplica un pequeño campo eléctrico al sistema, solo nos cuesta una pequeña cantidad de energía desplazar la superficie de Fermi, ocupando unos pocos estados k que se mueven hacia la derecha y despoblando algunos estados k que se mueven hacia la izquierda. En otras palabras, el estado del sistema responde cambiando un poco y se induce una corriente. Como tal, este sistema es un conductor eléctrico.

¹²Se suele utilizar el nombre *superficie* de Fermi en cualquier dimensión aunque claramente en este caso no es una superficie, sino solo dos puntos. En dos dimensiones tendremos una curva y en tres tendremos una superficie.

Capítulo 2

Estructura cristalina de los sólidos

En el capítulo anterior estudiamos algunas propiedades de una estructura periódica en una dimensión como la de la figura 2.1. Consideremos por el momento una cadena en una dimensión, donde la posición de cada átomo puede escribirse como $r_n = na$ con n un número entero. Vimos anteriormente que dos puntos en el espacio recíproco (espacio k) eran equivalentes si $k_1 = k_2 + G_m$ donde $G_m = 2\pi m/a$, con m un número entero. Los puntos G_m forman lo que se conoce como la red recíproca.

Queremos ahora ir un poco más allá y estudiar sólidos cristalinos en 3D. Para esto necesitamos establecer un lenguaje que nos ayude a describir estructuras en dos y tres dimensiones de manera inteligente y sobre todo de manera estandarizada para poder ponernos de acuerdo en lo que estamos describiendo y poder comparar con medidas experimentales. Para poder lograr esto, dedicaremos buena parte de esta sección para presentar una lista de definiciones que debemos aprender para poder estudiar estructuras de sólidos realistas.

2.1. Celda unidad y redes de Bravais

Un cristal ideal está formado por un arreglo periódico infinito de grupos de átomos. A cada uno de esos grupos que se repiten periódicamente para



Figura 2.1: Red periódica en una dimensión.

2.1 Celda unidad y redes de Bravais

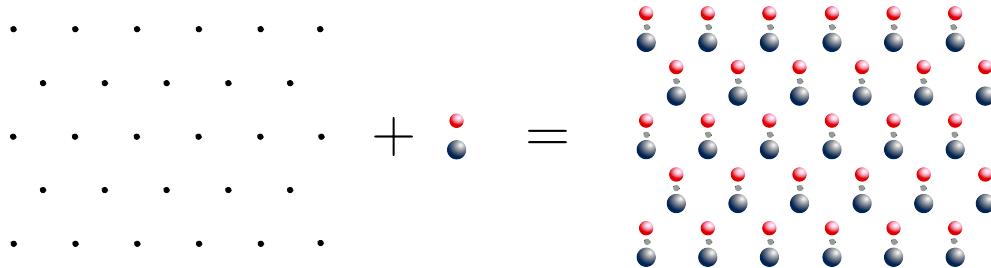


Figura 2.2: A partir de una red de Bravais triangular se obtiene una red hexagonal con dos sitios por celda.

formar el cristal lo llamaremos celda, y al conjunto de puntos del espacio donde se colocan las celdas las llamaremos red. Por ejemplo, en la figura 2.2 se muestra esquemáticamente como obtener una red hexagonal a partir de una red triangular con dos sitios por celda. Una definición importante que usaremos mucho es justamente la de red de Bravais.

Definición: Red de Bravais *Llamaremos red de Bravais a un conjunto infinito de puntos que se obtiene como combinación lineal de vectores linealmente independientes con coeficientes enteros. A estos vectores los llamaremos vectores primitivos*

Por ejemplo, cualquier punto de una red de Bravais en 2 dimensiones puede escribirse como

$$\mathbf{r}_{n_1, n_2} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2,$$

con $n_i \in \mathbb{Z}$ y \mathbf{a}_i vectores linealmente independientes en \mathbb{R}^2 . De la misma manera, en \mathbb{R}^3 podemos escribir

$$\mathbf{r}_{n_1, n_2, n_3} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Hasta ahora trabajamos con cadenas de sitios que constituyen redes en una dimensión donde la definición se cumple trivialmente ya que escribíamos que $r_n = na$.

En dos y tres dimensiones la elección de los vectores primitivos que generan la red no es única. Ver figura 2.3.

En una red de Bravais, cada punto tiene exactamente el mismo entorno que el resto de los puntos. Esta propiedad suele ser usada para identificar cuando un conjunto de puntos constituye una red de Bravais. Debemos tener cuidado al estudiar arreglos periódicos ya que no todos los arreglos periódicos

Estructura cristalina de los sólidos

de puntos constituyen una red de Bravais. La red hexagonal por ejemplo, no lo es, ya que no podemos generar todos los puntos como combinación lineal de dos vectores. Equivalentemente, si miramos el entorno de cada sitio de la red vemos que hay dos subconjuntos de puntos, cada uno de los cuales tiene un entorno diferente. Podemos pensar a la red hexagonal como dos redes de Bravais interpenetradas (Ver figura 2.2).

Para poder describir redes más complejas, como la red hexagonal tenemos que definir el concepto de **celda unidad**.

Definición: Celda Unidad *Una celda unidad o celda unitaria es una estructura o motivo que al ser repetido construye la estructura periódica completa.*

Así como ocurre con los vectores primitivos, la elección de la celda unidad tampoco es única. Tenemos libertad de elegir diferentes celdas para construir un mismo cristal, pero dentro de esa variedad de diferentes celdas hay algunas elecciones que son más importantes a la hora de describir un sólido.

Definición: Celda primitiva *Llamaremos celda primitiva a una celda unidad que contiene la menor cantidad de sitios posible en ella.*

Es decir una celda primitiva es la celda unidad de menor tamaño que podemos tomar y que aun sirva para construir el cristal. Sin embargo, a veces es útil definir una celda unitaria que no es primitiva para que sea más simple trabajar con las expresiones matemáticas. Esto se conoce como una **celda unidad convencional**. Casi siempre estas celdas convencionales se eligen para tener ejes ortogonales. En la figura 2.3 se muestran algunos ejemplos de posibles celdas unitarias en dos dimensiones. En esta figura, la celda unitaria convencional (arriba a la izquierda) se elige para tener ejes ortogonales.

En la figura hay una celda a la cual llamamos celda de Wigner-Seitz[15]. Esta es una celda muy útil y es además una celda primitiva.

Definición: Celda de Wigner-Seitz *Dado un punto de la red, el conjunto de todos los puntos en el espacio que están más cerca de ese dado punto que de cualquier otro punto de la red constituye la celda Wigner-Seitz.*

2.1 Celda unidad y redes de Bravais

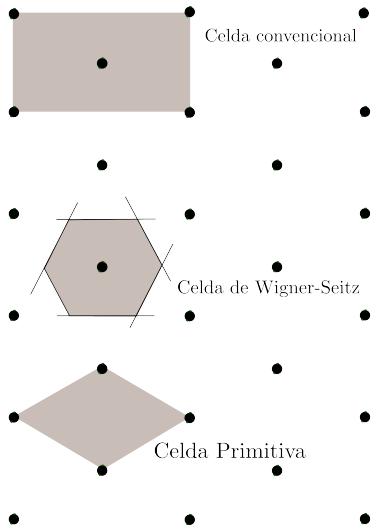


Figura 2.3: Diferentes elecciones de celdas unitarias para la misma red.

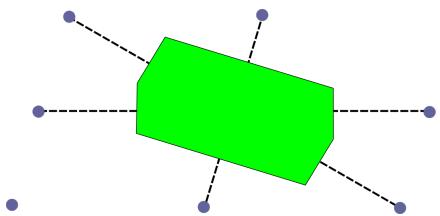


Figura 2.4: Construcción de una celda de Wigner-Seitz.

Hay una forma simple para construir una celda de Wigner-Seitz. Primero elegimos un punto de la red y dibujamos líneas rectas entre este punto y todos los vecinos cercanos. Después dibujamos bisectrices perpendiculares de todas estas líneas. La región que queda encerrada por las bisectrices perpendiculares constituyen la celda de Wigner-Seitz. Una propiedad importante es que toda celda de Wigner-Seitz constituye una celda unitaria primitiva.[3]

En la figura 2.4 mostramos un ejemplo de la construcción de Wigner-Seitz para un diseño bidimensional. Una construcción similar se puede realizar en tres dimensiones, en cuyo caso uno debe construir planos de bisección perpendiculares a los segmentos que unen cada sitio.

La descripción de los objetos dentro de la celda unitaria en términos de algún punto de referencia en la celda unitaria es conocido como una “base”. Esta definición es importante ya que generalmente debemos describir sólidos cuya estructura no se corresponde con una red de Bravais. Esto generalmente es consecuencia de la estructura interna de la celda unidad.

En la figura 2.5 mostramos una estructura periódica en dos dimensiones

Estructura cristalina de los sólidos

compuesta por dos tipos de átomos. A la derecha mostramos una celda unitaria primitiva con la posición de los átomos dada con respecto al punto de referencia de la celda unitaria que se considera la esquina inferior izquierda.

Podemos describir en general la posición de los sitios de una red con base de la siguiente manera:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_{celda} + \mathbf{r}_{base}$$

donde $\mathbf{r}_{cell} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$ es la posición del punto de referencia de la celda unidad donde se encuentra el átomo que queremos describir y \mathbf{r}_{base} es la posición del átomo dentro de la celda con respecto al punto de referencia.

Por ejemplo, para el caso de la red hexagonal de la figura 2.6 tendremos que los puntos de referencia de cada celda (pequeños puntos negros) forman una red triangular, para la cual podemos tomar los vectores primitivos como

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} \hat{i} + a \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} \quad (2.1)$$

$$\mathbf{a}_2 = a \hat{i} \quad (2.2)$$

2.2. Redes en tres dimensiones

La descripción de redes se generaliza trivialmente de dos a tres dimensiones, ahora usando por supuesto tres vectores primitivos. La red más simple en tres dimensiones es la red cúbica simple que se muestra en la figura 2.7.

En este caso, la celda unidad primitiva se puede tomar convenientemente como un cubo simple, que incluye 1/8 de cada una de sus ocho esquinas.

Estructuras levemente más complejas que la red cúbica simple son las redes tetragonal y la red ortorombicas (ver figura 2.8) donde los ejes permanecen perpendiculares, pero los vectores primitivos pueden ser de diferentes

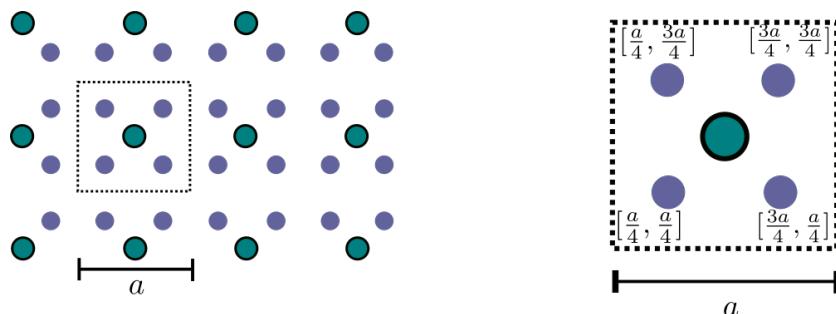


Figura 2.5: Red con motivo o base.

2.2 Redes en tres dimensiones

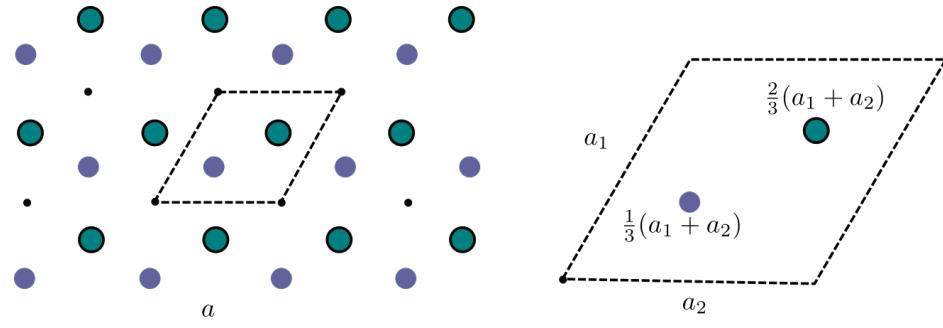


Figura 2.6: La red hexagonal y su celda unitaria.

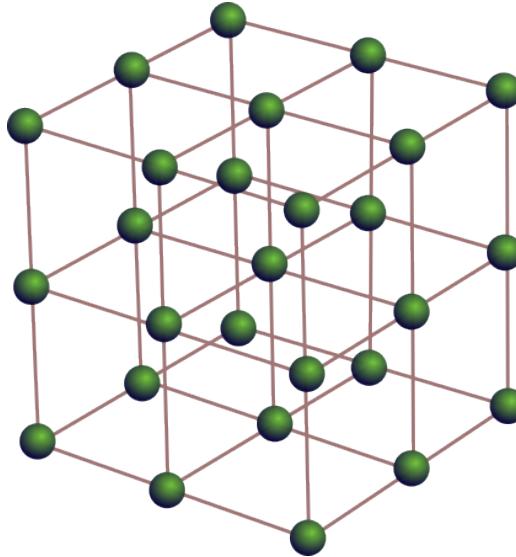


Figura 2.7: Red cúbica.

longitudes. La celda unidad ortorrómbica tiene tres vectores de longitudes diferentes, mientras que la celda unitaria tetragonal tiene dos vectores de igual longitud y uno diferente.

Por convención, para describir una red en 3 dimensiones se usan tres índices enteros

$$[u, v, w] = u \mathbf{a}_1 + v \mathbf{a}_2 + w \mathbf{a}_3$$

Red cúbica centrada en el cuerpo (BCC)

La red cúbica centrada en el cuerpo (bcc) es una red cúbica simple donde hay un sitio adicional en el centro del cubo (a veces esto se conoce como

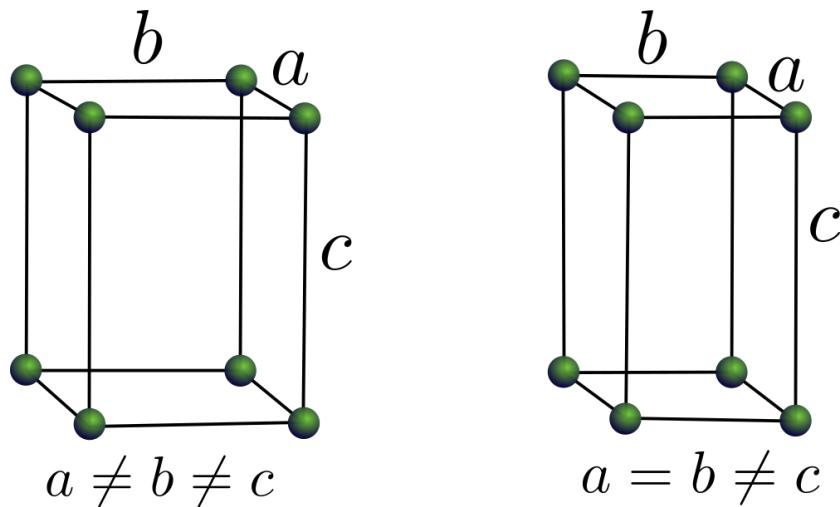
Estructura cristalina de los sólidos

Figura 2.8: Redes tetragonal y ortorómbica

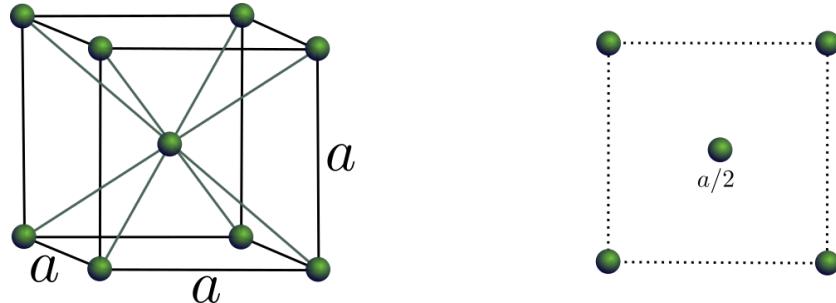


Figura 2.9: Red cúbica centrada en el cuerpo.

cubic-I). La celda unitaria para esta red se muestra en la figura 2.9.

Otra forma de representar esta celda unitaria sin mostrar una figura tridimensional es utilizar una proyección bidimensional de la parte superior de la celda. Esto se conoce como vista en planta de la celda unitaria. Esta vista se muestra a la derecha de la figura 2.9.

En la imagen de la celda unitaria BCC, hay ocho sitios de red en las esquinas de la celda (cada uno de los cuales cuenta como $1/8$ dentro de la celda unidad convencional) y un sitio en el centro de la celda. Por lo tanto, la celda unidad convencional contiene exactamente dos sitios de red.

Una forma conveniente de describir la red bcc, es pensarla como si fuera una red cúbica simple con una base de dos átomos por celda. La red cúbica simple contiene puntos en $[x, y, z]$ donde las tres coordenadas son múltiplos enteros de la constante de red a .

Para obtener la celda unitaria de la BCC tomamos la celda unitaria

2.2 Redes en tres dimensiones

convencional cúbica simple y colocamos un punto adicional en la posición $[a/2, a/2, a/2]$. Por lo tanto, los puntos de la red BCC se pueden describir como

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{\text{vertice}} &= a [n_1, n_2, n_3] \\ \mathbf{r}_{\text{centro}} &= a ([n_1, n_2, n_3] + [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}])\end{aligned}$$

La elección que hicimos de la celda unidad hace parecer que los dos sitios dentro de la celda unidad son dos tipos diferentes de puntos. Sin embargo esto no es así. Todos los puntos en esta red pueden considerarse equivalentes (solo parecen no equivalentes porque hemos elegido un celda unitaria con dos sitios en ella).

Es fácil verificar que si tomamos los vectores primitivos como

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= [a, 0, 0] \\ \mathbf{a}_2 &= [0, a, 0] \\ \mathbf{a}_3 &= [\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}],\end{aligned}$$

cualquier combinación de la forma

$$\mathbf{r} = n_1 \mathbf{r}_1 + n_2 \mathbf{r}_2 + n_3 \mathbf{r}_3$$

con n_1, n_2 y n_3 enteros, es un vector de la red y cualquier vector de la red puede ser escrito de esa manera.

También es fácil convencerse de que el entorno de cada punto de la red es el mismo. Si nos concentramos en el punto en el centro de la celda unitaria, vemos que tiene exactamente 8 vecinos más cercanos en cada una de las diagonales. De la misma forma, cualquiera de los puntos en las esquinas de las celdas tendrá también 8 vecinos más cercanos correspondiente a los puntos en el centro de las 8 celdas unitarias adyacentes. De hecho esto nos dice que cada sitio de la red tiene siempre 8 vecinos. Esto es lo que se denomina **número de coordinación**.

Definición: Número de coordinación

El número de coordinación de una red (que frecuentemente denotaremos z) es el número vecinos más cercanos que tiene cualquier punto de la red.

Estructura cristalina de los sólidos

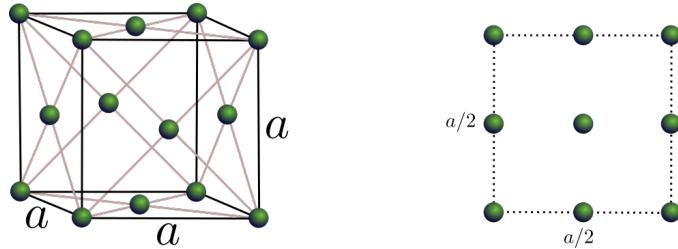


Figura 2.10: Red cúbica centrada en las caras

Para la red BCC, el número de coordinación es $z = 8$. De la misma manera que lo hicimos en dos dimensiones, se puede construir una celda de Wigner-Seitz alrededor de cada punto de la red. La diferencia principal es que ahora en vez de tomar las directrices deberemos trazar los planos perpendiculares a las líneas que unen a un sitio con sus vecinos más cercanos. La celda de Wigner-Seitz para la red BCC se muestra en la siguiente figura. Por supuesto que es más difícil dibujar las celdas en 3D que en 2D de la misma manera que es más difícil graficar funciones en tres variables que en dos.

Red cúbica centrada en las caras (FCC)

La red cúbica centrada en las caras (Face Centered Cubic (FCC)) es una red cúbica simple donde hay un punto adicional en el centro de cada cara del cubo (esto a veces se conoce como cubic-F, “F por face”). La celda unitaria se muestra a la izquierda de la figura 2.10 y a la derecha se muestra una vista en planta de la celda unitaria.

En la celda unitaria FCC, hay ocho sitios de red en las esquinas de la celda (cada uno de los cuales los contamos como si tuvieran $1/8$ dentro de la celda) y un punto en el centro de cada una de las 6 caras (que tomamos como $1/2$ dentro de la celda ya que es compartido por dos celdas).

Por lo tanto, la celda unitaria contiene exactamente cuatro sitios de red. Las posiciones de estos puntos pueden escribirse como

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}_{\text{vertex}} &= a [n_1, n_2, n_3] \\
 \mathbf{r}_{\text{cara}_{XY}} &= a ([n_1, n_2, n_3] + [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0]) \\
 \mathbf{r}_{\text{cara}_{XZ}} &= a ([n_1, n_2, n_3] + [\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}]) \\
 \mathbf{r}_{\text{cara}_{YZ}} &= a ([n_1, n_2, n_3] + [0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}])
 \end{aligned}$$

2.2 Redes en tres dimensiones

Como antes, esta forma de escribir la red hace parecer como si fueran cuatro tipos diferentes de sitios, pero solo es porque hemos elegido una celda unidad con cuatro sitios.

Como antes podemos verificar que es efectivamente una red de Bravais. Si escribimos los vectores de red como

$$\mathbf{a}_1 = [a/2, a/2, 0] \quad (2.3)$$

$$\mathbf{a}_2 = [a/2, 0, a/2] \quad (2.4)$$

$$\mathbf{a}_3 = [0, a/2, a/2] \quad (2.5)$$

cualquier combinación de la forma

$$\mathbf{r} = n_1 \mathbf{r}_1 + n_2 \mathbf{r}_2 + n_3 \mathbf{r}_3$$

con n_1 , n_2 y n_3 enteros, es un vector de la red y cualquier vector de la red puede ser escrito de esa manera.

Además de las redes que vimos hay otros nueve tipos de redes en tres dimensiones. Estos se conocen como los catorce tipos de redes de Bravais.

2.2.1. Red recíproca y zona de Brillouin

Como vimos en secciones anteriores, algunos sistemas se describen de manera más natural en términos del cuasi-momento. A este espacio se lo denomina habitualmente el espacio recíproco. Recordemos algunos resultados de nuestro estudio de sistemas en una dimensión. Tanto en el caso de las vibraciones de una cadena como en el modelo de tight binding consideramos una red simple en una dimensión donde los sitios de la red estaban en las posiciones $r_n = na$, con n un número entero. Por otro lado, recordemos que dos puntos k_1 y k_2 en el espacio de cuasi-momentos son equivalentes entre sí cuando se cumple que $k_1 = k_2 + G_m$, donde $G_m = 2\pi m/a$ con m un número entero. Estos puntos G_m también forman una red, denominada red recíproca.

La razón por la que estos valores de k son equivalentes es porque consideramos ondas de la forma e^{ikna} con n un número entero. Debido a esta forma propuesta para la onda, encontramos que si realizamos el cambio $k \rightarrow k + G_m$ no se modifica el valor de la función de onda ya que

$$e^{i(k+G_m)na} = e^{ikna} e^{iG_m na} = e^{ikna} e^{i\frac{2\pi m}{a}na} = e^{ikna}$$

Luego, para las ondas que hemos estudiado hasta aquí, es equivalente tener cuasi momento k o $k + G_m$.

Generalizando este concepto podemos realizar la siguiente definición

Estructura cristalina de los sólidos

Definición: Red recíproca *Dado un punto de la red real \mathbf{R} , un punto \mathbf{G} será un punto de la red recíproca, si y solo si*

$$e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}} = 1$$

para todo punto \mathbf{R} de la red real.

Construcción de la red recíproca

Para construir la red recíproca, escribamos los puntos de la red real de la forma

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Nos concentraremos por un momento en definir el caso tridimensional, pero el caso en dos dimensiones es análogo. Queremos definir los puntos de la red recíproca en términos de tres vectores linealmente independientes como hacemos para la red real. Nos aseguraremos que cualquier vector de la red recíproca cumpla con la condición

$$e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}} = 1,$$

pidiendo que los vectores que generan la red recíproca cumplan que

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{i,j}, \quad (2.6)$$

donde los vectores \mathbf{a}_i son los que generan la red real, los vectores \mathbf{b}_i son los generadores de la red recíproca y $\delta_{i,j}$ es la delta de Kronecker. Se pueden generar vectores \mathbf{b}_i con estas características directamente a partir de los vectores de la red real en la forma

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (2.8)$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (2.9)$$

Dados estos vectores que cumplen con la ecuación (2.6) podemos escribir un vector arbitrario de la red recíproca como

$$\mathbf{G} = m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2 + m_3 \mathbf{v}_3.$$

2.2 Redes en tres dimensiones

Si calculamos la cantidad $e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}}$ vemos que

$$e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{G}} = e^{i(n_1\mathbf{a}_1+n_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3)\cdot(m_1\mathbf{v}_1+m_2\mathbf{v}_2+m_3\mathbf{v}_3)} \quad (2.10)$$

$$= e^{i2\pi(n_1m_1+n_2m_2+n_3m_3)} \quad (2.11)$$

Para que G sea un punto de la red recíproca, la exponencial anterior debe ser igual a 1 para cualquier punto R de la red real, es decir, para todos los valores enteros de n_1 , n_2 y n_3 . Claramente, esto solo puede ser cierto si m_1 , m_2 y m_3 también son enteros. Esto prueba entonces que la red recíproca es de hecho ¡una red de Bravais!

Índices de Miller

Una forma alternativa de interpretar la red recíproca es en términos de una familia de planos de la red real. Llamaremos plano cristalino a un plano que contenga al menos tres puntos de la red que no sean colineales. De hecho si un plano contiene tres puntos no colineales de la red, entonces contiene infinitos puntos de la misma. Llamaremos familia de planos cristalinos a un conjunto de planos igualmente separados para los cuales se cumple que el conjunto de planos contiene a todos los puntos de la red.

En la figura 2.11 se muestran dos ejemplos de familias de planos en una red. Noten que los planos son paralelos e igualmente espaciados, y cada punto de la red está incluido en exactamente un plano.

Para identificar a las familias de planos cristalinos se hace una correspondencia uno a uno con las direcciones de los vectores de la red recíproca, a las cuales son normales. Además, el espacio entre estos los planos de la red es $d = 2\pi/|\mathbf{G}_{min}|$ donde \mathbf{G}_{min} es el vector de red recíproca de longitud mínima en esta dirección (normal a los planos).

Tomemos un vector del espacio \mathbf{G} recíproco y consideremos el plano definido por

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} = 2\pi n$$

Esto define una familia de planos paralelos que son perpendiculares a \mathbf{G} .

Cualquier punto de la red de Bravais debe pertenecer a alguno de estos planos ya que la definición de vector de la red recíproca nos dice que para cualquier punto de la red de Bravais se cumple necesariamente que

$$e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$$

y por lo tanto debe ser que $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi q$ para algún numero entero q . Sin embargo, puede ocurrir que existan planos de la familia definida por la ecuación $\mathbf{G} \cdot \mathbf{r} = 2\pi n$ que no contengan puntos de la red de Bravais. Si tomamos $\mathbf{G} \parallel \mathbf{r}$ La distancia entre dos planos adyacentes está dada por

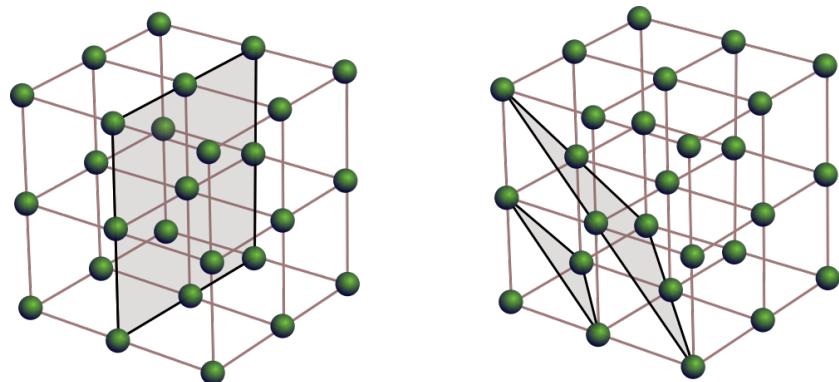
Estructura cristalina de los sólidos

Figura 2.11: Planos Cristalinos: Los planos en la figura de la izquierda corresponden a la dirección $(1,0,0)$ mientras que los de la derecha se corresponden con la dirección $(1,1,1)$

$$d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|}$$

2.3. Electrones en potenciales periódicos

Ya estudiamos brevemente electrones en un sistema periódico cuando estudiábamos el *tight-binding*. En esta sección estudiaremos electrones sometidos a un potencial periódico como el que está presente en una red de núcleos pero usaremos una perspectiva un poco diferente. Consideraremos a los electrones desde una perspectiva ondulatoria y estudiaremos ondas de electrones libres que son levemente perturbadas por el arreglo periódico de los átomos en la red.

Comencemos con electrones libres cuyo Hamiltoniano está dado por

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}.$$

Los autoestados de energía se corresponden con ondas planas $|\mathbf{k}\rangle$ cuyas autoenergías están dadas por

$$\epsilon_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar|\mathbf{k}|^2}{2m}.$$

Ahora, consideremos el caso de un electrón sometido a un potencial periódico sobre la red.

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}),$$

donde el potencial cumple que

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$$

y \mathbf{R} es un vector de la red real (red de Bravais). Si suponemos que el potencial es pequeño podemos intentar corregir perturbativamente la energía. Los elementos de matriz del potencial en la base de ondas planas están dados por

$$\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{L^3} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{R}} \int_{celda} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R})} V(\mathbf{r} + \mathbf{R}),$$

donde la integral del lado derecho de la igualdad se realiza dentro de la celda unidad y la suma es sobre todas las celdas.

$$\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{R}} \int_{celda} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R})} V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.12)$$

$$= \frac{1}{L^3} \left(\sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}} \right) \left(\int_{celda} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \right), \quad (2.13)$$

Estructura cristalina de los sólidos

donde usamos que el potencial es periódico $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$. La suma sobre celdas que está dentro del primer paréntesis es distinta de cero solo si

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{G}.$$

Es decir que este elemento de matriz es cero salvo que $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ sea un vector de la red reciproca. Esto no es más que la conservación del momento cristalino.

Entonces, en un proceso de *scattering* un estado de onda plana solo puede ir a parar a otra onda plana cuyo vector de onda difiera del incidente en un vector de la red reciproca. Podríamos usar este elemento de matriz para calcular la corrección a segundo orden en la energía como

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) + \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle + \sum_{\mathbf{k}'=\mathbf{k}+\mathbf{G}} \frac{|\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2}{\epsilon_0(\mathbf{k}) - \epsilon_0(\mathbf{k}')}. \quad (2.14)$$

Donde la suma se realiza sobre los vectores de la red reciproca no nulos. Lo anterior es correcto si supondremos que estamos en un caso no degenerado (es decir, suponemos que $\epsilon_0(\mathbf{k}) \neq \epsilon_0(\mathbf{k}')$).

Para estudiar que pasa en el caso degenerado busquemos soluciones de la forma

$$\epsilon_0(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}') \quad (2.15)$$

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}. \quad (2.16)$$

Concentrémonos por un momento en el caso 1D. Para una cadena donde los sitios están igualmente espaciados con parámetro de red a , los vectores de la red reciproca están dados por

$$G_n = \frac{2\pi}{a}n.$$

Si consideramos electrones libres cuya energía esté dada por $\epsilon_0(k) \sim k^2$, las únicas posibles soluciones para la ecuación $\epsilon_0(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}')$ corresponden a $k = \pm k'$. Para satisfacer la ecuación $k' = k + G$ con $G \neq 0$ solo podemos tener

$$k = -k' = \frac{\pi}{a}n.$$

Es decir, tendremos un caso degenerado en los niveles de energía correspondientes a los bordes de la zona de Brillouin. Aunque nosotros lo hicimos para el caso en una dimensión, esta es una situación más general que incluye sistemas en más dimensiones. Dado un punto \mathbf{k} en el borde de la zona de Brillouin, generalmente existe otro punto \mathbf{k}' también sobre el borde de la zona que cumple con las dos condiciones (2.15) y (2.16). En dos o más dimensiones generalmente ocurre que este punto no es único.

2.3 Electrones en potenciales periódicos

Cuando ocurre esta degeneración, la corrección (2.14) diverge y debemos usar una teoría de perturbaciones degenerada. Para calcular la corrección en esta teoría debemos primero diagonalizar el Hamiltoniano en el subespacio degenerado y luego tratar el resto de la perturbación. Dicho de otra manera, tomamos estados con la misma energía que se encuentran conectados por un elemento de matriz y los mezclamos.

Tomemos entonces dos ondas planas con vectores de onda $|\mathbf{k}\rangle$ y $|\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle$. Si estos estados tienen la misma energía, entonces debemos diagonalizar los elementos de matriz del Hamiltoniano correspondiente a estos estados primero, tendremos entonces que

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}|H|\mathbf{k}\rangle &= \epsilon_0(\mathbf{k}) \\ \langle \mathbf{k} + \mathbf{G}|H|\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle &= \epsilon_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \\ \langle \mathbf{k}|H|\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle &= V^*(\mathbf{G}) \\ \langle \mathbf{k} + \mathbf{G}|H|\mathbf{k}\rangle &= V(\mathbf{G}).\end{aligned}$$

Donde

$$V(\mathbf{G}) = \langle \mathbf{k} + \mathbf{G}|V|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{L^3} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}).$$

En este subespacio podemos escribir un autovector como

$$|\psi\rangle = a|\mathbf{k}\rangle + b|\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle.$$

Al buscar los autovalores en este subespacio debemos resolver la ecuación

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0(\mathbf{k}) & V^*(\mathbf{G}) \\ V(\mathbf{G}) & \epsilon_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

y el polinomio característico queda en la forma

$$(\epsilon_0(\mathbf{k}) - E)(\epsilon_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}) - E) - |V(\mathbf{G})|^2 = 0.$$

Si \mathbf{k} está en el borde de la zona de Brillouin, $\epsilon_0(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = \epsilon_0(\mathbf{k})$ y tenemos que

$$(\epsilon_0(\mathbf{k}) - E)^2 = |V(\mathbf{G})|^2$$

y por lo tanto

$$E_{\pm} = \epsilon_0(\mathbf{k}) \pm |V(\mathbf{G})|.$$

Es decir, el estado que antes era doblemente degenerado ahora se convierte en dos estados de energía diferente. Se ha abierto un *gap* por la presencia de el potencial periódico.

Estructura cristalina de los sólidos

Ahora veamos que pasa si consideramos estados que no están justo en el borde de la zona de Brillouin, pero están muy cercanos a ella de manera que las energías $\epsilon_0(\mathbf{k})$ y $\epsilon_0(\mathbf{k} + \mathbf{G})$ son casi iguales (cuasi degenerado).

Para simplificar consideremos el caso unidimensional, aunque la mayor parte de los argumentos pueden aplicarse en mayores dimensiones. Consideremos el borde de la zona $k = \pm n\pi/a$ separados por vectores de la red reciproca $G = 2\pi n/a$. Ahora consideremos una onda plana cerca del borde, digamos con vectores de onda $k = n\pi/a + \delta$. Este vector de onda se conecta mediante un proceso de *scattering* generado por el potencial periódico con el vector de onda $k = -n\pi/a + \delta$ mediante el vector de la red reciproca $G = 2\pi n/a$. Tendremos entonces para la energía

$$\begin{aligned}\epsilon_0(n\pi/a + \delta) &= \frac{\hbar^2}{2m}((n\pi/a)^2 + 2n\pi\delta/a + \delta^2) \\ \epsilon_0(-n\pi/a + \delta) &= \frac{\hbar^2}{2m}((n\pi/a)^2 - 2n\pi\delta/a + \delta^2).\end{aligned}$$

La ecuación de autovalores puede escribirse como

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}((n\pi/a)^2 + \delta^2) - E \right)^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2m}2n\pi\delta/a \right)^2 + |V(G)|^2.$$

De esta ecuación podemos despejar los autovalores

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m}((n\pi/a)^2 + \delta^2) \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m}2n\pi\delta/a \right)^2 + |V(G)|^2}.$$

Si suponemos que δ es pequeño, podemos desarrollar la raíz cuadrada a segundo orden alrededor de $\delta = 0$ y obtener

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m}((n\pi/a)^2 + \delta^2) \pm |V(G)| + \frac{\hbar^2\delta^2}{2m} \left(1 \pm \frac{\hbar^2(n\pi/a)^2}{m|V(G)|} \right).$$

Por lo tanto vemos que cerca del borde de la zona de Brillouin, el potencial periódico abre un gap y además la dispersión cerca del borde es cuadrática.

La forma de las bandas que resulta de la interacción con un potencial periódico puede verse en la figura 2.12

La estructura general que encontramos es muy parecida a la que esperábamos del modelo de *tight-binding*. Como se ve en la figura hay bandas de energía donde hay estados permitidos, y hay espacios entre las bandas, donde no hay autoestados de energía.

2.3 Electrones en potenciales periódicos

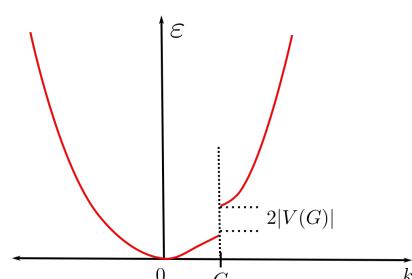
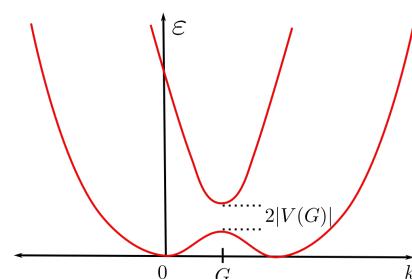
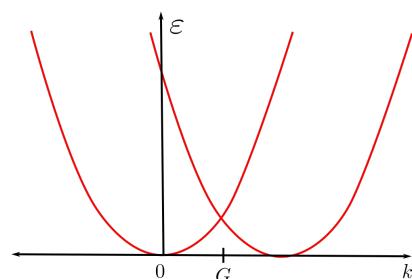
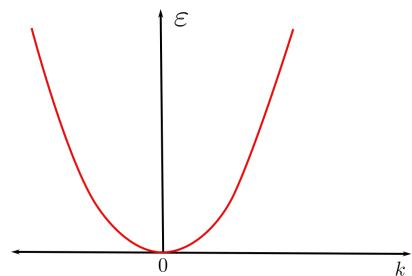


Figura 2.12: Bandas de energía.

Estructura cristalina de los sólidos

2.3.1. Teorema de Bloch

En el estudio anterior, estudiamos a los electrones sometidos a un potencial periódico desde la perspectiva de ondas planas que están débilmente perturbados por un potencial periódico. Pero en materiales reales, el potencial puede ser muy fuerte y de esta manera la teoría de perturbación puede no ser válida.

Si embargo aún en el régimen no perturbativo los resultados anteriores son válidos. Lo primero que debemos tener en cuenta es que el impulso de la onda plana no es una cantidad conservada, sino que lo que se conserva es el impulso cristalino. No importa cuán fuerte sea el potencial periódico, siempre que sea periódico, el momento cristalino es una cantidad conservada.

Este importante resultado fue descubierto por primera vez por Felix Bloch en 1928, y es lo que se conoce como el teorema de Bloch[5, 15, 3].

Definición: Teorema de Bloch: *Un electrón en un potencial periódico tiene autoestados de la ecuación de Schrödinger de la forma:*

$$\psi_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r})$$

donde $u_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r})$ es periódica en la celda unidad y el momento \mathbf{k} puede ser tomado en la primer zona de Brillouin.

La función periódica $u_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r})$ se conoce como función de Bloch. El índice α contempla el hecho de que al trabajar en el esquema de zona reducida tendremos más de un estado correspondiente a cada valor de k .

Como $u_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r})$ es periódica, podemos escribirla como una suma sobre vectores de la red reciproca.

$$u_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \tilde{u}_{\mathbf{G},\mathbf{k},\alpha} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}},$$

de esta manera nos aseguramos que $u_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, donde \mathbf{R} es un vector de la red real. Luego, la función de onda completa puede escribirse como

$$\psi_{\mathbf{k},\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \tilde{u}_{\mathbf{G},\mathbf{k},\alpha} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}.$$

De esta expresión vemos que una forma alternativa de expresar el teorema de Bloch es decir que podemos escribir cada autoestado como una suma sobre ondas planas cuyos momentos \mathbf{k} difieren en un vector de la red reciproca. La razón por la cual el teorema de Bloch es válido es que los elementos de

2.3 Electrones en potenciales periódicos

matriz del potencial son cero a menos que \mathbf{k} y \mathbf{k}' difieran en un vector de la red reciproca.

