

00323
3

74



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**Justificación del Cálculo del valor medio de la densidad de corriente en
un sistema con ondas de densidad de carga.**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
FÍSICO
PRESENTA:
GABRIEL ANTONIO SIADÉ PAULIN.**



DIRECTOR DE TESIS:

M. en C. AUGUSTO CABRERA MANUEL.



**FACULTAD DE CIENCIAS
UNAM**

2003



**FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

DRA. MARÍA DE LOURDES ESTEVA PERALTA
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
"Justificación del Cálculo de valor medio de la densidad de corriente en un sistema
con ondas de densidad de carga"

realizado por Siade Paulin Gabriel Antonio

con número de cuenta 91507598 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario

M. en C. Augusto Cabrera Manuel

Propietario

Dr. Armando Cuauhtemoc Pérez Guerrerp Noyola

Propietario

Dr. Tatsuo Akachi Miyazaki

Suplente

Dr. Enrique Yépez Mulia

Suplente

Fís. Margarita Sánchez y Sánchez

Consejo Departamental de Física



DRA. PATRICIA GOLDSTEIN BENACHE

Coordinadora de Licenciatura FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

| | |
|---|------------|
| ÍNDICE | 5 |
| INTRODUCCIÓN. | 7 |
| 1.MECÁNICA ESTADÍSTICA | 13 |
| 1.1 FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN. | 15 |
| 1.2 DISTRIBUCIÓN ESTADÍSTICA CUÁNTICA. | 25 |
| 1.3 DISTRIBUCIÓN DE GIBBS. | 41 |
| 1.4 RESPUESTA NO LINEAL DE UN SISTEMA. | 49 |
| 2. PARTÍCULAS IDÉNTICAS Y SEGUNDA CUANTIZACIÓN. | 53 |
| 2.1 VECTOR DE ESTADO DE UN SISTEMA DE PARTÍCULAS IDÉNTICAS. | 55 |
| 2.2. RELACIONES DE CORRESPONDENCIA ENTRE DISTINTAS BASES. | 57 |
| 2.3 BOSONES Y FERMIONES. | 61 |
| 2.4 OPERADOR DENSIDAD DE CORRIENTE ELÉCTRICA. | 75 |
| 2.5 OPERADOR ASOCIADO A UN CAMPO ELÉCTRICO EXTERNO. | 79 |
| 3. FUNCIÓN DE GREEN. | 87 |
| 3.1 FUNCIONES DE GREEN RETARDADA Y AVANZADA. | 89 |
| 3.2 FUNCIÓN DE GREEN RETARDADA Y DENSIDAD DE CORRIENTE ELÉCTRICA. | 97 |
| 3.3 CÁLCULO DE LA TRANSFORMADA DE FOURIER DE LA FUNCIÓN DE GREEN RETARDADA. | 103 |
| 4. DENSIDAD DE CORRIENTE MEDIA EN SISTEMAS CON ONDAS DE DENSIDAD DE CARGA (ODC). | 115 |
| 4.1 ONDAS DE DENSIDAD DE CARGA. | 117 |
| 4.2 HAMILTONIANO ASOCIADO A UN SISTEMA CON ODC. | 121 |
| 4.3 CARACTERIZACIÓN DEL VALOR MEDIO DE LA DENSIDAD DE CORRIENTE EN UN SISTEMA CON ODC. | 135 |
| 5. RESULTADOS Y CONCLUSIONES. | 147 |
| 6. BIBLIOGRAFÍA. | 151 |

INTRODUCCIÓN.

El espectro energético del electrón en el modelo unidimensional de potencial periódico propuesto por R. Kronig y W. Penny tiene una representación en el esquema zonal ampliado tal que la energía como función del vector de onda puede aproximarse a una parábola con discontinuidades en $k = \pm n\pi / c$ (“k” corresponde al vector de onda, “c” a la distancia entre cada átomo de la red y “n” a un número natural). Comparando dicho espectro energético con el espectro del electrón libre (donde la energía tiene una dependencia parabólica ininterrumpida en el vector de onda) tenemos que, un posible efecto del potencial periódico de la red sobre el electrón corresponde a la formación de discontinuidades en el espectro energético. Estas discontinuidades dan lugar a las llamadas bandas prohibidas y bandas permitidas en el espectro del electrón. A su vez, las vibraciones asociadas a la red atómica que asemejan osciladores armónicos con frecuencia ω_k (“k” representa el vector de onda) producen variaciones en el potencial periódico, las cuales originan nuevas discontinuidades en el espectro energético del electrón. “Pierls estableció que cuando la modulación de las posiciones u_n de los átomos en la red tiene la forma $\delta u_n = \delta u \cos [Qz + \phi]$ (donde “u” corresponde a la amplitud de la oscilación, “Q” representa el doble del vector de onda de Fermi y “ ϕ ” la fase que describe la posición del átomo) entonces se pueden producir discontinuidades en $\pm k_f$.”¹ En dicho estado de modulación las variaciones en el potencial periódico de la red unidimensional permiten confinar a todos los electrones dentro de la banda energética con energía menor igual a la de Fermi (al acercarse los átomos se incrementa la intensidad del potencial, incorporando dentro del nuevo pozo de potencial aquellos electrones antes libres). Por otro lado las energías de los niveles ocupados debajo de E_f disminuyen, reduciendo la energía electrónica total y acoplado la densidad de electrones a la modulación de la red, lo que permite formar ondas estacionarias denominadas ondas de densidad de carga (ODC).

¹ Cf. Thorne Robert E. “Charge-Density-Wave Conductors” Physics Today. p 42. May 1996.

La interacción entre electrones y los fonones asociados a los desplazamientos de la red atómica cuasiunidimensional ha sido considerada por algunos autores (desde principios del S.XX) como la responsable de la formación de las ODC (en distinción de aquellos que consideran la interacción entre los mismos electrones a través de fonones virtuales como la responsable de dicha formación). Aunque no todos manejan directamente el concepto de ondas de densidad de carga² podemos destacar que invariablemente consideran como características de las modulaciones las mencionadas anteriormente: representan desplazamientos periódicos de la red con vector de onda $2k_f$, las cuales originan una discontinuidad (vado) en el espectro energético del electrón en k_f tal que los niveles debajo de E_f se encuentran ocupados y los niveles superiores vacíos. Esta última característica es propia de los semiconductores sin embargo, los conductores de ODC tienen modos colectivos de transporte de carga ya que al aplicarles un campo eléctrico mayor al campo umbral , las ODC pueden deslizarse de una posición relativa a la red , es decir, mientras los átomos en la red oscilan regresando y adelantándose produciendo un nuevo potencial viajero al aplicar un campo eléctrico externo, los electrones modulados se mueven produciendo una corriente . El campo umbral a su vez, depende de las impurezas en el cristal ya que éstas determinan que tan insertada se encuentra la ODC en la red atómica. Las ODC han sido observadas tanto en conductores orgánicos como inorgánicos (TTF-TCNQ , NbSe₃ , NbS₃ , TaS₃ , (TaSe₄)₂ , K_{0.3}MoO₃ , (fluoranthene)₂ PF₆ , (perylene)₂ Au (maleonitriledithiolate)₂) siendo que, la temperatura a la que se forman dichas ondas podemos situarla entre 0 K y 350 K (según el conductor que consideremos) .

En el presente trabajo modelamos un sistema con ODC (sin impurezas) a través de un sistema de fermiones libres con masa (m^*) asociada a las ondas de densidad de carga , la cual determinamos considerando la interacción entre un electrón en la superficie de Fermi y la vibración atómica con frecuencia ω_Q (donde $Q = 2k_f$) a $T = 0$ K . A partir de dicho modelo calculamos explícitamente la densidad de

² Modulación de la densidad de electrones de conducción en un metal, asociada a la modulación de las posiciones de los átomos en la red.

corriente media al aplicar un campo eléctrico alterno³ en un sistema con ODC a $T = 0 \text{ K}$ y mostramos su correspondiente formalización en el caso de temperatura finita. Como parte de la justificación del cálculo consideramos que lo que permite cualificar de científica a una proposición (con la que definimos ó relacionamos símbolos que refieren objetos físicos) no estriba en su veracidad sino en el proceso ó camino para llegar a ella⁴, por lo que presentamos el cálculo del valor medio de la densidad de corriente en un sistema con ODC , exhibiendo detalladamente principios fundamentales, construcciones sintético a priori⁵, caracterizaciones de objetos físicos⁶, relaciones analíticas, postulados, interpretaciones analógicas, etc. , lo que permitirá elucidar la “forma” como el físico organiza su sistema de creencias, porciones de conocimiento y experiencias en la solución de ejemplares⁷ dentro de la investigación normal⁸ . En este sentido los tres primeros capítulos corresponden a una revisión exhaustiva de la teoría fisicomatemática

³ En el cálculo no consideramos algún parámetro que describiera el campo umbral a partir del cual el sistema presenta conducción.

⁴ Cf. Nicol E. “Los principios de la ciencia” Fondo de cultura económica. México. Tercera reimpresión. 1984. p 39.

⁵ Entenderemos por construcciones sintético a priori como aquellas “igualdades” (relaciones ó definiciones) donde la caracterización de uno de sus miembros remite a conceptos que anteriormente no eran pensados en el otro. Por ejemplo:

En la construcción de la función de distribución $d\omega / dv = \rho (v , t)$ podremos notar que a priori establecemos $\rho (v , t)$ como caracterización terminal del proceso de construcción de $d\omega / dv$. Al proponer la forma explícita de $\rho (v , t)$ (en la distribución microcanónica) como $c \delta (E - E_0)$ añadiremos conceptos que inicialmente no eran pensados en $d\omega / dv$.

⁶ Caracterizaremos un objeto a través de la materia (aquello que corresponde al efecto del objeto sobre nuestra facultad representativa) y la forma (que consideraremos independiente del efecto del objeto sobre nuestra facultad representativa).

⁷ Interpretamos el término “ejemplar” (presentado en Posdata: 1969 por T.Kuhn) a través de la siguiente caracterización ; en las soluciones concretas a problemas que los estudiantes enfrentan al principio de su educación científica y soluciones de problemas post-estudiantiles, el sujeto condiciona su facultad representativa para “percibir” una variedad de situaciones físicas como similares, las cuales caracteriza a través de alguna generalización simbólica (ley de la “naturaleza”).

⁸ La investigación normal (expuesta por Pérez R. Ana Rosa, en Kuhn y el cambio científico) esta guiada básicamente por un ejemplo de solución exitosa de cierto tipo de problemas, el cual es reconocido por los miembros de una comunidad pertinente y por un conjunto de compromisos ontológicos compartidos por una comunidad de especialistas.

necesaria para caracterizar la densidad de corriente media en un sistema de partículas idénticas mientras que el cuarto capítulo corresponde a la aplicación de dicha teoría al caso de un sistema con ODC.

En el primer capítulo desarrollamos el tema denominado mecánica estadística siguiendo la exposición de Landau L.D. y Lifshitz E. M. en Física Estadística Vol.V , presentando la caracterización de la función de distribución en el espacio de las fases, distribución estadística cuántica, distribución canónica, distribución canónica principal, operador asociado a la matriz de densidad y valor medio de una variable dinámica en sistemas perturbados. Esta última caracterización la consideraremos una relación básica para obtener el valor medio del operador asociado a la densidad de corriente, por lo que para establecer dicho operador, desarrollamos en el siguiente capítulo el tema de partículas idénticas y segunda cuantización a través de la propuesta de Merzbacher E. en Quantum Mechanics, donde partiendo del vector de estado en el espacio de número de un sistema de partículas idénticas y estableciendo relaciones de correspondencia entre distintas bases para operadores de creación y aniquilación (así como incorporando el operador de número) , proponemos una caracterización de las partículas denominadas bosón y fermión. Por medio del operador de número y considerando la definición clásica de la densidad de corriente y campo eléctrico establecemos una posible representación de sus correspondientes operadores en segunda cuantización.⁹

En el tercer capítulo introducimos las funciones de Green avanzada y retardada. Identificando esta última con el integrando del término lineal en el valor medio de una variable dinámica para sistemas perturbados y siguiendo la propuesta de Zubarev D.N. en Nonequilibrium Statistical Thermodynamics, caracterizamos el valor medio de la densidad de corriente para un sistema de partículas idénticas perturbado por un campo eléctrico externo alterno en términos de la transformada de Fourier de la función de Green retardada. Así mismo desarrollamos la transformada de Fourier de dicha función considerando los estados propios del Hamiltoniano del sistema y alternativamente mostramos su desarrollo (prescindiendo explícitamente de dichos estados) a través de serie de potencias en la frecuencia del campo eléctrico externo y conmutadores entre los operadores asociados a la densidad de corriente, campo eléctrico y Hamiltoniano del sistema.

⁹ Exhibiendo así un posible puente conceptual entre distintas teorías.

En el cuarto capítulo exponemos las propiedades que describen a un sistema con ODC, caracterizamos la masa (m^*) asociada a la onda de densidad de carga y establecemos los operadores Hamiltoniano, densidad de corriente y vector de polarización en el caso de dichos sistemas. Considerando el desarrollo de la transformada de Fourier de la función de Green retardada a través de serie de potencias en la frecuencia del campo eléctrico externo, así como los operadores antes mencionados, obtenemos la densidad de corriente media en un sistema con ODC (sin impurezas) a $T = 0$ K y mostramos su correspondiente formalización a temperatura finita.

En el apartado correspondiente a resultados y conclusiones exhibimos lo enunciado en el párrafo anterior, comparamos la masa m^* y el tensor de conductividad obtenidos con caracterizaciones establecidas por otros autores y planteamos algunas insuficiencias descriptivas en el modelo considerado.

Al respecto de la notación, cabe mencionar que los operadores y vectores corresponden a símbolos más oscuros que las variables dinámicas y cantidades escalares, mientras que “ h ” representa la constante de Planck multiplicada por $(2\pi)^{-1}$.