En resumen, el teorema de Bloch nos dice que aunque el potencial que actúa sobre los electrones sea fuerte, ¡ellos todavía se comportan casi como si fueran libres! Formando estados de onda plana modulados por la función periódica de Bloch y el hecho de que el momento es ahora el momento cristalino.

Capítulo 3

Segunda cuantificación

Queremos considerar ahora el caso de muchas partículas cuánticas. Normalmente este es un problema que sabemos muy bien cómo tratar en mecánica cuántica: si conocemos el espacio de Hilbert \mathcal{H}_1 de una sola partícula y una base completa $|\alpha\rangle$ ortogonal,

$$\langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1, \quad (3.1)$$

sabemos que para N partículas tenemos un espacio de Hilbert que se construye como el producto directo (tensorial) de los espacios individuales:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \quad (3.2)$$

y que una base completa de tal espacio es simplemente

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \equiv |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \cdots |\alpha_N\rangle, \quad (3.3)$$

el estado factorizado de N partículas independientes. Aquí utilizamos la notación $|\cdots\rangle$ para indicar que el estado no posee ninguna simetría frente al intercambio de partículas.

Debemos resolver entonces una ecuación de Schrödinger con una función de onda que depende de las N variables \mathbf{r}_i correspondientes a las N partículas,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N). \quad (3.4)$$

Aunque este es un programa perfectamente aceptable cuando el número de partículas es pequeño, es particularmente inadecuado para abordar el caso de muchos fermiones o bosones cuánticos interactuantes, por varias razones.

La primera razón tiene que ver con la indistinguibilidad de las partículas. Incluso si son libres entre ellas, no todos los estados son aceptables para

las funciones de onda de N partículas indistinguibles, para las que sólo se permiten las funciones de onda totalmente simétricas (para bosones) o antisimétricas (para fermiones). Esto significa que incluso para partículas que no interactúan no podemos usar directamente estados producto de la forma (3.3) y debemos lidiar con sus versiones simetrizadas o antisimetrizadas,

$$|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N!n_{\alpha_1}! \dots n_{\alpha_N}!}} \sum_{\nu} P_{\nu} |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle, \quad (3.5)$$

$$|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\nu} (-1)^{s_{\nu}} P_{\nu} |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle, \quad (3.6)$$

que se obtienen del estado factorizado (3.3) aplicando los operadores de simetrización o antisimetrización, al igual que las funciones de onda. En cierto modo, el hecho de que tengamos que tratar con partículas indistinguibles ya introduce correlaciones en la función de onda incluso cuando las interacciones no están presentes. La función de onda se vuelve bastante complicada ya que deben estar correctamente (anti-)simetrizadas y normalizadas, lo que las hace muy difíciles de manejar. que se escriban en la forma de un determinante ayuda un poco para los cálculos prácticos, pero no mucho. En resumen, incluso para los electrones que no interactúan, ¡habría que tratar con funciones de onda que contienen $10^{23}!$ términos, lo cual es realmente desagradable.

El segundo problema está relacionado con la forma en que representamos a los operadores en la mecánica cuántica estándar. Si consideramos, por ejemplo, un operador que mide el momento total de un sistema de partículas, este tiene que escribirse como una suma de operadores que actúan sobre cada partícula individualmente:

$$P_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^N P_i \quad (3.7)$$

donde P_i es el operador que actúa sobre la partícula i -ésima. Téngase en cuenta que esto es un abuso de notación ya que P_{tot} es un operador de \mathcal{H}_N , que rigurosamente se debe escribir como

$$P_i = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes P \otimes \dots \otimes \mathbf{1}, \quad (3.8)$$

donde $\mathbf{1}$ es la identidad y P se inserta en la posición i -ésima. El operador y las funciones de onda dependen así explícitamente del número de partículas. Por lo tanto, uno debería cambiar completamente todo el cálculo dependiendo de si miramos 2 o 20000 partículas, lo que nuevamente es particularmente molesto. También impide tomar de manera directa el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ cuando el volumen de los sistemas también tiende a infinito. Dada

Segunda cuantificación

la gran cantidad de partículas, está claro que tomar este límite es lo deseable ya que simplificaría mucho los cálculos¹.

Una tercera razón, quizás más profunda y más física, y que definitivamente liquida la posibilidad de utilizar la mecánica cuántica usual, es que en muchos sistemas el número de partículas no se conserva! Esto puede ocurrir por varias razones, por ejemplo, en sistemas de altas energías, porque buscamos describir sistemas de partículas que pueden aniquilarse y convertirse en otras, tales como electrones y positrónes. O para un ejemplo más ligado a los materiales, mencionemos el modelo BCS para un superconductor, que discutiremos en el capítulo siguiente. Veremos que las cuasipartículas fermiónicas que son responsables de la superconductividad se forman por una superposición de electrones y huecos y no se conservan en número.

Por estas razones, debemos buscar una reformulación de la representación estándar de la mecánica cuántica (también conocida como primera cuantificación) para sistemas de varias partículas indistinguibles. Idealmente deberíamos hallar un formalismo que se ocupe automáticamente de lo siguiente:

1. Que la simetrización o antisimetrización se realizara de manera automática sin tener que tratar explícitamente con $N!$ términos.
2. Que la forma de describir el sistema no dependa explícitamente del número de partículas presentes en él. Esto debería permitir tomar el límite termodinámico fácilmente y también abordar situaciones más generales en las que el número de partículas puede cambiar.

Esto lo proporciona el llamado método de “segunda cuantificación”² que describiremos en este capítulo.

3.1. Espacio de Fock

La idea básica es convertir el hecho de que las partículas sean indistinguibles en una ventaja. De hecho, si este es el caso, significa que no es necesario conocer el estado cuántico de cada partícula individual, sino simplemente cuántas partículas hay en un estado cuántico dado. Supongamos que uno tiene una base completa $|\alpha\rangle$ de estados para una sola partícula. En general, esta base es infinita, pero tomemos por conveniencia un espacio de dimensión

¹Trabajar en el límite termodinámico es deseable, además, porque es allí donde ocurren verdaderamente las transiciones de fase.

²La terminología usual de “primera” y “segunda” cuantificación es bastante desafortunada. Da a entender que hay otro objeto que ahora se está cuantificando, más específicamente la función de onda, pero esto es incorrecto, como veremos más adelante.

3.1 Espacio de Fock

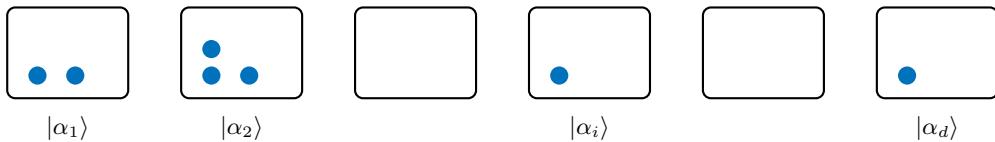


Figura 3.1: El estado de un sistema con un número arbitrario de partículas indistinguibles se conoce por completo si se sabe cuántas partículas hay en un estado cuántico determinado.

finita d y un número finito de estados. Siempre podemos tomar $d \rightarrow \infty$ ³. Así, denotamos todos los estados en esta base como

$$|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots, |\alpha_d\rangle, \quad (3.9)$$

Téngase en cuenta que el tamaño de la base no está relacionado con la cantidad de partículas que están presentes en el sistema. Para los bosones, por ejemplo, uno podría tener una base completa de los estados de una partícula que contienen solo dos estados y tener 10000 bosones presentes en el sistema (ya que varios de ellos pueden ir en el mismo estado cuántico). Para los fermiones, por supuesto, el número total de partículas siempre es menor que el número total de estados disponibles debido al principio de Pauli. Podemos describir completamente el sistema y reconstruir su función de onda si conocemos el número de partículas n_i en cada estado $|\alpha_i\rangle$ de la base completa de estados de partículas individuales, y por lo tanto, podemos caracterizar completamente la función de onda del sistema mediante el conjunto de números n_1, n_2, \dots, n_d . El número total de partículas en el sistema es, por supuesto, $N = n_1 + n_2 + \dots + n_d$, y puede variar si uno varía uno de los n_i .

Definamos entonces un espacio en el que puedan existir un número arbitrario de partículas. Si llamamos \mathcal{H}_N al espacio de Hilbert con N partículas, como en la ec. (3.2), podemos definir

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \dots = \bigoplus_{j=0}^{+\infty} \mathcal{H}_j \quad (3.10)$$

que es la suma directa de todos los espacios de Hilbert con 0, 1, 2, etc. partículas. Tal espacio se llama espacio de Fock. En este espacio definamos ahora el estado

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_d\rangle \quad (3.11)$$

como los estados simetrizados o antisimetrizados (3.5) y (3.6). Es decir, en lugar de rotular a esos estados mediante el conjunto α_i de estados estados

³Por supuesto que siempre existen sistemas donde d es finita. Por ejemplo, un spin $\frac{1}{2}$.

Segunda cuantificación

de partícula independiente en el que está cada partícula, los rotulamos por el número de partículas que contiene cada uno de ellos. Dos estados de la forma (3.11) que tienen un número diferente de partículas N pertenecen a dos espacios de Hilbert diferentes y, por lo tanto, son obviamente ortogonales en el espacio de Fock. Para sistemas con el mismo número total de partículas, se puede verificar usando (3.5) y (3.6) que los estados (3.11) para una base ortogonal y normalizada satisfacen

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_d | n'_1, n'_2, \dots, n'_d \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \cdots \delta_{n_d, n'_d} \quad (3.12)$$

Por lo tanto, podemos usar la base (3.11) para caracterizar cada operador y elemento de matriz en el espacio de Fock. Como se mencionó antes, esta base es extremadamente conveniente ya que se basa en la cantidad mínima de información necesaria para describir un sistema de partículas indistinguibles. En particular, el número de “contadores” n_i necesarios no crece con el número total de partículas.

3.2. Operadores de creación y destrucción

Introduciremos a continuación un conjunto de operadores que nos permitirá generar todos los elementos de la base (3.11). Para cada estado α_i de la base completa de una sola partícula, definimos un operador de creación y destrucción, que aumentará o disminuirá en uno el número de partículas en este estado particular. De este modo, podremos usar estos operadores para modificar el contador n_i dando el número de partículas en un estado cuántico dado, y así abarcar todo el espacio de Fock. La definición práctica de estos operadores es diferente dependiendo de la estadística de las partículas.

Bosones

Introducimos los operadores de creación a_i^\dagger y destrucción a_i por su acción sobre todos los estados de una base completa en el espacio de Fock, en la forma

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_d\rangle, \\ a_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_d\rangle. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Estas definiciones determinan por completo a los operadores por sus elementos de matriz en la base de números de ocupación (3.11). Comprobemos que los operadores a_i^\dagger y a_i son efectivamente hermíticos conjugados uno del otro.

3.2 Operadores de creación y destrucción

Dado que (3.11) es una base ortogonal, el único elemento de matriz distinto de cero para a_i^\dagger es

$$\langle n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_d | a_i^\dagger | n_1, \dots, n_i, \dots, n_d \rangle = \sqrt{n_i + 1}. \quad (3.14)$$

Tomando el complejo conjugado de esta expresión se obtiene

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots, n_d | a_i | n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_d \rangle = \sqrt{n_i + 1}, \quad (3.15)$$

que de hecho es exactamente la definición del operador a_i en (3.13) (con el reemplazo de n_i por $n_i + 1$). Otra propiedad importante de los operadores es que solo abarcan el espacio de Fock. De hecho, aunque parece formalmente de (3.13) que el operador a_i podría operar en un estado que tiene $n_i = 0$ partículas en el estado α_i el prefactor en la definición asegura que el elemento de matriz correspondiente es cero:

$$a_i |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_d\rangle = 0, \quad (3.16)$$

y así, si uno intenta aplicar el operador de destrucción en un estado que no tiene ninguna partícula en el estado cuántico correspondiente, obtiene un resultado trivial, lo que significa que no se pueden generar estados no físicos con números de ocupación negativos.

Si definimos el estado que no contiene partículas en ninguno de los estados cuánticos (a veces denominado vacío) en la forma

$$|0\rangle = |n_1 = 0, n_2 = 0, \dots, n_d = 0\rangle, \quad (3.17)$$

se verifica que a partir de este vacío $|0\rangle$ y los operadores a_i^\dagger podemos construir todos los vectores de la base completa del espacio de Fock, ya que

$$|n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_d^\dagger)^{n_d}}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_d!}} |0\rangle. \quad (3.18)$$

Por lo tanto, uno puede generar completamente el espacio de Fock desde el estado único $|0\rangle$ mediante los operadores de creación (y destrucción ya que son conjugados hermíticos). El vacío verifica la propiedad de que para cualquier i

$$a_i |0\rangle = 0 \quad (3.19)$$

Debemos tener cuidado de no mezclar el vacío $|0\rangle$, que es un vector del espacio de Fock, y uno sobre el que los operadores pueden actuar para dar otros estados del espacio de Fock, con el cero 0.

Los operadores de creación y destrucción constituyen así una manera muy conveniente de describir el espacio de Fock. En lugar de definirlos a

Segunda cuantificación

partir de sus elementos de matriz en una base dada, tal como (3.11), es más conveniente definirlos a partir de sus propiedades intrínsecas. Mostremos que la definición (3.13) implica que los operadores a_i^\dagger y a_i poseen ciertas relaciones de conmutación específicas. Y a la inversa, si se obedecen estas relaciones de conmutación, entonces los operadores, y el vacío correspondiente definido por (3.17), servirán para construir un espacio de Fock a partir de (3.18) en el que tendrán los elementos de matriz (3.14) y (3.15).

Calculemos primero la acción de un producto de dos operadores de creación a_i^\dagger y a_j^\dagger en estados distintos ($i \neq j$) sobre un estado arbitrario de la base:

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle &= a_i^\dagger \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j + 1, \dots, n_d\rangle \\ &= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_d\rangle. \end{aligned} \quad (3.20)$$

y es fácil comprobar que la acción de $a_j^\dagger a_i^\dagger$ producirá exactamente el mismo resultado. Así, para cualquier elemento de la base se tiene

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle = 0, \quad (3.21)$$

lo que significa que

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0. \quad (3.22)$$

Dado que un operador commuta consigo mismo, esto también es cierto cuando $i = j$. Tomando el hermítico conjugado del commutador anterior obtenemos

$$[a_i, a_j] = 0. \quad (3.23)$$

Veamos ahora qué ocurre si calculamos la acción del producto de un operador de destrucción con uno de creación, siempre con ($i \neq j$):

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle &= a_i^\dagger \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j - 1, \dots, n_d\rangle \\ &= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1, \dots, n_d\rangle \end{aligned} \quad (3.24)$$

y de manera similar la acción de $a_j a_i^\dagger$ (con $i \neq j$) daría el mismo resultado. Se tiene así $[a_i^\dagger, a_j] = 0$ cuando $i \neq j$. El caso $i = j$ es especial. Por un lado tenemos que

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle &= a_i^\dagger \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_d\rangle \\ &= \sqrt{(n_i - 1) + 1} \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle \\ &= n_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle, \end{aligned} \quad (3.25)$$

3.2 Operadores de creación y destrucción

y por otra parte

$$\begin{aligned} a_i a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle &= a_i \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_d\rangle \\ &= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle \\ &= (n_i + 1) |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Concluimos entonces que

$$[a_i, a_i^\dagger] |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle = |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle. \quad (3.27)$$

Juntando los dos resultados, encontramos finalmente que el conmutador es

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j}. \quad (3.28)$$

Se puede entonces resumir las propiedades de los operadores de creación y destrucción mediante el conjunto de relaciones fundamentales

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{i,j}, \\ [a_i^\dagger, a_j^\dagger] &= 0, \\ [a_i, a_j] &= 0. \end{aligned} \quad (3.29)$$

llamado también álgebra de los operadores. Junto con la acción de los operadores de destrucción sobre el vacío (3.19), son equivalentes a las definición de los elementos de matriz (3.15) y (3.14). Esto implica que si disponemos de

1. Una base completa $|\alpha_i\rangle$ de estados de partículas individuales (y las funciones de onda correspondientes $\langle \mathbf{r}|\alpha_i\rangle$)
2. Operadores de creación y destrucción, a_i^\dagger y a_i , para cada uno de estos estados, que obedecen relaciones conmutación canónicas (3.29).
3. Un vacío $|0\rangle$ que es destruido por los operadores de destrucción $a_i|0\rangle = 0$,

podemos construir completamente un espacio de Fock para bosones. La idea es entonces explotar directamente las propiedades anteriores y utilizar las relaciones de conmutación canónicas entre los operadores bosónicos para calcular las propiedades físicas, en lugar de las funciones de onda. Esta descripción se conoce como segunda cuantificación.

Segunda cuantificación

Tomemos por ejemplo el siguiente estado de dos partículas:

$$|\psi\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle = |n_1 = 1, n_2 = 1\rangle. \quad (3.30)$$

y reconstruyamos la expresión para la función de onda usando. Se obtiene

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 |\psi\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) + \varphi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_2) \varphi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1)], \quad (3.31)$$

que es la función correctamente simetrizada que describe dos bosones. Sin embargo, el interés de la segunda cuantificación es apegarse a los operadores y sus relaciones de conmutación y evitar volver a las funciones de onda, que en general son bastante intratables. Por ejemplo, los operadores de creación comunitan entre sí, y por lo tanto $a_1^\dagger a_2^\dagger = a_2^\dagger a_1^\dagger$. Entonces

$$a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle = a_2^\dagger a_1^\dagger |0\rangle, \quad (3.32)$$

y así la función de onda $|\psi\rangle$ resulta ser simétrica por permutación de las partículas. Los operadores de creación y destrucción están así directamente diseñados para tener en cuenta adecuadamente la simetrización de las funciones de onda y la indistinguibilidad de las partículas. De hecho, las relaciones de conmutación permiten obtener directamente la información sin pasar por ningún proceso de simetrización. En particular, los promedios se pueden calcular directamente. Ilustrémoslo calculando la normalización de la función $|\psi\rangle$. Queremos calcular

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle 0 | a_2 a_1 a_1^\dagger a_2^\dagger | 0 \rangle. \quad (3.33)$$

Aunque este es un ejemplo específico, veremos que generalmente todos los observables físicos se reducen al promedio en el vacío de un determinado producto de los operadores de creación y destrucción, por lo que el método que describimos se puede aplicar de manera general. Para calcular el promedio, lo único que necesitamos usar es el hecho de que el vacío es destruido por todos los a_i . Por tanto, utilizando las relaciones de conmutación, deberíamos llevar los operadores a_i a la derecha, de modo de hacerlos actuar sobre el vacío. para actuar sobre el vacío. Primero escribimos $a_1 a_1^\dagger = 1 + a_1^\dagger a_1$ de la relación de conmutación. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \langle 0 | a_2 (1 + a_1^\dagger a_1) a_2^\dagger | 0 \rangle, \\ &= \langle 0 | a_2 a_2^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | a_2 a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.34)$$

En el segundo término podemos usar ahora la relación de conmutación $a_1 a_2^\dagger = a_2^\dagger a_1$ para reescribirlo como $\langle 0 | a_2 a_1^\dagger a_2^\dagger a_1 | 0 \rangle$ que inmediatamente da cero. Para

3.2 Operadores de creación y destrucción

el primero usamos de nuevo las relaciones de commutación, y obtenemos

$$\begin{aligned}\langle \psi | \psi \rangle &= \langle 0 | a_2 a_2^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | (1 + a_2^\dagger a_2) | 0 \rangle, \\ &= \langle 0 | 1 | 0 \rangle, \\ &= 1.\end{aligned}\tag{3.35}$$

Aunque los cálculos pueden volverse tediosos cuando crece el número de operadores, la mecánica siempre es la misma, y con un poco de práctica se pueden acelerar.

Fermiones

Pasemos ahora a los operadores de creación y destrucción de fermiones. De manera similar que para los bosones, definimos

$$\begin{aligned}c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle &= (1 - n_i)(-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_d\rangle, \\ c_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle &= n_i(-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_d\rangle,\end{aligned}\tag{3.36}$$

donde $\epsilon_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$ y $\epsilon_1 = 0$. El orden de los elementos en la base debe fijarse una vez, y utilizar siempre la misma convención, pero, por supuesto, es arbitraria.

En estas definiciones, algunos términos son bastante transparentes: dado que para los fermiones el principio de Pauli impide que dos fermiones estén en el mismo estado, los números de ocupación n_i están restringidos a tomar los valores 0 o 1. Por lo tanto, es importante que el operador de creación no pueda crear dos partículas en un estado, lo cual queda asegurado por el factor $1 - n_i$ que garantiza que si c_i^\dagger actúa sobre un estado con $n_i = 1$ entonces la acción del operador dará cero. De manera similar, el factor n_i asegura que el operador de destrucción no puede destruir una partícula en el estado para el cual $n_i = 0$. La física del factor extraño $(-1)^{\epsilon_i}$ no es obvia por el momento, y uno podría tener la tentación de definir los operadores sin tal factor de fase. Veremos su utilidad un poco más adelante.

Procedemos ahora exactamente como con los bosones: comprobemos primero que los operadores c_i^\dagger y c_i son efectivamente hermíticos conjugados uno del otro. De hecho, los cálculos con fermiones son más simples en cierto sentido, ya que para cada estado α_i solo hay dos posibilidades $n_i = 0$ o $n_i = 1$ para el estado correspondiente. El único elemento de matriz distinto de cero para el operador c_i^\dagger es

$$\langle n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_d | c_i^\dagger | n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_d \rangle = (-1)^{\epsilon_i}.\tag{3.37}$$

Segunda cuantificación

mientras que para c_i el único elemento de matriz distinto de cero es

$$\langle n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_d | c_i | n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_d \rangle = (-1)^{\epsilon_i}. \quad (3.38)$$

que obviamente es el complejo conjugado del otro.

Para continuar con las relaciones de commutación y comprender el papel de los coeficientes $(-1)^{\epsilon_i}$, veamos primero la acción de $c_i c_i^\dagger$. Como esto solo afecta al estado α_i , podemos simplemente considerar su acción sobre los dos estados con $n_i = 0$ y $n_i = 1$:

$$\begin{aligned} c_i c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_d\rangle &= (-1)^{\epsilon_i} c_i |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_d\rangle \\ &= (-1)^{2\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_d\rangle \\ &= |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_d\rangle \end{aligned} \quad (3.39)$$

Por otro lado,

$$c_i^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i = 0, \dots, n_d\rangle = 0. \quad (3.40)$$

Nótese que en este resultado los factores $(-1)^{\epsilon_i}$ no juegan ningún papel, y podríamos haber definido los operadores sin incluirlos. En forma similar,

$$\begin{aligned} c_i c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_d\rangle &= 0 \\ c_i^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_d\rangle &= |n_1, \dots, n_i = 1, \dots, n_d\rangle. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Se observa entonces que $[c_i, c_i^\dagger]$ no tiene ninguna expresión simple. En cambio, el anticomutador

$$\{c_i, c_i^\dagger\} = c_i c_i^\dagger + c_i^\dagger c_i \quad (3.42)$$

conduce a

$$\{c_i, c_i^\dagger\} |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle = |n_1, \dots, n_i, \dots, n_d\rangle, \quad (3.43)$$

y por lo tanto

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = 1 \quad (3.44)$$

Por lo tanto, se puede adivinar que en lugar del comutador, es el anticomutador el que jugará un papel importante. El rol del factor $(-1)^{\epsilon_i}$ será, por lo tanto, asegurar que para las otras combinaciones también se obtengan relaciones simples para el anticomutador. Ilustrémoslo con la acción de $c_i c_j^\dagger$ con $i \neq j$. Suponiendo que $i < j$, tenemos que

$$\begin{aligned} c_i c_j^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle &= (1 - n_j)(-1)^{\epsilon_j} c_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j + 1, \dots, n_d\rangle \\ &= (1 - n_j)(-1)^{\epsilon_j} n_i (-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_d\rangle. \end{aligned} \quad (3.45)$$

3.2 Operadores de creación y destrucción

Por otro lado,

$$\begin{aligned} c_j^\dagger c_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle &= n_i (-1)^{\epsilon_i} c_j^\dagger |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j, \dots, n_d\rangle \\ &= (1 - n_j) (-1)^{\epsilon'_j} n_i (-1)^{\epsilon_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots, n_d\rangle. \end{aligned} \quad (3.46)$$

El término ϵ'_j corresponde al factor de fase en un estado con $n_i - 1$ en lugar de n_i . Así, $\epsilon'_j = \epsilon_j - 1$. En ausencia de dichos términos de fase, las dos expresiones (3.45) y (3.46) serían idénticas y tendríamos que $[c_i, c_j^\dagger] = 0$. Gracias a los factores de fase ϵ_j ahora tenemos un signo menos entre los dos términos y la relación se convierte en

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = 0, \quad (3.47)$$

lo que permitirá definir los operadores c_i sólo en términos de sus anticonmutadores. Es fácil comprobar las restantes relaciones, y así se tiene, de forma similar que para los bosones,

$$\begin{aligned} \{c_i, c_j^\dagger\} &= \delta_{i,j}, \\ \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} &= 0, \\ \{c_i, c_j\} &= 0. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Por otro lado, de la misma forma que para los bosones, se puede construir todos los estados del espacio de Fock a partir de un vacío $|0\rangle$ que es destruido por todos los $c_i (c_i |0\rangle = 0)$ usando la relación (3.18)

Las funciones de onda y los promedios se pueden calcular también con las mismas técnicas que antes, veamos como ejemplo la función de onda de dos fermiones en los estados α_1 y α_2 :

$$|\psi\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle. \quad (3.49)$$

y entonces la función de onda resulta

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha_1(\mathbf{r}_1) \alpha_2(\mathbf{r}_2) - \alpha_1(\mathbf{r}_2) \alpha_2(\mathbf{r}_1)], \quad (3.50)$$

que es, por supuesto, la función de onda correctamente antisimetrizada para fermiones. Sin ir a la función de onda, se puede ver directamente la antisimetrización a nivel de estados y operadores: usando la relación de anticonmutación $\{c_1, c_2\} = 0$ se encuentra que

$$c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle = -c_2^\dagger c_1^\dagger |0\rangle, \quad (3.51)$$

Segunda cuantificación

y así la función de onda $|\psi\rangle$ es obviamente antisimétrica por permutación de las partículas.

El hecho de que el operador c_i se ocupe automáticamente de la antisimetrización hace que sea muy conveniente escribir incluso funciones complicadas. Por ejemplo, el mar de Fermi, que corresponde al estado de N fermiones de menor energía posible, se escribe

$$|F\rangle = \prod_{j=1}^N c_j^\dagger |0\rangle \quad (3.52)$$

Los promedios en el vacío se pueden calcular exactamente con la misma técnica descrita para los bosones. Por ejemplo, si tomamos $|\psi\rangle = c_1^\dagger |0\rangle$, entonces (usando las relaciones de anticonmutación),

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &= \langle 0|c_i c_i^\dagger |0\rangle \\ &= \langle 0|1 - c_i^\dagger c_i |0\rangle \\ &= \langle 0|1|0\rangle = 1. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Generalizando el cálculo anterior puede mostrarse el mar de Fermi está correctamente normalizado, $\langle F|F\rangle = 1$.

3.2.1. Operadores de un cuerpo

Ahora que tenemos definidos a los operadores que permiten construir todo el espacio de Fock, lo que queda por resolver es expresar los observables físicos que queremos calcular en términos de estos operadores. Para hacerlo, debemos tener en cuenta que los observables deben actuar sobre partículas indistinguibles, lo que establece algunas restricciones sobre su forma. Antes de dar sus expresiones en segunda cuantificación, es conveniente clasificarlos de acuerdo al número de partículas sobre las que actúan. Hay observables físicos que miden solo los números cuánticos de una partícula a la vez (tales como el momento, la densidad, etc.) y otros que necesitan tratar con los números cuánticos de dos de las partículas para determinar sus elementos de matriz. Este es caso, por ejemplo, del operador que mide las interacciones entre las partículas. El primer tipo se llama operadores de un cuerpo, mientras que el segundo es de dos cuerpos. En principio, se pueden tener operadores que involucren más de dos partículas (tales como colisiones de tres cuerpos y más), pero son de poca utilidad práctica en la física del estado sólido, por lo que discutiremos principalmente aquí los de uno y dos cuerpos. Las fórmulas dadas aquí se pueden generalizar fácilmente si es necesario.

3.2 Operadores de creación y destrucción

Definición

Comencemos primero con los operadores de un cuerpo. De manera bastante general, llamemos O a un operador que representa alguna propiedad de una partícula a la vez. Por supuesto, si O actúa en el espacio de Hilbert con N partículas, debe actuar sobre cada partícula del sistema. Llamemos $O^{(1)}$ al operador que actúa en el espacio de Hilbert de una sola partícula; el operador O correspondiente a las N partículas debe ser

$$O = O_1^{(1)} \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_N + \mathbf{1}_1 \otimes O_2^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_N + \dots + \mathbf{1}_1 \otimes \dots \otimes O_N^{(1)} \quad (3.54)$$

donde $O_i^{(1)}$ es el operador que actúa sobre la partícula i -ésima. El hecho de que en la suma anterior, todos los coeficientes sean idénticos, es la consecuencia directa del hecho de que las partículas son indistinguibles, y no podemos distinguir en una medida si un cierto conjunto de números cuánticos corresponden a una u otra partícula del sistema. La forma (3.54) es por lo tanto la forma más general posible de un operador de un solo cuerpo para partículas indistinguibles.

Para expresar (3.54) en segunda cuantificación, debemos comenzar por analizar qué sucede si tenemos un sistema con una sola partícula (si no hay ninguna partícula, un operador de un cuerpo es trivialmente nulo). En ese caso $O = O^{(1)}$ y usando la base completa α podemos escribir

$$O = \sum_{\alpha, \beta} |\alpha\rangle\langle\alpha| O^{(1)} |\beta\rangle\langle\beta|, \quad (3.55)$$

y luego utilizamos que $|\alpha\rangle = c_\alpha^\dagger |0\rangle$ para obtener

$$O = \sum_{\alpha, \beta} \langle\alpha| O^{(1)} |\beta\rangle c_\alpha^\dagger |0\rangle\langle 0| c_\beta. \quad (3.56)$$

La interpretación física de esta fórmula es bastante simple: el operador c_β destruye una partícula en un estado β ; como solo tenemos una partícula en el sistema, nos vemos obligados a ir al vacío, luego, desde el vacío, el operador c_α^\dagger recrea la partícula en el estado α . El resultado neto es que todavía tenemos una partícula en el sistema pero ha cambiado su estado cuántico al pasar del estado β al estado α . La amplitud de dicha transición está dada por los elementos de matriz del operador $O^{(1)}$ entre los estados β y α .

Si en lugar de una partícula tuviéramos ahora un número arbitrario de partículas en el sistema, tendríamos que hacer exactamente lo mismo para cada una de ellas, dejando invariantes los números cuánticos de las demás, como sugiere (3.54), y hacer la suma. Un operador que logra esto está dado por la expresión

$$O = \sum_{\alpha, \beta} \langle\alpha| O^{(1)} |\beta\rangle c_\alpha^\dagger c_\beta \quad (3.57)$$

Segunda cuantificación

que es idéntica a (3.56) excepto que no estamos obligados a ir al vacío después de la destrucción de la partícula en el estado β . De hecho, si hay varias partículas, el operador $c_\alpha^\dagger c_\beta$ cambiará el número cuántico de una partícula del estado β al estado α y dejará intactos los números cuánticos de todas las demás partículas del sistema. Sin embargo, el operador c_β operará en todas las partículas del sistema y, por lo tanto, hará esa transición para la primera, segunda, etc. realizando automáticamente la suma en (3.54).

La expresión (3.57) permite así representar cualquier operador de un solo cuerpo en segunda cuantificación, conociendo sólo la acción del operador $O^{(1)}$ en el espacio de una sola partícula. Nótese que las funciones de onda provenientes de la elección de la base completa α sólo intervienen en el cálculo de los elementos de matriz $\langle \alpha | O^{(1)} | \beta \rangle$. Una vez que se calculan estos elementos de matriz, todo el operador se reduce a una combinación lineal de operadores de creación y destrucción y, por lo tanto, todos los promedios físicos se pueden calcular mediante las técnicas descritas en la sección anterior, sin tener que volver a las funciones de onda. Por supuesto, todos los aspectos de su simetrización o la antisimetrización son tenidos en cuenta automáticamente por la naturaleza de los operadores de creación o destrucción.

Ejemplos

Comencemos con el operador que mide la densidad de partículas en un punto \mathbf{r}_0 , que para una partícula se escribe

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_0) = |\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0|, \quad (3.58)$$

debido a que $\langle \psi | \rho^{(1)}(\mathbf{r}_0) | \psi \rangle = |\psi(\mathbf{r}_0)|^2$. En segunda cuantificación la forma del operador dependerá de la elección de la base completa α que tomemos. Empecemos tomando la base de autoestados de posición $|\mathbf{r}\rangle$, en cuyo caso, el operador $c_{\mathbf{r}}^\dagger$ es el operador que crea una partícula en el punto \mathbf{r} . Usando esta base y la relación (3.57) se obtiene

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}_0) &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}' \rangle c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{r}'}, \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}') c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{r}'}, \\ &= c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

La expresión $c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}$ es particularmente simple de interpretar. El operador $c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}$ destruye y recrea una partícula en el mismo estado cuántico. Por lo tanto, no ha cambiado nada en el sistema. Sin embargo, la acción del operador

3.2 Operadores de creación y destrucción

$c_{\mathbf{r}_0}$ dará cero si no hay ninguna partícula a destruir en el estado cuántico correspondiente (aquí una partícula en el punto \mathbf{r}_0). El operador $c_{\mathbf{r}_0}^\dagger c_{\mathbf{r}_0}$ da cero si no hay ninguna partícula en el estado cuántico correspondiente y uno si hay una partícula. Por tanto, simplemente cuenta el número de partículas en el punto \mathbf{r}_0 . Generalmente, el operador $c_\alpha^\dagger c_\alpha$ simplemente cuenta el número de partículas en el estado α . El operador que cuenta el número total de partículas en el sistema está dado entonces por

$$N = \int d\mathbf{r} c_{\mathbf{r}}^\dagger c_{\mathbf{r}}. \quad (3.60)$$

La generalización al caso de partículas con spin es inmediata. Para ello la base completa será $\alpha = (\mathbf{r}, \sigma)$ y el operador densidad solo actúa en la parte espacial, por lo tanto

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_0) = |\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0| \otimes \mathbf{1}_{\text{spin}}, \quad (3.61)$$

y así (3.57) da lugar a

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}\sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{r}'\sigma' \rangle c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'}, \\ &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}') \delta_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}',\sigma'}, \\ &= c_{\mathbf{r}_0\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\uparrow} + c_{\mathbf{r}_0\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\downarrow}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

También podríamos calcular la densidad de spin a lo largo del eje z en el punto \mathbf{r}_0 . En ese caso el operador de una partícula es

$$S_z^{(1)}(\mathbf{r}_0) = |\mathbf{r}_0\rangle\langle\mathbf{r}_0| \otimes S_z, \quad (3.63)$$

Segunda cuantificación

y usando (3.57) se obtiene⁴

$$\begin{aligned} S_z(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}\sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \otimes S_z | \mathbf{r}'\sigma' \rangle c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'}, \\ &= \sum_{\sigma\sigma'} \langle \sigma | S_z | \sigma' \rangle c_{\mathbf{r}_0\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\sigma'}, \\ &= \frac{1}{2}(c_{\mathbf{r}_0\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\uparrow} - c_{\mathbf{r}_0\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\downarrow}). \end{aligned} \quad (3.64)$$

De manera similar, la densidad de spin a lo largo de la dirección x es

$$\begin{aligned} S_x(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}\sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \otimes S_x | \mathbf{r}'\sigma' \rangle c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'}, \\ &= \sum_{\sigma\sigma'} \langle \sigma | S_x | \sigma' \rangle c_{\mathbf{r}_0\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\sigma'}, \\ &= \frac{1}{2}(c_{\mathbf{r}_0\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\downarrow} + c_{\mathbf{r}_0\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\uparrow}), \end{aligned} \quad (3.65)$$

y para la dirección y ,

$$\begin{aligned} S_y(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}\sigma | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \otimes S_y | \mathbf{r}'\sigma' \rangle c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'}, \\ &= \sum_{\sigma\sigma'} \langle \sigma | S_y | \sigma' \rangle c_{\mathbf{r}_0\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\sigma'}, \\ &= \frac{i}{2}(-c_{\mathbf{r}_0\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\downarrow} + c_{\mathbf{r}_0\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{r}_0\uparrow}), \end{aligned} \quad (3.66)$$

Alternativamente, podríamos haber usado la base de los autoestados del operador momento, $|\mathbf{k}\rangle$, cuyas funciones de onda son

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (3.67)$$

⁴Recordemos que las expresiones de los operadores de spin en la base $|\pm\rangle$ son

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{2}[|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|], \\ S_y &= \frac{i}{2}[-|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|], \\ S_z &= \frac{1}{2}[|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle+|]. \end{aligned}$$

3.2 Operadores de creación y destrucción

Dado que el spin y la parte orbital son independientes, solo daremos las expresiones para el caso sin espín. Incorporar el spin se realiza exactamente de la misma forma que en la base de coordenadas. El operador $c_{\mathbf{k}}$ ahora destruye una partícula momento \mathbf{k} (es decir, en un estado de onda plana con momento \mathbf{k}). La ecuación (3.57) da lugar a

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}_0) &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \langle \mathbf{k}_1 | \mathbf{r}_0 \rangle \langle \mathbf{r}_0 | \mathbf{k}_2 \rangle c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_0} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_0} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}.\end{aligned}\quad (3.68)$$

La expresión (3.68) no es tan simple como (3.59) ya que el operador densidad no es diagonal en la base de momentos. Sin embargo, tanto (3.68) como (3.59) representan el mismo operador. Esto nos da una conexión directa entre los operadores que crean una partícula en el punto \mathbf{r} y los que crean una partícula con momento \mathbf{k} . Comparando las ecuaciones (3.68) y (3.59) se obtiene

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}}. \quad (3.69)$$

Esta expresión constituye un ejemplo de una transformación, en este caso lineal y dada por una transformada de tipo Fourier, entre operadores de creación. Esta transformación preserva los comutadores, como puede verificarse en forma simple, y por lo tanto constituye un ejemplo de transformación canónica. Discutiremos más sobre este tema más adelante.

Usando la expresión (3.68) también podemos calcular el número total de partículas en el sistema:

$$\begin{aligned}N &= \int d\mathbf{r} \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\ &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\ &= \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}},\end{aligned}\quad (3.70)$$

y si tenemos en cuenta que $c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$ cuenta el número de partículas en el estado cuántico \mathbf{k} , se obtiene nuevamente que el número total de partículas es la suma de todos los números de partículas en todos los estados cuánticos posibles. Finalmente se puede usar (3.68) para obtener una expresión simple

Segunda cuantificación

de la transformada de Fourier de la densidad:

$$\begin{aligned}
 \rho(\mathbf{q}) &= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{qr}} \rho(\mathbf{r}), \\
 &= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{qr}} \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}}.
 \end{aligned} \tag{3.71}$$

Otro operador importante es, por supuesto, la energía cinética de las partículas. Para una partícula se tiene $H^{(1)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, y de manera más general, podríamos tener cualquier función del momento $H^{(1)} = \epsilon(\mathbf{p})$. Por lo tanto, es muy conveniente utilizar la base de momentos. La energía cinética se expresa así como

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \langle \mathbf{k}_1 | \varepsilon(\mathbf{p}) | \mathbf{k}_2 \rangle c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \varepsilon(\mathbf{k}_2) c_{\mathbf{k}_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2}, \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}},
 \end{aligned} \tag{3.72}$$

que tiene la interpretación simple de que la energía cinética total del sistema es la suma de el número de partículas en cada estado \mathbf{k} (dado por $c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$) multiplicado por la energía cinética $\epsilon(\mathbf{k})$ de tal estado. La generalización para sistemas con *spin* es inmediata y, en general se obtiene

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \tag{3.73}$$

asumiendo que la energía cinética no depende del espín (en ausencia de acoplamiento espín-órbita). Debemos tener en cuenta que dado que el número total de partículas es $N = \sum_k c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$, agregar un potencial químico $-\mu N$ no cambia la forma del Hamiltoniano:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \tag{3.74}$$

y simplemente reemplaza $\varepsilon(\mathbf{k})$ por $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$. A temperatura cero la energía $\xi(\mathbf{k})$ es cero en el nivel de Fermi, negativa por debajo, y positiva por encima.