El presente trabajo le resume al estudiante de física interesado en el tema, los tópicos básicos para incorporarse en un estudio más detallado sobre las ondas de densidad de carga, el cual ha permitido desarrollar modelos de sistemas con propiedades de transporte electrónico colectivo, cálculos de la energía de cuasipartículas, extensiones del modelo de campo autoconsistente para determinar la interacción electrón-red, aplicación del modelo de jalea deformable, etc., así mismo, al estudiante de filosofía de la ciencia le muestra parte de una justificación en ciencia dura que podría invitarle a una reflexión sobre fundamentación crítica del conocimiento científico de la “naturaleza”.

1 MECÁNICA ESTADÍSTICA.

El estudio de las propiedades de los sistemas constituidos por una enorme cantidad de partículas puede dirigirse a través de la mecánica estadística la cual proporciona un puente entre la dinámica microscópica del sistema y predicciones macroscópicas en términos del valor medio de variables dinámicas.

En este capítulo mostramos las siguientes formalizaciones propias de la teoría estadística: en primer lugar establecemos una caracterización de la función de distribución en el espacio de las fases con la cual sustentamos una distribución microcanónica, a su vez, presentamos una distribución estadística de estados cuánticos mezclados a partir de la matriz de densidad (con dicha matriz caracterizamos el valor medio de cualquier variable dinámica cuántica) finalmente, establecemos una distribución canónica principal mostrando su dependencia térmica y considerándola condición inicial de un sistema perturbado desarrollamos al operador asociado a la matriz de densidad en el caso de dichos sistemas.

1.1 FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN ¹⁰.

En la caracterización de la función de distribución partimos de considerar el **número de grados de libertad** (s) de un sistema mecánico macroscópico (macroscópico en sentido de suponerlo constituido por una cantidad de partículas tal que es irresoluble la totalidad de ecuaciones diferenciales que pudieran describir el movimiento de cada una de ellas), en este sentido la posición de los puntos de este sistema en el espacio se caracteriza por s coordenadas que designaremos por las letras q_i , donde el subíndice, toma los valores: $1, 2, \dots, s$, mientras que el **estado** de este sistema mecánico en un momento dado se predetermina por las asignaciones en dicho instante, de las s coordenadas q_i y de las s velocidades correspondientes $q_i^{\dot{}}$ (ó momentos generalizados p_i). En esta descripción, para un sistema de n partículas cada una de ellas con 3 grados de libertad (representados mediante las coordenadas: x, y, z), el estado del sistema en un instante t se caracteriza por las asignaciones de

$$x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n,$$

$$p_{x_1}, p_{y_1}, p_{z_1}, p_{x_2}, p_{y_2}, p_{z_2}, \dots, p_{x_n}, p_{y_n}, p_{z_n}.$$

Los diferentes estados del sistema se pueden representar por puntos en el llamado **espacio de las fases**, sobre los ejes de coordenadas de este espacio se toman los valores de las coordenadas y de los momentos del sistema dado. Cada sistema posee, en estas condiciones, su propio espacio de las fases, **espacio cuyo número de dimensiones es igual al doble del número de grados de libertad** (para el caso de n partículas cada una de ellas con 3 grados de libertad tendríamos un total de $3n$ grados de libertad y su correspondiente espacio de las fases tendría $6n$ dimensiones).

¹⁰ La construcción de la función de distribución la propondremos a través de los principios fundamentales de la física estadística descritos en Landau L.D. y Lifshitz E.M. Física Estadística Vol. 5 del Curso de Física Teórica. Editorial Reverté, S.A. 1969 España.

Consideremos un cuerpo macroscópico aislado (no se encuentra en interacción con otro cuerpo). Separemos una parte que es muy pequeña comparada con todo el sistema pero que sigue siendo macroscópica (subsistema). En virtud de la extrema complejidad de las acciones exteriores, debidas a las restantes componentes del sistema, al cabo de un intervalo de tiempo suficientemente grande el subsistema que hemos separado pasa un número de veces suficientemente grande por todos sus estados posibles, en otras palabras consideraremos que si tomamos un estado posible, al cabo de un intervalo de tiempo grande, el subsistema pasará varias veces cerca de ese estado. En el modelo del espacio de las fases lo anterior se representa a través de considerar una pequeña porción de "volumen" de dicho espacio (en el caso antes mencionado:

$$x_1 + \Delta x_1, y_1 + \Delta y_1, z_1 + \Delta z_1, x_2 + \Delta x_2, y_2 + \Delta y_2, z_2 + \Delta z_2, \dots, x_n + \Delta x_n, y_n + \Delta y_n, z_n + \Delta z_n,$$

$$P_{x_1} + \Delta P_{x_1}, P_{y_1} + \Delta P_{y_1}, P_{z_1} + \Delta P_{z_1}, P_{x_2} + \Delta P_{x_2}, P_{y_2} + \Delta P_{y_2}, P_{z_2} + \Delta P_{z_2} \dots, P_{x_n} + \Delta P_{x_n}, P_{y_n} + \Delta P_{y_n}, P_{z_n} + \Delta P_{z_n},$$

-en adelante abreviaremos dicho "volumen" con la letra v-) por el que "pasa" varias veces la trayectoria fase. Una posible manera de "visualizar" lo anterior es la siguiente¹¹

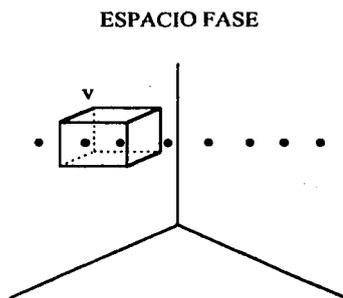


figura 1

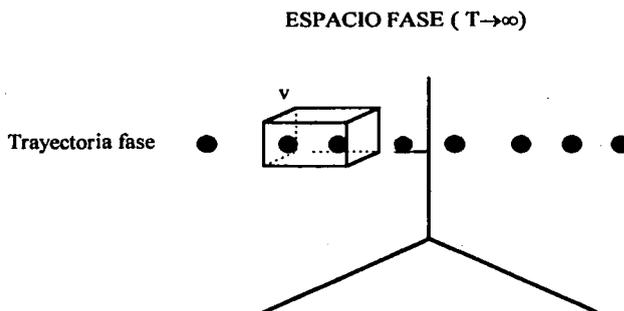


figura 2

¹¹ Todas aquellas figuras que pretenden representar alguna característica del espacio de las fases carecen de sentido dimensional. Los "puntos más anchos" (figura 2) corresponden a un sistema que ha pasado un número de veces suficientemente grande a través del volumen v al cabo de un intervalo largo de tiempo.

Suponiendo que el parámetro tiempo a partir del cual se considera que el subsistema pasa varias veces por algún estado es equiplicable en el espacio de las fases y denotando con Δt al intervalo total de tiempo en el que se traslada por el "volumen" fase, tenemos que, como se predeterminó que el subsistema pasa un número de veces suficientemente grande por todos sus estados posibles (lo que en el modelo del espacio de las fases se interpreta como: en el "volumen" considerado la trayectoria fase "pasará" un número de veces suficientemente grande por dicho "volumen", pues lo suponemos como la representación de una "zona" asociada a estados posibles del sistema), entonces Δt se propone como una cantidad del orden de T . Así, en un intervalo de tiempo $T \rightarrow \infty$ tenemos que el cociente $\Delta t / T$ se considera que tiende a un cierto límite. Esta cantidad

$$w = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\Delta t}{T}$$

se interpreta como la probabilidad de que al "observar" al subsistema, en un instante arbitrario, lo encontremos en la porción dada v del espacio de las fases.

Suponiendo la porción de "volumen" en distintas "posiciones" del espacio de las fases y que la trayectoria fase no "pasa" necesariamente el mismo número de veces en cada posición¹², tenemos que el tiempo total Δt que el subsistema "pasa" por cada elemento de volumen puede depender del número de puntos contemplados en cada volumen y del tiempo en que el subsistema "permanece"¹³ en dichos puntos (ver figura 3).

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

¹² En dicho supuesto consideramos que aunque cada uno de los estados posibles inicialmente tienen la misma probabilidad de que el subsistema sea "observado" en ellos, se proponen estados de equilibrio estadístico en los que el subsistema llega a permanecer más tiempo.

¹³ Es decir, el tiempo total en el que el subsistema pasó por cada punto contemplado en la porción de "volumen".

Espacio fase

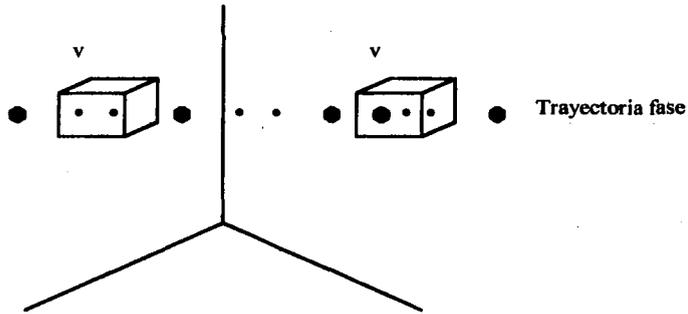


figura 3

Para delimitar dicha dependencia consideremos que la porción de "volumen" muestra que colocamos en distintas posiciones del espacio de las fases se hace tender a cero.

A priori definimos

$$\lim_{\Delta v \rightarrow 0} \frac{\Delta w}{\Delta v} = \rho(q, p, t) \quad (1.1.1)$$

como la función de distribución (de la probabilidad) en dicho espacio.

Consideremos a dichos puntos como invariantes, es decir, el número total de puntos que componen la trayectoria fase del subsistema no aumenta ó disminuye una vez que ha pasado por todos sus estados posibles. Representando dicho supuesto a través de la ecuación de continuidad tenemos que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \bar{v} = 0.$$

Para el caso de un **sistema multidimensional** (2s dimensiones, s componentes asociadas a las posiciones y s a los momentos generalizados) como en el "ejemplo" de n partículas, cada una de ellas con tres grados de libertad, podemos representar al operador ∇ en coordenadas rectangulares a través de la siguiente relación

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial y_1}, \frac{\partial}{\partial z_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n}, \frac{\partial}{\partial y_n}, \frac{\partial}{\partial z_n}, \frac{\partial}{\partial p_{x_1}}, \frac{\partial}{\partial p_{y_1}}, \frac{\partial}{\partial p_{z_1}}, \dots, \frac{\partial}{\partial p_{x_n}}, \frac{\partial}{\partial p_{y_n}}, \frac{\partial}{\partial p_{z_n}} \right),$$

mientras que el vector velocidad, al interpretarlo como la derivada con respecto al tiempo de cada una de las 2s componentes de los objetos pertenecientes (estados fase) al espacio 2s dimensional, lo representamos como

$$\bar{v} = \left(\frac{\partial x_1}{\partial t}, \frac{\partial y_1}{\partial t}, \frac{\partial z_1}{\partial t}, \dots, \frac{\partial x_n}{\partial t}, \frac{\partial y_n}{\partial t}, \frac{\partial z_n}{\partial t}, \frac{\partial p_{x_1}}{\partial t}, \frac{\partial p_{y_1}}{\partial t}, \frac{\partial p_{z_1}}{\partial t}, \dots, \frac{\partial p_{x_n}}{\partial t}, \frac{\partial p_{y_n}}{\partial t}, \frac{\partial p_{z_n}}{\partial t} \right)$$

(notemos cómo el vector velocidad ahora se encuentra caracterizado no sólo por las derivadas con respecto al tiempo de las coordenadas asociadas a la posición sino también por las correspondientes derivadas de cada componente de los momentos generalizados) por lo que, $\nabla \cdot \rho \bar{v}$ corresponde a

$$\nabla \cdot \rho \bar{v} = \frac{\partial}{\partial x_1} \rho \frac{\partial x_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y_1} \rho \frac{\partial y_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z_1} \rho \frac{\partial z_1}{\partial t} + \dots + \frac{\partial}{\partial p_{x_n}} \rho \frac{\partial p_{x_n}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial p_{y_n}} \rho \frac{\partial p_{y_n}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial p_{z_n}} \rho \frac{\partial p_{z_n}}{\partial t}.$$

En dicho producto tenemos $3n=s$ derivadas parciales con respecto a las componentes de la posición y $3n=s$ con respecto a los momentos generalizados, las cuales abreviaremos de la siguiente manera

$$\nabla \cdot \rho \bar{v} = \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial q_i} \rho \frac{\partial q_i}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial p_i} \rho \frac{\partial p_i}{\partial t}$$

donde $\{ q_i \}$ representa las componentes asociadas a la posición y $\{ p_i \}$ sus correspondientes momentos generalizados. Desarrollando las derivadas parciales y factorizando obtenemos

$$\nabla \cdot \rho \bar{\mathbf{v}} = \sum_{i=1}^s \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} \right\} + \rho \sum_{i=1}^s \left\{ \frac{\partial^2 q_i}{\partial q_i \partial t} + \frac{\partial^2 p_i}{\partial p_i \partial t} \right\}.$$

Representando las componentes del momento generalizado (p_i) como "conjugados" a sus correspondientes componentes de la posición (q_i), tenemos que

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{y} \quad \frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

donde $H = H(q, p)$ corresponde a la función de Hamilton del subsistema considerado.

Substituyendo (1.1.1) en el desarrollo del producto punto, obtenemos

$$\nabla \cdot \rho \bar{\mathbf{v}} = \sum_{i=1}^s \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} \right\} + \rho \sum_{i=1}^s \left\{ \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right\}.$$

Considerando que el orden de derivación de $H(q, p)$ no altera las derivadas parciales de dicha función el segundo término se anula, por lo que

$$\nabla \cdot \rho \bar{\mathbf{v}} = \sum_{i=1}^s \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} \right\}.$$

Substituyendo lo anterior en la ecuación de continuidad obtenemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} \right\} = 0,$$

lo que corresponde a que la función de distribución $\rho = \rho(q, p, t)$ tiene una derivada total con respecto al tiempo nula,

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left\{ \frac{\partial\rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial\rho}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} \right\} = 0. \quad (1.1.2)$$

Para el caso de equilibrio estadístico, es decir, cuando el sistema macroscópico aislado se encuentra en un estado tal que para cualquiera de sus partes las magnitudes físicas macroscópicas son iguales a sus valores medios, tenemos que la función de distribución de cada subsistema podemos restringirla a un movimiento estacionario.

En otras palabras, después de que el subsistema ha pasado por todos sus estados posibles debido a la (débil) interacción con los demás subsistemas supondremos que alcanza (después de un "tiempo grande") equilibrio estadístico, lo que en el espacio de las fases podemos representar a través de considerar exclusivamente aquellos puntos que correspondan a dicho equilibrio, fijando así una región del espacio de las fases por la que el subsistema pasará reiteradamente. Analizando la evolución del subsistema a partir del instante en que alcanza equilibrio estadístico tendremos que al colocar un elemento de volumen en alguna porción dada de la región antes mencionada, obtendremos que la cantidad de puntos acumulados durante un intervalo de tiempo (t) será la misma independientemente del instante en que empecemos a "observar" la evolución del subsistema en equilibrio¹⁴. Es decir,

¹⁴ Al respecto cabe mencionar que si la cantidad de puntos acumulados en el volumen muestra difiere para distintos instantes entonces podemos establecer un promedio sobre el tiempo que permita definir una nueva función de distribución tal que, la densidad -promedio- de puntos en la porción dada de la región de equilibrio donde colocamos el volumen muestra sea independiente del tiempo.

$$\rho(q_0, p_0, t' + t) = \rho(q_0, p_0, t'' + t) \quad (1.1.3)$$

para t' y t'' , instantes en donde el subsistema se encuentra en equilibrio.

La relación (1.1.3) podemos representarla a través de la siguiente expresión¹⁵

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (1.1.4)$$

¹⁵ Una posible formalización de que cuando el subsistema se encuentra en equilibrio estadístico podemos restringir su función de distribución a un movimiento estacionario es la siguiente. El promedio de una magnitud física (f) macroscópica para el caso de una función de distribución dependiente del tiempo, corresponde a

$$\overline{f(t)} = \int f(q, p) \rho(q, p, t) dq dp. \quad (1)$$

Suponiendo que el subsistema se encuentra en equilibrio estadístico tenemos que

$$f(q, p) = \overline{f(t)}. \quad (2)$$

Substituyendo (2) en (1) y calculando la derivada parcial respecto al tiempo, obtenemos

$$\frac{\partial \overline{f(t)}}{\partial t} = \frac{\partial \overline{f(t)}}{\partial t} \int \rho(q, p, t) dq dp + \overline{f(t)} \int \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} dq dp. \quad (3)$$

Considerando que la función de distribución se encuentra normalizada a la unidad ($\int \rho(q, p) dq dp = 1$), obtenemos de (3) que

$$\overline{f(t)} \int \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} dq dp = 0.$$

Esta última relación podemos satisfacerla para el caso en donde

$$\frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} = 0,$$

lo que corresponde a restringir la función de distribución a un movimiento estacionario.

Substituyendo (1.1.4) en (1.1.2) obtenemos

$$\frac{d\rho}{dt} = \sum_{i=1}^s \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} \right\} = 0. \quad (1.1.5)$$

De (1.1.5) tenemos que cuando el subsistema se encuentra en equilibrio estadístico, su función de distribución se expresa a través de aquellas combinaciones de las variables q, p que se conserven constantes. Estas combinaciones constituyen las llamadas **integrales de movimiento**.

A su vez, si consideramos al subsistema que se encuentra en equilibrio estadístico, compuesto por n subsistemas que interaccionan débilmente (ó tendiendo a una interacción nula), obtenemos que

$$\ln \rho_{1,2,\dots,n} = \ln \rho_1 + \ln \rho_2 + \dots + \ln \rho_n. \quad (1.1.6)$$

A partir de las relaciones (1.1.5) y (1.1.6) podemos establecer que el logaritmo de la función de distribución de un subsistema en equilibrio estadístico corresponde a una **integral de movimiento aditiva**. Considerando todas las integrales de movimiento aditivas: la energía, las tres componentes del vector impulso y las tres componentes del vector momento cinético, tenemos que

$$\ln \rho(q, p) = \alpha + \beta E(q, p) + \gamma \cdot P(q, p) + \delta \cdot M(q, p) \quad (1.1.7)$$

con coeficientes constantes $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

Puesto que "el impulso y el momento cinético de un sistema aislado están ligados con su movimiento como un todo (una translación uniforme y una rotación uniforme) podemos decir que el estado estadístico de un sistema que realiza un movimiento dado depende solamente de su energía"¹⁶. En este sentido la relación anterior se reduce a

$$\ln \rho (q , p) = \alpha + \beta E (q , p) .$$

En lo anterior tenemos que cuando el subsistema se encuentra en equilibrio estadístico su función de distribución depende exclusivamente de la energía. Así , la región del espacio de las fases que permitió restringir la función de distribución a un movimiento estacionario corresponde a puntos en dicho espacio que podemos representar a través de la energía $E (q , p)$. Considerando caracterizada la región antes mencionada a través de la energía interna (E_0) del sistema aislado proponemos¹⁷

$$\rho (q , p) = c \delta (E - E_0) \qquad \text{Distribución microcanónica.}$$

La función de distribución microcanónica para aquellos puntos del espacio de las fases que se encuentran fuera de la región que corresponde a equilibrio estadístico con respecto a la energía dada E_0 tendrá una asignación nula, mientras que los puntos en dicha región supone se distribuyen con una densidad constante.

¹⁶ Landau L.D. op. cit. p 14. Al respecto cabe mencionar que si suponemos la existencia de un marco de referencia en el cual la cantidad total de movimiento (impulso) del sistema corresponde a un término nulo tenemos que, el momento cinético total permanece invariante en distintos marcos de referencia inerciales y la energía del sistema equivale a la energía en reposo (energía interna) del sistema aislado. En dicho caso, al logaritmo de la función de distribución podemos asignarle una dependencia exclusiva en la energía interna del sistema.

¹⁷ Debido a que la energía interna del sistema aislado permanece constante, caracterizaremos la región en el espacio de las fases que representa equilibrio estadístico a través de la energía en reposo (E_0) del sistema , por lo que $E (q , p) = E_0$ en dicha región.

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

1.2 DISTRIBUCIÓN ESTADÍSTICA CUÁNTICA.

Análogamente que en la caracterización de la función de distribución, consideremos un sistema aislado y "separemos" un subsistema en equilibrio estadístico. El estado en el que se encuentra dicho subsistema ahora lo supondremos descrito a través de la función propia Ψ_n donde con n asignamos los números cuánticos asociados a tal estado. Esta función representa lo que en estadística clásica corresponde a una región de equilibrio del espacio de las fases¹⁸ con energía E_n . Si ahora consideramos un conjunto de subsistemas cada uno de ellos en equilibrio parcial¹⁹ tenemos que estos estados a su vez, podemos caracterizarlos por un conjunto de funciones propias $\{ \Psi_n \}$ en donde cada función representa el estado de equilibrio de algún subsistema con energía E_n . En el espacio de configuración del sistema tenemos un conjunto de regiones en equilibrio parcial donde cada una de ellas se caracteriza por su n -ésima energía.

Suponiendo $\{ \Psi_n \}$ como una base completa tenemos que cualquier estado del sistema podemos describirlo a través de dicho conjunto así como, formar un espacio de funciones propias considerando a cada una de ellas como eje coordenada, lo que permite definir un conjunto de funciones ortogonales a través del siguiente producto interno

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \delta_{mn} . \quad (1.2.1)$$

¹⁸ Estrictamente no podemos caracterizar un espacio de las fases pues solo podemos determinar la posición de una partícula cuántica (ó el momento, pero no ambos). Aunque para los fines de la exposición esto no altera las propiedades enunciadas posteriormente, dicha caracterización corresponde al espacio de configuración.

¹⁹ En dicho caso el conjunto de subsistemas en equilibrio parcial corresponde a una colección de subsistemas con la misma estructura que el considerado inicialmente pero en diferentes estados posibles tal que, cada uno de ellos alcanza su propio estado de equilibrio.

Sea $|\Phi\rangle$ un vector propio con el que representamos algún estado del sistema. Como suponemos

$\{\Psi_n\}$ una base completa tenemos que

$$|\Phi\rangle = \sum_n c_n |\Psi_n\rangle. \quad (1.2.2)$$

Aplicando en (1.2.2) $\langle\Psi_m|$ por la izquierda, obtenemos

$$\langle\Psi_m|\Phi\rangle = \sum_n \langle\Psi_m|c_n|\Psi_n\rangle.$$

Como c_n corresponde a coeficientes podemos extraerlo del producto interno, es decir,

$$\langle\Psi_m|\Phi\rangle = \sum_n c_n \langle\Psi_m|\Psi_n\rangle. \quad (1.2.3)$$

Aplicando (1.2.1) en (1.2.3) obtenemos

$$\langle\Psi_m|\Phi\rangle = \sum_n c_n \delta_{mn}$$

$$\langle\Psi_m|\Phi\rangle = c_m. \quad (1.2.4)$$

La relación (1.2.4) indica una posible caracterización de los coeficientes de las funciones propias ortogonales. En particular para un estado base, por ejemplo:

$$|\Phi\rangle = |\Psi_k\rangle,$$

tendríamos de (1.2.4) que

$$\langle \Psi_n | \Psi_k \rangle = c_n. \quad (1.2.5)$$

Substituyendo (1.2.5) en (1.2.2) obtenemos para un estado base

$$| \Psi_k \rangle = \sum_n \langle \Psi_n | \Psi_k \rangle | \Psi_n \rangle.$$

Como $\langle \Psi_n | \Psi_k \rangle$ corresponde a un escalar tenemos que conmuta con $| \Psi_n \rangle$, es decir,

$$| \Psi_k \rangle = \sum_n | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi_k \rangle,$$

de donde obtenemos

$$\sum_n | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | = 1 \quad \text{Relación de completéz.}$$

Por otro lado, tenemos que una variable dinámica en mecánica cuántica se representa a través de su correspondiente operador, mientras que su valor medio podemos determinarlo mediante la siguiente relación²⁰

²⁰ Clásicamente el valor medio de una magnitud física se define como

$$\bar{f}(t) = \int f(q, p) \rho(q, p, t) dq dp.$$

En **mecánica cuántica** tenemos que cada variable dinámica se representa a través de su correspondiente operador, mientras que $\rho(x) = \varphi^*(x) \varphi(x)$ pues sólo podemos encontrar la distribución de la posición (ó momento, pero no ambos). En este sentido tenemos que el promedio de un operador f podemos interpretarlo mediante reglas cuánticas como

$$\langle A \rangle_{MC} = \sum_{n, m} c_n^* c_m \langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle.$$

En general tenemos que los coeficientes c_n varían azarosamente (debido a la interacción del conjunto de subsistemas considerados inicialmente con las demás "partes" del sistema aislado) por lo que para calcular el valor medio del operador A promediamos la relación anterior sobre todo el conjunto de valores posibles de dichos coeficientes, es decir,

$$\langle A \rangle = \overline{\langle A \rangle_{MC}} = \sum_{n, m} \overline{c_n^* c_m} \langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle.$$

Postulando $\rho_{mn} = \overline{c_n^* c_m}$ como los elementos de matriz de un operador estadístico que actúa sobre la base $\{ \Psi_n \}$ obtenemos

$$\langle A \rangle = \sum_{n, m} \rho_{mn} \langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle.$$

$$\langle f \rangle_{MC} = \int \varphi^*(x) f \varphi(x) dx. \quad (a)$$

A través de una base completa de funciones propias $\{ \Psi_m \}$ cualquier estado podemos expresarlo como

$$\varphi = \sum_m c_m | \Psi_m \rangle \quad \varphi^* = \sum_n \langle \Psi_n | c_n^*. \quad (b)$$

Substituyendo (b) en (a) , obtenemos en notación de Dirac

$$\langle f \rangle_{MC} = \sum_{n, m} c_n^* c_m \langle \Psi_n | f | \Psi_m \rangle.$$

Escribiendo de forma explícita al elemento de matriz en la relación anterior ,

$$\langle A \rangle = \sum_{n, m} \langle \Psi_m | \rho | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle.$$

Aplicando la suma sobre n exclusivamente a los términos con dicha variable muda obtenemos

$$\langle A \rangle = \sum_m \langle \Psi_m | \rho \sum_n | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle.$$

Considerando la relación de completéz, en la expresión anterior , tenemos que

$$\langle A \rangle = \sum_m \langle \Psi_m | \rho A | \Psi_m \rangle. \quad (1.2.6)$$

Esta última expresión permite calcular el valor medio de una variable dinámica A a través de la traza de los operadores ρA .

El conjunto de cantidades $\rho_{mn} = \overline{c_n^* c_m}$ define la matriz de densidad del sistema aislado en cuestión.