3.2 Operadores de creación y destrucción

3.2.2. Operadores de dos cuerpos

Veamos ahora los operadores que involucran dos partículas y como definir sus elementos de matriz. Es en particular el caso del potencial de interacción entre dos partículas

$$V = \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (3.75)$$

Definición

Con un espíritu similar al de los operadores de un solo cuerpo, llamemos $O^{(2)}$ al operador correspondiente que actúa en el espacio de Hilbert de sólo dos partículas. El operador de dos cuerpos que actúa en \mathcal{H}_N debe tener la forma

$$O = \sum_{i < j} O_{i,j}^{(2)} \otimes \mathbf{1}_k = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} O_{i,j}^{(2)} \otimes \mathbf{1}_k, \quad (3.76)$$

para que el operador $O^{(2)}$ pueda operar sobre cada par de partículas en el sistema. De manera similar que para los operadores de un solo cuerpo, los coeficientes en la suma anterior deben ser todos iguales, de lo contrario significaría que las partículas podrían distinguirse.

Para entender cómo escribir O en segunda cuantificación, veamos el caso en el que hay exactamente dos partículas en el sistema. Debemos definir el operador O por sus elementos de matriz en el espacio físico de las funciones (anti)simetrizadas $|\alpha, \beta\rangle$, lo que significa que debemos conocer todos los elementos

$$\langle \alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta \rangle. \quad (3.77)$$

Tomemos primero la expresión (3.77) y escribamos $|\alpha, \beta\rangle$ en términos de los *kets* ordenados (3.5) y (3.6)

$$(\alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta) = (\beta, \alpha | O^{(2)} | \delta, \gamma), \quad (3.78)$$

aquí la igualdad se debe a que simplemente estamos intercambiando partículas, y por lo tanto obtenemos

$$\langle \alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta \rangle = (\alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta) \pm (\alpha, \beta | O^{(2)} | \delta, \gamma). \quad (3.79)$$

Ahora deberíamos encontrar en segunda cuantificación un operador que reproduzca estos elementos de matriz y, por supuesto, funcione para N partículas en lugar de dos. Se verifica que

$$O = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (\alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta) c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma, \quad (3.80)$$

Segunda cuantificación

funciona tanto para fermiones como para bosones. No demostraremos esta relación en general, lo cual puede hacerse calculando los elementos de matriz a ambos lados, sino que simplemente comprobaremos que funciona para $N = 2$ partículas. Calculemos, a partir de (3.80), los elementos de matriz

$$\langle \alpha_0, \beta_0 | O | \gamma_0, \delta_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (\alpha, \beta | O^{(2)} | \gamma, \delta) \langle \alpha_0, \beta_0 | c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma | \gamma_0, \delta_0 \rangle. \quad (3.81)$$

Como $|\alpha_0, \beta_0\rangle = c_{\alpha_0}^\dagger c_{\beta_0}^\dagger |0\rangle$ tenemos que calcular promedios de la forma

$$\langle 0 | c_{\beta_0} c_{\alpha_0} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma c_{\gamma_0}^\dagger c_{\delta_0}^\dagger | 0 \rangle \quad (3.82)$$

lo cual puede realizarse mediante la técnica que discutimos antes, consistente en llevar hacia la derecha a los operadores de destrucción para que actúen sobre el vacío. Esto da

$$\langle 0 | c_{\beta_0} c_{\alpha_0} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma c_{\gamma_0}^\dagger c_{\delta_0}^\dagger | 0 \rangle = [\delta_{\alpha_0, \alpha} \delta_{\beta_0, \beta} \pm \delta_{\alpha_0, \beta} \delta_{\beta_0, \alpha}] [\delta_{\gamma_0, \gamma} \delta_{\delta_0, \delta} \pm \delta_{\gamma_0, \delta} \delta_{\delta_0, \gamma}]. \quad (3.83)$$

El signo + es el habitual para los bosones y el – para los fermiones. Físicamente significa que cuando los operadores de destrucción actúan en la forma

$$c_\delta c_\gamma | \gamma_0, \delta_0 \rangle, \quad (3.84)$$

tienen que destruir las dos partículas en los dos estados cuánticos posibles y así δ tiene que ser uno de los estados y γ el otro con el signo adecuado dependiendo de la (anti)simetría de la función de onda. Usando (3.83) en (3.81) de hecho recuperamos los mismos elementos de matriz que (3.79).

Físicamente, la fórmula (3.80) tiene una interpretación similar a la de los operadores de un solo cuerpo. El término $c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma$ destruye dos partículas con los números cuánticos γ y δ , para esto es necesario que el sistema contenga dos partículas (que es lo que debe ocurrir para que un operador de dos cuerpos pueda actuar). Luego recrea las dos partículas con dos nuevos números cuánticos α y β . La amplitud para este proceso está dada por los elementos de matriz del operador $O^{(2)}$ en una transición donde la primera partícula va del estado γ al estado α y la segunda del estado δ al estado β . El elemento de matriz se escribir para *kets* ordenados (son *kets* producto y por lo tanto más simples); los operadores de creación y destrucción se encargan de todas las permutaciones y de realizar esta transición para cualquier par de partículas en el sistema.

Ejemplos

La interacción más común entre los electrones es aquella que depende de la distancia entre las dos partículas. Los dos operadores de tal interacción

3.2 Operadores de creación y destrucción

son, por lo tanto,

$$O^{(2)} = V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2), \quad (3.85)$$

donde $\hat{\mathbf{r}}_1$ y $\hat{\mathbf{r}}_2$ son los operadores que miden la posición de la primera y la segunda partícula respectivamente. Excepcionalmente utilizaremos aquí la notación con el sombrero para indicar que son operadores. Por ejemplo, para la interacción de Coulomb es

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (3.86)$$

pero otros tipos de interacciones como una interacción local $V(\mathbf{r}) = U\delta(\mathbf{r})$ también son opciones posibles. Mantendremos V como función general en lo que sigue.

Para expresar el operador en segunda cuantificación, tenemos nuevamente que realizar la elección de la base. Debido a que el operador $V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$ es diagonal en la base de posición, comenzemos con ésta. Usando (3.80) y el hecho de que α es la base de posiciones, obtenemos

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 (\mathbf{r}_3 \mathbf{r}_4 | V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2) | \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_3}^\dagger c_{\mathbf{r}_4}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_1}, \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_3}^\dagger c_{\mathbf{r}_4}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_1}, \quad (3.87) \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_1}. \end{aligned}$$

Si se incluye el espín, la base completa se convierte en $\alpha = (\mathbf{r}, \sigma)$ y como el operador $V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$ es la identidad en el sector de espín, se obtiene

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}. \quad (3.88)$$

La expresión (3.88) puede escribirse en una forma más familiar utilizando las relaciones de (anti)comutación para fermiones

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} &= -c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}, \\ &= -c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger (\delta_{\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2 \sigma_2} - c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger) c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}, \quad (3.89) \\ &= -\delta_{\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2} + c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}, \\ &= -\delta_{\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2 \sigma_2} \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) + \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \rho_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2), \end{aligned}$$

Segunda cuantificación

(para bosones se obtiene una expresión similar, con signo +). El segundo término da lugar a la expresión

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \rho_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2), \quad (3.90)$$

que es la forma familiar de la interacción entre dos densidades de partículas (o cargas) en dos puntos diferentes. La diferencia es que ahora los ρ son operadores que miden la densidad en lugar de variables clásicas. El primer término se reduce a

$$\sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r} = 0) \rho_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) = V(\mathbf{r} = 0) N, \quad (3.91)$$

que es simplemente un término de potencial químico. Téngase en cuenta que puede ser infinito para algunas interacciones, como la interacción de Coulomb. Este primer término está ahí para corregir el hecho de que la expresión (3.90) contrariamente a (3.88) no contiene solo la interacción entre dos partículas diferentes. Efectivamente, (3.88) tiene dos operadores de destrucción a la derecha, lo que significa que los operadores solo pueden actuar en estados que contienen dos partículas. Por el contrario, (3.90) es de la forma

$$c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_1 \sigma_1} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}^{\dagger} c_{\mathbf{r}_2 \sigma_2}, \quad (3.92)$$

y por lo tanto puede actuar incluso si solo hay una partícula en el sistema. Por lo tanto, contiene una falsa “autointeracción” de la partícula consigo misma. Es esta interacción la que conduce al potencial químico (3.91) que debe incluirse adecuadamente junto con (3.90). No obstante, si se fija el número de partículas del sistema, entonces esta modificación es irrelevante ya que simplemente se absorbe en una re-definición del potencial químico y se puede usar (3.88) o (3.90) indistintamente.

Reescribamos ahora la interacción en la base del impulsos. Usando (3.80) y una base $\alpha = (\mathbf{k}, \sigma)$ se tiene

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2, \\ \mathbf{k}_3 \sigma_3, \mathbf{k}_4 \sigma_4}} (\mathbf{k}_3 \sigma_3, \mathbf{k}_4 \sigma_4) |V(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)| \mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2) c_{\mathbf{k}_3 \sigma_3}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_4 \sigma_4}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}. \quad (3.93)$$

Lo que sigue es calcular un elemento de matriz que involucra operadores de posición en una base de estados de momentos. Esto se realiza, como es habitual en mecánica cuántica, insertando resoluciones de la identidad en el espacio de coordenadas

$$\mathbf{1} = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|, \quad (3.94)$$

3.3 Resolviendo con segunda cuantificación

y utilizando la función de onda plana (3.67). Se obtiene

$$V = \frac{1}{2\Omega^2} \sum_{\substack{\sigma_1 \sigma_2 \\ \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-i(\mathbf{k}_3 \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_4 \mathbf{r}_2)} V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2)} \times c_{\mathbf{k}_3 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_4 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}, \quad (3.95)$$

A continuación aprovechamos que el potencial depende de la diferencia de coordenadas de las dos partículas y cambiamos a las variables de centro de masa $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ y coordenada relativa $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ para obtener

$$V = \frac{1}{2\Omega^2} \sum_{\substack{\sigma_1 \sigma_2 \\ \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}} \int d\mathbf{R} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{R}} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}/2} \times c_{\mathbf{k}_3 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_4 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \quad (3.96)$$

Finalmente, integramos en \mathbf{r} y \mathbf{R} ,

$$V = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{\sigma_1 \sigma_2 \\ \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} V(\mathbf{q} = \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) c_{\mathbf{k}_3 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_4 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}, \quad (3.97)$$

Comentemos brevemente esta expresión. La integración sobre \mathbf{R} da lugar al factor $\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$ que expresa la conservación de los momentos de las dos partículas antes y después de la interacción. Esto es consecuencia directa del hecho de que hemos elegido un potencial de interacción que es invariante frente a traslaciones $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ y, por lo tanto, el momento total ($\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$) y ($\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$) debe conservarse. La integral sobre la coordenada relativa conduce directamente a la transformada de Fourier del potencial de interacción con un vector de onda que corresponde al momento transferido de una a otra de las partículas durante la interacción. Finalmente, se puede reescribir el operador V teniendo en cuenta la restricción $\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$ como

$$V = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q} \\ \sigma_1 \sigma_2}} V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \quad (3.98)$$

que se representa gráficamente como se muestra en la figura 3.2

3.3. Resolviendo con segunda cuantificación

Ahora que tenemos las herramientas para expresar todos los operadores que necesitamos en segunda cuantificación, ya sea para el Hamiltoniano u

Segunda cuantificación

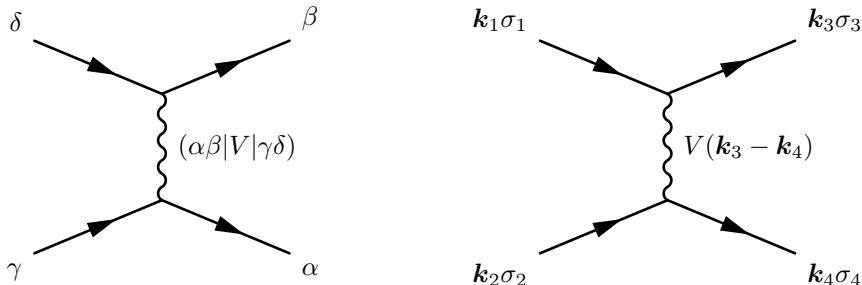


Figura 3.2: Visualización pictórica del término (3.98). Cada operador de destrucción está representado por una flecha entrante, cada creación por una saliente. Uno ve que la interacción puede verse como la dispersión de una partícula que va del estado $\mathbf{k}_1\sigma_1$ al $\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1$ con $\mathbf{q} = \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4$ por otra que va del estado $\mathbf{k}_2\sigma_2$ al estado $\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2$. La amplitud de estos elementos de matriz es la transformada de Fourier del potencial de interacción $V(\mathbf{q})$. Dado que el potencial es invariable por traslación en el espacio, el impulso se conserva a lo largo de la interacción. Dado que el potencial no depende de los grados de libertad del espín, la interacción conserva individualmente el espín de cada partícula. Esta representación se conoce como diagramas de Feynman. Es extremadamente útil cuando se construye la teoría de la perturbación.

otros observables físicos, y que sabemos calcular promedios de un número arbitrario de tales operadores de creación y destrucción en el vacío, podemos preguntarnos cómo resolver en la práctica un problema cuando conocemos el Hamiltoniano. En el esquema usual de la mecánica cuántica, escribimos la ecuación de Schrödinger y, a partir de ella, encontramos tanto los autovalores como las autofunciones, pero la esencia misma de la segunda cuantificación es evitar tener que lidiar con la función de onda, por lo que queremos seguir otra ruta para obtener tales cantidades. Cómo hacer esto es lo que examinaremos ahora.

3.3.1. Autovalores y autoestados

Veamos primero si podemos encontrar los valores propios o vectores propios de algún Hamiltoniano simple. Comencemos con un Hamiltoniano cuadrático general

$$H = \sum_{\alpha}^d A_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} \quad (3.99)$$

donde α es una base completa y los coeficientes A_{α} son números arbitrarios. Varios Hamiltonianos de sistemas físicos tienen tales formas, por ejemplo,

3.3 Resolviendo con segunda cuantificación

energía cinética de un sistema de partículas (3.73) y (3.74). Para Hamiltonianos cuadráticos y diagonales de la forma (3.99) el problema está resuelto. De hecho cada vector de p partículas de la forma

$$c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_3}^\dagger \dots c_{\alpha_p}^\dagger |0\rangle \quad (3.100)$$

es un vector propio de H con autovalor

$$E = \sum_{i=1}^p A_i \quad (3.101)$$

Para mostrar esto, ilustremos el cálculo en un estado de dos fermiones $|\psi\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle$ (se puede realizar un cálculo análogo para bosones):

$$\begin{aligned} H c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle &= \left(\sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha} \right) c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle, \\ &= \sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger (\delta_{\alpha, \alpha_1} - c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha}) c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle, \\ &= A_{\alpha_1} |\psi\rangle - \sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha} c_{\alpha_2}^\dagger |0\rangle, \\ &= A_{\alpha_1} |\psi\rangle - \sum_{\alpha} A_{\alpha} c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger (\delta_{\alpha, \alpha_2} - c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha}) |0\rangle, \\ &= A_{\alpha_1} |\psi\rangle - A_{\alpha_2} c_{\alpha_2}^\dagger c_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle, \\ &= A_{\alpha_1} |\psi\rangle + A_{\alpha_2} |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (3.102)$$

La física de este resultado es simple de entender. El operador $n_{\alpha} = c_{\alpha}^\dagger c_{\alpha}$ no es otra cosa que el número de ocupación, y cuenta las partículas en el estado α . Así, si en $|\psi\rangle$ hay una partícula en tal estado devolverá 1 y la energía correspondiente se contará en H .

Así vemos que si tenemos un Hamiltoniano que está en una forma cuadrática diagonal como (3.99) entonces podemos obtener todos los valores propios y vectores propios del sistema. A temperatura cero el estado fundamental consistirá simplemente (para los fermiones) en ocupar todos los estados con la mínima energía posible según el número de partículas en el sistema.

$$|F\rangle = \prod_{i=1}^N c_{\alpha_i}^\dagger |0\rangle, \quad (3.103)$$

si $E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_d$.

Segunda cuantificación

3.3.2. Valores de expectación térmicos

A temperatura finita también podemos calcular los promedios de muchos operadores. Un caso importante es el operador que da el número de partículas en el estado α_p

$$\begin{aligned} \langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle &= \frac{\text{Tr} [e^{-\beta H} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}]}{\text{Tr} [e^{-\beta H}]}, \\ &= \frac{\sum_{n_1, \dots, n_\Omega} \langle n_1, \dots, n_\Omega | e^{-\beta \sum_\alpha A_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_1, \dots, n_\Omega \rangle}{\sum_{n_1, \dots, n_\Omega} \langle n_1, \dots, n_\Omega | e^{-\beta \sum_\alpha A_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha} | n_1, \dots, n_\Omega \rangle}. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Usando el hecho de que (tanto para fermiones como para bosones) $[c_\alpha^\dagger c_\alpha, c_\gamma] = 0$ si $\alpha \neq \gamma$ y una relación similar para c_γ^\dagger , vemos que el término $e^{-\beta H}$ se factoriza en la forma

$$e^{-\beta H} = \prod_{j=1}^{\Omega} e^{-\beta A_{\alpha_j} c_{\alpha_j}^\dagger c_{\alpha_j}}. \quad (3.105)$$

Como en la traza cada término n_i es independiente, la media también se factoriza, y el numerador se convierte en

$$\left(\sum_{n_{\alpha_p}} \langle n_{\alpha_p} | e^{-\beta A_{\alpha_p} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_{\alpha_p} \rangle \right) \prod_{j \neq p} \left(\sum_{n_{\alpha_j}} \langle n_{\alpha_j} | e^{-\beta A_{\alpha_j} c_{\alpha_j}^\dagger c_{\alpha_j}} | n_{\alpha_j} \rangle \right). \quad (3.106)$$

Todos los términos con $j \neq p$ son idénticos en el numerador y el denominador y se cancelan entre sí. La traza se reduce entonces a

$$\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle = \frac{\sum_{n_{\alpha_p}} \langle n_{\alpha_p} | e^{-\beta A_{\alpha_p} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} | n_{\alpha_p} \rangle}{\sum_{n_{\alpha_p}} \langle n_{\alpha_p} | e^{-\beta A_{\alpha_p} c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p}} | n_{\alpha_p} \rangle}, \quad (3.107)$$

lo cual es bastante obvio físicamente. De hecho, dado que el Hamiltoniano es diagonal en α , sólo el estado α_p puede contribuir al promedio de un operador que solo involucra al estado α_p . Como $c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} |n_p\rangle = n_p |n_p\rangle$ simplemente obtenemos

$$\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle = \frac{\sum_{n_{\alpha_p}} e^{-\beta A_{\alpha_p} n_p} n_p}{\sum_{n_{\alpha_p}} e^{-\beta A_{\alpha_p} n_p}}. \quad (3.108)$$

Hasta ahora todo lo que hicimos es independiente de tener bosones o fermiones. Sin embargo, el resultado final dependerá de cuáles sean los valores permitidos de n_p . Para fermiones solo $n_p = 0$ y $n_p = 1$ están en la suma, y de este modo

$$\langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle = \frac{e^{-\beta A_{\alpha_p}}}{1 + e^{-\beta A_{\alpha_p}}} = \frac{1}{1 + e^{\beta A_{\alpha_p}}}, \quad (3.109)$$

3.3 Resolviendo con segunda cuantificación

y se recupera el factor de Fermi. Vemos que este es un resultado totalmente general (no limitado a autoestados del impulso) para Hamiltonianos bilineales y se está en equilibrio térmico.

Para bosones $n_p = 0, \dots, +\infty$, y así la suma se convierte en

$$\begin{aligned}
 \langle c_{\alpha_p}^\dagger c_{\alpha_p} \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\sum_{n_p=0}^{+\infty} e^{-\beta n_p A_{\alpha_p}} \right], \\
 &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left[\frac{1}{1 - e^{-\beta A_{\alpha_p}}} \right], \\
 &= \frac{e^{-\beta A_{\alpha_p}}}{1 - e^{-\beta A_{\alpha_p}}}, \\
 &= \frac{1}{e^{\beta A_{\alpha_p}} - 1},
 \end{aligned} \tag{3.110}$$

y se recupera el factor de Bose.

3.3.3. Transformaciones canónicas

Con Hamiltonianos cuadráticos diagonales podemos calcular entonces esencialmente cualquier valor de expectación o cantidad física que se necesite. Por supuesto, en general, el Hamiltoniano del sistema no será ni cuadrático ni diagonal. Entonces, resolver en segunda cuantificación significa esencialmente que tenemos que encontrar una transformación de los operadores c y c^\dagger que lleven al Hamiltoniano en una forma diagonal cuadrática. Aunque en principio cualquier transformación es posible, no todas las son buenas. Queremos que los nuevos operadores d y d^\dagger que son los resultados de la transformación sigan generando el espacio Fock. Significa que sólo podemos considerar transformaciones que conserven las relaciones canónicas de conmutación. Por supuesto, encontrar tales transformaciones es, en general, una tarea formidable. Sin embargo, hay una clase muy importante de transformaciones cuando el Hamiltoniano sigue siendo una forma cuadrática, pero no diagonal, que examinaremos en la siguiente sección.

Antes de hacerlo, comentemos finalmente que incluso sin resolver el Hamiltoniano se puede explotar la libertad de elegir diferentes operadores de creación y destrucción para usar una representación más conveniente. Como ya se mencionó, se permite toda transformación que conserve las relaciones canónicas de conmutación. Pongamos un ejemplo sencillo, se verán más ejemplos en la siguiente sección. La transformación más simple es la trans-

Segunda cuantificación

formación partícula-agujero.

$$\begin{aligned} c_\alpha^\dagger &= d_\alpha, \\ c_\alpha &= d_\alpha^\dagger. \end{aligned} \tag{3.111}$$

Para los fermiones es fácil comprobar, por sustitución de los operadores d verifican las relaciones canónicas de anticommutación. Por ejemplo

$$[d_\alpha, d_\beta^\dagger]_+ = [c_\alpha^\dagger, c_\beta]_+ = \delta_{\alpha,\beta}. \tag{3.112}$$

Si los operadores c_α y c_α^\dagger respectivamente destruyen y crean un electrón en el estado α , el operador d_α y d_α^\dagger también son operadores de destrucción y creación de “algo más”, que también tiene una estadística fermiónica y por lo tanto, se puede utilizar para construir un espacio de Fock. En ese caso particular, el operador d_α destruye un hueco en el estado α (que es idéntico a crear un electrón) y el operador d_α^\dagger crea un hueco (que es lo mismo que destruir un electrón).

Un punto importante al hacer la transformación es no olvidar modificar también el vacío. De hecho, el vacío de las partículas d no es el mismo que el vacío de las partículas c . Se tiene así $|0_c\rangle$ y $|0_d\rangle$. El vacío de las partículas d se define como siempre por

$$d_\alpha|0_d\rangle = 0,$$

para todos los estados α . Es fácil comprobar usando la relación (3.111) que

$$|0_d\rangle = \prod_\alpha c_\alpha^\dagger |0_c\rangle.$$

Destruir una partícula d sobre este vacío es equivalente a crear una de tipo c . Pero esto no es posible, porque todos los estados están ocupados.

Más generalmente, consideremos un Hamiltoniano cuadrático, no diagonal, arbitrario:

$$H = \sum_{i,j=1}^{N_s} c_i^\dagger A_{ij} c_j \tag{3.113}$$

donde A_{ij} son los elementos de una matriz hermética \mathbf{A} , y N_s es un número del orden del volumen del sistema, Ω , que especifica la cantidad de estados accesibles de partícula independiente. Para simplificar la notación conviene escribir en forma matricial:

$$H = \mathbf{c}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{c} \tag{3.114}$$

donde

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{N_s} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}^\dagger = (c_1^\dagger \ c_2^\dagger \ \cdots \ c_{N_s}^\dagger) \tag{3.115}$$

3.3 Resolviendo con segunda cuantificación

es un vector de N_s elementos, donde cada elemento es un operador de creación, y su transpuesto conjugado. Obsérvese que hemos introducido la notación con una barra sobre \mathbf{c} para indicar la operación de transposición sobre el vector en conjunto con el dagado de sus elementos. La utilidad de esta notación quedará más clara en la próxima sección. La matriz \mathbf{A} , al ser hermítica, puede ser diagonalizada por una matriz unitaria \mathbf{U} ,

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U} = \tilde{\mathbf{A}} \quad (3.116)$$

donde $\tilde{\mathbf{A}}$ es la matriz diagonal que contiene a los autovalores de \mathbf{A} , A_1, \dots, A_{N_s} y \mathbf{U} se construye ordenando los autovectores de \mathbf{A} en columnas. Una vez hallada la matriz \mathbf{U} , podemos utilizarla para definir un nuevo conjunto de operadores d_α mediante la transformación

$$\mathbf{d} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{c}, \quad (\text{en componentes, } d_\alpha = \sum_{k=1}^{N_s} U_{i\alpha}^* c_i) \quad (3.117)$$

de manera tal que el Hamiltoniano, expresado en términos de los d resulta

$$H = \mathbf{d}^\dagger \mathbf{U}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{U} \mathbf{d} = \mathbf{d}^\dagger \tilde{\mathbf{A}} \mathbf{d} = \sum_\alpha A_\alpha d_\alpha^\dagger d_\alpha. \quad (3.118)$$

Es decir, resulta ser de la forma diagonal (3.99).

Una condición importante para que esto funcione es que la transformación (3.117) conserve los anticonmutadores entre d , que es el caso debido a su unitariedad, ya que

$$[d_\alpha^\dagger, d_\beta]_+ = \sum_{ij} U_{i\alpha} U_{\beta j}^\dagger [c_i^\dagger, c_j]_+ = \sum_j U_{j\alpha} U_{\beta j}^\dagger = (\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U})_{\beta\alpha} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.119)$$

Una vez hallada la forma diagonal (3.118), el estado fundamental de N partículas está dado por (3.103)

$$|\mathcal{F}\rangle = \prod_{\alpha=1}^N d_\alpha^\dagger |0_d\rangle \quad (3.120)$$

donde $|0_d\rangle$ es el estado de vacío de los operadores d , que satisface

$$d_\alpha |0_d\rangle = 0 \quad \forall \alpha. \quad (3.121)$$

Para este tipo de transformación, el vacío resulta invariante, es decir $|0_c\rangle = |0_d\rangle$. En efecto, debido a que los d están linealmente relacionados a los c , si aplicamos algún d_α sobre $|0_c\rangle$, encontramos

$$d_\alpha |0_c\rangle = \sum_j U_{\alpha j}^\dagger c_j |0_c\rangle = 0, \quad (3.122)$$

Segunda cuantificación

y viceversa, si aplicamos c_j sobre $|0_d\rangle$ también se anula, utilizando la transformación inversa.

Por supuesto, en general, la matriz $A_{\alpha\beta}$ es de tamaño $N_s \times N_s$ y la diagonalización será muy difícil de realizar analíticamente. Sin embargo, hay casos simples donde puede hacerse. En especial, obsérvese que la transformada de Fourier (3.69), utilizada para relacionar la base de coordenadas, donde la energía cinética de los electrones en una caja es no diagonal, con la base de momentos, donde sí lo es, es un ejemplo de tal transformación unitaria.

3.3.4. Ejemplo: Modelo *tight binding*

Veamos otro modelo que puede resolverse mediante este tipo de transformaciones: el Hamiltoniano de ligadura fuerte o *tight-binding* que vimos en la sección 1.11. Adicionalmente, esto nos permitirá escribir este Hamiltoniano en segunda cuantificación. Los estados en cada sitio $|i\rangle$ proporcionan una base completa y, por lo tanto, podemos definir los operadores de creación y destrucción asociados con él, es decir, c_i^\dagger es el operador que crea una partícula en el sitio i . Estos son los análogos a los c_r^\dagger utilizados al estudiar operadores de un cuerpo, sólo que en un espacio discreto. La expresión en segunda cuantificación de H se escribe

$$H = \sum_{i,j} (i|H^{(1)}|j) c_i^\dagger c_j,$$

donde $H^{(1)}$ es el Hamiltoniano (1.37). Obtenemos así

$$H = \epsilon \sum_i c_i^\dagger c_i - t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j. \quad (3.123)$$

El segundo término describe un proceso en el que una partícula en el sitio i reaparece en el sitio vecino j y viceversa. Si bien es posible hacer todo este análisis en dimensión arbitraria, para simplificar la diagonalización partición supondremos que los sitios electrónicos se acomodan en un anillo, e identificamos el sitio en la posición $N_s + 1$ con el sitio 1, es decir, introducimos un operador de destrucción fermiónico adicional

$$c_{N_s+1} \equiv c_1, \quad (3.124)$$

y su complejo conjugado. Este Hamiltoniano es obviamente cuadrático pero no diagonal. En el lenguaje de (3.113) corresponde a una matriz tri-diagonal. Para diagonalizarla, primero pensamos en la física del problema: dado que el Hamiltoniano es invariante frente a traslaciones, el momento debe ser un buen número cuántico, y vamos utilizar entonces una combinación lineal de

3.3 Resolviendo con segunda cuantificación

operadores de creación y destrucción c_i que corresponden a su transformada de Fourier. Este es exactamente el mismo razonamiento que el que conduce a (3.69), sólo que ahora utilizaremos una transformada de Fourier discreta. Tratados simplemente como una combinación lineal de operadores, podemos definir

$$d_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{j=0}^{N_s-1} e^{ikr_j} c_j^\dagger, \quad (3.125)$$

donde hemos usado un nombre diferente d para enfatizar que se trata de nuevos operadores, e introducido las posiciones $r_j = aj$ donde a es la constante de red, y

$$k = \frac{2\pi n_k}{N_s a}, \quad n_k \in \mathbb{Z}.$$

Se puede comprobar inmediatamente que los operadores d_k cumplen las reglas canónicas de conmutación. Verifiquemos uno de los anticonmutadores y dejemos las otras relaciones como ejercicio:

$$\begin{aligned} [d_k, d_q^\dagger]_+ &= \frac{1}{N_s} \sum_{ij} e^{-ikr_i} e^{iqr_j} [c_i, c_j^\dagger]_+, \\ &= \frac{1}{N_s} \sum_{ij} e^{-ikr_i} e^{iqr_j} \delta_{ij}, \\ &= \frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(k-q)r_j}, \\ &= \delta_{kq}. \end{aligned} \quad (3.126)$$

Los operadores d_k son, por lo tanto, buenos operadores de Fermiones. Hay exactamente N_s operadores diferentes (el tamaño del espacio de Hilbert no puede cambiar) y k está confinado dentro de la primera zona de Brillouin $k \in [-\pi/a, \pi/a]$ como se discutió para la solución en primera cuantificación. Además, como resulta obvio de la definición (3.125), $|0_d\rangle = |0_c\rangle$. La transformación (3.125) se invierte fácilmente

$$c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{-ikr_j} d_k^\dagger, \quad (3.127)$$

y así, reemplazando los c_j en (3.123) y haciendo un poco de álgebra, se encuentra

$$H = \epsilon \sum_k d_k^\dagger d_k - \sum_k 2t \cos(ka) d_k^\dagger d_k. \quad (3.128)$$

Ahora que el Hamiltoniano es diagonal, podemos usar los operadores d_k para obtener el estado fundamental y los diversos promedios. A nivel físico, hemos

Segunda cuantificación

utilizado que, dado que la cantidad de movimiento se conserva, se pueden diagonalizar simultáneamente los operadores de impulso y el Hamiltoniano. Por lo tanto, el Hamiltoniano es una matriz diagonal por bloques en la base a los autovectores del operador impulso. Como esta base es de tamaño N_s (N_s diferentes k valores en la primera zona de Brillouin) nos queda para cada valor de k una matriz de 1×1 a diagonalizar, con lo cual el problema está completamente resuelto.

3.3.5. Términos anómalos

Estudiemos ahora un Hamiltoniano más general, que incluya términos de la forma $c^i c_j$. Este tipo de términos se denominan anómalos, y hacen que en el Hamiltoniano no commute con el operador N y por lo tanto no conserve el número de partículas, y por lo tanto no tiene una expresión simple en primera cuantificación. Típicamente aparecen cuando uno considera teorías para superconductividad, tales como el llamado Hamiltoniano de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) que estudiaremos más adelante. Consideremos el Hamiltoniano

$$H = \sum_{ij=1}^{N_s} c_i^\dagger A_{ij} c_j + \frac{1}{2} \sum_{ij=1}^{N_s} c_i B_{ij} c_j + \text{h.c.} \quad (3.129)$$

siendo $i, j = 1, \dots, N_s$, \mathbf{A} una matriz hermítica ($\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$), y \mathbf{B} una matriz antisimétrica ($\mathbf{B}^t = -\mathbf{B}$), ambas condiciones impuestas por la necesidad de que H sea un operador hermítico en conjunto con la estadística fermiónica. Para escribirlo en forma matricial, debemos considerar ahora que existen estos dos tipos de términos. Si buscamos utilizar una sola matriz, no será posible que su dimensión sea N_s . La forma usual de hacerlo consiste en introducir la notación de Nambu, en la cual se define un vector o spinor de Nambu de dimensión $2N_s$ cuyos elementos son tanto los operadores de creación como de destrucción:

$$\Psi^\dagger = \begin{pmatrix} c_1^\dagger & \cdots & c_{N_s}^\dagger & c_1 & \cdots & c_{N_s} \end{pmatrix} \quad (3.130)$$

en conjunto con la matriz

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & -\mathbf{B}^* \\ \mathbf{B} & -\mathbf{A}^* \end{pmatrix}, \quad (3.131)$$

que se conoce como Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes. Con estas definiciones el Hamiltoniano se escribe

$$H = \frac{1}{2} \Psi^\dagger \mathbf{H} \Psi + E_0 \quad (3.132)$$

3.3 Resolviendo con segunda cuantificación

dónde

$$E_0 = -\frac{1}{2} \operatorname{tr} \mathbf{A}, \quad (3.133)$$

Obsérvese que a matriz \mathbf{H} continúa siendo hermítica (para mostrarlo es importante la antisimetría de \mathbf{B}) y por lo tanto diagonalizable mediante una transformación unitaria \mathbf{M} de $2N_s \times 2N_s$, de manera similar a como lo realizamos en la sección anterior, de manera tal que

$$\mathbf{M}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{M} = \tilde{\mathbf{H}} = \operatorname{diag}(\Lambda_1, \dots, \Lambda_{N_s}, \bar{\Lambda}_1, \dots, \bar{\Lambda}_{N_s}), \quad (3.134)$$

donde Λ_α y $\bar{\Lambda}_\alpha$ son los autovalores de \mathbf{H} . El espinor transformado Φ se relaciona con el sin transformar a través de \mathbf{M} :

$$\Phi = \mathbf{M} \Psi, \quad (3.135)$$

Y entonces el Hamiltoniano, en términos de los nuevos operadores, resulta

$$H = \frac{1}{2} \Phi^\dagger \mathbf{M}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{M} \Phi = \frac{1}{2} \Phi^\dagger \tilde{\mathbf{H}} \Phi \quad (3.136)$$

Si escribimos al vector Φ en términos de un nuevo conjunto de operadores η_α, ξ_α en la forma

$$\Phi^\dagger = (\eta_1^\dagger \ \cdots \ \eta_{N_s}^\dagger \ \xi_1^\dagger \ \cdots \ \xi_{N_s}^\dagger). \quad (3.137)$$

el Hamiltoniano se escribe

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N_s} \Lambda_\alpha \eta_\alpha^\dagger \eta_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N_s} \bar{\Lambda}_\alpha \xi_\alpha^\dagger \xi_\alpha \quad (3.138)$$

Al ser unitaria, la transformación \mathbf{M} preserva los commutadores y es por lo tanto canónica, pero observemos que ahora la transformación mezcla a los operadores de creación y destrucción.

La forma (3.138) del Hamiltoniano posee dos términos y a simple vista daría la impresión de que como consecuencia de la existencia de términos anómalos debemos duplicar el número de grados de libertad. Veamos que esto es sólo así en apariencia.

Observemos que \mathbf{H} satisface la relación

$$\mathbf{H} = -\sigma_x \mathbf{H}^* \sigma_x, \quad (3.139)$$

donde la matriz de Pauli σ_x actúa sobre la estructura de Nambu (3.131), de 2×2 . Esta transformación constituye una simetría de \mathbf{H} , y resulta ser

Segunda cuantificación

antiunitaria⁵. La transformación (3.139) no es más que la simetría partícula-hueco. Esto implica que si ψ es un autoestado de \mathbf{H} con autovalor λ ,

$$\mathbf{H}\psi = \lambda\psi,$$

entonces ψ^* es autoestado de \mathbf{H}^* con el mismo autovalor (que es real, dado que \mathbf{H} es hermítico):

$$\mathbf{H}^*\psi^* = \lambda\psi^*$$

y entonces el vector $\psi' = \sigma_x\psi^*$ también es vector de \mathbf{H} con autovalor $-\lambda$:

$$\mathbf{H}\psi' = \mathbf{H}\sigma_x\psi^* = -\sigma_x\mathbf{H}^*\sigma_x\sigma_x\psi^* = -\sigma_x\mathbf{H}^*\psi^* = -\lambda\sigma_x\psi^* = -\lambda\psi'.$$

Dado que son vectores distintos, de otro modo tendrían distinto autovalor (a menos que $\lambda = 0$), si escribimos al autovector en la forma

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

donde u y v son vectores columna de N_s elementos, entonces

$$\psi' = \begin{pmatrix} v^* \\ u^* \end{pmatrix}$$

La matriz \mathbf{M} , que posee los autovectores en columnas, posee entonces la forma

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} u & v^* \\ v & u^* \end{pmatrix}, \quad (3.142)$$

donde u y v son matrices de $N_s \times N_s$. En otras palabras, la forma (3.142) es consecuencia de la simetría partícula-hueco de \mathbf{H} , ec. (3.139). Los autovalores $\bar{\Lambda}_\alpha$ puede tomarse como $\bar{\Lambda}_\alpha = -\Lambda_\alpha$ y la forma diagonal de la matriz de autovalores se escribe entonces

$$\tilde{\mathbf{H}} = \text{diag}(\Lambda_1, \dots, \Lambda_{N_s}, -\Lambda_1, \dots, -\Lambda_{N_s}), \quad (3.143)$$

⁵Una transformación antiunitaria K entre vectores $|x\rangle, |y\rangle$ de un espacio de Hilbert ($|y\rangle = K|x\rangle$) es un operador antilineal (es decir, tal que $K(a|x\rangle + b|y\rangle) = a^*K|x\rangle + b^*K|y\rangle$ con $a, b \in \mathbb{C}$) tal que transforma el producto escalar en el producto escalar conjugado:

$$\langle x|K^\dagger K|y\rangle = \langle x|y\rangle^*. \quad (3.140)$$

Este tipo de operadores, al igual que los operadores unitarios, no cambia el resultado de una medida, es decir que

$$|\langle x|K^\dagger K|y\rangle|^2 = |\langle x|y\rangle|^2. \quad (3.141)$$

3.3 Resolviendo con segunda cuantificación

donde Λ_α son todos positivos. Observemos además la transformación (3.135) se escribe explícitamente

$$\eta_i = u_{ij}c_j + v_{ij}^*c_j^\dagger, \quad (3.144)$$

$$\xi_i = v_{ij}c_j + u_{ij}^*c_j^\dagger, \quad (3.145)$$

pero entonces ξ_i no es más que el adjunto de η_i , $\xi_i = \eta_i^\dagger$, y el Hamiltoniano se escribe

$$H = \sum_{j=1}^{N_s} \Lambda_j \eta_j^\dagger \eta_j + \text{Const.} \quad (3.146)$$

De modo que sólo tenemos N_s grados de libertad, como se esperaba físicamente. Para diagonalizar el Hamiltoniano debimos duplicar el número de grados de libertad introduciendo huecos, pero vimos que esta duplicación es espuria. Sin embargo, en determinadas circunstancias puede ser útil mantener la duplicación, pero en ese caso debe recordarse que el par de niveles con energía $\pm \Lambda_j$ no corresponde a dos estados cuánticos distintos, sino a uno solo, que es una superposición coherente de electrones y huecos —una cuasipartícula de Bogoliubov, el bogoliubon: tiene una energía de excitación Λ_j , y es creada por el operador $\eta_j^\dagger = u_{ij}c_j + v_{ij}^*c_j^\dagger$. Llenar el estado asociado en energía $-\Lambda_j$ es equivalente a vaciar el estado de energía positiva.

El Hamiltoniano (3.129) no conserva el número de partículas, ya que no commuta con $N = \sum_j c_j^\dagger c_j$, aunque conserva el número de cuasi partículas, $M = \sum_j \eta_j^\dagger \eta_j$. Como consecuencia de que la transformación \mathcal{M} mezcla operadores c_j y c_j^\dagger el vacío no es invariante, tenemos un vacío $|0_c\rangle$ que satisface $c_j|0_c\rangle = 0$, y un vacío $|0_\eta\rangle$ que verifica $\eta_j|0_\eta\rangle = 0$. Encontrar la relación entre ambos puede ser complicado y depende de la forma de A y B . Lo haremos en el caso específico del modelo BCS más adelante. Una vez determinado $|0_\eta\rangle$, el estado fundamental de \mathcal{M} cuasipartículas se escribe como un mar de Fermi de bogoliubones:

$$|F\rangle = \prod_j^{\mathcal{M}} \eta_j^\dagger |0_\eta\rangle. \quad (3.147)$$

cuya energía resulta

$$E = \sum_j^{\mathcal{M}} \Lambda_j \quad (3.148)$$

El estado de mínima energía para un cierto potencial químico es entonces aquel con $\mathcal{M} = 0$ cuasipartículas, es decir, el vacío mismo de los Bogoliubones.