Para describir a los elementos de matriz es necesario considerar las siguientes distinciones: (1) los estados de sistemas cuánticos que se caracterizan a través de una superposición coherente de amplitudes se denominan **estados puros** (en dicha superposición tenemos tanto términos relacionados con las amplitudes $|c_n|^2$ como términos cruzados $c_n^* c_m$ para $n \neq m$), para dichos sistemas $\rho_{mn} = c_n^* c_m$, es decir, las cantidades c_n se consideran fijas y (2) los estados de sistemas cuánticos que se caracterizan a

través de una superposición incoherente de amplitudes se denominan **estados mezclados**, en dicho caso suponemos que los coeficientes c_n varían azarosamente por lo que los promedios de las cantidades $c_n^* c_m$ corresponden a términos nulos para toda $n \neq m$ (postulado de las fases al azar), es decir, en la superposición incoherente tenemos exclusivamente amplitudes

$$\rho_{nn} = \overline{c_n^* c_n}.$$

Cuando la descripción del sistema cuántico requiere de la matriz de densidad cuyos elementos ρ_{mn} se han correspondido con el promedio de $c_n^* c_m$ tenemos que los estados del sistema se caracterizan a través de una superposición incoherente de amplitudes en donde $\rho_{mn} = 0$ para toda $n \neq m$. En este sentido la matriz de densidad corresponde a una matriz diagonal con elementos

$$\rho_{nn} = \overline{|c_n|^2}.$$

La caracterización de los elementos de la matriz de densidad permite establecer la evolución temporal del operador asociado a dicha matriz. Para ello partamos de considerar al sistema cuántico completo (conjunto de subsistemas caracterizados inicialmente y su "exterior") en un **estado puro** y descrito a través del conjunto de funciones propias $\{ \Psi_n \}$ por medio de la relación

$$|\Phi\rangle = \sum_n c_n |\Psi_n\rangle.$$

Puesto que inicialmente $\{ \Psi_n \}$ representa una base completa tenemos que cualquier estado puede caracterizarse a través de dicho conjunto, siendo que c_n (en la relación anterior) tiene una representación dada por el término temporal²¹ de la ecuación completa de Schrödinger, es decir,

²¹ Al suponer $\{ \Psi_n \}$ una base completa tenemos que cualquier estado del sistema podemos establecerlo como

$$| \Phi \rangle = \sum_n c_n(t) | \Psi_n \rangle. \quad (i)$$

Los estados del sistema satisfacen la ecuación de Schrödinger,

$$H | \Phi \rangle = E | \Phi \rangle. \quad (ii)$$

De (i), (ii) y escribiendo de forma explícita a los operadores, obtenemos

$$\sum_n c_n(t) \{ (-\hbar^2 / 2m_n) \nabla_n^2 + V_n \} | \Psi_n \rangle = \sum_n i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) | \Psi_n \rangle.$$

Correspondiendo cada uno de los n términos y despejando $c_n(t)$ tenemos que

$$\{ (-\hbar^2 / 2m_n) \nabla_n^2 + V_n \} | \Psi_n \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) | \Psi_n \rangle.$$

Por otro lado, podemos representar la ecuación estacionaria de Schrödinger como

$$\{ (-\hbar^2 / 2m_n) \nabla_n^2 + V_n \} | \Psi_n \rangle = E_n | \Psi_n \rangle.$$

De estas últimas relaciones tenemos que

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t).$$

Integrando respecto al tiempo (suponiendo $c_n(0) = 1$) obtenemos que el término temporal corresponde a

$$c_n(t) = e^{-iE_n t / \hbar}.$$

$$c_n = e^{-iEnt/h},$$

lo que permite establecer

$$c_n^* c_m = e^{-i(E_m - E_n)t/h} \quad (1.2.7)$$

Como partimos considerando al sistema en un estado puro tenemos que

$$\rho_{mn} = c_n^* c_m \quad (1.2.8)$$

Substituyendo (1.2.8) en (1.2.7) obtenemos

$$\rho_{mn} = e^{-i(E_m - E_n)t/h}$$

Suponiendo E_n y E_m como funciones del tiempo y derivando la relación anterior con respecto a dicha variable (lo que contempla el caso particular: $E_n = \text{cte.}$ y $E_m = \text{cte.}$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{mn} &= \frac{i}{h} (E_n - E_m) \rho_{mn} + \frac{it}{h} \rho_{mn} \frac{d}{dt} (E_n - E_m) \\ &= \frac{i}{h} \rho_{mn} \frac{d}{dt} \{ t(E_n - E_m) \}. \end{aligned} \quad (1.2.9)$$

Para estados mezclados (descritos a través del operador asociado a la matriz de densidad) tenemos que cuando $n \neq m$ entonces $\rho_{mn} = 0$ y como $E_n - E_m = 0$ para $n = m$ obtenemos que la relación en (1.2.9) se anula para toda ρ_{mn} , por lo que

$$\frac{d}{dt} \rho_{mn} = 0. \quad (1.2.10)$$

Dado que para estados mezclados la matriz de densidad corresponde a una matriz diagonal y puesto que postulamos que su operador asociado, actúa sobre la base completa $\{ \Psi_n \}$ con la que caracterizamos a los estados del sistema y que por ello satisface la ecuación de Schrödinger ,

$$[\rho , H] = 0. \quad (1.2.11)$$

A partir de la ley de evolución de los elementos de matriz de cualquier variable dinámica cuántica²² tenemos que

$$\frac{d}{dt} \rho_{mn} = \langle \Psi_m | \frac{\partial}{\partial t} \rho | \Psi_n \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi_m | [\rho , H] | \Psi_n \rangle = 0.$$

²² Cf. De la Peña L. Introducción a la Mecánica Cuántica. UNAM y Fondo de Cultura. México. Segunda edición 1991. p 229.

Substituyendo (1.2.10) y (1.2.11) en la ley de evolución obtenemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0.$$

Es decir, el operador asociado a la matriz de densidad podemos asociarlo con un **movimiento estacionario**. Análogamente al caso clásico en donde suponer equilibrio estadístico permite restringir la función de distribución a través de un movimiento estacionario tenemos que, al suponer una base completa con la que describimos los estados de equilibrio parcial que caracterizan al sistema cuántico mezclado el operador asociado a la matriz de densidad corresponde a un movimiento estacionario, lo que permite **postularlo** en dependencia exclusiva de integrales de movimiento y al logaritmo de cada uno de sus elementos de matriz como integrales de movimiento aditivas. Para establecer la aditividad notemos lo siguiente.

El valor medio de una variable dinámica **A** (1.2.6) corresponde a

$$\langle A \rangle = \sum_m \langle \Psi_m | \rho A | \Psi_m \rangle.$$

Aplicando relación de completez, obtenemos

$$\langle A \rangle = \sum_{m, n} \langle \Psi_m | \rho | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle.$$

Como el operador ρ conmuta con H tenemos que la base $\{\Psi_n\}$ corresponde a sus funciones propias, por lo que la relación anterior podemos representarla como

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \sum_{m,n} \langle \Psi_m | \rho_n | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle \\ &= \sum_{m,n} \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle \rho_n \langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle.\end{aligned}$$

Puesto que inicialmente partimos de un conjunto de funciones ortonormalizadas a la unidad (1.2.1), obtenemos que el valor medio del operador A corresponde a

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \sum_{m,n} \delta_{nm} \rho_n \langle \Psi_n | A | \Psi_m \rangle \\ &= \sum_m \rho_m \langle \Psi_m | A | \Psi_m \rangle.\end{aligned}$$

Esta última expresión permite interpretar a los elementos de matriz ρ_m como el factor de peso con que los subsistemas contribuyen en la caracterización del sistema, es decir, a dicho factor podemos representarlo como la probabilidad de que dado algún subsistema, éste se encuentre en la región del espacio de configuración caracterizada a través de Ψ_m y con valor propio E_m . Considerando dicha interpretación podemos establecer que la probabilidad de que dos subsistemas cuasaislados (a y b) se encuentren con energía E_m corresponde a

$$\rho_m^{(a,b)} = \rho_m^{(a)} \rho_m^{(b)}.$$

Aplicando Ln en la relación anterior obtenemos

$$\text{Ln } \rho_m^{(a, b)} = \text{Ln } \rho_m^{(a)} + \text{Ln } \rho_m^{(b)}. \quad (1.2.12)$$

La relación en (1.2.12) permite desarrollar al logaritmo de los elementos de la matriz de densidad a través de funciones aditivas por lo que, al postular al operador ρ en dependencia de integrales de movimiento tenemos que dicho logaritmo lo podemos corresponder con integrales de movimiento aditivas mientras que, de las integrales de movimiento consideraremos exclusivamente la energía como en el caso clásico.

A continuación estableceremos una “distribución” microcanónica cuántica considerando una dependencia exclusiva en la energía por parte de los elementos de la matriz de densidad, para ello recordemos que en el caso clásico definimos la función de distribución $\rho (q , p)$ como la diferencia infinitesimal de la probabilidad de encontrar un subsistema dado en la región dv del espacio de las fases, en donde el elemento de volumen se estableció a través de la siguiente relación: $dv = dq dp = dq_1 dq_2 \dots dq_s dp_1 dp_2 \dots dp_s$ donde q_i , p_j representaban las coordenadas generalizadas de la posición y momento respectivamente.

Para establecer una construcción similar en el caso cuántico tomemos en cuenta lo siguiente: al incorporar la “distribución” estadística cuántica partimos de considerar un conjunto de subsistemas en equilibrio parcial caracterizados por las funciones propias $\{ \Psi_n \}$ donde cada función representaba el estado de equilibrio de algún subsistema con energía E_n , sin embargo, para los cuerpos macroscópicos el espectro energético es casi continuo por lo que podemos considerar la energía E_n como un intervalo energético en el que tendremos un número de estados cuánticos dependiendo de las dimensiones de dicho intervalo.

Análogamente al caso clásico, si w representa la probabilidad de observar en un instante arbitrario al sistema completo (conjunto de subsistemas en equilibrio parcial y su exterior) en un estado energético

tenemos que dicha probabilidad dependerá del intervalo $dE = dE_1 dE_2 \dots dE_n$, el cual lo supondremos caracterizado a través del número de estados cuánticos: $d\Gamma(E) = d\Gamma_1(E_1) d\Gamma_2(E_2) \dots d\Gamma_n(E_n)$ tal que $d\Gamma(E) = (d\Gamma/dE) dE$. En este sentido tenemos que la diferencial de probabilidad (dw) de observar al sistema en el intervalo de número de estados cuánticos ($d\Gamma(E)$) la postulamos como

$$dw = f(E) d\Gamma(E) \quad (1.2.13)$$

donde $f(E)$ corresponde a la función de distribución en el espacio de número de estados cuánticos la cual consideraremos en dependencia exclusiva de la energía. Para exhibir que dicha función corresponde a una función de distribución notemos que al suponer w y $\Gamma(E)$ en dependencia exclusiva de la energía podemos establecer que

$$dw = \frac{dw(E)}{dE} dE \quad \text{y} \quad d\Gamma(E) = \frac{d\Gamma(E)}{dE} dE .$$

Substituyendo dichas diferenciales en la relación (1.2.13), obtenemos

$$\frac{dw(E)}{dE} dE = f(E) \frac{d\Gamma(E)}{dE} dE .$$

La diferencia infinitesimal de probabilidad con respecto al elemento de volumen en el espacio descriptivo (fase, configuración, energía, etc.) representa una caracterización a priori de la función de distribución (1.1.1) por lo que en esta última relación la derivada en el miembro izquierdo corresponde a la

distribución de probabilidad en la energía, digamos $\rho(E)$, en este sentido tenemos que

$$\begin{aligned} \rho(E) dE &= f(E) \frac{d\Gamma(E)}{dE} dE \\ &= f(E) d\Gamma(E) \\ &= dw. \end{aligned} \tag{1.2.14}$$

Las relaciones en (1.2.14) exhiben cómo la dw corresponde al producto entre la función de distribución de probabilidad en energía²³ y el intervalo dE ó $f(E)$ por el número de estados cuánticos $d\Gamma(E)$ asociados al intervalo dE . Por lo que $f(E)$ podemos corresponderla con una función de distribución.

Considerando la relación que guarda dw con el producto entre una función de distribución y un intervalo de energía (ó el número de estados cuánticos correspondiente) así como postulando a la “distribución” microcanónica cuántica como una función constante para aquellas regiones en el espacio de energía que correspondan a una energía dada E_0 mientras que para energías distintas a E_0 como una asignación nula, tenemos que

$$dw = c \delta(E - E_0) d\Gamma(E) \quad \text{“Distribución” microcanónica cuántica.}$$

²³ En la distribución de Gibbs exhibiremos no sólo cómo la dw es proporcional a una función de distribución sino que w misma es una función de distribución, pudiendo interpretarla como el símil de la matriz de densidad cuyos elementos dependen exclusivamente de la energía (a temperatura constante).

En la caracterización anterior hemos supuesto tanto a W como la función de distribución $f(E)$ en dependencia exclusiva de la energía lo que se “sustenta” en que los elementos de la matriz de densidad podemos expresarlos en dependencia de dicha variable.

Concluimos que la distribución estadística de estados cuánticos mezclados depende de la matriz de densidad la cual corresponde a una matriz diagonal asociada con un movimiento estacionario cuyos elementos representan integrales de movimiento aditivas en dependencia exclusiva de la energía y a partir de los cuales podemos calcular el valor medio de cualquier variable dinámica. A su vez, el n -ésimo elemento de la matriz de densidad lo podemos interpretar como el factor de peso con que los subsistemas con energía E_n caracterizan al sistema total.

1.3 DISTRIBUCIÓN DE GIBBS.

En el tratamiento de la función de distribución microcanónica cuántica partimos de suponer un conjunto de subsistemas en equilibrio parcial caracterizados por un conjunto de funciones propias. A su vez, cada subsistema se “compone” por un número enorme de microsistemas asociados a distintas “formas”²⁴ de organización que al promediar se caracterizarán a través de aquella que represente al mayor número de microsistemas. Si en el conjunto de microsistemas se establece una ligadura interna que prohíba por ejemplo los estados energéticos que predominan, entonces el promedio (estado del subsistema) dependerá del conjunto de microestados no ligados que ahora predominen. Es decir, el macroestado (“observado”) corresponde con el número máximo de microestados (suponiendo ligaduras internas).