Si bien el número de partículas no es una cantidad conservada, el operador de paridad global,

$$P = (-1)^N = e^{i\pi N} \quad (3.149)$$

Segunda cuantificación

comuta con H , y por lo tanto los autoestados de energía poseen paridad fermiónica definida ± 1 .

3.4. Gas de Fermi

Desarrollaremos las propiedades básicas de un gas de N fermiones no interactuantes de masa m , utilizando las técnicas de segunda cuantización. Esto lo haremos no sólo por tratarse de un buen ejercicio, sino también por la enorme utilidad que tienen los resultados que obtendremos, como una aproximación de orden cero, en el tratamiento de sistemas de muchos fermiones. Podemos imaginarnos que estos fermiones están en una caja cúbica de volumen V , que eventualmente puede ser muy grande, y que se imponen condiciones de contorno periódicas. La base de partícula independiente se refiere, por lo tanto, a los autoestados de impulso $\hbar\mathbf{k}$ y proyección de *spin* $\sigma = \pm \frac{1}{2}$:

$$\varphi_{\kappa}(rs) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \chi_{\sigma}(s); \quad \kappa = \{\mathbf{k}, \sigma\} \quad (3.150)$$

con energía $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ y degenerados en *spin* $\sigma = \pm \frac{1}{2}$.

Para construir el estado fundamental del gas de Fermi ocupamos a cada uno de los estados disponibles de partícula independiente más bajos con un fermión, de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli. Esta ocupación es de a pares ya que las energías de partícula independiente no depende de *spin* y por cada $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ tenemos un fermión con $\sigma = +\frac{1}{2}$ y uno con $\sigma = -\frac{1}{2}$. Los niveles llenos conforman el mar de Fermi y el último nivel lleno, con impulso \mathbf{k}_F y energía $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$, se llama *nivel de Fermi* o *superficie de Fermi* (en el espacio de los impulsos). La estructura del estado fundamental es:

$$|F\rangle = \prod_{k \leq k_F, \sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |0\rangle. \quad (3.151)$$

La energía del nivel de Fermi se halla de la condición que el número total de partículas N sea,

$$\begin{aligned} N &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle F | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} | F \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \begin{array}{ll} 1 & ; k \leq k_F \\ 0 & ; k > k_F \end{array} \right\} \\ &= 2 \sum_{k \leq k_F} 1 = 2 \sum_{\mathbf{k}} \theta(k_F - k). \end{aligned} \quad (3.152)$$

Convirtiendo la suma en la integral, *i. e.*,

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \theta(k_F - k) \rightarrow \int \frac{\theta(k_F - k) k^2 dk}{(2\pi)^3} d\Omega = \int_0^{k_F} \frac{k^2 dk^2}{2\pi^2} \quad (3.153)$$

3.4 Gas de Fermi

se obtiene,

$$N = \frac{\Omega}{\pi^2} \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \Omega \quad (3.154)$$

o sea,

$$\rho_0 = \frac{N}{\Omega} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (3.155)$$

donde ρ_0 es la densidad media de partículas.

Calculemos ahora la densidad de partículas en el estado fundamental, que es

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \langle F | \hat{\rho}(\mathbf{r}\sigma) | F \rangle = \sum_s \langle F | c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}\sigma} | F \rangle, \quad (3.156)$$

o

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}'-\mathbf{k})} \langle F | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} | F \rangle. \quad (3.157)$$

El último valor medio será nulo a menos que $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, ya que si removemos del estado fundamental una partícula con impulso $\hbar\mathbf{k}'$, podremos volver de nuevo a ese estado sólo creando una partícula con el mismo impulso. Por lo tanto,

$$\langle F | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} | F \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.158)$$

y

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma} = \rho_0. \quad (3.159)$$

Como era de esperar, la densidad del gas es uniforme. Una cantidad muy útil, como veremos más adelante, es la matriz densidad de una partícula definida como

$$G_{\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle F | c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma} | F \rangle, \quad (3.160)$$

es decir, la amplitud de remover del estado fundamental una partícula que está en el punto \mathbf{r}' con *spin* σ para luego ponerla de nuevo al estado fundamental, pero ahora en la posición \mathbf{r} . Utilizando (3.69),

$$c_{\mathbf{r}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.161)$$

y (3.150) el cálculo es:

$$\begin{aligned} G_{\sigma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \langle F | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} | F \rangle \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma}, \end{aligned} \quad (3.162)$$

Segunda cuantificación

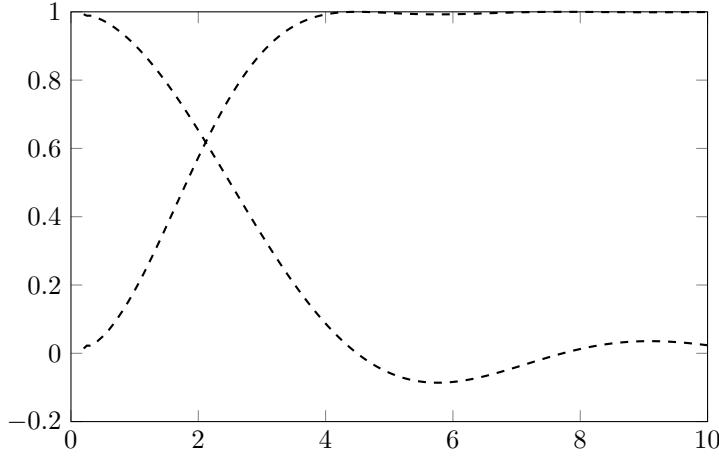


Figura 3.3: Función de correlación $C(u)$ en línea punteada, y $1 - C^2(u)$ en línea sólida.

o

$$G_\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{\Omega} \sum_{k \leq k_F} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \rightarrow \int_0^{k_F} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}. \quad (3.163)$$

Evaluando la integral se tiene⁶

$$G_\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\rho_0}{2} C(k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|); \quad C(u) = \frac{3}{u^3} (\sin u - u \cos u) = \frac{3j_1(u)}{u}. \quad (3.167)$$

A la cantidad $C(k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ se la denomina *función de correlación* y tiene las propiedades de tener un máximo para $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, con $C(0) = 1$, y de decaer rápidamente para $k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > 1$ (ver Fig. 3.3).

Vamos a calcular ahora la probabilidad de hallar una partícula del sistema en el punto \mathbf{r}' (con *spin* σ'), sabiendo que hay otra partícula en el punto \mathbf{r} (con *spin* σ). Esto significa que primero removemos del sistema una partícula que está en $\mathbf{r}\sigma$, dejando las $N - 1$ partículas en el estado $|\mathbf{r}\sigma\rangle = c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger |F\rangle$. Posteriormente, calculamos el valor medio de la densidad $\rho(\mathbf{r}', \sigma')$ en ese

⁶

$$G_\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_0^{k_F} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_{-1}^1 e^{-ik|\mathbf{r}' - \mathbf{r}'|u} du \quad (3.164)$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_0^{k_F} k dk \sin k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \quad (3.165)$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} (\sin k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cos k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (3.166)$$

3.4 Gas de Fermi

nuevo estado. Es decir, evaluamos

$$\left(\frac{\rho_0}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \langle F | c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'} c_{\mathbf{r}\sigma} | F \rangle. \quad (3.168)$$

Utilizando la representación en el espacio \mathbf{k} , (3.69), tenemos

$$\left(\frac{\rho_0}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{r}} \langle F | c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}_3\sigma'} c_{\mathbf{k}_4\sigma} | F \rangle. \quad (3.169)$$

Dado que $c_{\mathbf{k}\sigma}|F\rangle = 0$, si $k > k_F$ (*i.e.*, no podemos destruir partículas que no están), vemos de inmediato que la sumatoria está restringida a los estados con $|\mathbf{k}_3|, |\mathbf{k}_4| \leq k_F$. Además, el valor de expectación se anula a menos que las partículas que repongamos tengan los mismos impulsos y *espines* que las partículas removidas. La forma de hacerlo es emplear los anticommutadores, y escribir

$$\begin{aligned} \langle F | c_\kappa^\dagger c_\lambda^\dagger c_\mu c_\nu | F \rangle &= \langle F | c_\kappa^\dagger (\delta_{\lambda,\mu} - c_\mu c_\lambda^\dagger) c_\nu | F \rangle = \delta_{\lambda\mu} \langle F | c_\kappa^\dagger c_\nu | F \rangle - \langle F | c_\kappa^\dagger c_\mu c_\lambda^\dagger c_\nu | F \rangle \\ &= \delta_{\lambda,\mu} \delta_{\kappa,\nu} - \delta_{\kappa,\mu} \delta_{\lambda,\nu} \end{aligned} \quad (3.170)$$

con $\kappa, \lambda, \mu, \nu \leq k_F$, y por lo tanto⁷

$$\begin{aligned} \left(\frac{\rho_0}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}^{k_F} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{r}} (\delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_4} - \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_4}), \\ &\quad (3.171) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}^{k_F} \left[1 - \delta_{\sigma\sigma'} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \right], \quad (3.172)$$

$$= \left(\frac{\Omega}{2N} \right)^2 - \delta_{\sigma\sigma'} G_\sigma^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.173)$$

donde hemos utilizado (3.163). Finalmente de (3.167) se tiene

$$g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 1 - \delta_{\sigma\sigma'} C^2(k_F | \mathbf{r} - \mathbf{r}' |). \quad (3.174)$$

La cantidad $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ se denomina *densidad de correlación para dos partículas* y en la Fig. 3.3 se ilustra su comportamiento.

Veamos el significado físico de esta densidad de correlación. Si los *espines* son diferentes, la probabilidad relativa de encontrar las partículas en \mathbf{r} y \mathbf{r}'

⁷Notemos que, como las sumas se extienden solo sobre estados ocupados, no se pueden usar relaciones de completitud.

Segunda cuantificación

no depende de la distancia $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Esto es lo mismo que se obtendría clásicamente para un gas de partículas que no interactúan entre sí. En cambio, si los dos electrones tienen el mismo *spin* habrá una reducción muy grande en la probabilidad de hallarlos a distancias menores que k_F^{-1} . Es decir que el principio de Pauli produce correlaciones muy importantes sobre el movimiento de partículas con el mismo *spin*. Ocurre como si los fermiones con la misma orientación de *spin* se rechazaran entre sí. Esta “repulsión” efectiva proviene de la simetría de intercambio de la función de onda y no de una fuerza real entre las partículas. Para separaciones grandes $g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ se aproxima a uno, o sea al mismo valor que tienen dos partículas con *espines* diferentes.

Calculemos ahora la energía del estado fundamental del gas de Fermi. En particular, vamos a considerar que se trata de un gas de electrones de densidad media ρ_0 , que interactúan entre sí por medio de la interacción Coulombiana. Partiremos del Hamiltoniano,

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (3.175)$$

donde

$$\hat{T} = \sum_i \hat{t}(\mathbf{r}_i); \quad \hat{t}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m} \quad (3.176)$$

es el operador para la energía cinética, y

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \hat{v}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j); \quad \hat{v}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (3.177)$$

es el operador para la energía potencial. Dado que

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.178)$$

la energía cinética será⁸

$$E^{(0)} = \langle F | \hat{T} | F \rangle = \frac{3}{5} \varepsilon_F N. \quad (3.180)$$

⁸

$$\langle F | \hat{T} | F \rangle = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \theta(k - k_F) \rightarrow 2\Omega \int_0^{k_F} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = \Omega \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^5}{5\pi^2} = \frac{3}{5} \varepsilon_F N \quad (3.179)$$

3.4 Gas de Fermi

Para la energía potencial, podemos utilizar la ecuación (3.88)

$$E^{(1)} = \langle F | \hat{V} | F \rangle \quad (3.181)$$

$$= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{v}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{\sigma\sigma'} \langle F | c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{r}'\sigma'} c_{\mathbf{r}\sigma} | F \rangle \quad (3.182)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_0}{2} \right)^2 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{v}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{\sigma\sigma'} g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.183)$$

$$= \left(\frac{\rho_0}{2} \right)^2 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{v}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [2 - C^2(k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)], \quad (3.184)$$

donde hemos usado (3.174). Escribimos ahora,

$$E^{(1)} = E_D^{(1)} + E_I^{(1)} \quad (3.185)$$

con

$$E_D^{(1)} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2 \rho_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (3.186)$$

y

$$E_I^{(1)} = -\frac{e^2 \rho_0^2}{4} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{C^2(k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (3.187)$$

$E_D^{(1)}$ representa la interacción media de las partículas entre sí y se denomina energía directa ó energía de Hartree, mientras que $E_I^{(1)}$ es la energía de intercambio y se debe al principio de exclusión de Pauli. Haciendo el cambio de variables: $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ y $\mathbf{r} - \mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$, también resulta,

$$E_D^{(1)} = \frac{N \rho_0 e^2}{2} v_0; \quad v_0 = \int \frac{d\mathbf{r}}{r}, \quad (3.188)$$

y

$$E_I^{(1)} = -\frac{N \rho_0 e^2}{4} \int d\mathbf{r} \frac{C^2(k_F r)}{r}. \quad (3.189)$$

Los electrones de conducción en un metal corresponden al gas de electrones que estamos considerando. Notemos que en cualquier situación física nunca se tiene un gas aislado, sino que hay siempre un número suficiente de cargas positivas, que hacen que el sistema, como un todo, sea neutro. En una primera aproximación, todos los iones positivos dentro del metal o dentro de un plasma, se pueden reemplazar por un fondo (o “background”) de densidad de cargas positivas $\rho_0 e$. La autoenergía de ese fondo es:

$$\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^2 \rho_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (3.190)$$

Segunda cuantificación

que junto con la energía electrostática media entre el fondo positivo y los electrones,

$$-\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \frac{e^2 \rho_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (3.191)$$

cancela exactamente la energía de Hartree de los electrones. Por lo tanto, en primer orden de aproximación, la interacción neta en un gas de electrones es precisamente la energía de intercambio (3.189), que integrando resulta:

$$E_I^{(1)} = -\frac{3}{4\pi} e^2 k_F. \quad (3.192)$$

Definiendo ahora la distancia media entre las partículas, d , por medio de

$$\Omega = N \frac{4\pi d^3}{3}, \quad (3.193)$$

resulta,

$$k_F = \frac{3\pi^2 N}{\Omega} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{d} \cong 1,92 d^{-1}, \quad (3.194)$$

es decir que $k_F^{-1} \cong d/2$. Otra longitud característica es el radio de Bohr, $a_0 = \hbar^2/me^2$. Introducimos entonces un parámetro sin dimensiones,

$$r_s = \frac{d}{a_0} \quad (3.195)$$

por medio del cual escribimos

$$E^{(0)} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} N = \frac{N}{r_s^2} \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{e^2}{2a_0} = N \frac{2,12}{r_s^2} \frac{e^2}{2a_0} \quad (3.196)$$

$$E_I^{(1)} = -\frac{N}{r_s} \frac{3}{2\pi} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{e^2}{2a_0} = -N \frac{0,916}{r_s} \frac{e^2}{2a_0} \quad (3.197)$$

La energía total $\langle F | \hat{H} | F \rangle$, evaluada con una función de onda antisimetrizada, se denomina energía de Hartree-Fock (HF)

$$E_{HF} = N \left(\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + \dots \right) \frac{e^2}{2a_0}. \quad (3.198)$$

De la Fig. 3.4 vemos que para $r_s \gtrsim 2$ resulta $E_{HF} < 0$, lo que indica que el sistema se torna ligado. El principio de exclusión juega un papel importante en esto, evitando que los electrones con los mismos spines se acerquen y de este modo hace disminuir su energía electrostática. Notemos que la aproximación de HF es solo válida para gases densos ($r_s \ll 1$) y no para los metales con $1,8 \leq r_s \leq 5,5$.

3.4 Gas de Fermi

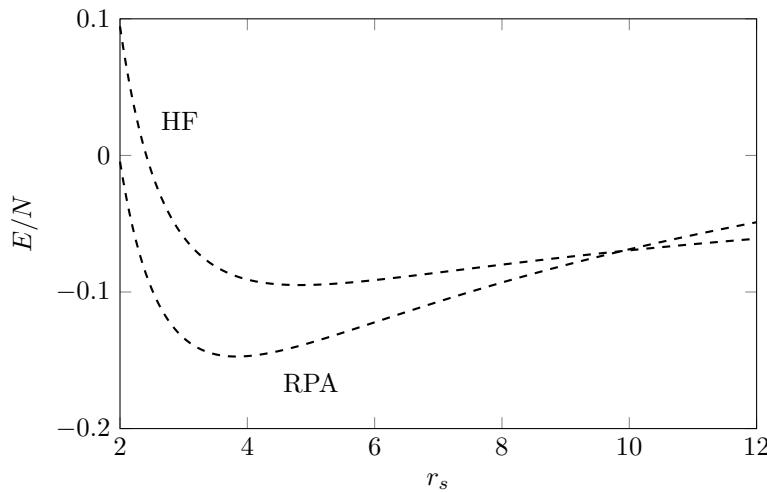


Figura 3.4: Energía por partícula, en unidades de Ry ($e^2/2a_0$), para el estado fundamental del gas de Fermi.

La energía se puede bajar más todavía por el hecho de que también los electrones con spines opuestos tienden a separarse, debido a la interacción Coulombiana. Esta aproximación se denomina de fases al azar o “*random phase approximation*” (RPA) y lleva al resultado⁹

$$E_{RPA} = N \left(\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + 0,062 \ln r_s - 0,142 + \dots \right) \frac{e^2}{2a_0} \quad (3.199)$$

que también se muestra en la Fig. 3.4.

⁹Véase D. Pines, *Elementary Excitations in Solids* p. 118 y M. Gell-Mann and K. Brueckner, Phys. Rev. **106**, 364 (1957).

Capítulo 4

Propiedades magnéticas de los sólidos

A partir de una teoría basada en la estructura de bandas y el llenado de las mismas podemos realizar una clasificación de los materiales y saber si es un metal o un aislante. Sin embargo, esta clasificación no siempre resulta correcta. El problema es que hemos despreciado la interacción Coulombiana entre los electrones y en algunos casos esto nos conduce a conclusiones erróneas. Por otro lado, si queremos comprender el comportamiento de los sólidos debemos ser capaces de estudiar la respuesta magnética de los mismos. En este capítulo nos enfocaremos en presentar algunas nociones básicas del magnetismo de los sólidos.

4.1. Magnetismo e interacción de intercambio

Para campos magnéticos pequeños, la magnetización de un sistema es en general lineal con el campo magnético aplicado.

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}.$$

Cuando la susceptibilidad es positiva ($\chi > 0$) decimos que el material es **paramagnético** y en este caso el sistema se magnetiza en la dirección del campo magnético aplicado.

Cuando la susceptibilidad es negativa ($\chi < 0$) decimos que el material es **diamagnético** y en este caso el sistema se magnetiza en dirección contraria al campo magnético aplicado. El diamagnetismo es el estado que encontraremos habitualmente ya que la gran mayoría de los sistemas biológicos son

4.1 Magnetismo e interacción de intercambio

diamagnéticos. En contraste con el diamagnetismo y el paramagnetismo, encontramos a los sistemas **ferromagnéticos** donde \mathbf{M} puede ser distinto de cero aun en ausencia de campo magnético externo.

Intentaremos recuperar este tipo de respuesta magnética partiendo de nociones básicas de la mecánica cuántica. Para simplificar la explicación omitiremos los detalles de la estructura atómica que brinda diferentes contribuciones al momento magnético, en particular, no consideraremos la contribución orbital, es decir, no consideraremos los términos de interacción espín-orbita. Para simplificar usaremos en lo que sigue $\hbar = 1$, $c = 1$. El Hamiltoniano de un electrón en un átomo está dado por

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}).$$

Al aplicar un campo magnético debemos hacer $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ (recordemos que aquí $q = -e$) y el Hamiltoniano será

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + g\mu_B \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} + V(\mathbf{r}).$$

Donde $\mu_B = \frac{e}{2m}$ es el magnetón de Bohr. En general el potencial vector \mathbf{A} es una función de las coordenadas y no commuta con \mathbf{p} . Sin embargo, podemos hacer uso de la libertad de gauge para elegir el potencial vector y tomar uno que cumpla con la condición $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ y entonces el commutador será cero. Podemos elegir por ejemplo

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$$

Con esto, el Hamiltoniano queda en la forma

$$H = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{e}{2m}\mathbf{p} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) + \frac{e^2}{2m}|\mathbf{B} \times \mathbf{r}|^2 + g\mu_B \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$$

Los dos primeros términos corresponden al Hamiltoniano en ausencia de campo magnético aplicado.

El tercer término se puede reescribir usando la propiedad cíclica $\mathbf{x} \cdot (\mathbf{y} \times \mathbf{z}) = \mathbf{z} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{y})$ como

$$H = \frac{e}{2m}\mathbf{p} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{e}{2m}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \frac{e}{2m}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}$$

Donde usamos que $\frac{1}{\hbar}(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \mathbf{L}$. Luego, el Hamiltoniano completo queda en la forma

$$H = H_0 + \mu_B \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + g\mathbf{S}) + \frac{e^2}{2m}|\mathbf{B} \times \mathbf{r}|^2.$$

Propiedades magnéticas de los sólidos

El primer término (H_0) corresponde a un electrón en ausencia de campo magnético externo. El segundo término se lo conoce como el **término paramagnético** y corresponde al acoplamiento del momento angular total del electrón con el campo magnético externo. Cuando un campo magnético externo es aplicado, el momento magnético del electrón se alinea con el campo, por lo que este término está asociado con la respuesta paramagnética del sistema. Recordemos que

$$\mathbf{m} = -g\mu_B \mathbf{S}.$$

El último término se conoce como **término diamagnético** y será el responsable del comportamiento diamagnético de algunos materiales.

4.1.1. Un espín

Consideremos el caso de un solo espín $\frac{1}{2}$ sometido a un campo magnético externo. El Hamiltoniano, como vimos estará dado por

$$H = g\mu_B \mathbf{B} \cdot \mathbf{S},$$

donde g es el factor giromagnético (el cual tomaremos como $g = 2$), $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de matrices de Pauli y $\mu_B = \frac{e}{2m}$ es el magnetón de Bohr (recordemos que para simplificar tomamos $\hbar = 1$). En este caso no consideraremos el momento angular orbital para simplificar la discusión.

Los autovalores del Hamiltoniano están dados por $E_{\pm} = \pm\mu_B B$, (donde $B = |\mathbf{B}|$) y con ellos podemos construir la función de partición

$$Z = e^{-\beta\mu_B B} + e^{\beta\mu_B B} = 2 \cosh(\beta\mu_B B).$$

La energía libre se escribe entonces como

$$F = -k_B T \log(Z) = -k_B T \log(2 \cosh(\beta\mu_B B))$$

y el momento magnético por espín estará dado por

$$\mathbf{m} = -\frac{\partial F}{\partial B} = \mu_B \tanh(\beta\mu_B B).$$

Si estudiamos un sistema de muchos espines que pudiéramos suponer independientes podemos escribir la magnetización por unidad de volumen como

$$M = n m = n\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right), \quad (4.1)$$

donde $n = N/V$ es el número de *espines* por unidad de volumen. En la figura 4.1 podemos observar el comportamiento de la magnetización con el campo

4.1 Magnetismo e interacción de intercambio

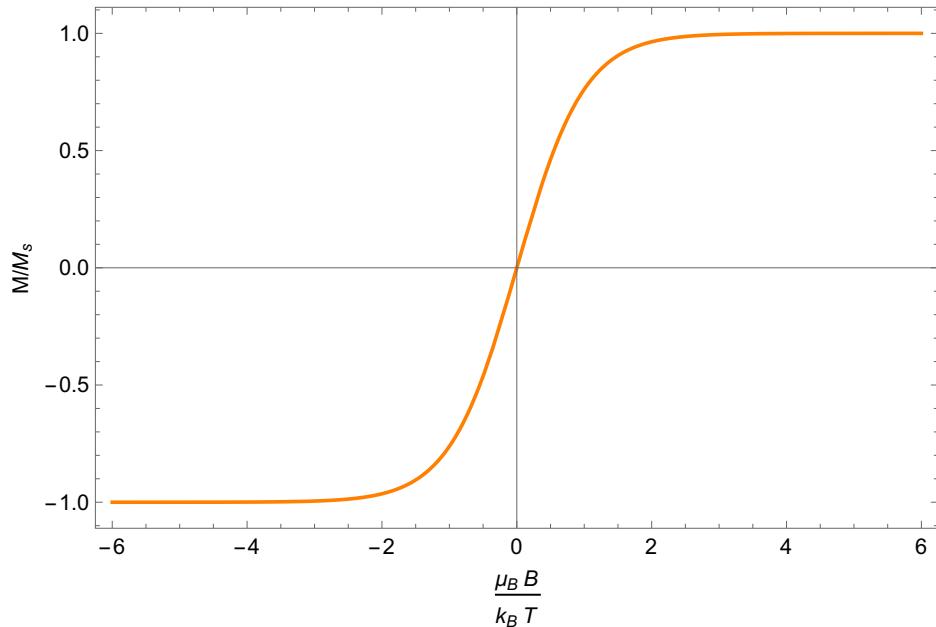


Figura 4.1: Magnetización como función del campo magnético

magnético. Para campos magnéticos pequeños vemos que el comportamiento es aproximadamente lineal y podemos desarrollar en potencias del campo magnético y obtener

$$\mathbf{M} \simeq n \frac{B \mu_B^2}{k_B T} + O(B^3),$$

y por lo tanto, en el límite de campo cero tenemos que

$$\lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial B} = \frac{n \mu_B^2}{k_B T}.$$

La expresión anterior es conocida como la **Ley de Curie**[12]. Y en general se expresa como $\chi = \frac{C}{k_B T}$. Esta ley aun se puede observar en sistemas magnéticos más complejos y la constante C aporta información de la naturaleza magnética del sistema.

A partir de la energía libre podemos calcular también algunas cantidades termodinámicas por ejemplo en la figura 4.2-a mostramos la magnetización normalizada como función de $k_B T / (\mu_B B)$. Una vez determinada la magnetización podemos calcular la energía como $E = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}$ (figura 4.2-b), el calor específico como $\frac{\partial E}{\partial T}$ (figura 4.2-c) y la entropía como $-(\frac{\partial F}{\partial T})_{B=cte}$, (figura 4.2-d).

De las figuras vemos que cuando $T \rightarrow \infty$ la energía tiende a cero indicando que los momentos magnéticos se vuelven completamente desordenados.

Propiedades magnéticas de los sólidos

El calor específico de la figura (figura 4.2-b) tiene un máximo cuando $T = (\mu_B B)/k_B$. Esto indica que a esta temperatura es posible excitar térmicamente a los espines para que efectúen transiciones entre los dos estados.

La entropía aumenta cuando aumentamos la temperatura, como esperamos para un sistema que se desordena.

4.1.2. Dos espines - Interacción de intercambio

Origen de la interacción de intercambio

La interacción de intercambio es una de las principales responsables por las fases magnéticas de largo alcance que podemos encontrar en los sistemas magnéticos. Su origen está íntimamente relacionado a la indistinguibilidad de las partículas y por ende a la mecánica cuántica. Este es un ejemplo claro de que aun en fenómenos macroscópicos como la atracción/repulsión de dos imanes la mecánica cuántica puede jugar un rol esencial. De hecho el magnetismo es un fenómeno basado en la noción del espín el cual es intrínsecamente cuántico. Por lo que el magnetismo en sí puede verse como una manifestación de la mecánica cuántica.

Consideremos un modelo simple donde tenemos solo dos electrones cuyas coordenadas espaciales son \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 y escribamos la función de onda del estado de dos electrones como producto de electrones independientes. Supongamos que el primer electrón está en un estado $\psi_a(\mathbf{r}_1)$ y el segundo electrón está en un estado $\psi_b(\mathbf{r}_2)$, entonces la función de onda producto podría escribirse como $\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2)$, sin embargo esta función de onda no tiene la simetría correcta ya que si intercambiamos los dos electrones obtenemos la función de onda $\psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)$ la cual no es un múltiplo de la que teníamos inicialmente, es decir, la función de onda propuesta no es ni simétrica ni antisimétrica ante el intercambio de partículas.

Sin embargo la simetría corresponde a la función de onda completa, es decir la función que contenga a la función orbital y la parte de espín. Sabemos que la parte de espín de la función de onda puede ser antisimétrica (correspondiendo a un estado de tipo singlete $S = 0$) o simétrica correspondiente a un estado de tipo triplete ($S = 1$). Luego podemos escribir la función de onda completa para los casos singlete y triplete como

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)) \chi_S \quad (4.2)$$

$$\Psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)) \chi_T \quad (4.3)$$

La energía correspondiente a cada uno de estos estados estará dada por

4.1 Magnetismo e interacción de intercambio

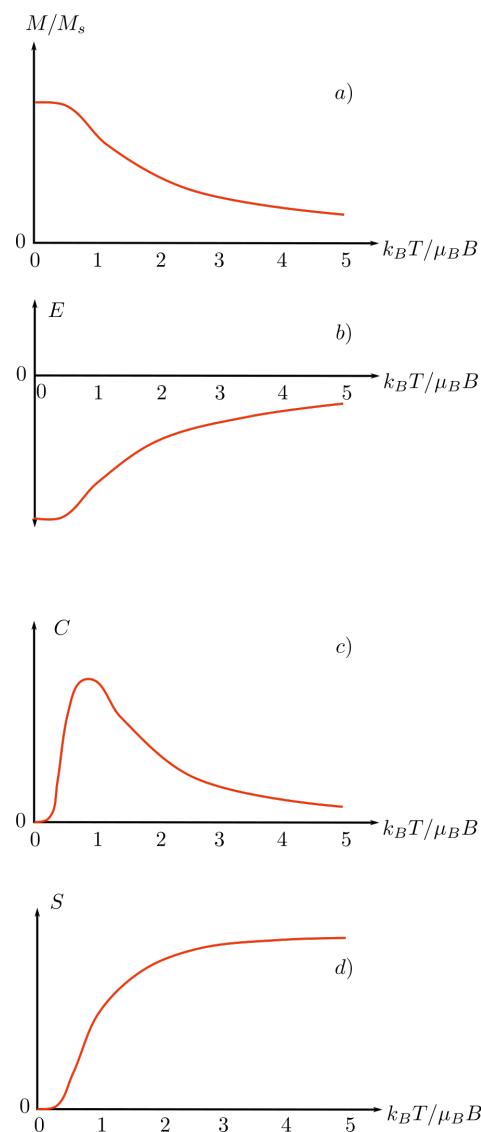


Figura 4.2: a) Magnetización normalizada. b) Energía. c) Calor específico.
d) Entropía.

Propiedades magnéticas de los sólidos

el valor de expectación del Hamiltoniano

$$E_S = \int \Psi_S^* H \Psi_S d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \quad (4.4)$$

$$E_T = \int \Psi_T^* H \Psi_T d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \quad (4.5)$$

Si suponemos que las funciones de onda de espín están normalizadas tenemos que la diferencia de energía entre los estados singlete y triplete esta dada por

$$E_S - E_T = 2 \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1) \psi_b^*(\mathbf{r}_2) H \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1), d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \quad (4.6)$$

Es importante notar que, aunque el Hamiltoniano no contenga explícitamente ningún término dependiente del espín, si la integral anterior (conocida como integral de intercambio) es distinta de cero, entonces los estados de espín singlete y triplete tienen diferente energía. Si deseamos estudiar solo los grados de libertad magnéticos podríamos entonces escribir un Hamiltoniano efectivo que de cuenta de la diferencia de energía al pasar de un estado de espín a otro.

Se puede escribir dicho Hamiltoniano en términos de un producto de operadores de espín de la forma $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_1$ ya que sabemos que (para $S = 1/2$) el producto toma el valor $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_1 = -3/4$ si los espines están en un estado de singlete y $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_1 = 1/4$ en un triplete. Podríamos entonces escribir un Hamiltoniano de la forma

$$H_{eff} = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - (E_S - E_T)\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_1$$

Este Hamiltoniano arroja los valores correctos para la energía de los estados singlete y triplete. El mismo está formado por un término constante y otro que depende del espín. El primer término es solo un corrimiento en la energía y podemos olvidarnos de él por el momento. Si definimos la **constante de intercambio** como

$$J = \frac{E_S - E_T}{2} = \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1) \psi_b^*(\mathbf{r}_2) H \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1), d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \quad (4.7)$$

Podemos escribir el Hamiltoniano dependiente del espín como

$$H_{eff} = -2J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

Si la constante de intercambio es positiva $J > 0$ entonces $E_S > E_T$ y el estado fundamental corresponde a un estado triplete. Si $J < 0$ entonces $E_S < E_T$ y el estado fundamental corresponde a un estado singlete.

4.2 Propiedades magnéticas de los sólidos

4.1.3. Muchos espines

Para el caso de un sistema con muchos espines seguir un razonamiento similar al que usamos para dos *espines* es mas engorroso, sin embargo, puede mostrarse se puede utilizar una propuesta similar a la que derivamos para un par de espines cuando tenemos muchos espines que interactúan de a pares. Esto es lo que se conoce como **Hamiltoniano de Heisenberg**.

$$H = - \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (4.8)$$

donde $J_{i,j}$ es la constante de intercambio entre los espines i y j . La suma es sobre todos los espines y el factor 2 es omitido porque al recorrer todos los espines con los índices i, j estamos sumando cada par dos veces. Como la constante de intercambio depende de la superposición de los orbitales, si dos espines se encuentran muy alejados esta integral será pequeña. Es por eso que comúnmente la constante de intercambio $J_{i,j}$ se suele tomar distinta de cero solo para los espines más cercanos. Una elección común es tomar $J_{i,j} = J$ si los espines i, j son primeros vecinos y cero en caso contrario.

4.2. Propiedades magnéticas de los sólidos

4.2.1. Tipos de orden magnético

Vamos a estudiar brevemente algunos de los diferentes tipos de ordenes magnéticos que pueden ser producidas por la interacción de intercambio y algunos ingredientes extra como la frustración magnética.

Ferromagnetismo

Un material ferromagnético puede tener una magnetización diferente de cero aún en ausencia de campo magnético externo y en este estado de magnetización todos los espines apuntan en la misma dirección. Este efecto es generalmente producido por la interacción de intercambio entre los espines y puede ser descrito mediante un Hamiltoniano de Heisenberg.

$$H = -2 \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + g\mu_B \mathbf{B} \cdot \sum_j \mathbf{S}_j$$

Si consideramos que las constantes de intercambio a primeros vecinos son positivas y cero a vecinos más lejanos, el Hamiltoniano anterior describe un ferromagnéto en presencia de un campo magnético externo.

Propiedades magnéticas de los sólidos

Modelo de Weiss para el ferromagnéto

Una forma de describir aproximadamente la física encerrada en el Hamiltoniano anterior es la siguiente. Definamos un campo efectivo para el espín en el sitio i de la siguiente manera

$$\mathbf{B}_{MF} = -\frac{2}{g\mu_B} \sum_j J_{i,j} \langle \mathbf{S}_j \rangle$$

Ahora concentrémonos por un momento solo en el espín correspondiente al sitio i . La contribución a la energía de intercambio del espín i estará dada por $-2 \sum_j J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ y este término puede escribirse (en campo medio) en términos del campo efectivo que definimos antes como

$$-2 \sum_j J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = g\mu_B \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{B}_{MF}$$

y entonces el Hamiltoniano para el ferromagnéto puede escribirse como

$$H_{MF} = g\mu_B \sum_i \mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{B} + \mathbf{B}_{MF})$$

Al escribir el Hamiltoniano de esta manera asumimos que todos los espines experimentan el mismo campo efectivo y estamos reemplazando el operador $-\frac{2}{g\mu_B} \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{S}_j$ por su valor de expectación. El Hamiltoniano efectivo al que llegamos tiene la misma forma que el Hamiltoniano de un paramagnéto que estudiamos anteriormente. Como el campo efectivo que definimos (a veces conocido como “campo molecular”) básicamente mide el efecto de ordenamiento se los espines, podemos suponer que este será proporcional a la magnetización del sistema.

$$\mathbf{B}_{MF} = \lambda \mathbf{M}.$$

Ahora podemos tratar este problema como si fuera un paramagnéto sujeto a un campo magnético $\mathbf{B} + \mathbf{B}_{MF}$. A bajas temperaturas podemos tener que los espines se alinean con el campo molecular aun en ausencia de campo magnético externo \mathbf{B} . Esto hace que la magnetización total aumente, pero como el campo molecular es proporcional a la magnetización este aumenta también haciendo que a bajas temperaturas el sistema se mantenga magnetizado.

Podemos encontrar soluciones de este modelo usando la ecuación (4.1) para la magnetización de un espín en un campo magnético que vimos anteriormente

$$M = n\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B(B + \lambda M)}{k_B T}\right). \quad (4.9)$$

4.2 Propiedades magnéticas de los sólidos

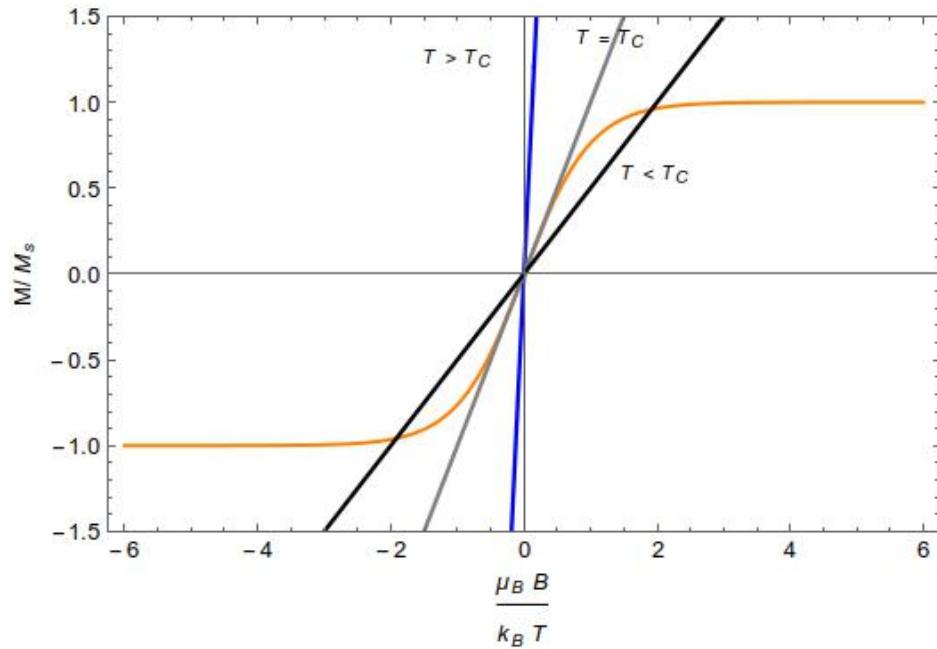


Figura 4.3: Soluciones gráficas de la ecuación correspondientes a $B = 0$. Para $T < T_c$ tenemos solución para $M \neq 0$

La ecuación anterior es una ecuación trascendente que puede ser resuelta gráficamente (ver figura 4.3). Si consideramos el caso sin campo magnético externo ($B = 0$), vemos que para temperaturas menores que la temperatura crítica $T < T_c$ la ecuación tiene soluciones no nulas, mientras que para $T > T_c$ la única solución corresponde a $M = 0$.

La solución para M en función de T/T_c se muestra en la figura 4.4. La magnetización es cero para temperaturas $T \geq T_c$ y distinta de cero para $T < T_c$. En $T = T_c$ la magnetización es continua pero su derivada con respecto a T no lo es. Esto indica que la transición entre las fases ferromagnética y no magnética es de segundo orden.

Antiferromagnetismo

Si la interacción de intercambio es negativa ($J < 0$), el campo molecular es orientado de manera que favorece la alineación antiparalela de los momentos magnéticos a primeros vecinos. Eso es lo que se denomina antiferromagnetismo. Generalmente este tipo de orden se encuentra en redes bipartitas, es decir, redes que están compuestas por dos redes interpenetradas. De esta manera en las redes bipartitas los momentos magnéticos en una de las subredes apuntan todos en una dirección y en la otra subred en dirección opuesta.

Propiedades magnéticas de los sólidos

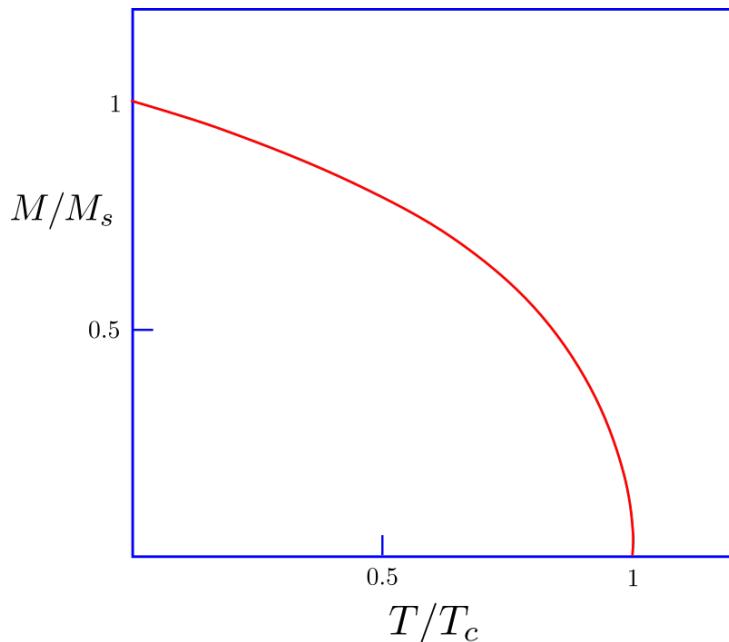
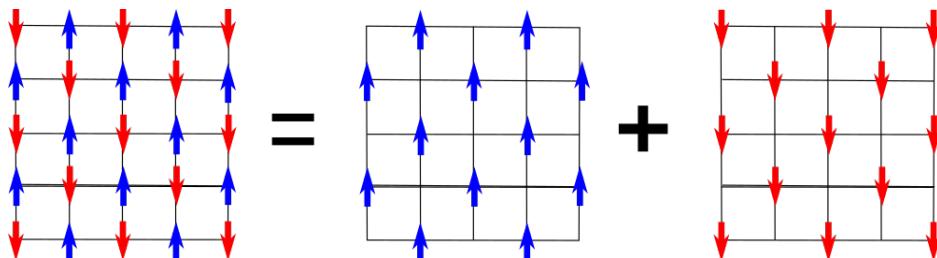


Figura 4.4: Solución para M en función de T/T_c

A este tipo de estado magnético se lo conoce como **estado de Neél** y es esquematizado por la figura siguiente.



Si identificamos a una subred con el índice $+$ y a la otra con el índice $-$, entonces podemos escribir el campo molecular sobre cada subred como

$$\begin{aligned} B_+^{MF} &= -\lambda M_- \\ B_-^{MF} &= -\lambda M_+ \end{aligned}$$

Luego el campo total efectivo en cada subred será

$$\begin{aligned} B_+ &= B - \lambda M_- \\ B_- &= B - \lambda M_+ \end{aligned}$$

donde λ es una constante. En cada subred el campo molecular para el caso

4.2 Propiedades magnéticas de los sólidos

de espín 1/2 estará dado por

$$M_{\pm} = M_s \tanh\left(\frac{\mu_B B_{\pm}}{k_B T}\right), \quad (4.10)$$

donde $M_s = \mu_B \frac{N}{V}$. M_{\pm} representan la magnetización de cada subred y la magnetización total estará dada por

$$M = M_+ + M_-.$$

La expresión para M_+ y M_- es casi idéntica a la que encontramos para el caso ferromagnético y por lo tanto la magnetización en cada subred tendrá el mismo comportamiento que el de un ferromagnéto y se hará cero para temperaturas mayores que las de la temperatura de transición conocida como **temperatura de Neél**.

Aunque la magnetización de cada subred se comporte como la de un ferromagnéto, las dos magnetizaciones apuntan en direcciones opuestas y si las dos subredes son equivalentes a campo magnético externo nulo tendremos que la magnetización total es cero. Para describir al antiferromagnéto en ausencia de campo externo se suele usar un parámetro de orden diferente al de la magnetización. Este parámetro se conoce como magnetización alternada y consiste simplemente en la diferencia entre las magnetizaciones de ambas subredes.

$$M_s = M_+ - M_-.$$

La magnetización alternada es entonces distinta de cero para valores de la temperatura menores que la temperatura de Neel y cero para temperaturas mayores.

Para temperaturas menores a la de Neel, podemos estudiar el comportamiento de la magnetización ante la aplicación de un campo magnético. Ya vimos que en ausencia de campo magnético la magnetización es cero (si las subredes son equivalentes). A campo pequeño podemos desarrollar la magnetización a orden lineal en B como lo hicimos antes y obtener el comportamiento de la susceptibilidad.

A temperaturas altas podemos aproximar la tangente usando que $\tanh(x) \simeq x$ y así tenemos que

$$M \simeq \frac{2M_s \mu_B / k_B}{T + (M_s \mu_B / k_B)} B.$$

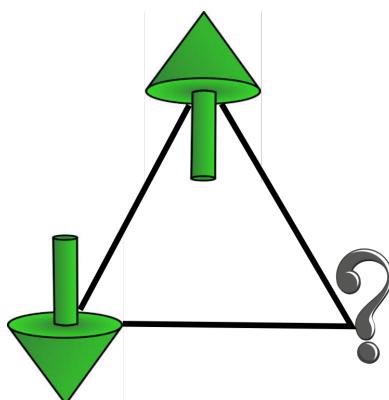
De esta manera podemos escribir la susceptibilidad a campos pequeños como

$$\chi = \frac{M}{B} = \frac{C}{T + T_N}$$

Propiedades magnéticas de los sólidos

Antiferromagnetos frustrados:

En ciertas redes no es posible acomodar este tipo de estados donde cada espín es antiparalelo a todos sus vecinos. Por ejemplo si consideramos la red triangular con interacciones antiferromagnéticas entre primeros vecinos vemos que: una vez que dos espines fueron colocados de forma antiparalela dentro de un triángulo, no hay manera de que el tercer espín se acomode de forma antiparalela a los otros dos. Se dice que en este caso el sistema está frustrado ya que no se pueden minimizar todos los términos de la energía al mismo tiempo.



En muchos casos la combinación entre frustración y la naturaleza cuántica de los espines genera fases magnéticas no convencionales.

Ferrimagnetismo

La discusión que dimos antes para el antiferromagnéto asume que en una red bipartita las dos subredes son equivalentes, pero si por alguna razón no lo fueran (cristalográficamente esto es posible), entonces la magnetización de las dos subredes no sería igual y por lo tanto no se cancelarían. Esto daría como resultado que aunque el orden magnético es en esencia antiferromagnético el sistema tiene una magnetización neta. Este fenómeno es conocido como **ferrimagnetismo**.

Como el campo molecular de cada subred es diferente entonces la magnetización espontánea de cada subred tendrá diferentes dependencia con la temperatura y puede ocurrir, por ejemplo, que una subred domine la magnetización a bajas temperaturas y la otra lo haga a temperaturas más altas. Cuando esto ocurre podemos variar la magnetización del sistema variando la temperatura de manera que al aumentar la temperatura el sistema puede pasar de tener magnetización positiva a cero y luego volverse negativa. Finalmente a temperaturas más altas el sistema se desordena y la magnetización

4.2 Propiedades magnéticas de los sólidos

es nuevamente cero. La temperatura a la cual la magnetización cambia de signo se conoce como **Temperatura de compensación**. La susceptibilidad magnética de los ferrimagnétos no sigue en general la ley de Curie. Las ferritas son materiales que presentan ferrimagnetismo. Se conoce comúnmente como ferritas a un grupo de compuestos con las fórmulas químicas de la forma $XO \cdot Fe_2O_3$, donde la letra X representa a un ion positivo divalente como por ejemplo Zn^{2+} , Fe^{2+} , Cu^{2+} , Mn^{2+} , Ni^{2+} , etc.

Orden espiral

En algunos casos (como en muchas tierras raras) la estructura cristalina es tal que los átomos se acomodan en planos que interactúan fuertemente y estos planos se acoplan magnéticamente. Consideremos el caso donde los momentos magnéticos en cada plano interactúan ferromagnéticamente de manera que el orden magnético en cada plano corresponde a todos los espines del plano apuntando en la misma dirección. Si consideramos el momento magnético total en cada plano estará dado por la suma de los momentos magnéticos de todos los sitios del plano. Esto dará como resultado un valor grande del momento magnético en cada plano por lo que podemos considerar a cada plano como un espín clásico. Consideremos ahora la interacción entre planos como una interacción entre espines clásicos con acoplamientos entre primeros J_1 y segundos vecinos J_2 . Si el ángulo entre los momentos magnéticos totales correspondientes a dos planos sucesivos es θ , entonces podemos escribir la energía del sistema como

$$E = -2N^2S^2(J_1 \cos \theta + J_2 \cos(2\theta)),$$

donde N es el número de sitios en cada plano. Buscamos el mínimo de la energía imponiendo que $\frac{\partial E}{\partial \theta} = 0$ con lo que obtenemos la condición

$$(J_1 + J_2 \cos \theta) \sin \theta = 0.$$

Esta ecuación tiene como soluciones a $\sin \theta = 0$ lo que implica que el orden ferromagnético ($\theta = 0$) y antiferromagnético ($\theta = \pi$) son extremos de la energía. La otra solución corresponde a

$$\cos(\theta) = -\frac{J_1}{4J_2}$$

Esta solución corresponde a lo que se conoce como orden espiral y es energéticamente favorable solo cuando $J_2 < 0$ y se cumple la condición $|J_1| < 4|J_2|$. Como el ángulo correspondiente a esta solución depende de los valores de los acoplamientos J_1 y J_2 , que en principio pueden tomar cualquier valor

Propiedades magnéticas de los sólidos

real, el ángulo θ no estará en general commensurado con la red. Es decir que no se repetirá. Para valores arbitrarios de los acoplamientos no habrá dos planos con el mismo ángulo θ .

4.3. Ruptura de simetría

En los tipos de orden magnético que vimos antes todos tenían en común que su aparición se daba espontáneamente a bajas temperaturas. Todos estos ordenamientos están caracterizados por la dependencia con la temperatura donde alguna cantidad relevante cambia al pasar de temperaturas menores a mayores de alguna temperatura crítica T_c . Para cada una de estas fases se puede definir un parámetro de orden el cual será cero para $T > T_c$ y será diferente de cero para $T < T_c$. Este parámetro actúa entonces como un indicador de que el sistema está ordenado. En este tipo de ordenes, el parámetro de orden está asociado a la ruptura de una simetría.

En el caso de un ferromagnéto cuando el sistema se magnetiza lo hace en una dirección particular. Por ejemplo, a campo cero todos los momentos magnéticos se alinean hacia arriba y no hacia abajo. Sin embargo en las ecuaciones que escribimos no hay nada que favorezca la alineación de los espines hacia arriba comparado con los espines hacia abajo, ya que el Hamiltoniano es invariante ante inversión. Entonces, el modelo microscópico tiene una simetría que no posee el estado fundamental. Observemos por ejemplo lo que pasa en un ferromagnéto en 2 dimensiones. A temperaturas altas $T > T_c$ el sistema posee una simetría de rotación completa. Todas las direcciones son equivalentes ya que el sistema está completamente desordenado y los momentos magnéticos alrededor de un punto cualquiera del plano apuntan en cualquier dirección y el campo efectivo promedia a cero.

Para temperaturas menores a la temperatura crítica $T < T_c$ el sistema elige una dirección y los momentos magnéticos se alinean en esa dirección. Ahora la simetría de rotación está rota porque tenemos una dirección preferencial. El estado de baja temperatura ha reducido sus simetrías.

Un comentario importante sobre la ruptura de simetría es que es imposible cambiar la simetría de forma gradual. El sistema posee una simetría o no la posee. Esto hace que la transición de fase sea abrupta.

4.4 Teoría de Landau para el ferromagnetismo

4.4. Teoría de Landau para el ferromagnetismo

Un modelo simple que reproduce este tipo de transición de fase fue desarrollado por Landau y se basa en consideraciones muy generales. Supongamos que podemos escribir la energía libre de un ferromagneto con magnetización M como una serie de potencias en M . Como los estados con magnetización hacia arriba (positiva) y hacia abajo (negativa) tienen la misma energía esta serie no puede contener potencias impares de M . Podemos entonces escribir algo como

$$F(M) = F_0 + aM^2 + bM^4 + \dots$$

Donde F_0 , a y b no dependen de M .

Supongamos ahora que la constante $a = a(T)$ depende de la temperatura. Si $a(T)$ es tal que cambia de signo en $T = T_c$ entonces podemos escribir cerca de $T = T_c$ que $a(T) = a_0(T - T_c)$ donde a_0 es una constante positiva.

Para encontrar el estado fundamental del sistema buscamos extremos de la energía libre, es decir soluciones de $\partial F / \partial M = 0$. Esta condición implica que

$$2M(a_0(T - T_c) + 2bM^2) = 0.$$

De esta ecuación podemos obtener dos soluciones

$$M = 0 \quad o \quad M = \pm \left(\frac{a_0(T_c - T)}{2b} \right)^{1/2}.$$

La segunda solución es válida solo para $T < T_c$. La solución $M = 0$ es válida para todo T , pero para $T < T_c$ es un punto de equilibrio inestable. Esto puede verse fácilmente calculando la segunda derivada de la energía libre.

Entonces, la teoría de Landau nos dice que la magnetización será cero para $T > T_c$ y para temperaturas menores a T_c será proporcional a $(T_c - T)^{1/2}$

La teoría de Landau es una teoría de campo medio en el sentido de que supone que todos los espines “sienten” el mismo campo producido por todos sus vecinos. En este sentido es similar al modelo de Weiss. Las teorías de campo medio fallan al explicar correctamente la transición de fase porque ignora las correlaciones y fluctuaciones que se vuelven muy importantes cerca de T_c .

Propiedades magnéticas de los sólidos

4.5. Excitaciones en el ferromagneto: Ondas de espín

Ya vimos que, cuando consideramos un sistema de muchos espines, podemos utilizar un modelo microscópico como el modelo de Heisenberg

$$H = - \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j.$$

Consideremos la versión unidimensional del modelo de Heisenberg donde el Hamiltoniano está dado por

$$H = -2J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}.$$

Podemos estudiar como evoluciona con el tiempo el valor medio del espín en un dado sitio de la forma

$$\begin{aligned} \frac{d\langle S_j^\alpha \rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [S_j^\alpha, H] \rangle \\ \frac{d\langle S_j^\alpha \rangle}{dt} &= \frac{-2J}{i\hbar} \langle [S_j^\alpha, \mathbf{S}_{j-1} \cdot \mathbf{S}_j] + [S_j^\alpha, \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}] \rangle \\ &= \frac{-2J}{i\hbar} \langle \sum_\beta [S_j^\alpha, S_{j-1}^\beta S_j^\beta] + \sum_\beta [S_j^\alpha, S_j^\beta S_{j+1}^\beta] \rangle \\ &= \frac{-2J}{i\hbar} \langle \sum_\beta S_{j-1}^\beta [S_j^\alpha, S_j^\beta] + \sum_\beta [S_j^\alpha, S_j^\beta] S_{j+1}^\beta \rangle \\ &= \frac{-2J}{i\hbar} \langle \sum_{\beta,\gamma} S_{j-1}^\beta i\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} S_j^\gamma + \sum_{\beta,\gamma} i\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} S_j^\gamma S_{j+1}^\beta \rangle \\ &= \frac{-2J}{i\hbar} \langle \sum_{\beta,\gamma} i\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} S_{j-1}^\beta S_j^\gamma + \sum_{\beta,\gamma} i\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} S_j^\gamma S_{j+1}^\beta \rangle \\ &= \frac{2J}{\hbar} \langle (\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_{j-1})^\alpha + (\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_{j+1})^\alpha \rangle. \end{aligned}$$

Para poder avanzar, trataremos por el momento a los espines como si fueran clásicos y luego veremos el tratamiento cuántico. El estado fundamental tiene todos los espines alineados (supondremos que en la dirección z). De esta manera el estado fundamental clásico cumple que $S^z = S$, $S^x = S^y = 0$. Consideremos ahora una pequeña desviación del estado fundamental tal que

4.5 Excitaciones en el ferromagneto: Ondas de espín

$S^z \simeq S$, $S^x, S^y \ll S$. Tenemos entonces que

$$\frac{dS_j^x}{dt} \simeq \frac{2JS}{\hbar}(2S_j^y - S_{j-1}^y - S_{j+1}^y) \quad (4.11)$$

$$\frac{dS_j^y}{dt} \simeq -\frac{2JS}{\hbar}(2S_j^x - S_{j-1}^x - S_{j+1}^x) \quad (4.12)$$

$$\frac{dS_j^z}{dt} \simeq 0. \quad (4.13)$$

Si proponemos soluciones de la forma

$$S_j^x = A_x e^{iqja - \omega t} \quad (4.14)$$

$$S_j^y = A_y e^{iqja - \omega t}. \quad (4.15)$$

Vemos que para que sean solución debemos tener que $A_x = iA_y$ y la frecuencia cumple que

$$\hbar\omega = 4JS(1 - \cos(qa)).$$

Esta es la relación de dispersión de las excitaciones sobre el estado fundamental ferromagnético. Estas excitaciones son conocidas como ondas de espín.

Si bien la solución anterior corresponde a un modelo clásico nos enseña que las excitaciones se comportan como ondas y podemos intentar buscar una solución del modelo cuántico con estas características[16]. Consideraremos el Hamiltoniano cuántico

$$H = -2J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} = -2J \sum_i \left[S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \right].$$

El estado fundamental cuántico puede escribirse como un estado producto

$$|\phi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\cdots\rangle,$$

de manera que $H|\phi_0\rangle = -NS^2J|\phi_0\rangle$. Ahora creemos una excitación dando vuelta un espín en el sitio j

$$|j\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow_j\uparrow\uparrow\uparrow\cdots\rangle.$$

Este estado lo podemos escribir a partir del estado fundamental como

$$|j\rangle = S_j^- |\phi_0\rangle.$$

Sin embargo, este no es un autoestado del Hamiltoniano (comprobarlo como ejercicio).

Ahora bien, como vimos en el caso clásico, podemos construir excitaciones

Propiedades magnéticas de los sólidos

de tipo ondulatorio. Intentemos combinar las excitaciones de este tipo en cada sitio de manera de recuperar la simetría de traslación del Hamiltoniano proponiendo el estado

$$|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{iqja} |j\rangle.$$

Es inmediato mostrar que

$$H|q\rangle = E(q)|q\rangle,$$

donde

$$E(q) = -NS^2J + 4JS(1 - \cos(qa)).$$

Si restamos la energía correspondiente al estado fundamental ferromagnético $-NS^2J$ vemos que la energía de la excitación es $\epsilon(q) = 4JS(1 - \cos(qa))$, que es el mismo resultado que encontramos para el caso clásico.

4.6. Ondas de espín y operadores de Holstein-Primakoff

La formulación de segunda cuantificación que vimos en secciones anteriores se basa en el álgebra de operadores de creación y destrucción. Esta formulación tiene como ventajas que permite representar de forma compacta el espacio de excitaciones de un sistema y nos permite tener en cuenta la simetría de la función de onda definiendo simples relaciones de conmutación de estos operadores. Como el objetivo del formalismo es describir sistemas cuánticos, consideraremos el siguiente conjunto de autovalores ψ_n de un Hamiltoniano H

$$H|\psi_n\rangle = \epsilon_n|\psi_n\rangle.$$

De esta manera, la función de onda de dos partículas que se encuentran en estados α, β se escribe como

$$|\alpha, \beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_\alpha\rangle_1 \otimes |\psi_\beta\rangle_2 - \sigma |\psi_\beta\rangle_1 \otimes |\psi_\alpha\rangle_2),$$

donde $\sigma = 1$ si las partículas son fermiones y $\sigma = -1$ si son bosones. De esta manera tenemos en cuenta la simetría correcta de la función de onda, como corresponde a partículas indistinguibles. Sin embargo, si queremos usar la notación anterior para un sistema de muchas partículas se vuelve un poco engoroso.

Es aquí donde la formulación en términos de operadores de creación es más eficiente. Denotemos como $|0\rangle$ a un estado de referencia que llamaremos

4.6 Ondas de espín y operadores de Holstein-Primakoff

estado de vacío. Físicamente, este estado representa un estado vacío en el cuál no hay partículas presentes. Definamos ahora operadores que puedan actuar sobre este estado (junto con su operador adjunto) de manera que

$$\begin{aligned} a_{\gamma_i}|0\rangle &= 0 \\ a_{\gamma_i}^\dagger|0\rangle &= |\gamma_i\rangle \\ \mathcal{C} \prod_{i=1}^N a_{\gamma_i}^\dagger|0\rangle &= |\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \dots, \gamma_{N-1}, \gamma_N\rangle. \end{aligned}$$

Donde \mathcal{C} es un factor de normalización, $\mathcal{C} = \frac{1}{\sqrt{\prod_i^n n_i!}}$, con n_i el número de partículas en el estado γ_i . Noten que con esta definición para el factor de normalización, como no podemos tener más de un fermión en cada estado y $1! = 1$, tenemos que $\mathcal{C} = 1$. En cambio, si las partículas son bosones este factor se vuelve importante.

Para que la simetría de la función de onda sea la correcta estos operadores deben respetar las relaciones de commutación bosónicas o fermiónicas es decir

$$[a_\alpha, a_\beta^\dagger]_\sigma = \delta_{\alpha,\beta}, \quad [a_\alpha, a_\beta]_\sigma = 0, \quad [a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger]_\sigma = 0$$

donde

$$[A, B]_\sigma = AB + \sigma BA.$$

Es decir, en el caso de bosones los operadores commutan y en el caso fermiónico anticommutan. Muchas veces usaremos la notación $[A, B] = AB - BA$ para denotar al commutador y $\{A, B\} = AB + BA$ para el anticommutador entre A y B .

De esta manera, es fácil ver que las relaciones de commutación anteriores implican que

$$a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger |0\rangle = |\mu, \nu\rangle = -\sigma a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger |0\rangle = -\sigma |\nu, \mu\rangle.$$

Es decir, si $\sigma = -1$, las partículas son bosones y tenemos que el estado $|\mu, \nu\rangle = |\nu, \mu\rangle$ es simétrico ante el intercambio de partículas. En cambio, si $\sigma = 1$, las partículas son fermiones y tenemos que el estado $|\mu, \nu\rangle = -|\nu, \mu\rangle$ es antisimétrico.

Como vimos anteriormente, el conjunto de todos los estados (correspondiente a la unión de los diferentes subespacios de estados con número fijo de partícula) se denomina espacio de Fock. Una vez definidos los estados del espacio de Fock podemos expresar cualquier operador en segunda cuantificación.

Una forma conveniente de encontrar la representación de los operadores es expresar el operador en términos de una base donde sea diagonal y luego transformar a una base arbitraria. Para esto, es útil definir el operador

Propiedades magnéticas de los sólidos

número

$$n_\lambda = a_\lambda^\dagger a_\lambda.$$

Este operador cumple que

$$n_\lambda (a_\lambda^\dagger)^n |0\rangle = n (a_\lambda^\dagger)^n |0\rangle.$$

Es decir, el estado $(a_\lambda^\dagger)^n |0\rangle$ es un autoestado del operador número con autovalor n . El operador n_λ cuenta el número de partículas que se encuentran en el estado λ .

4.6.1. Ondas de espín para el ferromagnéto

Estudiaremos ahora las excitaciones sobre el estado fundamental ferromagnético usando una representación de los operadores de espín conocida como bosones de Holstein-Primakov. Luego, podremos extender de manera natural el uso de estos operadores bosónicos para estudiar el caso antiferromagnético. Estudiaremos el modelo de Heisenberg correspondiente al siguiente Hamiltoniano

$$H = 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j,$$

donde el caso $J < 0$ corresponde a un sistema ferromagnético y entenderemos la notación $\langle i,j \rangle$ como una suma entre vecinos próximos en la red. Los operadores de espín satisfacen el álgebra de SU(2)

$$[\hat{S}_j^\alpha, \hat{S}_k^\beta] = i \delta_{j,k} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_k^\gamma. \quad (4.16)$$

Dado el signo de la constante de acoplamiento J , el Hamiltoniano favorece las configuraciones en las que todos los espines en sitios vecinos están alineados en la misma dirección. Un estado fundamental del sistema podría ser, por ejemplo

$$|gs\rangle = \bigotimes_j |\uparrow\rangle_j, \quad (4.17)$$

donde $|\uparrow\rangle_j$ representa un estado con máxima componente z del espín en el sitio j . Si realizamos una rotación cualquiera de todos los espines simultáneamente no cambia la energía, por lo que el estado fundamental es altamente degenerado y el sistema posee una simetría continua de rotación global.

Para estudiar las pequeñas desviaciones alrededor del estado fundamental $|gs\rangle$ introducimos una representación de los operadores de espín en términos de operadores bosónicos conocidos como bosones de Holstein-Primakov

$$\begin{aligned} S^z &= s - a^\dagger a \\ S^- &= \sqrt{1 - \frac{a^\dagger a}{2s}} \sqrt{2s} a^\dagger \end{aligned}$$

4.6 Ondas de espín y operadores de Holstein-Primakoff

El mapeo anterior reproduce las relaciones de conmutación exactas entre operadores de espín y el vínculo $S^2 = s(s+1)$. Sin embargo, es muy difícil trabajar con el mismo sin hacer aproximaciones dada la complicada expresión en términos de los operadores bosónicos. Nótese que el estado de máximo espín corresponde a un estado sin bosones. El operador S^- actúa entonces incrementando el número de bosones presentes en el sistema.

Podemos utilizar un desarrollo en potencias de $1/s$, para hacer el problema más fácil de resolver, desarrollando la raíz en la expresión de los S^\pm a orden más bajo tendremos que

$$\begin{aligned} S^- &\approx \sqrt{2s} a^\dagger \\ S^+ &\approx \sqrt{2s} a \\ S^z &= s - a^\dagger a \end{aligned}$$

Para el caso Ferromagnético podemos usar estas expresiones y obtener un Hamiltoniano cuadrático en los operadores bosónicos.

$$H = 2Js \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i - a_i^\dagger a_i - a_j^\dagger a_j) + 2J \sum_{\langle i,j \rangle} (s^2 + a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j).$$

Aún al más bajo orden obtenemos un Hamiltoniano que contiene un término de interacción generado por la interacción $S^z S^z$. Nosotros analizaremos primero la parte cuadrática, que es la que domina en el límite de s grande, donde ya podrán verse las primeras correcciones al comportamiento clásico (que en este caso asociamos con el límite $s \rightarrow \infty$).

$$H = 2Js \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i - a_i^\dagger a_i - a_j^\dagger a_j)$$

Ahora escribiremos la suma de forma conveniente para poder separarla en una suma sobre los sitios y otra sobre vecinos cambiando la notación $i \leftrightarrow x$

$$H = 2Js \sum_{x,r} (a_x^\dagger a_{x+r} + a_{x+r}^\dagger a_x - a_x^\dagger a_x - a_{x+r}^\dagger a_{x+r}). \quad (4.18)$$

La suma sobre sobre x corre sobre todas las posiciones de la red mientras que r corre sobre la mitad de los vecinos de cada sitio de manera de no contar un par de vecinos dos veces. Por ejemplo en una red cuadrada (2D) puede entenderse por la suma en r como la suma sobre el vecino de la derecha y el de arriba como se muestra en la figura 4.5. Transformando Fourier los operadores bosónicos

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{ik \cdot x} a_k,$$

Propiedades magnéticas de los sólidos

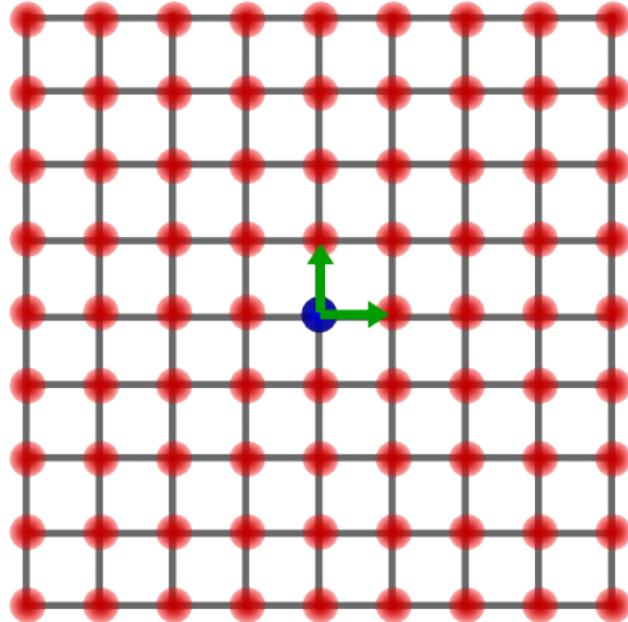


Figura 4.5: Red cuadrada.

el Hamiltoniano (4.18) queda en la forma

$$\begin{aligned}
 H &= 2Js \sum_k \left(-z + \sum_r e^{ik \cdot r} + \sum_r e^{-ik \cdot r} \right) a_k^\dagger a_k \\
 &= -2Jsz \sum_k \left(1 - \frac{1}{z} \sum_r (e^{ik \cdot r} + e^{-ik \cdot r}) \right) a_k^\dagger a_k \\
 &= -2Jsz \sum_k \left(1 - \frac{2}{z} \sum_r \cos(k \cdot r) \right) a_k^\dagger a_k,
 \end{aligned}$$

donde z es lo que se conoce como número de coordinación, es decir, la cantidad de vecinos que tiene cada sitio de la red. Si consideramos el caso en una dimensión $z = 2$ y la relación de dispersión queda como

$$H = \sum_k -4Js (1 - \cos(k)) a_k^\dagger a_k.$$

Es decir la relación de dispersión está dada por

$$\epsilon(k) = -4Js (1 - \cos(k))$$

que es el mismo resultado que encontramos cuando estudiamos las ondas de espín en la sección anterior (a diferencia de un signo porque simplemente tomamos una convención diferente para J en el Hamiltoniano).

4.6 Ondas de espín y operadores de Holstein-Primakoff

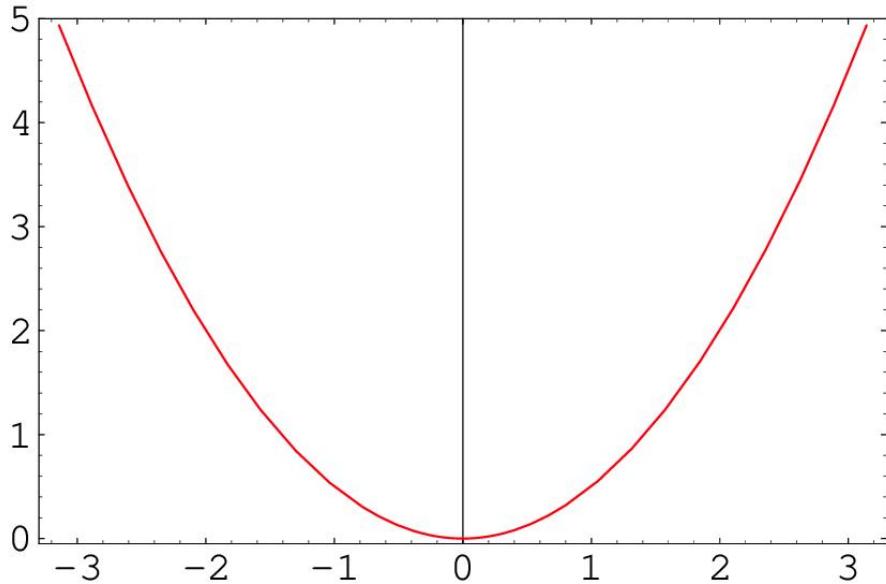


Figura 4.6: Relación de dispersión de las ondas de espín ferromagnéticas.

Si desarrollamos alrededor de $k = 0$ tenemos que

$$\begin{aligned}
 H &= -2Jsz \sum_k \left(1 - \frac{2}{z} \sum_r \cos(k \cdot r) \right) a_k^\dagger a_k \\
 &\approx -2Jsz \sum_k \left(\frac{2}{z} \sum_r \frac{(k \cdot r)^2}{2} \right) a_k^\dagger a_k \\
 &\approx -2Js \sum_k \left(\sum_r (k \cdot r)^2 \right) a_k^\dagger a_k \\
 &\approx -2Js \sum_k |k|^2 a_k^\dagger a_k,
 \end{aligned}$$

de donde vemos que la relación de dispersión $\varepsilon(k) = -2Js|k|^2$ es cuadrática y va a cero cuando $|k| \rightarrow 0$. Este es el modo de Goldstone que corresponde a la ruptura de simetría del estado fundamental ferromagnético. Es importante notar que la física de bajas energías esta dominada por el modo $k = 0$ donde la relación de dispersión va a cero.

4.6.2. Ondas de espín para el antiferromagnéto

Ahora si, podemos estudiar el antiferromagnéto usando bosones de Holstein-Primakov. Aunque el Hamiltoniano difiere del visto para el ferromagnéto solo en el signo de la constante de acoplamiento, la física del antiferromagnéto es

Propiedades magnéticas de los sólidos

muy diferente. Para las llamadas redes bipartitas el estado de mínima energía clásica se alcanza con una configuración alternada de los espines conocida como estado de Néel. En este estado tenemos dos subredes dentro de las cuales todos los espines se encuentran paralelos, mientras que las dos subredes se encuentran rotadas 180° una respecto de la otra. De nuevo tenemos que el sistema posee una simetría global de rotación pero a diferencia del caso ferromagnético, la configuración clásica de mínima energía no es un autoestado del Hamiltoniano.

A continuación quisiéramos seguir con la metodología utilizada para estudiar el ferromagnéto usando la representación de los operadores de espín en término de bosones, pero para esto es conveniente realizar antes una transformación canónica de los operadores de espín donde los espines pertenecientes a una subred (digamos la subred B) son rotados 180° de manera que la proyección z del espín cambie de signo y entonces, en términos de estos operadores transformados, la configuración clásica de mínima energía este dada ahora por todos los espines paralelos. Esto se logra (por ejemplo) efectuando una rotación de 180° de los operadores de espín alrededor del eje x . ($R_x(\pi)\mathbf{S}_B$). En ese caso tendremos entonces que

$$\begin{aligned}\tilde{S}_B^x &= S_B^x \\ \tilde{S}_B^y &= -S_B^y \\ \tilde{S}_B^z &= -S_B^z,\end{aligned}$$

por lo que los operadores \tilde{S}^+ y \tilde{S}^- quedan

$$\tilde{S}_B^+ = \tilde{S}_B^x + i\tilde{S}_B^y = S_B^x - iS_B^y = S_B^- \quad (4.19)$$

$$\tilde{S}_B^- = \tilde{S}_B^x - i\tilde{S}_B^y = S_B^x + iS_B^y = S_B^+ \quad (4.20)$$

Luego el Hamiltoniano para el antiferromagnéto queda, en términos de los operadores transformados

$$H = 2J \sum_{<i,j>} \frac{1}{2}(S_i^+ \tilde{S}_j^+ + S_i^- \tilde{S}_j^-) - S_i^z S_j^z. \quad (4.21)$$

Como al rotar los espines conseguimos la misma configuración de mínima energía que en el caso del ferromagnéto, podemos usar la misma representación bosónica para los operadores de espín y esperar que las fluctuaciones a este estado produzcan el análogo antiferromagnéto a las ondas de espín discutidas antes.

Entonces Para la subred A tenemos, como antes

$$\begin{aligned}S_i^z &= s - a_i^\dagger a_i \\ S_i^- &\simeq \sqrt{2s} a_i^\dagger \\ S_i^+ &\simeq \sqrt{2s} a_i\end{aligned}$$

4.6 Ondas de espín y operadores de Holstein-Primakoff

y para la subred B

$$\begin{aligned}\tilde{S}_j^z &= s - a_j^\dagger a_j \\ \tilde{S}_j^- &\simeq \sqrt{2s} a_j^\dagger \\ \tilde{S}_j^+ &\simeq \sqrt{2s} a_j.\end{aligned}$$

Nótese que nuevamente el estado con ausencia de bosones corresponde a todos los espines con proyección máxima. El Hamiltoniano en términos de la representación bosónica queda

$$\begin{aligned}H &= 2J \sum_{\langle i,j \rangle} s(a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) - (s - a_i^\dagger a_i)(s - a_j^\dagger a_j) \\ H &= 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-s^2 + s(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j + a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) - a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j \right].\end{aligned}$$

El último término es de orden s^0 por lo que podemos despreciarlo en el límite de s grande donde los términos que dominan serán los de orden $O(s)$ y $O(s^2)$

$$H = -2JNs^2 + 2Js \sum_{\langle i,j \rangle} \left[(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j + a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger) \right].$$

Ahora transformamos Fourier los operadores bosónicos de la siguiente manera

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i k \cdot x_j} a_k$$

De esta forma el Hamiltoniano queda

$$\begin{aligned}H &= -2JNs^2 + 2Js \sum_{k_1, k_2} \left[2\delta_{k_1, k_2} a_{k_1}^\dagger a_{k_2} + \left(\frac{1}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{-i(k_1 x_i + k_2 x_j)} \right) a_{k_1} a_{k_2} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i(k_1 x_i + k_2 x_j)} \right) a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger \right].\end{aligned}$$

Ahora, para poder realizar la suma en coordenadas escribimos $x_i = x_i + \mathbf{a}_r$, donde \mathbf{a}_r es un vector que va desde x_i hasta el r -esimo vecino. Luego tenemos

$$\left(\frac{1}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{-i(k_1 x_i + k_2 x_j)} \right) = \left(\frac{1}{N} \sum_r e^{-ik_2 a_r} \sum_i e^{-i(k_1 + k_2)x_i} \right) = \delta_{k_1, -k_2} \sum_r e^{-ik_2 a_r},$$

y una forma análoga para el otro término similar. Usando esto en el Hamiltoniano obtenemos

$$H = -2JNs^2 + 2Js \sum_k \left[2 a_k^\dagger a_k + \left(\sum_r e^{-ika_r} \right) a_k a_{-k} + \left(\sum_r e^{ika_r} \right) a_k^\dagger a_{-k}^\dagger \right].$$

Propiedades magnéticas de los sólidos

Como la suma sobre k es simétrica con respecto al límite superior e inferior (por ejemplo en 1D $-\pi < k < \pi$) podemos escribir

$$\begin{aligned} H &= -2JNs^2 + 2Js \sum_k \left[2a_k^\dagger a_k + \left(\sum_r \cos(k \cdot a_r) \right) a_k a_{-k} + \left(\sum_r \cos(k \cdot a_r) \right) a_k^\dagger a_{-k}^\dagger \right] \\ H &= -2JNs^2 + 2Js \sum_k \left[2a_k^\dagger a_k + \gamma_k a_k a_{-k} + \gamma_k a_k^\dagger a_{-k}^\dagger \right] \\ H &= -2JNs^2 + 2Js \sum_k \left[a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k} + \gamma_k (a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) \right], \end{aligned}$$

donde $\gamma_k = \sum_r \cos(k \cdot a_r)$. El Hamiltoniano anterior puede ser diagonalizado fácilmente mediante una transformación de Bogoliubov, definiendo dos nuevos operadores de la forma

$$b_k = \alpha_k a_k + \beta_k a_{-k}^\dagger \quad (4.22)$$

$$c_k^\dagger = \beta_k a_k + \alpha_k a_{-k}^\dagger \quad (4.23)$$

Con la condición $\alpha_k^2 - \beta_k^2 = 1$ para asegurar que los nuevos operadores cumplan con el álgebra bosónica¹. Al reemplazar en H obtenemos

$$H = 2JNs^2 + 2Js \sum_k \left\{ (\alpha_k^2 + \beta_k^2 - 2\gamma_k \alpha_k \beta_k) [b_k^\dagger b_k + c_k^\dagger c_k] \right\} \quad (4.24)$$

$$+ \left\{ (\alpha_k^2 + \beta_k^2) \gamma_k - 2\alpha_k \beta_k \right\} [b_k^\dagger c_k^\dagger + b_k c_k] + 2(\beta_k^2 - \gamma_k \alpha_k \beta_k). \quad (4.25)$$

Imponemos que el coeficiente que acompaña a los términos que no conservan el número de partículas se anule, junto con la condición sobre los coeficientes para que se cumplan las relaciones de commutación bosónicas.

$$\begin{aligned} 0 &= \gamma_k (\alpha_k^2 + \beta_k^2) - 2\alpha_k \beta_k \\ 1 &= \alpha_k^2 - \beta_k^2. \end{aligned}$$

De las soluciones de este sistema de ecuaciones obtenemos

$$\alpha_k^2 + \beta_k^2 - 2\gamma_k \alpha_k \beta_k = \sqrt{1 - \gamma_k^2} \quad (4.26)$$

$$2(\beta_k^2 - \gamma_k \alpha_k \beta_k) = \sqrt{1 - \gamma_k^2} - 1 \quad (4.27)$$

y reemplazando en el Hamiltoniano obtenemos

$$H = 2JNs(s+1) + 2Js \sum_k \sqrt{1 - \gamma_k^2} [b_k^\dagger b_k + c_k^\dagger c_k + 1].$$

¹el lector lo puede verificar como ejercicio

4.6 Ondas de espín y operadores de Holstein-Primakoff

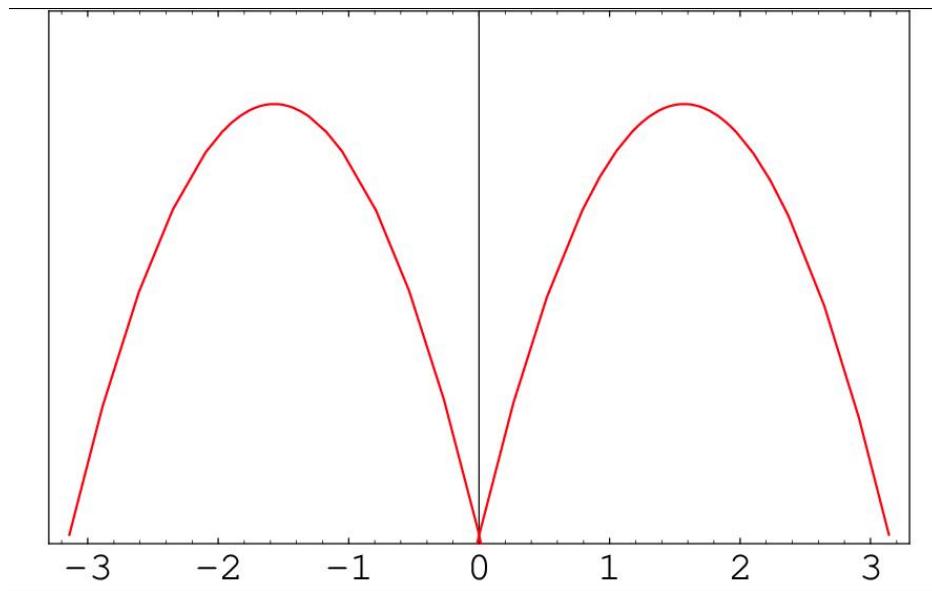


Figura 4.7: Relación de dispersión correspondiente a las ondas de espín anti-ferromagnéticas.