La débil interacción entre los subsistemas que consideramos en la construcción de la función de distribución, ahora podemos representarla como una manifestación de las ligaduras internas de los microestados que “componen” a sus correspondientes subsistemas y que “obstaculizan” un estado de equilibrio total por principio. Sin embargo, como los subsistemas tienden a dicho estado, tenemos que este proceso permite la eliminación de ligaduras internas gracias a la interacción entre los subsistemas, dando lugar a que el número de microsistemas compatibles con el subsistema final crezca continuamente. Es decir, el estado de equilibrio “total” corresponde a un continuo crecimiento de microestados compatibles con el sistema (procesos irreversibles). En otras palabras si X es el parámetro que describe al sistema y $N(X)$ es el número de microestados correspondientes entonces el valor observado es aquel que maximiza $N(X)$, el cual depende de las ligaduras internas de los microsistemas que al irse eliminando (por interacción) permitirán “observar” el estado total de equilibrio. La **entropía** (S) se define entonces como una función proporcional al logaritmo del número de microestados asociados con el macroestado por lo que, para el caso de una distribución de estados cuánticos descritos en el espacio de número de estados cuánticos $\Delta \Gamma(E)$ tenemos que $S = \text{Ln } \Delta \Gamma(E)$.

²⁴ Los movimientos de los átomos individuales están fuertemente acoplados de tal modo que tienden a moverse de acuerdo a esquemas organizados denominados modos normales. En este sentido tenemos que la “forma” con la que caracterizamos un conjunto de microsistemas corresponde a un modo normal.

Para determinar la función de distribución de un macroestado caracterizado a través de un subsistema con energía E_n y número de estados cuánticos $d\Gamma_n(E_n)$ es necesario considerar tanto al subsistema como al medio ó sistema aislado del que forma parte el cual supondremos con energía E' y número de estados cuánticos $d\Gamma'(E')$, por lo que la energía total corresponde a $E_0 = E_n + E'$ mientras que la distribución microcanónica a

$$dw_n = c \delta(E_n + E' - E_0) d\Gamma_n(E_n) d\Gamma'(E').$$

Puesto que buscamos la función de distribución del n -ésimo subsistema con energía E_n (ó n -ésimo elemento de la matriz de densidad), supondremos un solo estado cuántico en el intervalo dE_n por lo que $d\Gamma_n(E_n) = 1$. Substituyendo esta última relación en la distribución microcanónica e integrando, obtenemos que

$$w_n = c \int \delta(E_n + E' - E_0) d\Gamma'(E') \quad (1.3.1)$$

donde

$$d\Gamma'(E') = \frac{d\Gamma'(E')}{dE'} dE' \quad (1.3.2)$$

De la definición de entropía tenemos que

$$e^{S'(E')} = \Delta \Gamma'(E'). \quad (1.3.3)$$

Como $\Delta \Gamma'(E')$ depende exclusivamente de E' podemos aproximarla como

$$\Delta \Gamma'(E') \approx \frac{d\Gamma'(E')}{dE'} \Delta E'$$

Substituyendo esta última relación en (1.3.3) obtenemos

$$\frac{e^{S'(E')}}{\Delta E'} \approx \frac{d\Gamma'(E')}{dE'} \quad (1.3.4)$$

Substituyendo (1.3.4) en (1.3.2),

$$d\Gamma'(E') \approx e^{\frac{S'(E')}{\Delta E'}} dE'$$

Finalmente, substituyendo dicha relación en (1.3.1) tenemos que

$$w_n \approx c \int \delta(E_n + E' - E_0) \frac{e^{S'(E')}}{\Delta E'} dE'$$

Debido a la presencia de la función δ , la integral anterior corresponde a

$$w_n \approx c \left[\frac{e^{S'(E')}}{\Delta E'} \right]_{E' = E_0 - E_n} \quad (1.3.5)$$

Como E_0 corresponde a la energía del medio tenemos que $E_0 \gg E_n$ (el subsistema analizado no concentra alta energía comparada a la del medio) por lo que $\Delta E'$ evaluado en $E_0 - E_n$ podemos aproximarlo a ΔE_0 . En el término que contiene al factor exponencial, podemos desarrollar a $S'(E_0 - E_n)$ en potencias de E_n hasta un término lineal²⁵, obteniendo que

$$S'(E_0 - E_n) = S'(E_0) - \frac{dS'(E_0)}{dE_0} E_n.$$

La derivada de la entropía respecto a la energía se define como T^{-1} por lo que la relación anterior corresponde a

$$S'(E_0 - E_n) = S'(E_0) - \frac{E_n}{T}.$$

Substituyendo el desarrollo de $S'(E_0 - E_n)$ y la aproximación $\Delta E' \approx \Delta E_0$ en (1.3.5) obtenemos

$$w_n \approx \left[\frac{c e^{S'(E_0)}}{\Delta E_0} \right] e^{-E_n/T}. \quad (1.3.6)$$

²⁵ Desarrollando $S'(E_0 - E_n)$ en potencias de E_n tenemos que

$$S'(E_0 - E_n) = A_0 + A_1 E_n + A_2 E_n^2 + \dots$$

Notemos lo siguiente,

$A_0 = S'(E_0 - E_n) |_{E_n=0}$ lo que corresponde a $A_0 = S'(E_0)$, mientras que

$A_1 = dS'(E_0 - E_n) / dE_n |_{E_n=0}$ Substituyendo $X = E_0 - E_n$ y avaluando X en E_0 obtenemos $A_1 = -dS'(E_0) / dE_0$

por lo que, el desarrollo en potencias de E_n hasta un término lineal corresponde a

$$S'(E_0 - E_n) = S'(E_0) - E_n dS'(E_0) / dE_0.$$

El término entre corchetes en la relación (1.3.6) no depende de la energía E_n y se determina a través de condiciones de normalización. Mientras que a temperatura constante tenemos que la diferencial de w_n corresponde a

$$d w_n = k w_n d E_n \quad \text{donde: } k = -c \frac{e^{S'(E_0)}}{T \Delta E_0} \quad \text{para } T = \text{cte.}$$

Comparando $d w_n$ con la relación establecida entre la diferencial de la probabilidad y la función de distribución ($d w = \rho(E) d E$ relación (1.2.14)) concluimos que w_n es una función de distribución que para el caso cuántico podemos definir como el n ésimo elemento de la matriz de densidad. En este sentido tenemos que w_n podemos interpretarlo como la probabilidad de encontrar un subsistema con energía E_n y a su vez caracterizarlo como la función de **distribución de Gibbs ó distribución canónica**, siendo una de las fórmulas más importantes pues determina la distribución estadística a temperatura constante de un subsistema con energía E_n y número de estados cuánticos $d\Gamma_n(E_n) = 1$, además de que con ella podemos representar un cuerpo macroscópico relativamente pequeño²⁶ con respecto al sistema aislado del que forma parte. Por lo que considerando la relación en (1.3.6) definimos la distribución de Gibbs como

$$w_n = A e^{-E_n/T} \quad \text{Distribución de Gibbs,}$$

donde A se determina a través de condiciones de normalización.

²⁶ Aunque dicho subsistema corresponde a una réplica del sistema del que "forma parte", la energía concentrada en él (E_n) la suponemos mucho menor a la energía del medio (E_0). En este sentido lo podemos considerar con la misma estructura que el sistema aislado y con energía proporcional a un número de "partículas" menor que el del sistema total, representando así, un cuerpo macroscópico relativamente pequeño con respecto al sistema total.

En la distribución de Gibbs para el caso de subsistemas con un número variable de partículas se considera el mismo método que se aplicó para obtener la función w_{nN} con la diferencia de que la entropía del medio depende en este caso de la energía E' y del número de partículas N' , es decir, $S' = S'(E', N')$, mientras que la función de distribución w_{nN} de un subsistema se caracteriza a través de la energía E_n y el número de partículas N , por lo que la energía total (medio y subsistema) corresponde a $E_0 = E' + E_n$ y el número total de partículas a $N_0 = N' + N$. De la relación (1.3.5) en términos de $S'(E', N')$ establecemos

$$w_{nN} \approx c \left[\frac{e^{S'(E', N')}}{\Delta E'} \right]_{\substack{E' = E_0 - E_n \\ N' = N_0 - N}} \quad (1.3.7)$$

Considerando nuevamente $E_0 \gg E_n$ tenemos que $\Delta E'$ evaluada en $E_0 - E_n$ corresponde a ΔE_0 , mientras que el término $S'(E_0 - E_n, N_0 - N)$ podemos aproximarlo a través de un desarrollo de potencias en E_n y N limitándonos a los términos lineales, obteniendo

$$S'(E_0 - E_n, N_0 - N) \approx S'(E_0, N_0) - \frac{\partial S'(E_0, N_0)}{\partial E_0} E_n - \frac{\partial S'(E_0, N_0)}{\partial N_0} N.$$

Substituyendo $\frac{\partial S'(E_0, N_0)}{\partial E_0} \equiv T^{-1}$ y $\frac{\partial S'(E_0, N_0)}{\partial N_0} \equiv -\mu T^{-1}$,

$$S'(E_0 - E_n, N_0 - N) \approx S'(E_0, N_0) - \frac{E_n}{T} + \frac{\mu N}{T} \quad (1.3.8)$$

Con la aproximación $\Delta E' \approx \Delta E_0$ y (1.3.8) obtenemos que la relación en (1.3.7) corresponde a

$$w_{nN} \approx \left[\frac{c e^{S'(E_0, N_0)}}{\Delta E_0} \right] e^{-(E_n - \mu N) / T} .$$

El término entre corchetes es independiente de la energía E_n y suele establecerse a través de condiciones de normalización. Considerando lo anterior, tenemos que la distribución de Gibbs para el caso de subsistemas con un número variable de partículas ó distribución canónica principal se define como

$$w_{nN} = A e^{-(E_n - \mu N) / T} \quad \text{Distribución canónica principal ,}$$

donde la constante de normalización suele caracterizarse a través de la siguiente relación

$$A = \left[\sum_{n, N} e^{-(E_n - \mu N) / T} \right]^{-1} .$$

Por otro lado recordemos que con w_{nN} podemos representar al enésimo elemento de la matriz de densidad por lo que partiendo de los estados propios del Hamiltoniano $\mathbf{H}' = \mathbf{H} - \mu \mathbf{N}$, caracterizamos al operador (ρ) asociado a la matriz de densidad en el caso de una distribución canónica principal como

$$\rho = A e^{-\mathbf{H}' / T} .$$

Finalmente, es importante destacar que la función de distribución de Gibbs para el caso de subsistemas con un número variable de partículas toma en cuenta tanto las fluctuaciones de la energía como las del número de partículas del sistema, es por ello que se denomina **distribución canónica principal**.

RECEIVED
MAY 19 1964

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

1.4 RESPUESTA NO LINEAL DE UN SISTEMA.

El Hamiltoniano de un sistema cuántico compuesto por subsistemas en donde varía el número de partículas corresponde a $\mathbf{H}' = \mathbf{H} - \mu N$. Al aplicar una perturbación externa dependiente del tiempo caracterizada por el operador \mathbf{H}_t tenemos que al Hamiltoniano total de dicho sistema podemos representarlo como $\mathbf{H} = \mathbf{H}' + \mathbf{H}_t$.

Una posible aproximación del operador asociado a la matriz de densidad para el sistema perturbado consiste en suponer como condición inicial una distribución canónica principal, es decir, a $t \rightarrow -\infty$ tenemos que el sistema no perturbado satisface

$$\rho |_{t \rightarrow -\infty} = A e^{-\mathbf{H}'/T} \equiv \rho_0. \quad (1.4.1)$$

La evolución temporal del operador ρ , debida a la perturbación, podemos obtenerla a través del siguiente método. La representación de Heisenberg de dicho operador corresponde a

$$\rho(t) = e^{i\mathbf{H}'t/\hbar} \rho e^{-i\mathbf{H}'t/\hbar}. \quad (1.4.2)$$

Calculando la derivada parcial respecto al tiempo

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \frac{i\mathbf{H}'}{\hbar} e^{i\mathbf{H}'t/\hbar} \rho e^{-i\mathbf{H}'t/\hbar} + e^{i\mathbf{H}'t/\hbar} \frac{\partial \rho}{\partial t} e^{-i\mathbf{H}'t/\hbar} - e^{i\mathbf{H}'t/\hbar} \rho e^{-i\mathbf{H}'t/\hbar} \frac{i\mathbf{H}'}{\hbar}$$

En el lado derecho de la relación anterior tenemos que el primer y tercer término corresponden al conmutador entre H' y $\rho(t)$ por lo que

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} [H', \rho(t)] + e^{iH't/\hbar} \frac{\partial \rho}{\partial t} e^{-iH't/\hbar}. \quad (1.4.3)$$

Suponiendo que para el sistema perturbado los elementos de matriz del operador ρ representan estados mezclados (1.2.10) tenemos que la ley de evolución de dicho operador podemos corresponderla²⁷ con

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho]. \quad (1.4.4)$$

Substituyendo (1.4.4) en (1.4.3),

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} [H', \rho(t)] + \frac{1}{i\hbar} e^{iH't/\hbar} [H, \rho] e^{-iH't/\hbar}.$$

Desarrollando el segundo conmutador para $H = H' + H_t$ y considerando que $[H', e^{\pm iH't/\hbar}] = 0$ obtenemos

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} [H', \rho(t)] + \frac{1}{i\hbar} [H', \rho(t)] + \frac{1}{i\hbar} [H_t(t), \rho(t)]. \quad (1.4.5)$$

²⁷ En dicha correspondencia extrapolamos la ley de evolución de los elementos de matriz del operador ρ (para estados mezclados) al caso de un sistema perturbado y caracterizado a través del Hamiltoniano total H .