De esta manera la relación de dispersión de las ondas de espín esta dada por

$$\varepsilon(k) = Js\sqrt{1 - \gamma_k^2} \quad (4.28)$$

$$\sim \frac{2Js}{\sqrt{z}} |k| \quad (4.29)$$

Notemos aquí que a diferencia del caso ferromagnético, la relación de dispersión en este caso tiene un comportamiento lineal a valores de k cercanos a cero.

Capítulo 5

Superconductividad

En este capítulo discutiremos un nuevo estado fundamental del gas de electrones interactuante: el estado superconductor. En este estado cuántico macroscópico, los electrones se aparean para formar estados ligados coherentes llamados pares de Cooper, que cambian drásticamente las propiedades macroscópicas del sistema, dando lugar a una conductividad y un diamagnetismo perfecto. Nos centraremos principalmente en los superconductores convencionales, donde los pares de Cooper se originan a partir de una pequeña y atractiva interacción electrón-electrón mediada por fonones. Sin embargo, en los llamados superconductores no convencionales —un tema de intensa investigación en la física del estado sólido actual— el apareamiento puede originarse incluso a partir de interacciones puramente repulsivas.

5.1. Fenomenología

La superconductividad fue descubierta por Kamerlingh-Onnes en 1911, cuando estudiaba las propiedades de transporte del Hg (mercurio) a bajas temperaturas. Encontró que por debajo de la temperatura de licuefacción del helio, alrededor de 4,2 K, la resistividad del Hg caía repentinamente a cero. Aunque en ese momento no había un modelo bien establecido para el comportamiento del transporte a baja temperatura en metales, el resultado fue bastante sorprendente, ya que las expectativas eran que la resistividad llegara a cero o divergiera a $T = 0$, pero no que se anule a una temperatura finita.

En un metal, la resistividad a bajas temperaturas tiene una contribución constante de la dispersión de los electrones por las impurezas, una contribución T^2 de la dispersión electrón-electrón y una contribución T^5 de la dispersión por fonones. Así, la desaparición de la resistividad a bajas tempe-

5.1 Fenomenología

raturas es una clara indicación de un nuevo estado fundamental. Aquí uno puede preguntarse si esa resistividad cae exactamente a cero o resta una ligera resistividad residual, aunque pequeña. La respuesta va en la dirección de la primera afirmación. De hecho existen materiales que exhiben violentos cambios en la resistividad, alcanzando incluso valores muy pequeños, pero que no son superconductores. Otra pregunta de interés aquí es por qué aparece una escala de energía tan baja asociada a esas temperaturas críticas, cuando la energía características de un metal, su energía de Fermi, es del orden de 1 eV. Es de destacar que no todos los metales se vuelven superconductores, por ejemplo los mejores conductores, Cu, Ag, Au no lo son.

Meissner descubrió otra propiedad clave del superconductor en 1933. Encotró que la densidad de flujo magnético \mathbf{B} se expulsa por debajo de la temperatura de transición superconductora T_c , es decir, $\mathbf{B} = 0$ dentro de un material superconductor, el llamado efecto Meissner, lo que significa que el superconductor es un diamagneto perfecto. Recuérdese que la relación entre \mathbf{B} , el campo magnético \mathbf{H} y la magnetización \mathbf{M} está dada por:

$$\mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{M}, \quad (5.1)$$

y por lo tanto, dado que $\mathbf{B} = 0$ en el interior de un superconductor, la susceptibilidad magnética $\chi = \partial\mathbf{M}/\partial\mathbf{H}$ es

$$\chi = -\frac{1}{4\pi}. \quad (5.2)$$

y como $\chi < 0$ el material es un diamagneto. Además, dado que la permeabilidad $\mu = 1 + 4\pi\chi$, que señala la proporción $\mathbf{B} = \mu$ no puede ser negativo, lo cual violaría la estabilidad termodinámica, realiza el valor más pequeño (más diamagnético) de μ , que es $\mu = 0$. Si aumentamos el campo magnético aplicado a un superconductor, eventualmente se destruye el estado superconductor, haciendo que el sistema regrese al estado normal. Los superconductores se clasifican en dos tipos: en los de tipo I, no existe un estado intermedio que separe la transición del estado superconductor al estado normal al aumentar el campo, y esta se produce abruptamente, mientras que en los superconductores de tipo II, existe un estado intermedio, denominado estado mixto, que aparece antes de la transición al estado normal. En el estado mixto, el campo magnético penetra parcialmente en el material a través de la formación de una serie de tubos de flujo que transportan un múltiplo del cuadro de flujo magnético $\Phi_0 = hc/2|e|$.

Si bien el nombre de estos materiales sugiere que la conductividad perfecta es la propiedad fundamental de un superconductor, veamos que el diamagnetismo perfecto no puede deducirse, y es tan fundamental como aquella.

Superconductividad

Estudiemos las implicaciones de la resistividad nula utilizando las ecuaciones de Maxwell. Si un material es un conductor perfecto, la aplicación de un campo eléctrico acelera libremente la carga eléctrica:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -e\mathbf{E}. \quad (5.3)$$

Pero dado que la densidad de corriente está dada por $\mathbf{J} = -en_s\dot{\mathbf{r}}$, donde n_s es el número de “electrones superconductores” tenemos que

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = \frac{n_s e^2}{m} \mathbf{E}. \quad (5.4)$$

Si insertamos esta relación en la ley de Faraday

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (5.5)$$

obtenemos

$$\nabla \times \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = -\frac{n_s e^2}{cm} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (5.6)$$

Pero al utilizar la ley de Ampère para un campo eléctrico estático,

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}, \quad (5.7)$$

se encuentra

$$\nabla \times \nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\frac{4\pi n_s e^2}{mc^2} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (5.8)$$

La identidad $\nabla \times \nabla \times \mathbf{C} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{C}) - \nabla^2 \mathbf{C}$ y la ecuación de Maxwell $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ permiten llegar a la ecuación

$$\nabla^2 \left(\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) = \lambda^{-2} \left(\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right), \quad (5.9)$$

donde definimos la profundidad de penetración:

$$\lambda = \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi n_s e^2}}. \quad (5.10)$$

¿Cuál es el significado de la Ec. (5.9)? Consideremos un sistema unidimensional que es un conductor perfecto para $x > 0$. Resolviendo la ecuación diferencial para x , y teniendo en cuenta las condiciones de contorno, obtenemos que la derivada $\partial \mathbf{B}/\partial t$ decrece exponencialmente con x , es decir

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \left(\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right)_{x=0} e^{-x/\lambda}. \quad (5.11)$$

5.1 Fenomenología

Esto significa que el campo magnético dentro de un conductor perfecto es constante en el tiempo. Sin embargo, este no es el efecto Meissner, según el cual el campo magnético debe anularse dentro del superconductor. Consideremos que se aplica un campo magnético \mathbf{B}_0 a un material superconductor por encima de T_c , cuando aún es un metal normal. Si enfriamos el sistema por debajo de T_c , el efecto Meissner indica que \mathbf{B}_0 tiene que ser expulsado del material, ya que el campo se debe anular en el interior. Sin embargo, para un conductor perfecto el campo conservaría un valor diferente de cero, \mathbf{B}_0 dentro del material. ¡Este ejercicio nos dice que un superconductor no es solo un conductor perfecto! O dicho de otro modo, la resistividad cero no implica el diamagnetismo perfecto. Ambas son propiedades fundamentales.

Buscando entender el efecto Meissner, los hermanos London propusieron un modelo fenomenológico para describir los superconductores que elimina arbitrariamente las derivadas temporales de la Ec. (5.9):

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \lambda^{-2} \mathbf{B}. \quad (5.12)$$

Esta ecuación captura correctamente el efecto Meissner, como discutimos anteriormente, enfatizando las propiedades diamagnéticas perfectas del superconductor. Combinada con la ley de Ampère, esta ecuación implica la siguiente relación entre \mathbf{J} y \mathbf{B} :

$$\nabla \times \mathbf{J} = -\frac{n_s e^2}{mc} \mathbf{B}. \quad (5.13)$$

Dado que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, donde \mathbf{A} es el potencial vector magnético, la ecuación anterior se convierte en la ecuación de London,

$$\mathbf{J} = -\frac{n_s e^2}{mc} \mathbf{A}, \quad (5.14)$$

en el *gauge* de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, es decir, en el *gauge* donde el vector potencial tiene sólo la componente transversal distinto de cero. Se debe elegir este *gauge* porque debe cumplirse además la ecuación de continuidad, $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$.

¿Cómo podemos justificar la ecuación de London? Esta no deja de ser sorprendente en algún sentido, ya que la corriente es en principio una cantidad observable, mientras que el potencial vector no lo es, al menos clásicamente. Sin embargo, en mecánica cuántica la definición de la corriente que es necesaria para satisfacer la ecuación de continuidad,

$$\mathbf{J} = \frac{e\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] - \frac{e^2}{mc} |\psi|^2 \mathbf{A}, \quad (5.15)$$

Superconductividad

incluye un término lineal en \mathbf{A} . Si el primero pudiera anularse por alguna razón tendríamos la ecuación de London.

London propuso además una explicación basada en la rigidez de la función de onda en el estado superconductor. Por ejemplo, según el teorema de Bloch, el momento total del sistema en su estado fundamental $|\Psi\rangle$ (es decir, en ausencia de cualquier campo aplicado) tiene un valor medio cero, $\langle\Psi|\mathbf{p}|\Psi\rangle = 0$. Ahora, supongamos que la función de onda Ψ es rígida, es decir, que esta relación se mantiene incluso en presencia de un campo externo. Entonces, dado que el momento canónico está dado por $\mathbf{p} = m\mathbf{v} - e\mathbf{A}/c$, obtenemos,

$$\langle\mathbf{v}\rangle = \frac{e\mathbf{A}}{mc} \quad (5.16)$$

Como $\mathbf{J} = -en_s\langle\mathbf{v}\rangle$, recuperamos la ecuación de London (5.14).

Por supuesto, la pregunta principal es sobre el mecanismo microscópico que da lugar a esta rigidez de la función de onda y, en última instancia, al estado superconductor. Varios de los físicos más brillantes del siglo pasado intentaron abordar esta pregunta —como Bohr, Einstein, Feynman, Born, Heisenberg— pero la respuesta llegó recién en 1957 con la famosa teoría de Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) ¡casi 50 años después del descubrimiento experimental de Kamerlingh-Onnes!

Las contribuciones experimentales fundamentales hicieron que las principales propiedades de los superconductores fueran más transparentes antes de que apareciera la teoría BCS en 1957. La observación de una disminución exponencial del calor específico a bajas temperaturas mostró que el espectro de energía de un superconductor posee un gap. Esto contrasta con el espectro de un metal normal, que no posee ningún gap; recuérdese que excitar un par electrón-hueco cerca de la superficie de Fermi le cuesta muy poca energía al metal.

Otro experimento clave fue la observación del efecto isótopo. Al estudiar la temperatura crítica T_c para la transición al estado superconductor de materiales que contienen un isótopo de elemento diferente, se encontró que T_c decrece con $M^{-1/2}$, donde M es la masa del isótopo. Dado que esta masa está relacionada solo con los iones que forman la red, esta observación experimental indicó que la red, y por lo tanto los fonones, deben desempeñar un papel clave en la formación del estado superconductor.

El punto principal de la teoría BCS es que la interacción electrón-electrón, que resulta atractiva al estar mediada por los fonones da lugar a pares de Cooper, es decir, estados ligados formados por dos electrones de espines y momentos opuestos. Estos pares de Cooper forman entonces un estado fundamental macroscópico coherente, que presenta un gap en su espectro y un diamagnetismo perfecto. La clave para la formación de pares de Cooper es

5.2 Un par de Cooper

la existencia de una superficie de Fermi bien definida, como veremos más adelante.

5.2. Un par de Cooper

Gran parte de la física involucrada en la teoría BCS, en especial la explicación del surgimiento de una atracción entre electrones, se puede discutir en el contexto de un problema simple de mecánica cuántica. Consideremos dos electrones que interactúan entre sí a través de un potencial atractivo $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. La ecuación de Schrödinger viene dada por:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}_1}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}_2}^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (5.17)$$

donde $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ es la función de onda y E la energía del par. Como es habitual, cambiamos las variables a la coordenada relativa $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ya la posición del centro de masa $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$. En términos de estas nuevas variables, la ecuación de Schrödinger se convierte en:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{R}}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (5.18)$$

donde $m^* = 2m$ es la masa total y $\mu = m/2$ es la masa reducida. Como el potencial no depende de la coordenada del centro de masa \mathbf{R} , buscamos soluciones del a forma:

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}, \quad (5.19)$$

lo que da lugar a la ecuación:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \tilde{E} \psi(\mathbf{r}), \quad (5.20)$$

donde definimos $\tilde{E} = E - \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*}$. Para un valor dado de \tilde{E} , la energía E más baja es aquella para la que $\mathbf{K} = 0$, es decir, para la que se anula el momento del centro de masa. Consideremos entonces el centro de masa está quieto, y que $E = \tilde{E}$. En este caso, los dos electrones tienen momentos opuestos. Dependiendo de la simetría de la parte espacial de la función de onda, par $\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$ o impar $\psi(\mathbf{r}) = -\psi(-\mathbf{r})$, los espines de los electrones formarán un estado singlete o triplete, respectivamente, para asegurar la antisimetría de la función de onda total.

Superconductividad

Para proceder, tomamos la transformada de Fourier de la ecuación de Schrödinger, introduciendo

$$\psi(\mathbf{k}) = \int d^3r \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (5.21)$$

y una expresión análoga para la transformada de Fourier del potencial $V(\mathbf{r})$, de donde obtenemos

$$2\varepsilon_{\mathbf{k}}\psi(\mathbf{k}) + \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \psi(\mathbf{k}') = E\psi(\mathbf{k}), \quad (5.22)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ es la energía de los electrones libres. Reescribamos esta ecuación en la forma

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{E - 2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \psi(\mathbf{k}'). \quad (5.23)$$

Supongamos ahora que la atracción entre electrones proviene de la mediación de fonones, y para fijar ideas tomemos un modelo simple en el cual el potencial es constante en el espacio \mathbf{k} . Pero dado que los fonones poseen una frecuencia máxima de excitación fijada por la frecuencia de Debye, ω_D , si la energía de los electrones individuales es mayor que $\hbar\omega_D$ los fonones no serán efectivos en acoplarlos, en consecuencia, el potencial debe anularse cuando los valores de \mathbf{k} involucrados impliquen que $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ sea mayor que $\hbar\omega_D$. Es decir, consideremos un potencial que es atractivo $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -V_0$ para $\varepsilon_{\mathbf{k}'}, \varepsilon_{\mathbf{k}} < \hbar\omega_D$ y cero en caso contrario. Obtenemos

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{-V_0}{E - 2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \int_{\varepsilon_{\mathbf{k}'} < \hbar\omega_D} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \psi(\mathbf{k}'), \quad (5.24)$$

$$= C \frac{-V_0}{E - 2\varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (5.25)$$

donde C contiene a la integral en el lado derecho de la primera línea, que da lugar a una constante independiente de \mathbf{k} . Si ahora integremos a ambos lados en la región restringida $\varepsilon_{\mathbf{k}} < \hbar\omega_D$, la constante aparece en ambos miembros y puede eliminarse, dando lugar a la ecuación

$$\frac{1}{V_0} = - \int_{\varepsilon_{\mathbf{k}} < \hbar\omega_D} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{E - 2\varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (5.26)$$

que representa la ecuación para las autoenergías E . Para resolverla es conveniente introducir la densidad de estados de los electrones libres,

$$\rho(\varepsilon) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad (5.27)$$

5.2 Un par de Cooper

que permite escribir (5.26) en la forma

$$\frac{1}{V_0} = - \int_0^{\hbar\omega_D} d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{E - 2\varepsilon}, \quad (5.28)$$

Utilizamos el resultado para la densidad de estados

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \quad (5.29)$$

y realizando la integral obtenemos

$$\frac{1}{V_0} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\sqrt{\hbar\omega_D} - \sqrt{\frac{-E}{2}} \arctan \left(\sqrt{\frac{2\hbar\omega_D}{-E}} \right) \right]. \quad (5.30)$$

Esta ecuación determina el valor de la energía del estado ligado $E < 0$ como función del potencial de atracción V_0 . Si tomamos el límite $E \rightarrow 0^-$, el segundo término se anula, y vemos que el valor mínimo de V_0 para tener un estado ligado es

$$V_{0,\min} = \frac{2\pi^2}{\sqrt{\hbar\omega_D}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{3/2} \quad (5.31)$$

Por lo tanto, encontramos que habrá un estado ligado solo si la interacción atractiva es lo suficientemente fuerte.

No obstante, en este ejercicio pasamos por alto un aspecto importante: en el sistema real de muchos cuerpos, solo los electrones cercanos al nivel de Fermi se verán afectados por la interacción atractiva. Para imitar esta propiedad, consideraremos un potencial atractivo $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -V_0$ para los estados electrónicos desocupados por encima de la energía de Fermi $\varepsilon_F, \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_F, \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F < \hbar\omega_D$. Esto significa que debemos repensar los límites de integración, y reescribir la integral en la ecuación (5.28) con límites ε_F y $\varepsilon_F + \hbar\omega_D$. Más aún, como $\hbar\omega_D \ll \varepsilon_F$, podemos aproximar la densidad de estados por su valor en ε_F , y entonces la ecuación para E se escribe

$$\frac{1}{V_0} \approx -\rho(\varepsilon_F) \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \hbar\omega_D} d\varepsilon \frac{1}{E - 2\varepsilon}, \quad (5.32)$$

$$= \frac{\rho(\varepsilon_F)}{2} \ln \left(\frac{2\varepsilon_F - E + 2\omega_D}{2\varepsilon_F - E} \right). \quad (5.33)$$

En el límite de $V_0\rho(\varepsilon_F) \ll 1$, E está cerca de $2\varepsilon_F$, y podemos aproximar $2\varepsilon_F - E + 2\omega_D \approx 2\omega_D$. Definiendo la energía de enlace $E_b \equiv 2\varepsilon_F - E$, obtenemos:

$$E_b = 2\omega_D e^{-\frac{2}{V_0\rho(\varepsilon_F)}}. \quad (5.34)$$

Superconductividad

Se formará entonces un estado ligado independientemente de cuán pequeña sea la interacción atractiva V_0 , denominado par de Cooper. Esto es fundamentalmente diferente del caso de electrones libres que consideramos antes, donde la interacción atractiva tiene que superar un umbral para crear un estado ligado. La propiedad clave responsable de este comportamiento diferente es la existencia de una superficie de Fermi bien definida, que separa los estados que están ocupados de los estados que no están ocupados.

La energía del estado ligado E_b es exponencialmente pequeña en $1/V_0\rho(\varepsilon_F)$, lo que, como veremos más adelante, dará lugar a una temperatura crítica muy baja. Más aún, en los buenos metales, como oro, plata y cobre, el acoplamiento electrón-fonón es muy pequeño (lo que los vuelve buenos conductores al disminuir la dispersión de electrones por los iones) y por lo tanto la temperatura crítica es mínima y la superconductividad indetectable.

Para finalizar este apartado, recordemos que la energía total en el caso de que el centro de masa tenga un momento finito \mathbf{K} viene dada por:

$$\begin{aligned} E &= E_{\mathbf{K}=0} + \frac{\hbar^2 K^2}{4m}, \\ &= 2\varepsilon_F - E_b + \frac{\hbar^2 K^2}{4m}, \end{aligned} \tag{5.35}$$

y por lo tanto, en el límite $E \rightarrow 2\varepsilon_F$, todavía podemos obtener un estado ligado con momento de centro de masa finito:

$$K = \frac{2}{\hbar} \sqrt{mE_b}, \tag{5.36}$$

que da lugar a una densidad de corriente finita:

$$J = n_s e \frac{\hbar K}{m} = 2n_s e \sqrt{\frac{E_b}{m}}. \tag{5.37}$$

5.3. Muchos pares de Cooper: estado BCS

En la sección anterior vimos que dos electrones cerca del nivel de Fermi son inestables frente a la formación de un par de Cooper para una interacción atractiva arbitrariamente pequeña. Esperamos entonces que el sistema electrónico de muchos cuerpos sea inestable hacia la formación de un nuevo estado fundamental, donde proliferen estos pares de Cooper. En esta sección, estudiaremos este estado BCS utilizando la teoría de campo medio.

5.3 Muchos pares de Cooper: estado BCS

5.3.1. Hamiltoniano efectivo

Para formular una teoría microscópica de la superconductividad consideremos el siguiente Hamiltoniano efectivo de muchas partículas:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{kk}'} V_{\mathbf{kk}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}. \quad (5.38)$$

Aquí, $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ crea un electrón con momento \mathbf{k} y espín σ , y ya incluimos el potencial químico al definir $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. El segundo término describe la destrucción de un par de Cooper (dos electrones con momento y espín opuestos) y la subsiguiente creación de otro par de Cooper. Observemos que este Hamiltoniano posee una forma reminiscente del Hamiltoniano general estudiado en las ecuaciones (3.74) y (3.98), sólo que sólo posee términos donde los pares se crean con espines opuestos, y además la interacción pasada al espacio de coordenadas no se escribe como una función simple de la distancia. Esto se debe a que es el resultado de la atracción efectiva generada por la mediación de los fonones. Como intervienen los fonones, al igual que en el caso de un solo par de cooper visto anteriormente, sólo pueden acoplarse electrones cuyo momento esté restringido de modo que su energías permanezca menor que la frecuencia de Debye, es decir, el potencial V satisface que $V_{\mathbf{kk}'} = 0$ si $|\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_D$ o $|\xi_{\mathbf{k}'}| > \hbar\omega_D$

Para continuar, realizamos el desacople de campo medio habitual del término cuártico¹

$$\begin{aligned} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle &\approx \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \\ &\quad - \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \end{aligned} \quad (5.41)$$

El valor medio $\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle$ podría no anularse si el estado fundamental superconductor. Así, definimos la función del *gap*:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{kk}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (5.42)$$

Por ahora, no hay razón para llamarlo *gap*, pero discutiremos su significado muy pronto.

¹La aproximación de campo medio consisten en reemplazar un producto de operadores A y B de acuerdo a

$$AB \approx \langle A \rangle B + A \langle B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (5.39)$$

Nótese que el error introducido al hacer este reemplazo es

$$AB - \langle A \rangle B - A \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle), \quad (5.40)$$

es decir, es de segundo orden en las desviaciones de A y B respecto de sus valores medios.

Superconductividad

El Hamiltoniano efectivo se convierte en:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \quad (5.43)$$

Obsérvese que es de la forma general (3.129) que introducimos en el capítulo 3. Posee términos anómalos, y por lo tanto para resolverlo debemos introducir alguna transformación que mezcle electrones con huecos. Empleamos la transformación de Bogoliubov del tipo de las ecuaciones (3.144) y (3.145) y en particular, definimos nuevos operadores fermiónicos $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}$ y coeficientes $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ en la forma:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \end{aligned} \quad (5.44)$$

Para que se satisfagan las relaciones de conmutación fermiónica, se debe verificar la condición de normalización:

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad (5.45)$$

que implica, además, que la transformación resulta unitaria. Sustituyendo en el Hamiltoniano efectivo se obtiene para el término de energía cinética:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left[c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left[\left(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 \right) \left(\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \right. \\ &\quad \left. + 2|v_{\mathbf{k}}|^2 + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + 2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \right] \end{aligned} \quad (5.46)$$

y para el de apareamiento:

$$\begin{aligned} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right) &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \right) \left(\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \right) \right] \\ &- \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 \right) \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right. \\ &\quad \left. + \left(\Delta_{\mathbf{k}}^* (u_{\mathbf{k}}^*)^2 - \Delta_{\mathbf{k}} (v_{\mathbf{k}}^*)^2 \right) \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \right] \end{aligned} \quad (5.47)$$

De este modo, recolectando términos de igual tipo en potencias de γ y γ^\dagger , el Hamiltoniano efectivo adquiere la forma

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (5.48)$$

5.3 Muchos pares de Cooper: estado BCS

con:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \left[2\xi_{\mathbf{k}}|v_{\mathbf{k}}|^2 - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \right] \\ H_1 &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi_{\mathbf{k}} \left(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 \right) + \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \right] \left(\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \\ H_2 &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 \right) \right] \left(\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) + \text{h.c.}, \end{aligned} \quad (5.49)$$

Para diagonalizar el Hamiltoniano, debemos encontrar los coeficientes $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ que hace que el término no diagonal H_2 se anule. Esto se consigue imponiendo la condición cuadrática

$$2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 = 0. \quad (5.50)$$

Resolviendo para el cociente $v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}$ se obtiene:

$$\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \frac{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} - \xi_{\mathbf{k}}}{\Delta_{\mathbf{k}}^*}, \quad (5.51)$$

donde elegimos solo la raíz positiva para asegurarnos de que la energía del estado BCS sea un mínimo y no un máximo. Obsérvese que debido a que el numerador es real, la fase de la función de gap compleja $\Delta_{\mathbf{k}}$ debe ser la misma que la fase relativa entre $v_{\mathbf{k}}$ y $u_{\mathbf{k}}$. Dado que podemos establecer la fase de $u_{\mathbf{k}}$ en cero sin pérdida de generalidad, se deduce que las fases de $v_{\mathbf{k}}$ y $\Delta_{\mathbf{k}}$ son las mismas.

Usando la condición de normalización $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$, obtenemos:

$$\begin{aligned} |u_{\mathbf{k}}|^2 &= \frac{1}{1 + |\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}|^2} = \frac{1}{2} \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 - \xi_{\mathbf{k}} \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right) \end{aligned} \quad (5.52)$$

de lo que se sigue que

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right). \quad (5.53)$$

A continuación introducimos la forma explícita de u y v en las expresiones para H_0 y H_1 . Usando las relaciones anteriores, obtenemos:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \left[2\xi_{\mathbf{k}}|v_{\mathbf{k}}|^2 - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \right), \end{aligned} \quad (5.54)$$

Superconductividad

y

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi_{\mathbf{k}} (|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) + \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \right] (\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} (\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}). \end{aligned} \quad (5.55)$$

El Hamiltoniano efectivo resulta entonces de la forma

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\sigma} + E_0, \quad (5.56)$$

donde hemos introducido las energías de los estados de cuasipartículas,

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}, \quad (5.57)$$

y donde E_0 es la energía del estado fundamental:

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \right). \quad (5.58)$$

Queda claro a partir de la Ec. (5.57) por qué llamamos a $\Delta_{\mathbf{k}}$ la función del *gap*: incluso en el nivel de Fermi, donde $\xi_{\mathbf{k}} = 0$, el espectro de energía del superconductor tiene una *gap* de tamaño $|\Delta_{\mathbf{k}}|$. Por lo tanto, necesitamos entregar una energía mínima de $2|\Delta_{\mathbf{k}}|$ al sistema para excitar sus cuasipartículas, que son descritas por los operadores $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ y que son más que los Bogoliubones introducidos en la sección 3.3.5, y que de invertir las Ecs. (5.44) se observa que son mezcla de electrones y huecos:

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} \end{aligned} \quad (5.59)$$

Observemos de las Ecs. (5.53) y (5.52) que describen el comportamiento de $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$, que $\Delta_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$, $|u_{\mathbf{k}}|^2 \rightarrow 1$ para $\xi_{\mathbf{k}} > 0$ y $|u_{\mathbf{k}}|^2 \rightarrow 0$ para $\xi_{\mathbf{k}} < 0$ mientras que $|v_{\mathbf{k}}|^2 \rightarrow 1$ para $\xi_{\mathbf{k}} < 0$ y $|v_{\mathbf{k}}|^2 \rightarrow 0$ para $\xi_{\mathbf{k}} > 0$. Por lo tanto, en el estado normal, crear una excitación de Bogoliubon corresponde a crear un electrón para energías por encima del nivel de Fermi y crear un agujero (destruyendo un electrón) de momento y espín opuestos para energías por debajo del nivel de Fermi. En el estado superconductor, donde tanto u como v son distintos de cero, un Bogoliubon se convierte en una superposición de un electrón y un estado de hueco.

Observemos que, tal como esperábamos, el Hamiltoniano BCS no conserva el número de partículas, pero sí su paridad. Es interesante observar además que el Hamiltoniano original posee simetría SU(2) y por lo tanto, el *spin* se conserva y es un buen número cuántico. Esto significa que así como los electrones poseen *spin*, los Bogoliubones también, y por ello podemos asignarles la etiqueta σ tal como hicimos en la ecuación (5.59).

5.3 Muchos pares de Cooper: estado BCS

5.3.2. Estado fundamental: Función de onda BCS

El estado de mínima energía corresponde al vacío de Bogoliubones, $|0_\gamma\rangle$, que llamaremos función de onda BCS:

$$\gamma_{\mathbf{k}\sigma}|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = 0 \quad (5.60)$$

(recuérdese que en presencia de términos anómalos el mismo no es invariante) ¿Cómo se puede escribir esta función de onda en términos del vacío original de electrones $|0\rangle$? Para averiguarlo, escribimos la función de onda BCS como una combinación arbitraria de pares de Cooper, en la forma:

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \mathcal{W} \prod_{\mathbf{q}} e^{\alpha_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger} |0\rangle \quad (5.61)$$

donde \mathcal{W} es una constante de normalización y $\alpha_{\mathbf{q}}$ es una función a determinar. Para hacerlo, es suficiente considerar solo una especie de espín. Escrita en términos de los operadores de electrones, la condición (5.60) se convierte en:

$$u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} |\Psi_{\text{BCS}}\rangle = v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |\Psi_{\text{BCS}}\rangle \quad (5.62)$$

Claramente entonces, cuando $c_{\mathbf{k}\uparrow}$ actúa sobre la función de onda anterior, el único factor dentro del producto que no commuta con $c_{\mathbf{k}\uparrow}$ es aquel para el cual $\mathbf{q} = \mathbf{k}$. Centrémonos en este término. Definiendo $\theta_{\mathbf{k}} = \alpha_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ para simplificar la notación, tenemos:

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} e^{\alpha_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle = c_{\mathbf{k}\uparrow} e^{\theta_{\mathbf{k}}} |0\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}}^n}{n!} |0\rangle \quad (5.63)$$

Por otro lado, $\theta_{\mathbf{k}}$ satisface la relación de commutación Ahora tenemos la relación de commutación

$$[c_{\mathbf{k}\uparrow}, \theta_{\mathbf{k}}] = \alpha_{\mathbf{k}} \{c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = \alpha_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \quad (5.64)$$

donde usamos que $[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}$. Entonces, de $c_{\mathbf{k}\uparrow}|0\rangle = 0$, se sigue que:

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}} |0\rangle = \alpha_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (5.65)$$

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}}^2 |0\rangle = ([c_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}}, \theta_{\mathbf{k}}] + \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}}) |0\rangle \quad (5.66)$$

$$= \theta_{\mathbf{k}} ([c_{\mathbf{k}\uparrow}, \theta_{\mathbf{k}}] + c_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}}) |0\rangle \quad (5.67)$$

$$= 2\theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (5.68)$$

y en general,

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}}^n |0\rangle = n \theta_{\mathbf{k}}^{n-1} \alpha_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (5.69)$$

Superconductividad

Por lo tanto, obtenemos

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} e^{\theta_{\mathbf{k}}} |0\rangle = \alpha_{\mathbf{k}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\theta_{\mathbf{k}}^{n-1}}{(n-1)!} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (5.70)$$

Ahora bien, del conmutador

$$[\theta_{\mathbf{k}}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger] = \alpha_{\mathbf{k}} [c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger] = 0 \quad (5.71)$$

llegamos al resultado:

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} e^{\theta_{\mathbf{k}}} |0\rangle = \alpha_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\theta_{\mathbf{k}}^{n'}}{n'!} |0\rangle = \alpha_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger e^{\theta_{\mathbf{k}}} \quad (5.72)$$

Sustituyendo en la Ec. (5.62) se obtiene

$$u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | \Psi_{\text{BCS}} \rangle \quad (5.73)$$

lo que implica que la función $\alpha_{\mathbf{k}}$ viene dada por:

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}. \quad (5.74)$$

La función de onda BCS resulta entonces

$$\begin{aligned} | \Psi_{\text{BCS}} \rangle &= \mathcal{W} \prod_{\mathbf{k}} e^{\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle \\ &= \mathcal{W} \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \end{aligned} \quad (5.75)$$

donde usamos el hecho de que, debido al principio de exclusión de Pauli, $(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)^n = 0$ para $n > 1$. Para normalizar esta función de onda, notamos que:

$$\langle 0 | (u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}) (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle \quad (5.76)$$

$$= \langle 0 | \left(|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) |0\rangle \quad (5.77)$$

$$= \langle 0 | \left(|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 \left(1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \right) \left(1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \right) |0\rangle \quad (5.78)$$

$$= \langle 0 | \left(|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 \right) |0\rangle \quad (5.79)$$

Por lo tanto, la función de onda BCS normalizada finalmente se escribe:

$$| \Psi_{\text{BCS}} \rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (5.80)$$

Recuérdese que la fase de los pares de Cooper está determinada únicamente por el coeficiente $v_{\mathbf{k}}$, y esta fase coincide con la fase de la función gap $\Delta_{\mathbf{k}}$.

5.4. La ecuación del gap

Todavía necesitamos determinar la función del *gap* $\Delta_{\mathbf{k}}$, dada de manera autoconsistente por la Ec. (5.42). Usando la transformación de Bogoliubov (5.44), tenemos:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} (\langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle - \langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle). \quad (5.81)$$

Los Bogoliubones poseen una distribución de Fermi-Dirac con dispersión $E_{\mathbf{k}}$,

$$\langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = \langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}'} } + 1} \quad (5.82)$$

lo que arroja:

$$\langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle - \langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = 1 - \frac{2}{e^{\beta E_{\mathbf{k}'} } + 1} = \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2k_B T}\right). \quad (5.83)$$

Utilizamos además las ecs. (5.52) y (5.51), obteniendo:

$$u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} = |u_{\mathbf{k}'}|^2 \frac{v_{\mathbf{k}'}}{u_{\mathbf{k}'}} \quad (5.84)$$

$$= \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}'}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}'}|^2}}, \quad (5.85)$$

dando lugar finalmente a la ecuación de la *gap*:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2k_B T}\right). \quad (5.86)$$

Ahora podemos estudiar para qué valores del potencial $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ y de la temperatura T obtenemos un *gap* distino de cero, y por lo tanto la solución BCS discutida en la sección anterior. Para proceder, necesitamos discutir la forma del potencial. Basados en los resultados para la interacción electrónica mediada por fonones, consideramos un potencial atractivo constante $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -V_0$ en una capa de espesor $\hbar\omega_D$ alrededor de la energía de Fermi, $|\xi_{\mathbf{k}}|, |\xi_{\mathbf{k}'}| < \hbar\omega_D$ (recuerde que $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$). Como el potencial no depende de \mathbf{k}, \mathbf{k}' , buscamos una función de *gap* que también sea independiente de \mathbf{k} y real, $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$. Este tipo de función de *gap* se denomina *gap* de onda s, ya que su dependencia angular es la del armónico esférico Y_{00} , constante. Obtenemos:

$$1 = \frac{V_0}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}\right) \quad (5.87)$$

Superconductividad

Introduciendo la densidad de estados por espín $\rho(\varepsilon)$, análoga a la Ec. (5.27), pero en tamaño finito, y teniendo en cuenta al potencial químico,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}}), \quad (5.88)$$

obtenemos:

$$\begin{aligned} 1 &= V_0 \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{\rho(\varepsilon) d\varepsilon}{2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right) \\ &\approx V_0 \rho_F \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right) \end{aligned} \quad (5.89)$$

donde hemos utilizado la forma explícita de la dispersión, eq. (5.57), y en la última línea, usamos el hecho de que $\hbar\omega_D \ll \mu$ para aproximar la densidad de estados dentro de la integral por su valor en el nivel de Fermi. Esta ecuación autoconsistente da la función *gap* para una temperatura arbitraria $\Delta(T)$; estudiemos las comportamientos límites. A $T = 0$, ya que $\tanh(x \rightarrow \infty) \rightarrow 1$, tenemos:

$$1 = V_0 \rho_F \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta_0^2}}, \quad (5.90)$$

donde denotamos $\Delta_0 \equiv \Delta(T = 0)$. La evaluación de la integral es directa y ad como resultado:

$$\frac{1}{V_0 \rho_F} = \operatorname{arcsinh}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0}\right). \quad (5.91)$$

En la mayoría de los casos, Δ_0 es del orden de unos pocos meV, mucho menor que $\hbar\omega_D$, que es del orden de unas pocas centenas de meV. Por lo tanto, podemos expandir $\operatorname{arcsinh}(x)$ a x grande para obtener:

$$\frac{1}{V_0 \rho_F} = \ln\left(\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta_0}\right), \quad (5.92)$$

que finalmente permite obtener el *gap*

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{V_0 \rho_F}}. \quad (5.93)$$

De este modo, recuperamos un resultado similar a nuestro análisis simplificado de la ecuación de Schrödinger: una interacción atractiva arbitrariamente pequeña V_0 da lugar a un gap finito a temperatura cero, lo que muestra que el sistema es inestable hacia la formación del estado superconductor BCS. También vemos que la superconductividad es un efecto no perturbativo, dada la dependencia no analítica de Δ con V_0 .

5.4 La ecuación del gap

¿Cuál es la temperatura crítica T_c para la cual aparece por primera vez un *gap* distinto de cero? Para determinarlo, volvamos a la Ec. (5.89) y tomemos $\Delta \rightarrow 0$, obteniendo

$$\frac{1}{V_0\rho_F} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh\left(\frac{\varepsilon}{2k_B T_c}\right) = \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} dx \frac{\tanh x}{x} \quad (5.94)$$

Evaluamos la integral por partes y usamos el hecho de que $\hbar\omega_D \gg k_B T_c$:

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} dx \frac{\tanh x}{x} &\approx (\tanh x \ln x)_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} - \int_0^{\infty} dx \frac{\ln x}{\cosh^2 x} \\ &\approx \ln\left(\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}\right) - \ln\left(\frac{\pi}{4e^{\gamma_E}}\right) = \ln\left(\frac{2e^{\gamma_E}\hbar\omega_D}{\pi k_B T_c}\right), \end{aligned} \quad (5.95)$$

donde $\gamma_E \approx 0,577$ es la constante de Euler. La temperatura de transición superconductora viene entonces dada por:

$$T_c = \frac{2e^{\gamma_E}}{\pi} \frac{\hbar\omega_D}{k_B} e^{-\frac{1}{V_0\rho_F}}, \quad (5.96)$$

que nuevamente depende de $e^{-\frac{1}{V_0\rho_F}}$, siendo distinto de cero para cualquier V_0 arbitrariamente pequeño. Combinando Ecs. (5.93) y (5.96) dan la relación universal entre el *gap* a temperatura cero y la temperatura crítica:

$$\frac{\Delta_0}{k_B T_c} \approx 1,76. \quad (5.97)$$

Este resultado es remarcable, porque no depende de la interacción V_0 ni de la frecuencia de los fonones ω_D . Finalmente, puede mostrarse que en cercanías del punto de transición, el *gap* depende de la temperatura en la forma

$$\Delta^2 \approx \frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} k_B^2 T_c (T_c - T) \quad (5.98)$$

donde $\zeta(x)$ es la función zeta de Riemann. Utilizando la relación entre T_c y Δ_0 , ec. (5.97) se obtiene

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} \approx 1,73 \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}, \quad (5.99)$$

de nuevo, una relación universal. La figura 5.1 muestra la forma del *gap* $\Delta(T)/\Delta_0$ calculada numéricamente en función de T/T_c . El comportamiento $(1 - T/T_c)^{\frac{1}{2}}$ es característico de transiciones de fase de segundo orden.