Eliminando los dos primeros términos del miembro derecho tenemos que la relación en (1.4.5) equivale a

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H_t(t), \rho(t)], \quad (1.4.6)$$

donde los operadores asociados a la matriz de densidad y la perturbación corresponden a la representación de Heisenberg. Notemos que integrando la relación anterior en el intervalo $-\infty, t'$] y considerando la condición inicial (1.4.1) obtenemos que

$$\rho(t') = \rho_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t'} [H_t(t), \rho(t)] dt. \quad (1.4.7)$$

La expresión en (1.4.7) permite calcular la evolución del operador asociado a la matriz de densidad para el sistema perturbado ya que podemos obtener al segundo operador en el conmutador a través de esta misma expresión integrando iteradamente, así por ejemplo: a segundo orden

$$\rho(t') = \rho_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t'} [H_t(t), \rho_0] dt + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{-\infty}^{t'} \int_{-\infty}^t [H_t(t), [H_{t_1}(t_1), \rho_0]] dt_1 dt.$$

Esta última relación exhibe una aproximación a segundo orden del operador asociado a la matriz de densidad. Por otro lado, tenemos que de la expresión en (1.2.6) el valor medio de una variable dinámica en la representación de Heisenberg corresponde a

$$\langle A(t') \rangle = \sum_m \langle \Psi_m | \rho(t') A(t') | \Psi_m \rangle.$$

Substituyendo la aproximación a segundo orden en la relación anterior, reagrupando términos a través de relación de completéz, considerando el conjunto de funciones como propias del Hamiltoniano no perturbado y tomando en cuenta que el valor medio es independiente de la representación, obtenemos que la aproximación a segundo orden del valor medio de una variable dinámica para sistemas perturbados corresponde a

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle A \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t'-t) \langle [A(t'), H_t(t)] \rangle_0 dt & (1.4.8) \\ &+ \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t'-t) \theta(t-t_1) \langle [[A(t'), H_t(t)], H_{t_1}(t_1)] \rangle_0 dt_1 dt, \end{aligned}$$

donde $\langle \dots \rangle_0 = \text{Tr}(\rho_0 \dots)$, $\theta(t'-t) = \{ 1 \text{ para } t < t' \text{ y } 0 \text{ para } t > t' \}$ y

$$\theta(t-t_1) = \{ 1 \text{ para } t_1 < t \text{ y } 0 \text{ para } t_1 > t \}.$$

2. PARTÍCULAS IDÉNTICAS Y SEGUNDA CUANTIZACIÓN.

Las partículas en sistemas cuánticos se caracterizan como indistinguibles e idénticas en el sentido de que podemos describirlas con el mismo conjunto de cantidades físicas como la masa, carga, espín, etc..²⁸ Un sistema de n partículas idénticas²⁹ requiere de una descripción en el espacio de configuración a través de funciones simétricas en el intercambio de partículas caracterizadas como bosones y antisimétricas en el caso de fermiones. En el espacio de configuración el estado de bosones podemos representarlo adecuadamente como un producto de funciones de estado de una partícula, mientras que el estado de fermiones a través de un determinante de dichas funciones, conocido en la literatura como determinante de Slater.

Una forma alternativa de describir sistemas de n partículas podemos establecerla a través del formalismo en segunda cuantización donde los estados del sistema se caracterizan en el espacio de número de ocupación. En el presente capítulo consideraremos algunas propiedades fundamentales con las que podemos caracterizar sistemas de partículas idénticas partiendo del vector de estado en dicho espacio y definiremos los operadores de creación y aniquilación en el subespacio de una i -ésima partícula además de exhibir sus correspondientes transformaciones en distintas bases para postularlas en el espacio de n partículas. A través de dichas transformaciones e introduciendo el operador de número, mostraremos dos posibles relaciones entre el orden de aplicación de los operadores de creación y aniquilación. Finalmente, estableceremos una posible formalización de los operadores asociados a la densidad de corriente eléctrica y campo eléctrico externo (en su aproximación lineal) para un sistema de partículas idénticas a través del operador de número que mide el valor total de alguna cantidad característica de una partícula aditiva, lo que permitirá representar a dichos operadores en segunda cuantización.

²⁸ En el esquema conceptual del físico donde la masa, carga, ó espín los establece en un plano formal del objeto al que los refiere supone prescindir de la materia del fenómeno (en términos kantianos) asociada al objeto partícula ya que considera dichos conceptos como propiedades intrínsecas del objeto y por ello independientes del sujeto que se los representa.

²⁹ Supondremos un sistema de partículas idénticas como un conjunto de objetos indistinguibles caracterizados por un juego completo de variables dinámicas con las que representaremos distintos estados cuánticos, prescindiendo de una definición formal de partícula.

MASIRO

54

2.1 VECTOR DE ESTADO DE UN SISTEMA DE PARTÍCULAS IDÉNTICAS.³⁰

En la caracterización de un sistema cuántico compuesto por n partículas idénticas consideramos un juego completo de variables dinámicas k con las que podemos describir cada una de las partículas. Los estados del sistema serán considerados a través de una combinación lineal del vector propio en donde la i -ésima componente caracteriza los estados de las n_i partículas con valor propio k_i . Matemáticamente esto quiere decir que cada valor propio k_i de k corresponde a la ocupación de un operador de número N_i cuyos vectores propios caracterizan los estados en donde un número definido de partículas n_i tienen valor propio k_i . El estado más general del sistema de n partículas se corresponde entonces con una combinación lineal del vector

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots} = |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad (2.1.1)$$

el cual constituye un conjunto completo de vectores ortonormalizados en donde n_i representa el número de partículas con valor propio k_i . El estado vacío y el de una i -ésima partícula se definen respectivamente como

$$\Psi^{(0)} = |0, 0, 0, \dots\rangle \quad y \quad (2.1.2)$$

$$\Psi_i^{(1)} = |0, 0, \dots, n_i=1, \dots\rangle \quad (2.1.3)$$

³⁰ La presente caracterización de partículas idénticas la estableceremos a partir de la propuesta de Merzbacher Eugen en Quantum Mechanics. Segunda edición.

A su vez, es usual definir los operadores de creación y aniquilación respectivamente con la propiedad

$$a_i^\dagger |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \propto |n_1, n_2, \dots, n_i+1, \dots\rangle \quad (2.1.4)$$

$$a_i |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \propto |n_1, n_2, \dots, n_i-1, \dots\rangle, \quad (2.1.5)$$

donde adicionan o eliminan una partícula en la i -ésima componente sobre la que actúan. Notemos que al aplicar el i -ésimo operador de creación al estado vacío obtenemos un resultado proporcional al estado de una partícula i -ésima, por lo que definimos

$$a_i^\dagger \Psi^{(0)} = \Psi_i^{(1)}, \quad (2.1.6)$$

mientras que el i -ésimo operador de aniquilación sobre el estado de una partícula i -ésima da como resultado un estado proporcional al vacío, por lo que a priori establecemos³¹

$$a_i \Psi_i^{(1)} = \Psi^{(0)}. \quad (2.1.7)$$

Suponiendo al vacío como el estado mínimo de partículas y a su vez, definiendo como carente de sentido aquellos estados con un número negativo de partículas tenemos que

$$a_i \Psi^{(0)} = 0 \quad y \quad (2.1.8)$$

$$a_i \Psi_j^{(1)} = \delta_{ij} \Psi^{(0)}. \quad (2.1.9)$$

³¹ Las relaciones (2.1.6) y (2.1.7) se establecen como punto de partida para obtener constantes de proporcionalidad en las relaciones de conmutación y anticonmutación entre los operadores de creación y aniquilación.

2.2 RELACIONES DE CORRESPONDENCIA ENTRE DISTINTAS BASES.

La transformación de una base con vectores propios $\{ | K_i \rangle \}$ a otra base con vectores $\{ | L_q \rangle \}$ se obtiene (aplicando relación de completez) a través de

$$| K_i \rangle = \sum_q | L_q \rangle \langle L_q | K_i \rangle = \sum_q c_{qi} | L_q \rangle ,$$

donde

$$c_{qi} = \langle L_q | K_i \rangle \quad y \quad (2.2.1)$$

$$| L_q \rangle = | 0, 0, \dots, n_q=1, \dots \rangle = \Phi_q^{(1)} , \quad (2.2.2)$$

mientras que el estado vacío ($\Phi^{(0)}$) se define como el mismo en ambas bases, es decir ,

$$\Phi^{(0)} = \Psi^{(0)} . \quad (2.2.3)$$

Para establecer la relación de correspondencia entre los operadores de aniquilación en distintas bases consideremos lo siguiente. De la expresión (2.2.1) tenemos que

$$\sum_q c_{qi}^* c_{qj} = \sum_q \langle K_i | L_q \rangle \langle L_q | K_j \rangle ,$$

desplazando la suma sobre q hasta los términos con dicha variable obtenemos que la relación anterior corresponde a

$$\sum_q c_{qi}^* c_{qj} = \langle \mathbf{K}_i | \sum_q | \mathbf{L}_q \rangle \langle \mathbf{L}_q | \mathbf{K}_j \rangle ,$$

aplicando relación de completéz y suponiendo cada base ortonormalizada a la unidad, obtenemos

$$\sum_q c_{qi}^* c_{qj} = \langle \mathbf{K}_i | \mathbf{K}_j \rangle = \delta_{ij} . \quad (2.2.4)$$

De (2.1.9) tenemos que

$$\mathbf{a}_i \Psi_j^{(1)} = \delta_{ij} \Psi_j^{(0)} .$$

Substituyendo (2.2.4) en la relación anterior obtenemos

$$\mathbf{a}_i \Psi_j^{(1)} = \sum_q c_{qi}^* c_{qj} \Psi_j^{(0)} ; \quad (2.2.5)$$

Notemos que

$$c_{qj} = \sum_r c_{rj} \delta_{qr} ,$$

por lo que substituyendo dicha relación en (2.2.5) tenemos

$$a_i \Psi_j^{(1)} = \sum_{q,r} c_{qi}^* c_{rj} \delta_{qr} \Psi^{(0)}. \quad (2.2.6)$$

Substituyendo (2.2.3) en (2.2.6) obtenemos

$$a_i \Psi_j^{(1)} = \sum_{q,r} c_{qi}^* c_{rj} \delta_{qr} \Phi^{(0)}. \quad (2.2.7)$$

De (2.1.9) en la base $\{ |L_q\rangle \}$ tenemos que

$$b_q \Phi_r^{(1)} = \delta_{qr} \Phi^{(0)}, \quad (2.2.8)$$

donde b_q representa al operador de aniquilación en dicha base. Substituyendo (2.2.8) en (2.2.7) obtenemos

$$\begin{aligned} a_i \Psi_j^{(1)} &= \sum_{q,r} c_{qi}^* c_{rj} b_q \Phi_r^{(1)} \\ &= \sum_q b_q c_{qi}^* \sum_r \Phi_r^{(1)} c_{rj}. \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

Por otro lado tenemos que de (2.2.1), (2.2.2), aplicando relación de completéz y la definición del estado de una partícula j -ésima, podemos establecer lo siguiente:

$$\begin{aligned} \sum_r \Phi_r^{(1)} c_{rj} &= \sum_r |L_r\rangle \langle L_r | K_j\rangle \\ &= |K_j\rangle = \Psi_j^{(1)} \end{aligned}$$

y finalmente substituyendo dicha relación en (2.2.9) tenemos que

$$a_i \Psi_j^{(1)} = \sum_q b_q c_{qi}^* \Psi_j^{(1)}$$

Esta última expresión permite establecer la relación de correspondencia entre los operadores de aniquilación en distintas bases del subespacio de una partícula, por lo que

$$a_i = \sum_q b_q c_{qi}^* \tag{2.2.10}$$

Calculando el transpuesto conjugado en (2.2.10), obtenemos la relación que guardan los operadores de creación en distintas bases del subespacio antes mencionado, es decir,

$$a_i^\dagger = \sum_q b_q^\dagger c_{qi} \tag{2.2.11}$$

Las expresiones en (2.2.10) y (2.2.11) las supondremos como relaciones de correspondencia entre operadores de aniquilación y creación respectivamente para transformaciones en el espacio de n partículas.

2.3 BOSONES Y FERMIONES.

Cuando dos operadores de creación a_i^\dagger y a_j^\dagger son aplicados a un vector de estado caracterizan el mismo estado físico salvo por una constante de proporcionalidad dependiendo del orden de aplicación por lo que, suele proponerse

$$a_i^\dagger a_j^\dagger \Psi = \lambda a_j^\dagger a_i^\dagger \Psi,$$

despejando y factorizando tenemos que la relación anterior es equivalente a

$$(a_i^\dagger a_j^\dagger - \lambda a_j^\dagger a_i^\dagger) \Psi = 0. \quad (2.3.1)$$

Para obtener la constante de proporcionalidad λ , expresamos los operadores en (2.3.1) a través de una nueva base por medio de la relación (2.2.11), es decir,

$$(a_i^\dagger a_j^\dagger - \lambda a_j^\dagger a_i^\dagger) \Psi = \sum_{q,k} c_{qi} c_{kj} (b_q^\dagger b_k^\dagger - \lambda b_k^\dagger b_q^\dagger) \Psi = 0.$$

Puesto que el producto entre los coeficientes en general corresponde a términos no nulos tenemos que para que dicha igualdad se satisfaga exigimos

$$\forall k, q \quad (b_q^\dagger b_k^\dagger - \lambda b_k^\dagger b_q^\dagger) = 0. \quad (2.3.2)$$

De la restricción (2.3.2) tenemos como posibles particularizaciones a

$$b_k^\dagger b_q^\dagger - \lambda b_q^\dagger b_k^\dagger = 0 \quad \text{y} \quad (2.3.3)$$

$$b_q^\dagger b_k^\dagger - \lambda b_k^\dagger b_q^\dagger = 0. \quad (2.3.4)$$

Despejando el segundo término en (2.3.3) y substituyendolo en (2.3.4) obtenemos

$$b_q^\dagger b_k^\dagger - \lambda^2 b_q^\dagger b_k^\dagger = 0.$$

De esta última expresión obtenemos que $\lambda = \pm 1$. Por lo que la constante de proporcionalidad en (2.3.1) permite establecer las siguientes relaciones,

$$\text{para } \lambda = 1 \quad a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger = 0 \quad \text{y} \quad (2.3.5a)$$

$$\text{para } \lambda = -1 \quad a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = 0. \quad (2.3.5b)$$

Calculando la transpuesta conjugada en las relaciones anteriores y puesto que dichas expresiones son validas para toda i, j tenemos que

$$\text{para } \lambda = 1 \quad a_i a_j - a_j a_i = 0 \quad \text{y} \quad (2.3.6a)$$

$$\text{para } \lambda = -1 \quad a_i a_j + a_j a_i = 0. \quad (2.3.6b)$$

En el caso de operadores de aniquilación y creación postulamos la siguiente expresión ³² para relacionar el orden de aplicación entre dichos operadores,

$$a_i a_j^\dagger \Psi = (\mu a_j^\dagger a_i + \alpha) \Psi. \quad (2.3.7)$$

Aplicando las expresiones (2.2.10) y (2.2.11) que permiten corresponder respectivamente a los operadores de creación y aniquilación en distintas bases y despejando α , obtenemos

$$\sum_{q,k} c_{qi}^* c_{kj} (b_q b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_q) = \alpha.$$

Separando los términos con un mismo subíndice tenemos que

$$\sum_k c_{ki}^* c_{kj} (b_k b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_k) + \sum_{k \neq q} c_{qi}^* c_{kj} (b_q b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_q) = \alpha. \quad (2.3.8)$$

Notemos que el segundo término al aplicarlo sobre el estado $\Phi_{n_1, n_2, n_3, \dots}$ permite establecer, de acuerdo con las definiciones de los operadores de creación y aniquilación, estados proporcionales a

$$|n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots, n_q - 1, \dots\rangle, \quad (2.3.9)$$

³² Se propone dicha expresión ya que permitirá mantener invariante en distintas bases al operador

$$\sum_i (a_i a_i^\dagger - \mu a_i^\dagger a_i),$$

con el cual caracterizaremos al operador de número.

mientras que $\alpha \Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3, \dots}$ da como resultado:

$$\alpha | \tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \dots, \tilde{n}_k, \dots, \tilde{n}_q, \dots \rangle. \quad (2.3.10)$$

Debido a que el primer término en (2.3.8) al aplicarlo al estado $\Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3, \dots}$ (considerando las definiciones de los operadores de creación y aniquilación) representa un vector proporcional a (2.3.10) tenemos que para mantener la igualdad en (2.3.8) anulamos el segundo término (ya que el vector en (2.3.9) y $\Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \tilde{n}_3, \dots}$ corresponden a distintos estados). Los coeficientes en el segundo término en general son distintos de cero por lo que exigimos

$$\forall q \neq k (b_q b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_q = 0). \quad (2.3.11)$$

Substituyendo (2.3.11) en (2.3.8) tenemos que

$$\sum_k c_{ki}^* c_{kj} (b_k b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_k) = \alpha. \quad (2.3.12)$$

Para determinar la constante α apliquemos la expresión anterior al estado vacío por lo que,

$$\sum_k c_{ki}^* c_{kj} (b_k b_k^\dagger \Phi^{(0)} - \mu b_k^\dagger b_k \Phi^{(0)}) = \alpha \Phi^{(0)}. \quad (2.3.13)$$

De las relaciones (2.1.6), (2.1.7) y (2.1.8) tenemos para la base $\{ |L_q\rangle \}$ que

$$b_k b_k^\dagger \Phi^{(0)} = b_k \Phi_k^{(1)} = \Phi^{(0)} \quad y$$

$$b_k^\dagger b_k \Phi^{(0)} = b_k^\dagger (0) = 0.$$

Substituyendo dichas relaciones en (2.3.13) obtenemos

$$\sum_k c_{ki}^* c_{kj} \Phi^{(0)} = \alpha \Phi^{(0)}$$

y considerando la relación (2.2.4)

$$\sum_k c_{ki}^* c_{kj} = \delta_{ij},$$

establecemos que

$$\delta_{ij} \Phi^{(0)} = \alpha \Phi^{(0)}.$$

Como α es una constante (independientemente del estado al que se aplique) tenemos que $\alpha = \delta_{ij}$ por lo que substituyendo la expresión (2.3.12) obtenemos,

$$\sum_k c_{ki}^* c_{kj} (b_k b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_k) = \delta_{ij}. \quad (2.3.14)$$

De la expresión (2.3.7) que consideramos inicialmente para relacionar el orden de aplicación de los operadores de creación y aniquilación en la base $\{ | K_i \rangle \}$ tenemos que despejando y substituyendo

$\alpha = \delta_{ij}$ obtenemos

$$a_i a_j^\dagger - \mu a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}. \quad (2.3.15)$$

Substituyendo la relación anterior en (2.3.14) establecemos que

$$\sum_k c_{ki}^* c_{kj} (b_k b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_k) = a_i a_j^\dagger - \mu a_j^\dagger a_i.$$

Como dicha igualdad es valida para toda i, j tenemos en particular para $i=j$ y sumando sobre i que

$$\sum_{k,i} c_{ki}^* c_{ki} (b_k b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_k) = \sum_i (a_i a_i^\dagger - \mu a_i^\dagger a_i).$$

De (2.2.1), $c_{ki}^* c_{ki} = \langle L_k | K_i \rangle \langle K_i | L_k \rangle$ por lo que la expresión anterior corresponde a

$$\sum_k \langle L_k | \sum_i | K_i \rangle \langle K_i | L_k \rangle (b_k b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_k) = \sum_i (a_i a_i^\dagger - \mu a_i^\dagger a_i). \quad (2.3.16)$$

Aplicando relación de completéz y considerando a $\{ |L_q\rangle \}$ como un conjunto de vectores ortonormalizados a la unidad tenemos que de la relación en (2.3.16) obtenemos

$$\sum_k (b_k b_k^\dagger - \mu b_k^\dagger b_k) = \sum_i (a_i a_i^\dagger - \mu a_i^\dagger a_i),$$

por lo que el operador

$$\sum_i (a_i a_i^\dagger - \mu a_i^\dagger a_i) \tag{2.3.17}$$

permanece invariante bajo una transformación de bases.

Para determinar las asignaciones posibles a μ , incorporamos al operador de número N_i el cual establece el número n_i de partículas caracterizadas por el valor propio k_i de las variables dinámicas k con las que describimos a cada partícula. Como el número total de partículas lo suponemos invariante en distintas representaciones tenemos que su correspondiente operador

$$N = \sum_i N_i$$

es invariante bajo una transformación de base. Por otro lado tenemos que tanto las constantes como el

operador en (2.3.17) permanecen invariantes bajo las transformaciones de los operadores de creación y aniquilación en distintas bases por lo que, se propone al operador de número de las i -ésimas partículas como

$$N_i = \alpha a_i^\dagger a_i + \beta a_i a_i^\dagger + \gamma, \quad (2.3.18)$$

lo que permite asegurar que el operador asociado al número total de partículas permanezca invariante bajo una transformación de la base del espacio en el que definimos al vector de estado de un sistema de n partículas.

Notemos que por la propia definición del estado vacío tenemos que el número de i -ésimas partículas en dicho estado es nulo por lo que

$$N_i \Psi^{(0)} = 0$$

ó bien, considerando la relación (2.3.18),

$$\alpha a_i^\dagger a_i \Psi^{(0)} + \beta a_i a_i^\dagger \Psi^{(0)} + \gamma \Psi^{(0)} = 0.$$

De las relaciones en (2.1.6), (2.1.7) y (2.1.8) tenemos que el primer término del lado izquierdo se anula, mientras que $a_i a_i^\dagger \Psi^{(0)} = \Psi^{(0)}$, por lo que la relación anterior corresponde a

$$\beta \Psi^{(0)} + \gamma \Psi^{(0)} = 0 \quad \text{ó bien} \quad \gamma = -\beta.$$

Substituyendo dicha igualdad en (2.3.18) obtenemos

$$N_i = \alpha a_i^\dagger a_i + \beta (a_i a_i^\dagger - 1). \quad (2.3.19)$$

Para el vector de estado del cual partimos, tenemos que la i -ésima componente representa el número n_i de partículas caracterizadas por el valor propio k_i de las variables dinámicas k con las que describimos a las partículas, por lo que dicho vector

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots} = |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle,$$

podemos caracterizarlo como un vector propio del operador de número, lo que permite definir

$$N_i |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle. \quad (2.3.20)$$

La incorporación del operador N_i asociado a la i -ésima partícula y su correspondiente valor propio n_i permiten obtener el siguiente conmutador³³,

$$[N_i, a_k^\dagger] = 0 \quad \forall i \neq k.$$

³³ Aplicando dicho conmutador al estado $\Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots}$ tenemos que

$$\begin{aligned} [N_i, a_k^\dagger] |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle &= N_i a_k^\dagger |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle - a_k^\dagger N_i |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \\ &= N_i a_k^\dagger |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle - n_i a_k^\dagger |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \\ &= (N_i - n_i) a_k^\dagger |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \\ &= (N_i - n_i) |n_1, n_2, \dots, n_k+1, \dots\rangle \\ &= (n_i - n_i) |n_1, n_2, \dots, n_k+1, \dots\rangle \quad \forall i \neq k, \end{aligned}$$

por lo que se establece $[N_i, a_k^\dagger] = 0 \quad \forall i \neq k$.

Incorporando la relación (2.3.19) en el conmutador anterior obtenemos

$$\begin{aligned}
 [N_i, a_k^\dagger] &= \alpha a_i^\dagger a_i a_k^\dagger + \beta a_i a_i^\dagger a_k^\dagger - \beta a_k^\dagger - \alpha a_k^\dagger a_i^\dagger a_i - \beta a_k^\dagger a_i a_i^\dagger + \beta a_k^\dagger \\
 &= \alpha (a_i^\dagger a_i a_k^\dagger - a_k^\dagger a_i^\dagger a_i) + \beta (a_i a_i^\dagger a_k^\dagger - a_k^\dagger a_i a_i^\dagger) \\
 &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{2.3.21}$$

Notemos que una solución de la ecuación anterior corresponde a

$$a_i^\dagger a_i a_k^\dagger - a_k^\dagger a_i^\dagger a_i = 0 \quad \text{y} \quad a_i a_i^\dagger a_k^\dagger - a_k^\dagger a_i a_i^\dagger = 0.$$

De las ecuaciones (2.3.5) para $\lambda = \pm 1$ tenemos que $a_k^\dagger a_i^\dagger = \pm a_i^\dagger a_k^\dagger$, por lo que la primera igualdad de la solución equivale a

$$a_i^\dagger a_i a_k^\dagger = \pm a_i^\dagger a_k^\dagger a_i.$$

Como $i \neq k$ establecemos de (2.3.15) que

$$a_i a_k^\dagger = \mu a_k^\dagger a_i.$$

Substituyendo dicha igualdad en la relación anterior obtenemos

$$\mu a_i^\dagger a_k^\dagger a_i = \pm a_i^\dagger a_k^\dagger a_i,$$

por lo que para $\lambda = \pm 1$ obtenemos $\mu = \pm 1$. Un análisis semejante para la segunda parte de la solución propuesta nos permite obtener el mismo resultado.

En caso de que consideremos $\alpha = 0$ y $\beta (a_i a_i^\dagger a_k^\dagger - a_k^\dagger a_i a_i^\dagger) = 0$ como solución en (2.3.21), tenemos que para $\beta = 0$ obtenemos $N_i = 0$ por (2.3.19). Como N_i es un operador distinto al operador nulidad necesariamente $a_i a_i^\dagger a_k^\dagger - a_k^\dagger a_i a_i^\dagger = 0$, reobteniendo $\mu = \pm 1$ para $\lambda = \pm 1$. Análogamente para el caso donde $\beta = 0$ y $\alpha (a_i^\dagger a_i a_k^\dagger - a_k^\dagger a_i^\dagger a_i) = 0$ obtenemos el mismo resultado.

Por lo anterior tenemos que las asignaciones posibles a μ , corresponden a $\mu = \pm 1$ para $\lambda = \pm 1$. Incorporando dichos resultados en (2.3.15) y considerando las expresiones (2.3.5) y (2.3.6) concluimos dos posibles clases de relaciones de conmutación entre los operadores de creación y aniquilación:

(I)

$$a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger = 0$$

$$a_i a_j - a_j a_i = 0$$

$$a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}$$

(II)

$$a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = 0$$

$$a_i a_j + a_j a_i = 0$$

$$a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}$$

Las partículas que satisfacen las relaciones de conmutación (I) se denominan **bosones** mientras que las que satisfacen las relaciones de anticonmutación (II) se denominan **fermiones**.

Las constantes α y β con las que caracterizamos al operador de número (2.3.19) podemos establecerlas a través del siguiente método. De las relaciones de conmutación y anticonmutación tenemos que

$$a_i a_i^\dagger = 1 \pm a_i^\dagger a_i, \quad \text{donde } (+) \text{ para bosones y } (-) \text{ para fermiones.}$$

Substituyendo (2.3.19) obtenemos

$$\begin{aligned} N_i &= \alpha a_i^\dagger a_i + \beta (1 \pm a_i^\dagger a_i - 1) \\ N_i &= (\alpha \pm \beta) a_i^\dagger a_i. \end{aligned} \tag{2.3.22}$$

De la ecuación de valores propios (2.3.20) tenemos que

$$N_i \Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots} = n_i \Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots}$$

por lo que de la relación (2.3.22) aplicada a $\Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots}$ obtenemos

$$(\alpha \pm \beta) a_i^\dagger a_i \Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots} = n_i \Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots}$$

Proponiendo n_i como el valor propio de $a_i^\dagger a_i$ tenemos que $(\alpha \pm \beta) = 1$, lo que permite establecer

$$N_i = a_i^\dagger a_i$$

Operador de número de las i-ésimas partículas.