Superconductividad

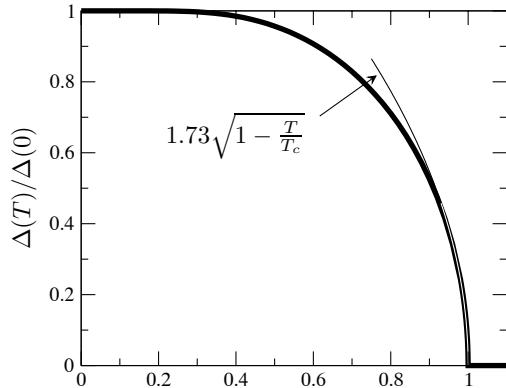


Figura 5.1: Gap superconductor como función de la temperatura.

Uno de los primeros éxitos de la teoría BCS fue la verificación de que la relación (5.97) se cumple aproximadamente en la mayoría de los superconductores conocidos en ese momento. La teoría BCS también aborda el efecto isótopo que analizamos anteriormente: T_c en la ecuación (5.96) depende linealmente de la frecuencia de Debye ω_D , que a su vez varía como la raíz cuadrada inversa de la masa iónica M , es decir, $T_c \propto \omega_D \propto M^{-1/2}$, de acuerdo con las observaciones experimentales.

5.4.1. Propiedades termodinámicas: calor específico

Una característica clave de la teoría BCS es la presencia de una *gap* de energía Δ en el espectro. Tal gap se manifiesta en varias cantidades termodinámicas, como el calor específico a temperaturas y la densidad de estados $\rho(\varepsilon)$. Esta último se puede medir experimentalmente a través de microscopía de efecto túnel. En el estado superconductor tenemos, para energías positivas $\varepsilon > 0$ (una vez más, nos centramos en la densidad de estados por espín):

$$\begin{aligned} \rho(\varepsilon) &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \delta \left(\varepsilon - \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2} \right) \\ &= \int d\xi \rho_0(\xi) \delta \left(\varepsilon - \sqrt{\Delta^2 + \xi^2} \right) \\ &= \rho_F \int d\xi \delta \left(\varepsilon - \sqrt{\Delta^2 + \xi^2} \right), \end{aligned} \quad (5.100)$$

donde $\rho_0(\xi)$ es la densidad de estados de la fase normal, que se ha aproximado por su valor en el nivel de Fermi ya que estas son las energías que nos

5.4 La ecuación del gap

interesan. Claramente, el argumento de la función delta solo puede ser cero si $\varepsilon > \Delta$, es decir, no hay estados dentro de la gap, como se esperaba. Usando que

$$\delta\left(\varepsilon - \sqrt{\Delta^2 + \xi^2}\right) = \sum_{\pm} \frac{\delta\left(\xi \pm \sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}\right)}{|\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}|} \quad (5.101)$$

obtenemos

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2\rho_F\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}} \theta(\varepsilon - \Delta) \quad (5.102)$$

donde $\theta(x)$ es la función escalón habitual. El factor 2 aquí es una consecuencia del hecho de que cuando $\Delta \rightarrow 0$, la energía $E \rightarrow |\xi|$, es decir, contiene dos ramas de excitaciones partícula-hueco, duplicando la densidad de estados. Si usamos esta expresión para la densidad de estados dentro del estado superconductor, es sencillo mostrar que el calor específico a bajas temperaturas muestra un comportamiento del tipo $C \sim e^{-\Delta/k_B T}$. La transición superconductora también afecta el calor específico en T_c . Para investigarlo, podríamos en principio calcular la energía interna total debida a las excitaciones de las cuasipartículas,

$$E_{\text{int}} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}} \langle \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \quad (5.103)$$

y evaluar la derivada $\partial E_{\text{int}} / \partial T$. El problema es que la energía del estado fundamental E_0 también depende de la temperatura. Para evitar este problema, es más fácil calcular la entropía del gas fermiónico libre formado por las excitaciones de Bogoliubones, de acuerdo a la fórmula usual

$$S = -k_B \sum_{\mathbf{k}\sigma} [(1 - f_{\mathbf{k}}) \ln(1 - f_{\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}}], \quad (5.104)$$

donde $f_{\mathbf{k}} \equiv \langle \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = 1 / (e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1)$ es la función de Fermi-Dirac. El calor específico (por unidad de volumen) viene dado por:

$$C = \frac{T}{V} \frac{dS}{dT} = \frac{T}{V} \frac{d\beta}{dT} \frac{dS}{d\beta} = -\frac{\beta}{V} \frac{dS}{d\beta} \quad (5.105)$$

Entonces,

$$\begin{aligned} C &= \frac{k_B \beta}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{df_{\mathbf{k}}}{d\beta} [-\ln(1 - f_{\mathbf{k}}) - 1 + \ln f_{\mathbf{k}} + 1] \\ &= \frac{k_B \beta}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{df_{\mathbf{k}}}{d\beta} \ln \left[\frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1} \frac{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}}} \right] \\ &= -\frac{2k_B \beta^2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{df_{\mathbf{k}}}{d\beta} E_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (5.106)$$

Superconductividad

La derivada total se escribe

$$\frac{df_{\mathbf{k}}}{d\beta} = \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \beta} + \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}} \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial \beta} = \frac{E_{\mathbf{k}}}{\beta} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}} + \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \frac{\partial \Delta^2}{\partial \beta} \quad (5.107)$$

donde usamos el hecho de que $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$. Por lo tanto, obtenemos

$$C = \frac{2k_B\beta}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}} \right) \left(E_{\mathbf{k}}^2 + \frac{\beta}{2} \frac{\partial \Delta^2}{\partial \beta} \right). \quad (5.108)$$

Analicemos esta expresión cerca de T_c . Por encima de la temperatura crítica, $\Delta^2 = 0$ y $E_{\mathbf{k}} \rightarrow |\xi_{\mathbf{k}}|$. Como $\partial f_{\mathbf{k}}/\partial \xi_{\mathbf{k}}$ es una función par de $\xi_{\mathbf{k}}$, tenemos $\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial |\xi_{\mathbf{k}}|} = \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \xi_{\mathbf{k}}}$. Usando la expansión de Sommerfeld:

$$-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \xi_{\mathbf{k}}} \approx \delta(\xi) + \frac{\pi^2}{6\beta^2} \delta''(\xi) \quad (5.109)$$

obtenemos, en el estado normal

$$\begin{aligned} C(T_c + 0^+) &= \frac{\pi^2 k_B}{3\beta} \int d\xi \xi^2 \rho(\xi) \delta''(\xi) \\ &= \frac{\pi^2 k_B}{3\beta} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} [\xi^2 \rho(\xi)]_{\xi=0} \\ &= \left(\frac{2\pi^2 k_B^2 \rho_F}{3} \right) T_c \equiv \gamma T_c \end{aligned} \quad (5.110)$$

Como era de esperar, recuperamos el resultado del gas de Fermi libre (recuérdese que ρ_F aquí es la densidad de estados por espín). Justo por debajo de T_c , podemos volver a tomar $E_{\mathbf{k}} \rightarrow |\xi_{\mathbf{k}}|$ y $\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}} = \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \xi_{\mathbf{k}}}$, pero ahora Δ^2 es distinto de cero. Por lo tanto, obtenemos:

$$\begin{aligned} C(T_c + 0^-) &= C(T_c + 0^+) + k_B \beta^2 \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial \beta} \right)_{T_c} \int d\xi \left(-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \xi} \right) \rho(\xi) \\ &= C(T_c + 0^+) + \rho_F \left(-\frac{\partial \Delta^2}{\partial T} \right)_{T_c} \end{aligned} \quad (5.111)$$

es decir, en T_c el calor específico es discontinuo, mostrando un salto $\Delta C \equiv C(T_c + 0^-) - C(T_c + 0^+)$:

$$\Delta C = \rho_F \left(-\frac{\partial \Delta^2}{\partial T} \right)_{T_c} \quad (5.112)$$

5.5 Ecuación de London y efecto Meissner

Cerca de T_c , la función de gap se comporta de acuerdo a la ec. (5.98), y entonces obtenemos la siguiente relación universal entre el salto de calor específico y su valor en el estado normal, dado por la Ec. (5.110):

$$\frac{\Delta C}{\gamma T_c} = \frac{12}{7\zeta(3)} \approx 1,43. \quad (5.113)$$

La observación experimental de esta relación universal en varios materiales superconductores es otro éxito de la teoría BCS.

5.5. Ecuación de London y efecto Meissner

Como ya hemos mencionado, la propiedad fundamental de un superconductor es el diamagnetismo perfecto, es decir, el efecto Meissner. Aquí mostraremos que la teoría BCS aborda naturalmente el efecto Meissner, justificando microscópicamente la ecuación fenomenológica de London (5.14).

Consideremos el término cinético del Hamiltoniano en presencia de un campo magnético. El momento canónico está dado por $\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$, donde \mathbf{A} es el potencial vector, y $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ el campo magnético. En el lenguaje de segunda cuantificación, introduciendo el operador de aniquilación fermiónico $c_{\mathbf{r}\sigma}$, el Hamiltoniano se escribe

$$H = \sum_{\sigma} \int d^3r c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 c_{\mathbf{r}\sigma} \quad (5.114)$$

Trabajamos en el calibre de Coulomb, donde $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} \propto \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Entonces, al orden más bajo en la teoría de perturbaciones en \mathbf{A} , tenemos $H = H_0 + H_1$, donde H_0 es el Hamiltoniano cinético en ausencia de campos externos y H_1 viene dado por:

$$H_1 = \frac{e}{mc} \sum_{\sigma} \int d^3r c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) c_{\mathbf{r}\sigma} \quad (5.115)$$

Ahora bien, el operador corriente total viene dado por:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}} &= -\frac{e}{\Omega} \sum_{\sigma} \int d^3r c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger \frac{1}{m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) c_{\mathbf{r}\sigma} \\ &= -\frac{e^2}{mc} \left(\frac{1}{\Omega} \sum_{\sigma} \int d^3r c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}\sigma} \right) \mathbf{A} - \frac{e}{m\Omega} \sum_{\sigma} \int d^3r c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger \mathbf{p} c_{\mathbf{r}\sigma} \end{aligned} \quad (5.116)$$

Evaluando el valor medio en el estado fundamental (es decir, a temperatura cero), obtenemos $\mathbf{J} = \mathbf{J}_d + \mathbf{J}_p$ con la denominada corriente diamagnética

$$\mathbf{J}_d = -\frac{ne^2}{mc} \mathbf{A}, \quad (5.117)$$

Superconductividad

y la corriente paramagnética $\mathbf{J}_p = \langle \hat{\mathbf{J}}_p \rangle$, con

$$\hat{\mathbf{J}}_p = -\frac{e}{m\Omega} \sum_{\sigma} \int d^3r c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \mathbf{p} c_{\mathbf{r}\sigma}. \quad (5.118)$$

Si \mathbf{J}_p fuera cero, recuperaríamos la ecuación de London (5.14) con todos los electrones formando parte del condensado superconductor, $n_s = n$. Sin embargo, el estado fundamental en presencia de un campo no es la función de onda BCS que discutimos anteriormente, que denotamos aquí por $|0\rangle$, debido a la contribución (5.114) a la energía cinética. Dado que este término es lineal en \mathbf{A} , en principio \mathbf{J}_p también puede tener un término lineal en \mathbf{A} que podría cancelar la contribución diamagnética \mathbf{J}_d . Esto es exactamente lo que sucede en el estado normal, donde no se observa el efecto Meissner.

En el estado superconductor, sin embargo, la situación es diferente. Usando la teoría de la perturbaciones a primer orden, el estado fundamental cambia en la forma

$$|0\rangle \rightarrow |0\rangle + \sum_{l \neq 0} |l\rangle \frac{\langle l | H_1 | 0 \rangle}{E_0 - E_l}, \quad (5.119)$$

donde $|l\rangle$ son los estados excitados. Entonces, como $\langle 0 | \hat{\mathbf{J}}_p | 0 \rangle = 0$, tenemos que

$$\mathbf{J}_p = \sum_{l \neq 0} \frac{\langle 0 | \hat{\mathbf{J}}_p | l \rangle \langle l | H_1 | 0 \rangle}{E_0 - E_l} + \sum_{l \neq 0} \frac{\langle 0 | H_1 | l \rangle \langle l | \hat{\mathbf{J}}_p | 0 \rangle}{E_0 - E_l}. \quad (5.120)$$

Analicemos el elemento de la matriz $\langle l | H_1 | 0 \rangle$, que depende de \mathbf{A} linealmente. Cambiando la base de la representación de coordenadas a la de momentos, $c_{\mathbf{r}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, y considerando la transformación de Fourier $\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{A}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$, tenemos:

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{\hbar e}{mc} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \left(\frac{1}{\Omega} \int d^3r e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \right) c_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} (\mathbf{A}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \frac{\hbar e}{mc} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned} . \quad (5.121)$$

Para hacer contacto con la teoría BCS, reescribimos este término de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{\hbar e}{mc} \left[\sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow} \right] \\ &= \frac{\hbar e}{mc} \left[\sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} (\mathbf{k}' + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} c_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow} \right] \\ &= \frac{\hbar e}{mc} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}) \end{aligned} \quad (5.122)$$

5.6 Modelo de Ginzburg-Landau

donde usamos el hecho de que, en el *gauge* de Coulomb, $\mathbf{q} \cdot \mathbf{A}_\mathbf{q} = 0$. Usando la transformación de Bogoliubov (5.44) y el hecho de que $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}|0\rangle = 0$, obtenemos el elemento de matriz

$$\begin{aligned} \langle l | c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} | 0 \rangle &= \langle l | (u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^* \gamma_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow}) (u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle, \\ &= u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} v_{\mathbf{k}} \langle l | \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | 0 \rangle \end{aligned} \quad (5.123)$$

y

$$\begin{aligned} \langle l | c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow} | 0 \rangle &= \langle l | (u_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}) (u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^* \gamma_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow} - v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger) | 0 \rangle \\ &= -u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \langle l | \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger | 0 \rangle \end{aligned} \quad (5.124)$$

Si ahora utilizamos las relaciones de anticomutación de los operadores de Bogoliubov, obtenemos

$$\langle l | H_1 | 0 \rangle = \frac{\hbar e}{mc} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_\mathbf{q} (u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} v_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle l | \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | 0 \rangle. \quad (5.125)$$

Para obtener la conductividad, debemos tomar el límite $\mathbf{q} \rightarrow 0$ para un campo uniforme. De la ecuación anterior, es claro que $\langle l | H_1 | 0 \rangle \rightarrow 0$ en este límite. Además, dado que el espectro de energía tiene un hueco, $|E_0 - E_l| > 2\Delta$ en la Ec. (5.120) — esta es la rigidez del estado superconductor. Entonces, se sigue que $\mathbf{J}_p = 0$, y finalmente encontramos que

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_p + \mathbf{J}_d = -\frac{ne^2}{mc} \mathbf{A}, \quad (5.126)$$

es decir, recuperamos la ecuación de London (5.117) y, en consecuencia, el efecto Meissner. Al comparar con la Ec. (5.14), notamos que en el estado fundamental (temperatura cero) todos los electrones participan en el condensado superconductor, es decir, $n_s = n$, y no sólo los electrones cercanos al nivel de Fermi. A temperatura finita, el número de electrones superconductores disminuye y eventualmente desaparece en T_c . Experimentalmente, la densidad del superfluído n_s se puede medir indirectamente a través de la profundidad de penetración, de acuerdo a la Ec. (5.10).

5.6. Modelo de Ginzburg-Landau

Terminamos este capítulo discutiendo brevemente otro enfoque para comprender la rigidez del estado superconductor y su relación con las corrientes persistentes. Se basa en el modelo de Ginzburg-Landau, originalmente concebido como un modelo fenomenológico para describir la superconductividad y que luego Gor'kov demostró que se derivaba de la teoría BCS [].

Superconductividad

La cantidad principal en el modelo de Ginzburg-Landau es el parámetro de orden complejo $\Psi(\mathbf{r})$, que puede interpretarse como la función de onda superconductora. La idea es que, por debajo de T_c , el valor medio de la función de onda superconductora no es cero, es decir, $\langle \Psi \rangle \neq 0$, mientras que por encima de T_c sigue siendo cero. Sea $F[\Psi(\mathbf{r})]$ la funcional que contiene la diferencia entre la energía libre del estado superconductor y el estado normal, $\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} F[\Psi(\mathbf{r})]$. De ello se deduce que el valor de equilibrio de F debe ser positivo por encima de T_c (para que la energía libre del estado normal sea menor que la energía libre del estado superconductor) y negativo por debajo de T_c . Por lo tanto, se debe anular en T_c . Cerca de T_c , se puede expandir la energía libre $F[\Psi(\mathbf{r})]$ en potencias de Ψ . Los requisitos de simetría y analiticidad imponen que los únicos términos posibles en la expansión sean aquellos que involucran potencias pares de $|\Psi|$. Así, en el caso de que $\Psi(\mathbf{r})$ no dependa de la posición \mathbf{r} , se obtiene:

$$F(\Psi, \Psi^*) = \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4. \quad (5.127)$$

Esta es la llamada expansión de energía libre de Landau, con $|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*$ ya que Ψ es una función compleja. El coeficiente cuártico β debe ser positivo, de lo contrario la energía libre no estaría acotada. Para entender el significado del coeficiente cuadrático α , minimizamos la función de energía libre tomando su derivada con respecto a Ψ^* (se obtiene el mismo resultado si se toma la derivada con respecto a Ψ), ya que sabemos que en equilibrio la energía libre toma su valor mínimo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \Psi^*} &= \alpha \Psi + \beta \Psi |\Psi|^2 = 0 \\ \Psi(a + \beta |\Psi|^2) &= 0, \end{aligned} \quad (5.128)$$

y por lo tanto, hay dos posibles soluciones:

$$|\Psi| = 0 \quad \text{o} \quad |\Psi| = \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}} \quad (5.129)$$

correspondientes al estado normal ($\Psi = 0$) y al estado superconductor ($\Psi \neq 0$) respectivamente. La energía libre de cada solución viene dada por:

$$F = 0 \quad \text{or} \quad F = -\frac{\alpha^2}{2\beta} \quad (5.130)$$

respectivamente. Por lo tanto, si existe la solución superconductora (es decir, la que tiene $\Psi \neq 0$), esta da lugar al mínimo global de la energía libre.

5.6 Modelo de Ginzburg-Landau

Claramente, debido a que $\beta > 0$, esta solución solo puede ser física si $\alpha < 0$. En consecuencia, para $\alpha > 0$ el estado normal representa el mínimo global y $\Psi = 0$, mientras que para $\alpha < 0$ el estado superconductor es el mínimo global y $\Psi \neq 0$. Este análisis nos permite concluir que α debe anularse y cambiar de signo en T_c . El *ansatz* más simple consiste en una dependencia lineal:

$$\alpha = a(T - T_c). \quad (5.131)$$

Reemplazando esta expresión en la solución, encontramos que

$$|\Psi| \propto \sqrt{T_c - T}, \quad (5.132)$$

y por lo tanto, la función de onda superconductora se anula cuando el sistema se approxima a T_c desde abajo con una dependencia de tipo raíz cuadrada.

Consideremos ahora el caso más general, en el que la función $\Psi(\mathbf{r})$ ya no es constante. Los requisitos de simetría y analiticidad imponen que solo las derivadas de segundo orden puedan aparecer en el desarrollo de energía libre, es decir, términos de la forma $|\nabla\Psi|^2$. El coeficiente de este término debe ser positivo, ya que al sistema le cuesta energía mantener una función de onda no uniforme, lo cual está relacionado con el concepto de rigidez. Debido a que el par de Cooper está cargado, debe acoplarse al campo electromagnético a través del acoplamiento mínimo usual $\frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{2e}{c}\mathbf{A}$, donde \mathbf{A} , donde el factor $2e$ se debe a que el par de Cooper tiene carga $-2e$. Por lo tanto, la funcional de energía libre se convierte en:

$$\begin{aligned} F[\Psi(\mathbf{r}), \Psi^*(\mathbf{r}), \mathbf{A}] = & \alpha|\Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi(\mathbf{r})|^4 \\ & + \frac{1}{4m} \left| \frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right|^2 |\Psi|^2 + \frac{B^2}{8\pi}. \end{aligned} \quad (5.133)$$

El último término es sólo la energía del campo electromagnético. El hecho de que tengamos $4m$ en lugar del habitual $2m$ se debe a que el par de Cooper tiene dos electrones. Esta es la llamada expansión de la energía libre de Ginzburg-Landau. Fue propuesto por primera vez por Ginzburg y Landau por motivos fenomenológicos antes de la teoría BCS. Más tarde, Gor'kov demostró que esta energía libre se puede derivar directamente de la teoría microscópica BCS.

Derivemos ahora las ecuaciones de equilibrio. Téngase en cuenta que necesitamos minimizar la energía libre con respecto a Ψ y \mathbf{A} . Para ello, es

Superconductividad

conveniente escribir explícitamente el término del gradiente en la forma:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi + \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi \right) \cdot \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^* + \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi^* \right) \\ &= \sum_i \frac{\hbar^2}{4m} \partial_i \Psi \partial_i \Psi^* - \sum_i \frac{i\hbar e}{2mc} (\Psi^* \partial_i \Psi - \Psi \partial_i \Psi^*) A_i + \sum_i \frac{e^2 A_i^2}{mc^2} |\Psi|^2 \quad (5.134) \end{aligned}$$

donde expresamos la ecuación en términos de los componentes vectoriales del operador ∇ y del potencial vector. Minimizando la funcional con respecto a Ψ^* se obtienen la ecuación de Euler-Lagrange:

$$\alpha \Psi + \beta \Psi |\Psi|^2 + \frac{1}{4m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi = 0. \quad (5.135)$$

Nótese su similitud con la ecuación de Schrödinger. Para minimizar la funcional de energía libre con respecto a \mathbf{A} , es conveniente reescribir la contribución magnética a la energía libre en la forma:

$$\frac{B^2}{8\pi} = \frac{|\nabla \times \mathbf{A}|^2}{8\pi} = \frac{1}{8\pi} \sum_{i,j,k,l,m} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} \partial_j A_k \partial_l A_m \quad (5.136)$$

donde usamos el símbolo de Levi-Civita ε_{ijk} , y la ecuación de Euler-Lagrange correspondiente se escribe

$$-\frac{i\hbar e}{2mc} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) + \frac{2e^2 \mathbf{A}}{mc^2} |\Psi|^2 = -\frac{1}{4\pi} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}). \quad (5.137)$$

Finalmente, usando la cuarta ecuación de Maxwell, $\nabla \times \mathbf{B} = 4\pi \mathbf{J}/c$, obtenemos una ecuación para la corriente superfluida,

$$\mathbf{J} = -\frac{e\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{2e^2 \mathbf{A}}{mc} |\Psi|^2. \quad (5.138)$$

Un análisis adicional que no se discutirá aquí revela que la amplitud de la función de onda superconductora $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ debe ser igual a la mitad de la densidad del superfluído $n_s/2$. Por lo tanto, en general podemos escribir

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{n_s(\mathbf{r})} e^{i\theta(\mathbf{r})} \quad (5.139)$$

donde $\theta(\mathbf{r})$ denota la fase del condensado superconductor. El factor de $1/2$ explica el hecho de que la carga asociada con la función de onda es la carga del par de Cooper $-2e$. En el caso de que la densidad del superfluído sea

5.6 Modelo de Ginzburg-Landau

homogénea, solo la fase de la función de onda superconductora depende de la posición, lo que produce la corriente del superfluido

$$\mathbf{J} = - \left(\frac{e\hbar n_s}{2m} \right) \nabla \theta - \left(\frac{n_s e^2}{mc} \right) \mathbf{A}. \quad (5.140)$$

El segundo término muestra que para una fase superconductora uniforme $\nabla \theta = 0$, recuperamos la ecuación de London. El primer término muestra que cuando $\mathbf{A} = 0$ una fase no uniforme da lugar a un flujo de corriente en estado superconductor, y viceversa. En la mayoría de los sistemas mecánicos cuánticos, los cambios macroscópicos en la fase global no modifican las propiedades del sistema. Aquí, sin embargo, todo el estado superconductor tiene la misma fase, y los cambios macroscópicos en θ conducen a cambios en las propiedades macroscópicas del sistema debido a esta coherencia de fase global. En el lenguaje BCS, la coherencia de fase proviene del factor v_k en la función de onda (5.80), que dota a cada par de Cooper de la misma fase. Si aplicamos a la fase una variación suave en la escala macroscópica, lo que resulta en $\nabla \theta$ no nulo, pero pequeño, el condensado superconductor responde desarrollando una corriente \mathbf{J} . Debido a que esta corriente es el resultado de minimizar la energía libre de Ginzburg-Landau, debe ser una propiedad de equilibrio y no puede disipar energía. Esto permite que el sistema se comporte como un conductor perfecto.

La expresión (5.140) tiene otras consecuencias importantes. Primero, obsérvese que si colocamos dos superconductores uno al lado del otro, separados por una delgada barrera aislante, la diferencia en la fase de las dos funciones de onda superconductoras dará lugar a una corriente que fluirá a través de la unión. Esto se conoce como el efecto Josephson.

En segundo lugar, consideremos la situación en la que se hace un agujero dentro de un superconductor, y dentro de este agujero el sistema se encuentra en el estado normal. Si consideramos un camino cerrado que rodea este agujero, pero que pasa dentro del estado superconductor, la corriente a lo largo de esta curva tiene que anularse. Entonces, integrando la Ec. (5.140) a lo largo de este camino se obtiene

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{\hbar c}{2e} \oint \nabla \theta \cdot d\mathbf{l}. \quad (5.141)$$

Si aplicamos ahora el teorema de Stokes se encuentra

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi, \quad (5.142)$$

Superconductividad

donde Φ es el flujo magnético. Como la fase θ solo puede cambiar por múltiplos de 2π desde el punto inicial hasta el punto final del ciclo, obtenemos

$$\Phi = \frac{hc}{2|e|} n \quad (5.143)$$

donde n es un entero arbitrario. Por lo tanto, el flujo magnético de una región normal dentro de un superconductor tiene que ser un múltiplo del cuantido de flujo $\Phi_0 = \frac{hc}{2|e|}$.

Nótese que la funcional (5.133) es invariante bajo transformaciones de gauge simultáneas, tanto en el potencial vector $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi$ como en la fase, $\theta \rightarrow \theta - \frac{2e}{hc}\chi$, ya que ambas se cancelan entre sí. Sin embargo, en el estado superconductor, debido a que la fase se encuentra fija, el sistema en realidad rompe la invarianza de gauge: la simetría rota por el estado superconductor es la simetría de gauge $U(1)$. Uno esperaría que la ruptura de esta simetría continua diera lugar a un modo de Goldstone. Sin embargo, esto no es cierto porque se trata de una simetría local, no global, que se acopla al potencial vector electromagnético. Esta es la principal diferencia con un superfluido neutro, que tiene un modo Goldstone asociado con la fase.

De hecho, se puede demostrar que la ruptura de la invarianza de gauge da lugar a una masa efectiva para el campo electromagnético, lo que constituye el célebre *mecanismo de Anderson-Higgs*. Consideremos, por ejemplo, la energía libre asociada a los cambios en la fase de un superconductor (es decir, se supone que la densidad del superfluido es constante). De la ecuación. (5.133), la energía libre se escribe

$$\mathcal{F} = \frac{n_s}{4m} \int d^3r \left(\hbar \nabla \theta + \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (5.144)$$

A esta energía libre se le puede sumar la energía electromagnética, que es proporcional a $q^2 A_{\perp}^2$, donde q es el vector de onda del campo y \mathbf{A}_{\perp} es la componente transversal del campo. Sin entrar en detalles, mencionemos que si se integran las fluctuaciones de la fase a partir de la energía libre, se obtiene una energía libre efectiva para el campo electromagnético de la forma

$$\mathcal{F}_{\text{eff}} \propto \sum_{\mathbf{q}} \left(\lambda^{-2} + q^2 \right) \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}_{\perp}(-\mathbf{q}). \quad (5.145)$$

El término $\lambda^{-2} \propto n_s$ es la profundidad de penetración (al inverso cuadrado) actúa como una masa efectiva para el campo electromagnético. Esto no es sorprendente: el efecto Meissner implica que el campo magnético es “masivo” dentro de un superconductor, ya que decrece a medida que se propaga desde la interfaz hacia el interior del superconductor. El responsable de dar masa

5.6 Modelo de Ginzburg-Landau

al superconductor, es decir, el “bosón de Higgs”, es el mismo condensado superconductor, más específicamente, su rigidez n_s . Por lo tanto, la rigidez es la propiedad clave responsable del efecto Meissner, y no la función del gap Δ ; de hecho, se pueden encontrar superconductores sin *gap* que sin embargo exhiben efecto Meissner y corrientes persistentes.

Capítulo 6

Bosonización

En este capítulo veremos una breve introducción a la bosonización. Esta técnica ha sido muy exitosa en el estudio de sistemas fuertemente correlacionados en una dimensión. Presentaremos aquí solo algunas de las ideas principales. El lector puede a partir de lo visto en este capítulo profundizar más en el tema en la bibliografía específica del tema [11].

6.1. Equivalencia entre operadores fermiónicos y bosónicos

6.1.1. Campos fermiónicos

Tomemos una teoría que puede formularse en términos de un conjunto de operadores de creación y de aniquilación fermiónicos en una dimensión espacial, que satisfacen relaciones canónicas de anticonmutación

$$\{c_{krs}, c_{k'r's'}^\dagger\} = \delta_{kk'}\delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}. \quad (6.1)$$

donde r representa la quiralidad, que distingue partículas que se mueven a la derecha ($r = +1$) o a la izquierda ($r = -1$) y s en general distingue especies de fermiones, por ejemplo en problemas de múltiples cadenas, pero que usualmente se utilizará para indicar el *spin* electrónico ($s = +1$ para *spin* para arriba y $s = -1$ para *spin* para abajo), y un índice discreto y no acotado k que denota el momento (o número de onda), de la forma

$$k = \frac{2\pi}{L} \left(n_k - \frac{1}{2}\delta_{rs} \right), \quad \text{con } n_k \in \mathbb{Z} \text{ y } \delta_{rs} \in [0, 2). \quad (6.2)$$

(nótese que los valores de k son diferentes para fermiones de distinto tipo). Aquí L es la longitud asociada al tamaño del sistema y δ_{rs} es un parámetro

6.1 Equivalencia entre operadores fermiónicos y bosónicos

que determina las condiciones de contorno del problema. En principio es posible que cada especie posea su propia condición de contorno. El modelo físico original del que provienen estos fermiones será el responsable de dictarlas. La cantidad k usualmente etiqueta las autoenergías ϵ_k del sistema libre (con ϵ_0 correspondiente a la energía de Fermi ϵ_F). Que este índice sea discreto y no acotado es un requisito indispensable para realizar una derivación rigurosa de las identidades de bosonización. Estas identidades son independientes de un problema específico como puede serlo el modelo de Tomonaga-Luttinger, o el problema de Kondo; y de la relación de dispersión ϵ_k . Esto es posible porque dichas identidades son igualdades entre operadores, es decir, válidas cuando actúan sobre cualquier estado del espacio de Fock. Son independientes entonces del Hamiltoniano, cuya forma detallada sólo se vuelve relevante al calcular funciones de correlación. Su aplicación a modelos más concretos será analizada más adelante. Comenzando con un conjunto de operadores de destrucción c_{krs} con las propiedades (6.1) y (6.2), definimos un conjunto de campos fermiónicos de la siguiente manera:

$${}_{rs}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ikrx} c_{krs}, \quad {}_{rs}^{\dagger}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ikrx} c_{krs}^{\dagger}, \quad (6.3)$$

donde $x \in (-\infty, \infty)$ es la variable espacial. Sus inversas son

$$c_{krs} = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_0^L dx e^{-irkx} \psi_{rs}(x), \quad c_{krs}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_0^L dx e^{irkx} \psi_{rs}^{\dagger}(x). \quad (6.4)$$

Los operadores ψ satisfacen las condiciones de contorno

$${}_{rs}(x+L) = e^{-i\pi r \delta_{rs}} \psi_{rs}(x), \quad (6.5)$$

que son periódicas para $\delta_{rs} = 0$ y antiperiódicas para $\delta_{rs} = 1$. Las ecuaciones (6.1) y (6.2), junto con la identidad

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{iny} = 2\pi \sum_{m \in \mathbb{Z}} \delta(y - 2\pi m), \quad (6.6)$$

implican de inmediato las relaciones de anticonmutación

$$\{\psi_{rs}(x), \psi_{r's'}^{\dagger}(x')\} = \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \delta(x - x' - mL) e^{-i\pi r \delta_{rs} m}, \quad (6.7)$$

$$\{\psi_{rs}(x), \psi_{r's'}(x')\} = \{\psi_{rs}^{\dagger}(x), {}_{r's'}^{\dagger}(x')\} = 0. \quad (6.8)$$

Para $x, x' \in [0, L]$ o $L \rightarrow \infty$, y condiciones de contorno periódicas se reducen a las relaciones usuales para campos fermiónicos.

Bosonización

El vacío fermiónico $|0\rangle_0$ (llamado a veces *mar de Fermi*) se define en la forma

$$c_{krs}|0\rangle_0 \equiv 0 \quad \text{para} \quad k > 0 \quad (\text{i.e. } n_k > 0), \quad (6.9)$$

$$c_{krs}^\dagger|0\rangle_0 \equiv 0 \quad \text{para} \quad k \leq 0 \quad (\text{i.e. } n_k \leq 0), \quad (6.10)$$

es decir que es un estado que posee todos los estados con $k < 0$ ocupados y aquellos con $k \geq 0$ libres. Respecto a este vacío se define la operación de orden normal del producto de operadores $ABC\dots$ como

$$:ABC\dots: = ABC\dots - {}_0\langle 0|ABC\dots|0\rangle_0, \quad (6.11)$$

para $A, B, C, \dots \in \{c_{krs}; c_{krs}^\dagger\}$. Esta definición es equivalente a agrupar todos los operadores c_{krs} con $k > 0$ y todos los c_{krs}^\dagger con $k \leq 0$ a la derecha de los demás. Nótese que una expresión del tipo $c_k^\dagger c_k$ con k arbitrario no está necesariamente ordenada normalmente, únicamente lo está si $k > 0$.

El operador número de partículas se define como

$$\hat{N}_{rs} \equiv \sum_{k=-\infty}^{\infty} :c_{krs}^\dagger c_{krs}: := \sum_{k=-\infty}^{\infty} [c_{krs}^\dagger c_{krs} - {}_0\langle 0|c_{krs}^\dagger c_{krs}|0\rangle_0]. \quad (6.12)$$

Designamos con $\mathbf{N} = (N_1, \dots, N_M)$ al conjunto de los autovalores N_{rs} para las diferentes especies, y por abuso de lenguaje diremos que un estado de \mathbf{N} partículas es un estado en el que hay N_{rs} partículas de tipo rs . Nótese que es posible aniquilar partículas con $k < 0$ (ya que justamente el mar de Fermi está lleno hasta el nivel $k = 0$). Alternativamente en este caso decimos que creamos un agujero con impulso k . Esto disminuye el autovalor N_{rs} , que puede tomar así valores negativos.

El conjunto de autoestados con un dado \mathbf{N} conforman el espacio de Hilbert de \mathbf{N} partículas $\mathcal{H}_{\mathbf{N}}$. El espacio de Fock \mathcal{F} se define como suma directa de los espacios de Hilbert con número fijo de partículas $\mathcal{F} = \sum_{\oplus \mathbf{N}} \mathcal{H}_{\mathbf{N}}$. Entre todos los estados con el mismo \mathbf{N} hay uno que posee menor energía, es aquel que está lleno hasta un determinado nivel, y vacío de allí en más: es el estado fundamental de $\mathcal{H}_{\mathbf{N}}$, $|\mathbf{N}\rangle_0$. Podemos dar una definición más precisa de este estado:

$$|\mathbf{N}\rangle_0 \equiv \prod_{rs} C_{rs}^{N_{rs}} |0\rangle_0, \quad (6.13)$$

donde

$$C_{rs}^{N_{rs}} \equiv \begin{cases} c_{N_{rs}rs}^\dagger c_{(N_{rs}-1)rs}^\dagger \dots c_{1rs}^\dagger & \text{para } N_{rs} > 0, \\ 1 & \text{para } N_{rs} = 0, \\ c_{(N_{rs}+1)rs} c_{(N_{rs}+2)rs} \dots c_{0rs} & \text{para } N_{rs} < 0. \end{cases} \quad (6.14)$$

6.1 Equivalencia entre operadores fermiónicos y bosónicos

6.1.2. Campos bosónicos

A partir del estado $|0\rangle_0$ pueden construirse el resto de las excitaciones de N partículas. Definimos los siguientes operadores de *creación y aniquilación bosónicos* que cumplen dicha tarea,

$$b_{qrs}^\dagger \equiv \frac{i}{\sqrt{n_q}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_{k+qrs}^\dagger c_{krs}, \quad b_{qrs} \equiv \frac{-i}{\sqrt{n_q}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_{k-qrs}^\dagger c_{krs}, \quad (6.15)$$

donde $n_q \in \mathbb{Z}^+$ es un entero positivo, y $q = 2\pi n_q/L > 0$. Estos operadores, al actuar sobre cualquier estado $|N\rangle_0$ crean una combinación de excitaciones de partícula-agujero sobre ese estado con q unidades de momento más (o menos), pero sin salirse de \mathcal{H}_N . En este sentido son operadores que aumentan y disminuyen el momento. Su normalización se eligió de modo que satisfagan relaciones de commutación bosónicas

$$[b_{qrs}, b_{q'r's'}^\dagger] = [b_{qrs}^\dagger, b_{q'r's'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{N}_{rs}, b_{q'r's'}^\dagger] = [\hat{N}_{rs}, b_{q'r's'}^\dagger] = 0, \quad (6.16)$$

$$\begin{aligned} [b_{qrs}, b_{q'r's'}^\dagger] &= \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \frac{1}{\sqrt{n_q n'_q}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} (c_{k+q'-qrs}^\dagger c_{krs} - c_{k+q'rs}^\dagger c_{k+qrs}) \\ &= \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{qq'} \sum_k \frac{1}{n_q} \left\{ [: c_{krs}^\dagger c_{krs} : - : c_{k+qrs}^\dagger c_{k+qrs} :] \right. \\ &\quad \left. + \left({}_0\langle 0 | c_{krs}^\dagger c_{krs} | 0 \rangle_0 - {}_0\langle 0 | c_{k+qrs}^\dagger c_{k+qrs} | 0 \rangle_0 \right) \right\} \\ &= \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{qq'}. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Las ecuaciones (6.16) se pueden verificar fácilmente, pero la derivación de (6.17) requiere cierto cuidado, como notaron por primera vez Mattis y Lieb [11]: para $q \neq q'$ los dos términos en la primera línea ya están ordenados normalmente (esto es porque sus valores medios de vacío son nulos) y pueden restarse trivialmente mediante un cambio $k \rightarrow k - q'$ en el segundo término, dando cero como resultado. Sin embargo, para $q = q'$ antes de hacer la sustracción debemos construir expresiones ordenadas normalmente, de otro modo estaríamos restando expresiones infinitas de un modo no controlado. Los términos en la segunda línea se cancelan, reemplazando en el segundo término $k \rightarrow k - q$ (esto ahora si se puede hacer porque están ordenados normalmente). La definición del vacío (Ecs. (6.9) y (6.10)) implica que la diferencia en los valores de expectación de la tercera línea arroja como resultado

$$\frac{1}{n_q} \left(\sum_{n_k=-\infty}^0 - \sum_{n_k=-\infty}^{-n_q} \right) = \frac{1}{n_q} n_q = 1. \quad (6.18)$$

Bosonización

Nótese que la construcción de los operadores b_{qrs} (6.15) y la derivación de los conmutadores (6.17) descansa fuertemente en el hecho de que el conjunto de ks es infinito y no acotado por debajo.

Es fácil verificar que dentro de \mathcal{H}_N , $|N\rangle_0$ actúa como estado fundamental para las excitaciones bosónicas:

$$b_{qrs}|N\rangle_0 = 0, \quad \text{para todo } q, r, s. \quad (6.19)$$

Intuitivamente esto es claro: si $|N\rangle_0$ es el estado fundamental entre todos aquellos que contienen N partículas, entonces no se le pueden quitar unidades de momento sin quitar partículas, es decir, sin salir de \mathcal{H}_N .