A partir de la caracterización del operador de número y tomando en cuenta las dos clases de relaciones de conmutación, es posible definir las constantes de proporcionalidad para los operadores de creación y aniquilación en (2.1.4) y (2.1.5) como

$$a_i | n_1, n_2, n_3, \dots \rangle = \pm (n_i)^{1/2} | n_1, n_2, \dots, n_i-1, \dots \rangle \quad (2.3.23)$$

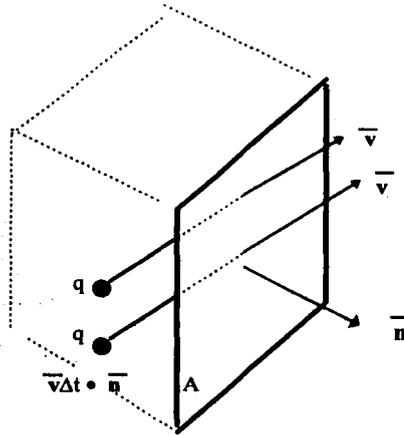
$$a_i^\dagger | n_1, n_2, n_3, \dots \rangle = \pm (n_i+1)^{1/2} | n_1, n_2, \dots, n_i+1, \dots \rangle \quad (2.3.24)$$

donde para el caso de bosones se considera (+) mientras que para fermiones tenemos (-) si el número total de componentes (del vector $\Psi_{n_1, n_2, n_3, \dots}$) distintas de cero y menores a n_i corresponden a un número par y (-) si el total de componentes distintas de cero y menores a n_i corresponden a un número non.

Finalmente, notemos que de la relación de anticonmutación para operadores de creación en el caso de $i=j$ tenemos que $a_i^\dagger a_i^\dagger + a_i^\dagger a_i^\dagger = 0$ por lo que $a_i^\dagger a_i^\dagger = 0$, lo que podemos interpretar como una representación del principio de exclusión de Pauli pues a partir de dicha igualdad no podemos establecer estados para dos ó más partículas con el mismo número cuántico por lo que, para fermiones tenemos que los valores posibles para el número de i-ésimas partículas se restringen a $n_i = 1$ ó $n_i = 0$. En este sentido es importante destacar que en las definiciones (2.3.23) y (2.3.24) necesitamos considerar para fermiones que si $n_i = 1$ entonces $a_i^\dagger | n_1, n_2, \dots \rangle = 0$, así como tomar en cuenta que para ambas clases de partículas $a_i | n_1, n_2, n_3, \dots \rangle = 0$ si $n_i = 0$.

2.4 OPERADOR DENSIDAD DE CORRIENTE ELÉCTRICA.

Para determinar el operador asociado a la densidad de corriente eléctrica partamos de la caracterización clásica de la densidad de corriente, es decir, supongamos un medio conductor con un tipo de portadores de carga q y representemos el número de portadores por unidad de volumen como N . Despreciemos el movimiento térmico de las cargas y asignémosle la misma velocidad \vec{v} de desplazamiento como se muestra en la siguiente figura.



En Δt las cargas se desplazan $\vec{v}\Delta t$ por lo que, considerando un vector normal \vec{n} a la superficie A tenemos que la distancia recorrida en dicha dirección corresponde a: $d = \vec{v}\Delta t \cdot \vec{n}$. La carga total ΔQ que atraviesa la superficie en el intervalo Δt será entonces la carga q por el número total de cargas dentro del volumen Ad , es decir,

$$\Delta Q = q N A d = q N A \vec{v}\Delta t \cdot \vec{n}. \quad (2.4.1)$$

Multiplicando por $(\Delta t)^{-1}$ los términos relacionados en (2.4.1) y considerando el límite cuando dicho intervalo tiende a cero, obtenemos

$$i = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta Q}{\Delta t} = (qN \bar{\mathbf{v}} \cdot \bar{\mathbf{n}}) A ,$$

donde i representa la corriente eléctrica , mientras que

$$\bar{\mathbf{J}} = qN \bar{\mathbf{v}}$$

se define como la densidad de corriente.

Para poder caracterizar a $\bar{\mathbf{J}}$ como una variable dinámica asociada a una partícula consideramos $N = 1$ en la definición anterior, además de expresar la velocidad en términos del momento $\bar{\mathbf{P}}$ asociado a la partícula con carga q . Por lo que para la α - componente tenemos que

$$J_{\alpha} = \frac{q}{m} P_{\alpha} \quad \text{Densidad de corriente asociada a una partícula en la dirección } \alpha .$$

Considerando un sistema compuesto por un número arbitrario de partículas idénticas cada una de ellas con su correspondiente momento, podemos caracterizar a cada partícula por medio del valor propio asociado a dicha variable dinámica. El operador que mide el valor total de la cantidad P_{α} de una partícula aditiva se define como

$$P_{\alpha} = \sum_i P_{\alpha i} N_i ,$$

por lo que el operador asociado a la densidad de corriente en la dirección α corresponde a

$$\mathbf{J}_\alpha = \frac{q}{m} \sum_i P_{\alpha i} \mathbf{N}_i, \quad (2.4.2)$$

donde \mathbf{N}_i representa al operador de número de las i -ésimas partículas con valor propio $P_{\alpha i}$.

Expresando los operadores de creación y aniquilación en el operador de número a través de una base arbitraria mediante las relaciones (2.2.10) y (2.2.11), tenemos de (2.4.2) que

$$\mathbf{J}_\alpha = \frac{q}{m} \sum_i P_{\alpha i} \sum_{k,r} c_{ki} c_{ri}^* \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_r.$$

De (2.2.1), $c_{ki} = \langle \mathbf{L}_k | \mathbf{K}_i \rangle$ y $c_{ri}^* = \langle \mathbf{K}_i | \mathbf{L}_r \rangle$ por lo que, en la relación anterior obtenemos

$$\mathbf{J}_\alpha = \frac{q}{m} \sum_{i,k,r} P_{\alpha i} \langle \mathbf{L}_k | \mathbf{K}_i \rangle \langle \mathbf{K}_i | \mathbf{L}_r \rangle \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_r. \quad (2.4.3)$$

Como $P_{\alpha i}$ lo supusimos valor propio en la base original $\{ | \mathbf{K}_i \rangle \}$ tenemos que

$$P_\alpha | \mathbf{K}_i \rangle = P_{\alpha i} | \mathbf{K}_i \rangle. \quad (2.4.4)$$

Incorporando la relación (2.4.4) en (2.4.3) y recorriendo la suma sobre i hasta los términos con dicha variable, obtenemos

$$\mathbf{J}_\alpha = \frac{q}{m} \sum_{k,r} \langle \mathbf{L}_k | \mathbf{P}_\alpha | \mathbf{L}_r \rangle \sum_i | \mathbf{K}_i \rangle \langle \mathbf{K}_i | \mathbf{L}_r \rangle \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_r.$$

Aplicando relación de completéz en la última relación tenemos que

$$\mathbf{J}_\alpha = \frac{q}{m} \sum_{k,r} \langle \mathbf{L}_k | \mathbf{P}_\alpha | \mathbf{L}_r \rangle \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_r. \quad (2.4.5)$$

expresión que se define como el **operador densidad de corriente eléctrica** en segunda cuantización, en donde “q” y “m” representan la carga y masa de cada partícula, “ \mathbf{b}_k^\dagger ” y “ \mathbf{b}_r ” corresponden a los operadores de creación y aniquilación en una base arbitraria y “ $\langle \mathbf{L}_k | \mathbf{P}_\alpha | \mathbf{L}_r \rangle$ ” representa el elemento de matriz del operador “ \mathbf{P}_α ” en dicha base, el cual interpretaremos como

$$\langle \mathbf{L}_k | \mathbf{P}_\alpha | \mathbf{L}_r \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_k^*(x) \mathbf{P}_\alpha \Phi_r(x) dx \equiv (\mathbf{P}_\alpha)_{kr}.$$

Finalmente, notemos que el operador densidad de corriente eléctrica en la representación de Heisenberg corresponde a

$$\mathbf{J}_\alpha(t) = \frac{q}{m} \sum_{k,r} \langle \mathbf{L}_k | \mathbf{P}_\alpha | \mathbf{L}_r \rangle e^{i\mathbf{H}'t/\hbar} \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_r e^{-i\mathbf{H}'t/\hbar}.$$

Introduciendo $e^{-i\mathbf{H}'t/\hbar} e^{i\mathbf{H}'t/\hbar} = 1$ entre los operadores de creación y aniquilación obtenemos

$$\mathbf{J}_\alpha(t) = \frac{q}{m} \sum_{k,r} \langle \mathbf{L}_k | \mathbf{P}_\alpha | \mathbf{L}_r \rangle \mathbf{b}_k^\dagger(t) \mathbf{b}_r(t), \quad (2.4.6)$$

relación que corresponde al operador densidad de corriente eléctrica en la representación de Heisenberg.

2.5 OPERADOR ASOCIADO A UN CAMPO ELÉCTRICO EXTERNO.

Consideremos un sistema de n partículas idénticas cada una de ellas portadora de carga q , sujetas a un campo eléctrico externo con potencial $\varphi(\vec{r})$. La energía de interacción entre cada partícula y el potencial escalar $\varphi(\vec{r})$ se caracteriza a través del principio de acoplamiento minimal³⁴ como $q\varphi(\vec{r})$. Por lo que para el sistema de n partículas tenemos que la energía potencial (sin considerar las interacciones entre las cargas) corresponde a

$$V = q \sum_{i=1}^n \varphi(\vec{r}_i), \quad (2.5.1)$$

donde \vec{r}_i representa el vector de posición de la i -ésima partícula portadora de carga q , en un sistema de coordenadas cuyo origen elegimos en un punto cualquiera del espacio en el que se encuentran dichas partículas.

La relación (2.5.1) podemos expresarla como

$$V = V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) + \dots, \quad (2.5.2)$$

donde $V_i(\vec{r}_i) = q\varphi(\vec{r}_i)$ corresponde al potencial de interacción de la i -ésima partícula con el campo eléctrico externo. Suponiendo que dicho campo varía débilmente, podemos desarrollar la energía en serie de potencias de $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$, es decir,

³⁴ El acoplamiento minimal corresponde a una característica empírica que usualmente se establece como principio. Cf. De La Peña p 389.

$$\begin{aligned}
 V_i(\bar{r}_i) = V_i(x_i, y_i, z_i) = & A_0 + A_1 x_i + A_2 x_i^2 + \dots + B_0 + B_1 y_i + B_2 y_i^2 + \dots \\
 & + C_0 + C_1 z_i + C_2 z_i^2 + \dots \quad (2.5.3)
 \end{aligned}$$

Notemos que,

$$V_i(0, 0, 0) = A_0 + B_0 + C_0 \quad y \quad (2.5.4)$$

$$\frac{\partial V_i(x_i, y_i, z_i)}{\partial x_i} = A_1 + 2A_2 x_i + 3A_3 x_i^2 + \dots$$

Evaluando la última expresión en $x_i = 0$ (lo que equivale a $x_i = y_i = z_i = 0$, pues los términos que dependen de y_i, z_i se anulan al calcular la derivada parcial respecto a x_i) obtenemos

$$\left. \frac{\partial V_i(x_i, y_i, z_i)}{\partial x_i} \right|_{x_i = y_i = z_i = 0} = A_1.$$

Análogamente calculando las parciales respecto a y_i, z_i :

$$\left. \frac{\partial V_i(x_i, y_i, z_i)}{\partial y_i} \right|_{x_i = y_i = z_i = 0} = B_1 \quad y \quad \left. \frac{\partial V_i(x_i, y_i, z_i)}{\partial z_i} \right|_{x_i = y_i = z_i = 0} = C_1.$$

Substituyendo (2.5.4), los coeficientes A_i , B_i y C_i en la relación (2.5.3) y aproximando hasta un término lineal, pues consideramos que el campo externo varía débilmente, tenemos que

$$\begin{aligned}
 V_i(x_i, y_i, z_i) = & V_i(0, 0, 0) + \frac{\partial V_i(x_i, y_i, z_i)}{\partial x_i} \Big|_{x_i=y_i=z_i=0} x_i + \frac{\partial V_i(x_i, y_i, z_i)}{\partial y_i} \Big|_{x_i=y_i=z_i=0} y_i \\
 & + \frac{\partial V_i(x_i, y_i, z_i)}{\partial z_i} \Big|_{x_i=y_i=z_i=0} z_i .
 \end{aligned}$$

En términos del operador nabla y el producto punto, la relación anterior es equivalente a

$$V_i(x_i, y_i, z_i) = V_i(0, 0, 0) + \nabla_i V_i(x_i, y_i, z_i) \Big|_{x_i=y_i=z_i=0} \cdot (x_i, y_i, z_i) ,$$

ó expresando en términos del vector $\bar{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$:

$$V_i(\bar{r}_i) = V_i(\bar{0}) + \nabla_i V_i(\bar{r}_i) \Big|_{\bar{r}_i=\bar{0}} \cdot \bar{r}_i .$$

Como $V_i(\bar{r}_i) = q \phi(\bar{r}_i)$ tenemos que $V_i(\bar{0}) = q \phi(\bar{0})$, por lo que el potencial de interacción de la i -ésima partícula corresponde a

$$V_i(\bar{r}_i) = q \phi(\bar{0}) + \nabla_i \phi(\bar{r}_i) \Big|_{\bar{r}_i=\bar{0}} \cdot q \bar{r}_i . \quad (2.5.5)$$

La relación (2.5.5) se aplica para cualquier i , por lo que incorporándola en (2.5.2) obtenemos

$$V = nq\varphi(\bar{0}) + \sum_{i=1}^n \nabla_i \varphi(\bar{r}_i) \Big|_{\bar{r}_i=0} \bullet q \bar{r}_i. \quad (2.5.6)$$

Para un vector potencial del campo que corresponda a un movimiento estacionario tenemos que el campo eléctrico se define como

$$\bar{E} = -\nabla\varphi,$$

por lo que substituyendo la relación anterior en (2.5.6):

$$\begin{aligned} V &= nq\varphi(\bar{0