Es obvio que los estados excitados $|N\rangle$ que conforman el espacio de Hilbert de N partículas se pueden obtener actuando sobre $|N\rangle_0$ con alguna función de los operadores fermiónicos: $|N\rangle = \bar{f}(c_{krs}^\dagger, c_{k'r's'})|N\rangle_0$. Haldane [11] mostró que también existe una representación en términos de los b_{qrs}^\dagger . Más específicamente, mostró lo siguiente:

Teorema 1 *Para cualquier estado $|N\rangle$, existe una función $f(b^\dagger)$ tal que*

$$|N\rangle = f(b^\dagger)|N\rangle_0. \quad (6.20)$$

Esta es una afirmación para nada trivial ya que los operadores b^\dagger crean complejas combinaciones de excitaciones partícula-agujero; y constituye el corazón de la bosonización debido a que implica una igualdad entre espacios de Fock bosónicos y fermiónicos. Omitiremos aquí la demostración, y remitiremos al lector a la mencionada referencia.

El estado fundamental $|N\rangle_0$ sirve para definir una operación de orden normal bosónica de un producto de operadores de tipo b_{qrs} y b_{qrs}^\dagger de manera análoga al orden normal fermiónico (6.11). Más aún, ambos son equivalentes, es decir que si un producto de operadores bosónicos está ordenado normalmente de acuerdo al orden bosónico, entonces también lo está de acuerdo al orden fermiónico, y viceversa. Por este motivo se utiliza la misma notación para ambos.

Con los operadores bosónicos definidos en la Ec (6.15) podemos definir campos bosónicos:

$$\begin{aligned} \varphi_{rs}(x) &= -r \sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{n_q}} e^{irqx} b_{qrs} e^{-aq/2}, \\ \varphi_{rs}^\dagger(x) &= -r \sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{n_q}} e^{-irqx} b_{qrs}^\dagger e^{-aq/2}, \end{aligned} \quad (6.21)$$

6.1 Equivalencia entre operadores fermiónicos y bosónicos

y su combinación hermítica

$$\begin{aligned}\phi_{rs}(x) &= \varphi_{rs}(x) + \varphi_{rs}^\dagger(x) \\ &= -r \sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{n_q}} \left(e^{irqx} b_{qrs} + e^{-irqx} b_{qrs}^\dagger \right) e^{-aq/2}.\end{aligned}\quad (6.22)$$

Aquí $a > 0$ es un parámetro infinitesimal que regulariza divergencias ultravioletas que ocurren en ciertas expresiones y conmutadores no ordenados normalmente. Usualmente se toma del orden del espaciado de red $a \sim 1/k_F$. Por construcción, los campos $\varphi_{rs}(x)$ y $\phi_{rs}(x)$ son periódicos en x con período L . Así definidos, estos campos satisfacen las relaciones de conmutación

$$[\varphi_{rs}(x), \varphi_{r's'}(x')] = [\varphi_{rs}^\dagger(x), \varphi_{r's'}^\dagger(x')] = 0, \quad (6.23)$$

$$[\varphi_{rs}(x), \varphi_{r's'}^\dagger(x')] = \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \sum_{q>0} \frac{1}{n_q} e^{q[ir(x-x')-a]} \quad (6.24)$$

$$= -\delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \ln \left[1 - e^{\frac{2\pi}{L}[ir(x-x')-a]} \right] \quad (6.25)$$

$$\xrightarrow{L \rightarrow \infty} -\delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \ln \left[\frac{2\pi}{L}[a - ir(x-x')] \right]. \quad (6.26)$$

La Ec. (6.25) se obtuvo utilizando la expansión en serie de $\log(1-y)$. Aquí se ve claramente que a actúa como *cut-off* de la divergencia ultravioleta para $x = x'$. Estos conmutadores son útiles en la evaluación del producto de operadores de vértice (exponenciales de campos bosónicos). Utilizando la identidad

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{[A,B]/2}, \quad (6.27)$$

para operadores A y B que conmutan con $[A, B]$, obtenemos

$$e^{i\varphi_{rs}^\dagger(x)} e^{i\varphi_{rs}(x)} = e^{i(\varphi_{rs}^\dagger + \varphi_{rs})(x)} e^{[i\varphi_{rs}^\dagger(x), i\varphi_{rs}(x)]/2} = \left(\frac{L}{2\pi a} \right)^{1/2} e^{i\phi_{rs}(x)}, \quad (6.28)$$

$$e^{-i\varphi_{rs}(x)} e^{-i\varphi_{rs}^\dagger(x)} = e^{-i(\varphi_{rs} + \varphi_{rs}^\dagger)(x)} e^{[-i\varphi_{rs}(x), -i\varphi_{rs}^\dagger(x)]/2} = \left(\frac{2\pi a}{L} \right)^{1/2} e^{-i\phi_{rs}(x)}. \quad (6.29)$$

Nótese que estas fórmulas son válidas para cualquier valor de L siempre que a sea suficientemente chico (esto es así porque para $x = x'$ el límite $L \rightarrow \infty$ en (6.25) es equivalente a $a \rightarrow 0$). Resulta interesante también la evaluación del conmutador del campo $\phi_{rs}(x)$ con su derivada:

$$[\phi_{rs}(x), \partial_{x'} \phi_{r's'}(x')] = -ir \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \frac{2\pi}{L} \sum_{n_q=1}^{\infty} \left[e^{\frac{2\pi}{L}[ir(x-x')-a]n_q} + e^{\frac{2\pi}{L}[-ir(x-x')-a]n_q} \right]. \quad (6.30)$$

Bosonización

A partir de aquí podemos obtener dos expresiones diferentes de acuerdo a cómo se tomen los límites para $L \rightarrow \infty$ y a infinitesimal. Si queremos una expresión no periódica, para L grande, es conveniente hacer la suma geométrica, y posteriormente tomar los límites dejando el límite $a \rightarrow 0$ para el final:

$$[\phi_{rs}(x), \partial_{x'} \phi_{r's'}(x')] = -\delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \frac{2\pi}{L} ir \left[\frac{1}{e^{\frac{2\pi}{L}[a-ir(x-x')]} - 1} + \frac{1}{e^{\frac{2\pi}{L}[a+ir(x-x')]} - 1} \right] \quad (6.31)$$

$$\xrightarrow{L \rightarrow \infty} -2\pi ir \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \left[\frac{a/\pi}{(x-x')^2 + a^2} - \frac{1}{L} \right] \quad (6.32)$$

$$\xrightarrow{a \rightarrow 0} -2\pi ir \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \left[\delta(x-x') - \frac{1}{L} \right]. \quad (6.33)$$

Nótese que para tomar correctamente el límite $L \rightarrow \infty$ en la primera línea de las expresiones precedentes, se deben desarrollar los exponentiales hasta orden cuadrático en $1/L$. Para L finito, en cambio, tomamos primero el límite $a \rightarrow 0$ en (6.30), y utilizamos la identidad (6.6):

$$[\phi_{rs}(x), \partial_{x'} \phi_{r's'}(x')] = -\delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} 2\pi ir \left[\sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(x-x' - nL) - \frac{1}{L} \right], \quad (6.34)$$

donde el término $1/L$ en esta última ecuación aparece debido a la ausencia del término $n_q = 0$ ($q = 0$) en la Ec. (6.30). Finalmente podemos calcular el comutador del campo ϕ_{rs} con si mismo, obteniendo

$$[\phi_{rs}(x), \phi_{rs}(x')] \xrightarrow{L \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} \pi ir \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} \epsilon(x-x'), \quad (6.35)$$

donde

$$\epsilon(x) = \begin{cases} \pm 1 & \text{si } x \gtrless 0, \\ 0 & \text{si } x = 0. \end{cases} \quad (6.36)$$

6.1.3. Factores de Klein

Los operadores b y b^\dagger crean excitaciones dentro del espacio de Hilbert de N partículas. Debemos definir entonces operadores que conecten espacios de Hilbert con diferente número de partículas, es decir, operadores escalera que aumenten o disminuyan el número fermiónico total, cosa que no pueden hacer los operadores bosónicos.

Definimos los *factores de Klein* F y F^\dagger como operadores con las siguientes propiedades: *i*) comutan con todos los operadores bosónicos:

$$[b_{qrs}, F_{r's'}^\dagger] = [b_{qrs}, F_{r's'}] = [b_{qrs}^\dagger, F_{r's'}^\dagger] = [b_{qrs}^\dagger, F_{r's'}] = 0 \quad \forall q, \quad (6.37)$$

6.1 Equivalencia entre operadores fermiónicos y bosónicos

y ii) su acción sobre un estado $|N\rangle = f(b^\dagger)|N\rangle_0$ es la de agregar una partícula en el nivel más bajo posible, y la de quitar una en el más alto respectivamente:

$$F_{rs}^\dagger|N\rangle \equiv f(b^\dagger)c_{(N_{rs}+1)rs}^\dagger|N\rangle_0, \quad (6.38)$$

$$F_{rs}|N\rangle \equiv f(b^\dagger)c_{N_{rs}rs}|N\rangle_0. \quad (6.39)$$

Así definidos, los factores de Klein poseen las siguientes propiedades:

$$F_{rs}F_{rs}^\dagger = F_{rs}^\dagger F_{rs} = 1 \quad (\text{unitariedad}), \quad (6.40)$$

$$\{F_{rs}^\dagger, F_{r's'}\} = 2\delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'} \quad \forall r, r', s, s', \quad (6.41)$$

$$\{F_{rs}^\dagger, F_{r's'}^\dagger\} = \{F_{rs}, F_{r's'}\} = 0 \quad \forall r \neq r', s \neq s', \quad (6.42)$$

$$[\hat{N}_{rs}, F_{r's'}^\dagger] = \delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}F_{rs}^\dagger, \quad [\hat{N}_{rs}, F_{r's'}] = -\delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}F_{rs}. \quad (6.43)$$

Para probar la unitariedad es fundamental que el espectro del operador \hat{N}_{rs} sea no acotado.

6.1.4. Identidades de bosonización

Con todas las definiciones y propiedades estudiadas estamos en condiciones de establecer igualdades entre operadores de campos bosónicos y fermiónicos. La primera de ellas, la más simple de derivar, establece una igualdad entre la densidad electrónica ordenada normalmente, y la derivada del campo bosónico $\partial_x\phi_{rs}(x)$

$$\rho_{rs}(x) \equiv : \psi_{rs}^\dagger(x)\psi_{rs}(x) := \frac{1}{L} \sum_q e^{irqx} \sum_k : c_{k-qrs}^\dagger c_{krs} : \quad (6.44)$$

$$= \frac{1}{L} \sum_{q>0} i\sqrt{n_q} \left(e^{irqx} b_{qrs} - e^{-irqx} b_{qrs}^\dagger \right) + \frac{1}{L} \sum_k : c_{krs}^\dagger c_{krs} : \quad (6.45)$$

$$= -\frac{1}{2\pi} \partial_x \phi_{rs}(x) + \frac{1}{L} \hat{N}_{rs} \quad (\text{para } a \rightarrow 0). \quad (6.46)$$

Aquí el orden normal es fundamental para trasladar los índices de suma.

La segunda, relaciona el campo fermiónico con el operador de vértice bosónico. Para derivarla debemos mostrar previamente la siguiente propiedad:

Prop. 1 $\psi_{rs}(x)|N\rangle_0$ es un estado coherente bosónico

Mostraremos que dicho estado es un autoestado de b_{qrs} y por lo tanto posee una representación como estado coherente. Para ello basta con calcular los comutadores de b y b^\dagger con ψ :

Bosonización

$$[b_{qrs}, \psi_{r's'}(x)] = \delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}\alpha_{qr}(x)\psi_{rs}(x), \quad (6.47)$$

$$[b_{qrs}^\dagger, \psi_{r's'}(x)] = \delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}\alpha_{qr}^*(x)\psi_{rs}(x), \quad (6.48)$$

donde $\alpha_{qr}(x) = \frac{i}{\sqrt{n_q}}e^{-irqx}$. Estos conmutadores y la ecuación (6.19) implican inmediatamente que

$$b_{qrs}\psi_{rs}(x)|N\rangle_0 = \delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}\alpha_{qr}(x)\psi_{rs}(x)|N\rangle_0. \quad (6.49)$$

Y por lo tanto, este estado posee una representación como estado coherente bosónico:

$$\psi_{rs}(x)|N\rangle_0 = \exp \left[\sum_{q>0} \alpha_{qr}(x)b_{qrs}^\dagger \right] F_{rs}\hat{\lambda}_{rs}(x)|N\rangle_0 \quad (6.50)$$

$$= e^{-ir\varphi_{rs}^\dagger(x)}F_{rs}\hat{\lambda}_{rs}(x)|N\rangle_0. \quad (6.51)$$

Aquí utilizamos la definición del campo φ_{rs}^\dagger (6.21) en la segunda igualdad. Hemos agregado el operador de fase $\hat{\lambda}$ que derivaremos en lo sucesivo; y el factor de Klein, que es necesario porque ψ remueve una partícula del estado $|N\rangle_0$, cosa que los campos bosónicos b^\dagger no pueden hacer. Para obtener el operador $\hat{\lambda}$ calculamos el siguiente valor medio de dos formas diferentes: por un lado,

$${}_0\langle N|F_{rs}^\dagger\psi_{rs}(x)|N\rangle_0 = {}_0\langle N|\hat{\lambda}_{rs}(x)|N\rangle_0 \equiv \lambda_{rs}(x), \quad (6.52)$$

donde hemos pasado adelante el factor de Klein F en (6.51), ya que según su definición (6.37) commuta con todos los b^\dagger ; utilizamos la unitariedad de los F 's, y expandimos en serie el exponencial, quedándonos con el término de orden 0, ya que ${}_0\langle N|b_{qrs}^\dagger = 0$.

Por otro lado, insertamos la descomposición de Fourier (6.3) para $\psi_{rs}(x)$ y la definición del factor de Klein (6.38), y nos quedamos sólo con el término $n_k = N_{rs}$ (o bien $k = \frac{2\pi}{L}(N_{rs} - \frac{1}{2}\delta_{rs})$):

$${}_0\langle N|F_{rs}^\dagger\psi_{rs}(x)|N\rangle_0 = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{irkx} {}_0\langle N|c_{N_{rs}rs}^\dagger c_{krs}|N\rangle_0 \quad (6.53)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ir\frac{2\pi}{L}(N_{rs} - \frac{1}{2}\delta_{rs})x}. \quad (6.54)$$

Concluimos entonces que el operador $\hat{\lambda}(x)$ está dado por

$$\hat{\lambda}_{rs}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ir\frac{2\pi}{L}(\hat{N}_{rs} - \frac{1}{2}\delta_{rs})x}. \quad (6.55)$$

6.1 Equivalencia entre operadores fermiónicos y bosónicos

Para derivar las identidades de bosonización debemos estudiar la acción del campo $\psi_{rs}(x)$ sobre un estado $|N\rangle$ arbitrario (que según (6.20) puede escribirse como $|N\rangle = f(\{b_{qrs}^\dagger\})|N\rangle_0$). Para ello utilizaremos las siguientes identidades,

$$\psi_{rs}(x)f(\{b_{qr's'}^\dagger\}) = f(\{b_{qr's'}^\dagger - \delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}\alpha_{qr}^*(x)\})\psi_{rs}(x), \quad (6.56)$$

$$f(\{b_{qr's'}^\dagger - \delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}\alpha_{qr}^*(x)\}) = e^{-ir\varphi_{rs}(x)}f(\{b_{qr's'}^\dagger\})e^{ir\varphi_{rs}(x)}, \quad (6.57)$$

que se pueden mostrar fácilmente a partir de la fórmula de Baker-Hausdorff,

$$e^{-B}Ae^B = A + [A, B] + \frac{1}{2!}[[A, B]B] + \dots, \quad (6.58)$$

expandiendo en serie de Taylor la función f y empleando los commutadores (6.47) y (6.48). Podemos evaluar entonces $\psi_{rs}(x)|N\rangle$ commutando $\psi_{rs}(x)$ con $f(\{b_{qrs}^\dagger\})$, insertando la representación (6.51) y reordenando los factores:

$$\begin{aligned} \psi_{rs}(x)|N\rangle &= \psi_{rs}(x)f(\{b_{qrs}^\dagger\})|N\rangle_0 & (6.59) \\ &= f(\{b_{qr's'}^\dagger - \delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}\alpha_{qr}^*(x)\})\psi_{rs}(x)|N\rangle_0 & [\text{por la Ec. (6.56)}] \\ &= f(\{b_{qr's'}^\dagger - \delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}\alpha_{qr}^*(x)\})e^{-ir\varphi_{rs}^\dagger(x)}F_{rs}\hat{\lambda}_{rs}(x)|N\rangle_0 & [\text{por la Ec. (6.51)}] \\ &= F_{rs}\hat{\lambda}_{rs}(x)e^{-ir\varphi_{rs}^\dagger(x)}f(\{b_{qr's'}^\dagger - \delta_{rr'}\delta_{\sigma\sigma'}\alpha_{qr}^*(x)\})|N\rangle_0 & [\text{por la Ec. (6.37)}] \\ &= F_{rs}\hat{\lambda}_{rs}(x)e^{-ir\varphi_{rs}^\dagger(x)}[e^{-ir\varphi_{rs}(x)}f(\{b_{qrs}^\dagger\})e^{ir\varphi_{rs}(x)}]|N\rangle_0 & [\text{por la Ec. (6.57)}] \\ &= F_{rs}\hat{\lambda}_{rs}(x)e^{-ir\varphi_{rs}^\dagger(x)}e^{-ir\varphi_{rs}(x)}f(\{b_{qrs}^\dagger\})|N\rangle_0 & [\text{por la Ec. (6.19)}] \\ &= F_{rs}\hat{\lambda}_{rs}(x)e^{-ir\varphi_{rs}^\dagger(x)}e^{-ir\varphi_{rs}(x)}|N\rangle. & [\text{por la Ec. (6.20)}] \end{aligned}$$

Dado que $|N\rangle$ es arbitrario, y que todo estado del espacio de Fock es de esta forma, concluimos que las siguientes *fórmulas de bosonización* valen como identidades entre operadores en el espacio de Fock, y para todo L :

$$\psi_{rs}(x) = F_{rs}\hat{\lambda}_{rs}(x)e^{-ir\varphi_{rs}^\dagger(x)}e^{-ir\varphi_{rs}(x)} \quad (6.60)$$

$$= F_{rs} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ir\frac{2\pi}{L}(\hat{N}_{rs} - \frac{1}{2}\delta_{rs})x} e^{-ir\varphi_{rs}^\dagger(x)} e^{-ir\varphi_{rs}(x)} \quad [\text{por la Ec. (6.55)}] \quad (6.61)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} F_{rs} e^{ir\frac{2\pi}{L}(\hat{N}_{rs} - \frac{1}{2}\delta_{rs})x} e^{-ir\phi_{rs}(x)}. \quad [\text{por la Ec. (6.28)}] \quad (6.62)$$

Puede ser útil definir

$$\Phi_{rs}(x) = \phi_{rs} - \frac{2\pi}{L}(\hat{N}_{rs} - \frac{1}{2}\delta_{rs})x. \quad (6.63)$$

Bosonización

Con esta definición, tenemos que

$$\psi_{rs}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} F_{rs} e^{-ir\Phi_{rs}(x)}, \quad (6.64)$$

$$\rho_{rs}(x) = -\frac{1}{2\pi} \partial_x \Phi_{rs}(x) + \frac{\delta_{rs}}{2L}. \quad (6.65)$$

Por último estudiaremos como representar un Hamiltoniano fermiónico libre con una relación de dispersión lineal

$$H_0 \equiv -irv_{rs} \int_0^L dx : \psi_{rs}^\dagger(x) \partial_x \psi_{rs}(x) := \sum_k v_{rs} k : c_{krs}^\dagger c_{krs} : . \quad (6.66)$$

donde v_{rs} es la velocidad de Fermi (es siempre positiva, independientemente de la quiralidad de los fermiones). La segunda forma se obtiene de la primera insertando el desarrollo de Fourier del campo ψ (6.3). Recordemos que estas expresiones no están ordenadas normalmente de forma automática, ya que la expresión $c_k^\dagger c_k$ solo está ordenada normalmente para $k > 0$, y es necesario escribir $: \dots :$. Nótese que las condiciones de contorno periódicas implican que el modo con $k = 0$ posee energía cero, y por lo tanto podemos tener dos estados fundamentales degenerados en los que ese modo está ocupado o desocupado.

La ecuación (6.20) implica que los b^\dagger 's actuando sobre $|N\rangle_0$ generan todo el espacio de Hilbert de N partículas. Esto significa entonces, que H_0 debe tener una representación en términos solamente de variables bosónicas. Para hallar esa representación, estudiemos el comutador de b_{qrs}^\dagger con H_0 :

$$[H_{0rs}, b_{qr's'}^\dagger] = \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'} v_{rs} q b_{qrs}^\dagger. \quad (6.67)$$

Además, dado que $[H_{0rs}, \hat{N}_{r's'}] = 0$ para todo r, r', s, s' , todo autoestado de \hat{N}_{rs} lo es también de H_{0rs} , en particular el estado fundamental de N partículas, $|N\rangle_0$. Su autovalor es, (se obtiene sumando las energías de los estados ocupados por encima del $n_k = 0$)

$$E_{0rs}^N = v_{rs} \left(\frac{2\pi}{L} \right) \begin{cases} \sum_{n=1}^{N_{rs}} (n - \delta_{rs}) = \frac{N_{rs}^2}{2} + \frac{N_{rs}}{2} (1 - \delta_{rs}) & \text{si } N \geq 0, \\ \sum_{n=N_{rs}+1}^0 -(n - \delta_{rs}) = \frac{N_{rs}^2}{2} + \frac{|N_{rs}|}{2} (1 - \delta_{rs}) & \text{si } N < 0, \end{cases} \quad (6.68)$$

$$= \frac{v_{rs}}{2} \left(\frac{2\pi}{L} \right) N_{rs} (N_{rs} + 1 - \delta_{rs}). \quad (6.69)$$

6.2 Aplicaciones

La única forma bosónica para H_0 que reproduce las Ecs. (6.67) y (6.68) es:

$$H_{0rs} = \sum_{q>0} v_{rs} q b_{qrs}^\dagger b_{qrs} + \frac{v_{rs}}{2} \left(\frac{2\pi}{L} \right) \hat{N}_{rs} (\hat{N}_{rs} + 1 - \delta_{rs}) \quad (6.70)$$

$$= \frac{v_{rs}}{4\pi} \int_0^L dx : (\partial_x \phi_{rs}(x))^2 : + \frac{v_{rs}}{2} \left(\frac{2\pi}{L} \right) \hat{N}_{rs} (\hat{N}_{rs} + 1 - \delta_{rs}). \quad (6.71)$$

La segunda forma es equivalente a la primera, como se comprueba al insertar la definición de ϕ_{rs} en términos de los b 's [Ec. (6.22)] en la Eq. (6.71). Nótese que en la primera forma podemos suprimir el orden normal, dado que esa expresión ya está ordenada normalmente, ya que aquí q solo puede ser positivo (no así la segunda donde encontramos la expresión : $b^\dagger b + bb^\dagger := 2b^\dagger b$). Ninguna contiene factores de Klein dado que el Hamiltoniano conserva el número de partículas. Con esta última ecuación completamos la derivación de las identidades de bosonización, que valen para L finito. Para obtener expresiones con $L \rightarrow \infty$ basta con despreciar los términos $\sim 1/L$. En este capítulo seguimos un enfoque constructivo, de modo que no es necesario verificar los conmutadores de los campos fermiónicos o igualdad entre funciones de Green. A continuación veremos las aplicaciones del proceso de bosonización, y como se vuelve extremadamente útil para el estudio de complicadas teorías fermiónicas en una dimensión espacial.

En la literatura es más común trabajar con Φ , ya que el segundo término en puede considerarse como un modo cero del campo. En esta notación el Hamiltoniano H_0 se lee

$$H_{0rs} = \frac{v_{rs}}{4\pi} \int_0^L dx : (\partial_x \Phi_{rs})^2 : + \frac{v_{rs}}{2} \left(\frac{2\pi}{L} \right) \hat{N}_{rs} - \frac{v_{rs}}{2} \left(\frac{2\pi}{L} \right) \frac{\delta_{rs}^2}{4}. \quad (6.72)$$

el último término es una constante y podría suprimirse. Además, podemos escribirlo en términos de densidades,

$$H_{0rs} = \frac{v_{rs}}{2} (2\pi) \int_0^L dx : \rho_{rs}(x)^2 : + \frac{v_{rs}}{2} \left(\frac{2\pi}{L} \right) (1 - \delta_{rs}) \hat{N}_{rs}. \quad (6.73)$$

6.2. Aplicaciones

6.2.1. Gas de electrones

Consideremos un gas de electrones independientes, cuyo Hamiltoniano es

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k C_k^\dagger C_k. \quad (6.74)$$

Bosonización

En la aproximación de electrones casi libres, o de ligadura fuerte, la relación de dispersión ϵ_k está dada por

$$\epsilon_k = -2t \cos ka \quad (6.75)$$

donde t es la constante de intercambio (acoplamiento entre sitios vecinos) y a es el espaciado entre los átomos de la red.

La superficie de Fermi en un sistema unidimensional consiste en dos puntos, $+k_F$ y $-k_F$; en su vecindad podemos linealizar la relación de dispersión (6.75):

$$\epsilon_k \simeq v_F(|k| - k_F). \quad (6.76)$$

La linealización genera dos ramas bien definidas en la relación de dispersión. Los electrones que pertenecen a la rama que contiene al punto $+k_F$ y $-k_F$ se mueven hacia la derecha e izquierda respectivamente. Si volvemos al operador fermiónico original, éste se puede descomponer teniendo en cuenta únicamente los modos cercanos al nivel de Fermi y despreciando los restantes,

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} C_k \simeq \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k \sim -k_F} e^{ikx} C_k + \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k \sim k_F} e^{ikx} C_k, \quad (6.77)$$

$$= \tilde{\psi}_L(x) + \tilde{\psi}_R(x). \quad (6.78)$$

Aquí la suma se extiende de $k = -\infty$ a $k = \infty$ (es una serie de Fourier de Fourier). Estas aproximaciones, tanto de la dispersión como del operador fermiónico, en principio, son razonable en un rango finito alrededor de los puntos de Fermi. Sin embargo, los tratamientos matemáticos se simplifican enormemente si tomamos esta versión linealizada para todos los valores de k entre $-\infty$ y $+\infty$, es decir, si reemplazamos el espectro libre por una aproximación lineal, estamos incorporando los infinitos modos requeridos por la bosonización descrita en las sección precedente. Por otro lado, sólo estamos interesados en excitaciones de baja energía, a las que contribuyen estados próximos a la superficie de Fermi; de modo que la inclusión de los estados adicionales por efecto de la linealización es despreciable en este régimen. Esto último se verifica a posteriori al estudiar los efectos producidos por la curvatura de banda, es decir incluyendo términos cuadráticos y cúbicos en la relación de dispersión. Se puede mostrar que las contribuciones de estos términos son irrelevantes frente a las del término lineal. No obstante, la introducción de los infinitos modos tratada de forma naïve presenta algunas complicaciones matemáticas ya que el mar de Fermi tiene ahora energía infinita. Para superar este problema, se sustrae la energía infinita del mar de

6.2 Aplicaciones

Fermi, operación que matemáticamente significa tomar el orden normal. Consideremos las condiciones de contorno para el campo Ψ . Para condiciones de contorno, $\Psi(x + L) = e^{i\pi\delta}\Psi(x)$ debemos tener que los valores de k son

$$k = \frac{2n\pi}{L} + \frac{\pi\delta}{L}, \quad (6.79)$$

donde $\delta \in [0, 2)$. Es conveniente factorizar los factores de fase $e^{\pm ik_F x}$ y cambiar k por $-k$ en el primer término:

$$\Psi(x) \simeq e^{-ik_F x} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k \sim 0} e^{-ikx} C_{-k-k_F} + e^{ik_F x} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k \sim 0} e^{ikx} C_{k+k_F}, \quad (6.80)$$

$$= e^{-ik_F x} \psi_L(x) + e^{ik_F x} \psi_R(x). \quad (6.81)$$

A los operadores que los representan a $\psi_{R/L}$ los denotaremos

$$c_{kR} = C_{k+k_F}, \quad (6.82)$$

$$c_{kL} = C_{-k-k_F}, \quad (6.83)$$

con $k \sim 0$. Adicionalmente, extendemos la suma sobre modos para los fermiones de tipo R y L también a todos los valores de k , y entonces

$$\psi_r(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{irkx} c_{kr}^\dagger, \quad (6.84)$$

donde r toma los valores $r = R/L$ (o $r = \pm 1$ en expresiones matemáticas). Obsérvese que estos campos satisfacen condiciones de contorno retorcidas

$$\psi_r(x + L) = e^{i\pi\delta} \psi_r(x), \quad (6.85)$$

y para ello necesitamos que la expansión de modos para los fermiones quirales tenga diferentes valores de k para ambas quiralidades, $k = 2\pi n/L + \pi\delta_r/L$, with $\delta_r = r\delta$. Este conjunto de operadores así definidos satisface los requisitos de ser un conjunto infinito y no acotado, y los identificamos inmediatamente con los descritos en las Ecs. (6.1) y (6.2). En término de estos operadores, el Hamiltoniano libre se escribe

$$H_0 = \sum_k v_F k : c_{kr}^\dagger c_{kr} := -iv_F \int_0^L : (\psi_R^\dagger \partial_x \psi_R - \psi_L^\dagger \partial_x \psi_L) :, \quad (6.86)$$

donde dividimos la suma sobre k en modos alrededor de $+k_F$ y $-k_F$. Observe que si sigo la ruta

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k C_k^\dagger C_k. \quad (6.87)$$

Bosonización

El término k_F en el Hamiltoniano es absorbido al redefinir los fermiones en las Eq. (6.82) y (6.83). Notemos que al reemplazar la dispersión exacta por su versión linealizada, y sumar sobre todos los modos, estamos introduciendo una suma infinita sobre todos los estados de energía negativa (el mar de Fermi). Es conveniente sustraer la energía del mar de Fermi, lo cual se consigue ordenando normalmente el Hamiltoniano. Finalmente, recuérdese que junto con la expresión de la Eq. (6.86), el fermión físico se escribe

$$\Psi(x) = e^{-ik_F x} \psi_L(x) + e^{ik_F x} \psi_R(x). \quad (6.88)$$

Siguiendo la fórmula estándar de bosonización obtenemos

$$\begin{aligned} H_0 = \frac{v_F}{4\pi} \int_0^L dx : & (\partial_x \Phi_R)^2 + (\partial_x \Phi_L)^2 : \\ & + \frac{v}{2} \left(\frac{2\pi}{L} \right) (\hat{N}_R + \hat{N}_L) - \frac{v_F}{8} \left(\frac{2\pi}{L} \right) (\delta_R^2 + \delta_L^2). \end{aligned} \quad (6.89)$$

6.2.2. Campos duales

Es usual introducir los campos duales Φ y Θ definidos como

$$\Phi = \frac{\Phi_R + \Phi_L}{2}, \quad \Phi_R = \Phi - \Theta, \quad (6.90)$$

$$\Theta = \frac{-\Phi_R + \Phi_L}{2}, \quad \Phi_L = \Phi + \Theta. \quad (6.91)$$

Usando (6.34) y (6.63) podemos mostrar que

$$[\Phi(x), \partial_{x'} \Theta(x')] = i\pi\delta(x - x'), \quad (6.92)$$

es decir, que poseen relaciones de commutación canónicas (definiendo el momento $\Pi = \frac{1}{\pi}\partial_x \Phi$). Además, definimos

$$\hat{N} = \hat{N}_R + \hat{N}_L, \quad \hat{N}_R = \frac{\hat{N} - \hat{J}}{2}, \quad (6.93)$$

$$\hat{J} = -\hat{N}_R + \hat{N}_L, \quad \hat{N}_L = \frac{\hat{N} + \hat{J}}{2}, \quad (6.94)$$

de donde tanto N como J , sus autovalores, resultan ambos pares o ambos impares. El Hamiltoniano se escribe

$$\begin{aligned} H_0 = \frac{v_F}{2\pi} \int_0^L dx : & (\partial_x \Phi)^2 + (\partial_x \Theta)^2 : \\ & + \frac{v_F}{2} \left(\frac{2\pi}{L} \right) \hat{N} - \frac{v_F}{4} \left(\frac{2\pi}{L} \right) (\hat{N}\delta + \hat{J}\varepsilon), \end{aligned} \quad (6.95)$$

6.2 Aplicaciones

donde

$$\delta = \delta_R + \delta_J, \quad \varepsilon = -\delta_R + \delta_L. \quad (6.96)$$

En términos de estos campos, las identidades de bosonización se escriben

$$_R = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} F_R e^{-i(\Phi-\Theta)}, \quad (6.97)$$

$$_L = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} F_L e^{+i(\Phi+\Theta)}. \quad (6.98)$$

Obsérvese que los campos Φ y Θ satisfacen las condiciones de contorno

$$\Phi(x+L) = \Phi(x) - \pi \hat{N}, \quad (6.99)$$

$$\Theta(x+L) = \Theta(x) - \pi \hat{J}. \quad (6.100)$$

Por lo tanto, los números cuánticos correspondientes a autovalores de \hat{N} y \hat{J} se relacionan con excitaciones topológicas de los campos.

Alternativamente, podemos trabajar con campos duales que no incluyan los modos cero,

$$\phi = \phi_R + \phi_L, \quad (6.101)$$

$$\theta = -\phi_R + \phi_L, \quad (6.102)$$

y que satisfacen condiciones de contorno periódicas. Están relacionados con los anteriores de acuerdo a

$$\Phi = \phi - \frac{\pi x}{L} \hat{N}, \quad (6.103)$$

$$\Theta = \theta - \frac{\pi x}{L} \hat{J}. \quad (6.104)$$

El Hamiltoniano, en este lenguaje, resulta

$$H_0 = \frac{v_F}{2\pi} \int_0^L dx : (\partial_x \phi)^2 + (\partial_x \theta)^2 : + \frac{v_F \pi}{2L} [\hat{N}(\hat{N}+2) + \hat{J}^2 - (\hat{N}\delta + \hat{J}\varepsilon)]. \quad (6.105)$$

6.2.3. Interacciones

Analicemos aquí el efecto de las interacciones entre electrones. Es en este punto donde la bosonización se vuelve realmente poderosa, ya que permite reducir un Hamiltoniano muy complicado a una expresión soluble. Consideremos una interacción de la forma

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{rr'} \int_0^L dx \int_0^L dx' g_{rr'}(x-y) : \rho_r(x) \rho_{r'}(x') :, \quad (6.106)$$

Bosonización

donde $\rho_r(x) =: \psi_r^\dagger(x)\psi_r(x)$: satisface condiciones de contorno periódicas para cualquier δ_r . Si introducimos la forma bosonizada para las densidades, obtenemos

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2(2\pi)^2} \sum_{rr'} \int_0^L dx \int_0^L dx' g_{rr'}(x-x') : \partial_x \Phi_r(x) \partial_x \Phi_{r'}(x') :, \quad (6.107)$$

donde supusimos que g es también una función periódica. A continuación redefinimos los acoplamientos, introduciendo $g_4 \equiv g_{RR} = g_{LL}$ y $g_2 = g_{RL} = g_{LR}$. También es necesario agregar un orden normal al producto de densidades, aunque cada factor esté ordenado normalmente, su producto no necesariamente lo está. Al agregar H_0 finalmente obtenemos para interacciones locales el modelo de Tomonaga-Luttinger,

$$H = \frac{v}{2\pi} \int_0^L dx \left[\frac{1}{K} : (\partial_x \Phi)^2 : + K : (\partial_x \Theta) : \right] + \frac{v_F \pi}{L} \hat{N} - \frac{v_F \pi}{2L} (\hat{N}\delta + \hat{J}\varepsilon). \quad (6.108)$$

en la notación de los campos duales, donde K es el llamado parámetro de Luttinger, y v es la velocidad del sonido, o velocidad de los modos colectivos,

$$v = \sqrt{\left(v_F + \frac{g_4}{2\pi}\right)^2 - \left(\frac{g_2}{2\pi}\right)^2}, \quad (6.109)$$

$$K = \sqrt{\frac{v_F + \frac{g_4}{2\pi} - \frac{g_2}{2\pi}}{v_F + \frac{g_4}{2\pi} + \frac{g_2}{2\pi}}}. \quad (6.110)$$

Bibliografía

- [1] Zur theorie der spezifischen waerme. *Annalen der Physik (Leipzig)*, 39(4), p. 789, 1912.
- [2] A. Altland and B. Simons. *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press, 2010.
- [3] N. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid state physics*. Harcourt, 1976.
- [4] A. Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Springer-Verlag, New York, 1994.
- [5] F. Bloch. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift für physik*, 52(7-8):555–600, 1929.
- [6] L. Boltzmann. Vorlesungen über gastheorie, 2 vols. *Leipzig: Barth*, 1898, 1896.
- [7] P. Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, 2015.
- [8] P. L. Dulong and A.-T. Petit. *Recherches sur quelques points importans de la theorie de la chaleur*. 1819.
- [9] A. Einstein. Die plancksche theorie der strahlung und die theorie der spezifischen wärme. *Annalen der Physik*, 327(1):180–190, 1907.
- [10] E. Fradkin. *Field Theories of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, second edition, 2013.
- [11] T. Giamarchi. *Quantum Physics In One Dimension*. Oxford University Press, 2004.
- [12] H. Goguel. Première partie. table par noms d'auteurs des travaux originaux publiés dans le bulletin de la société française de minéralogie 1878—1887. *Bulletin de Minéralogie*, 1(1):5–35, 1888.

BIBLIOGRAFÍA

- [13] J. R. Hook and H. E. Hall. *Solid State Physics*. Wiley, second edition, 1991.
- [14] D. I. Khomskii. *Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids*. Cambridge, 2010.
- [15] C. Kittel. *Quantum theory of solid*. Wiley, 1987.
- [16] C. A. Lamas. *Teorías efectivas en sistemas correlacionados*. Editorial Académica Española, 2012.
- [17] R. E. Peierls. *Quantum Theory of Solids*. Oxford University Press, 1955.
- [18] S. H. Simon. *The Oxford Solid State Basics*. Oxford, 2013.
- [19] A. M. Tsvelik. *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, second edition, 2007.

Autores

Dr. Carlos A. Lamas

Obtuvo el título de Licenciado en Física en la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata, y el grado de Doctor en Física en la misma institución. Realizó una estancia posdoctoral en la Université Paul Sabatier de Toulouse, Francia. Es Profesor Adjunto en el Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP, donde ha dictado diversos cursos de grado y posgrado. También ha sido profesor de las facultades de Ingeniería de la UNLP y de la Universidad Nacional de Lomas de Zamora y ha realizado estancias de investigación en centros internacionales. Se desempeña como Investigador Independiente del CONICET, con lugar de trabajo en el Instituto de Física La Plata. Su campo de especialización es el estudio de sistemas cuánticos fuertemente correlacionados, con énfasis en modelos teóricos de materia condensada.

Dr. Aníbal Iucci

El Dr. Aníbal Iucci obtuvo el título de Licenciado en Física en la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de La Plata, y el grado de Doctor en Física en la misma institución. Actualmente se desempeña como Investigador Independiente del CONICET y como Profesor en la Universidad Nacional de La Plata donde ha dictado diversos cursos sobre Mecánica Estadística, Mecánica Cuántica y física del sólido. Realizó una estancia postdoctoral en la Universidad de Ginebra, en el grupo del Dr. Thierry Giamarachi, entre 2004 y 2008, y ha realizado estancias de investigación en diversos centros internacionales. Su línea de investigación se centra en el estudio de sistemas cuánticos fuera del equilibrio, átomos fríos en redes ópticas y materia topológica.

Lamas, Carlos Alberto

Materia cuántica : una introducción a la física del estado sólido / Carlos Alberto Lamas. - 1a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata ; La Plata : EDULP, 2025.

Libro digital, PDF - (Libros de cátedra)

Archivo Digital: descarga

ISBN 978-950-34-2597-8

1. Mecánica Cuántica. 2. Magnetismo. I. Título.

CDD 530.12

Diseño de tapa: Dirección de Comunicación Visual de la UNLP

Universidad Nacional de La Plata – Editorial de la Universidad de La Plata

48 N.º 551-599 / La Plata B1900AMX / Buenos Aires, Argentina

+54 221 644 7150

edulp.editorial@gmail.com

www.editorial.unlp.edu.ar

Edulp integra la Red de Editoriales Universitarias Nacionales (REUN)

Primera edición, 2025

ISBN 978-950-34-2597-8

© 2025 - Edulp

e
exactas


edulp
EDITORIAL DE LA UNLP



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA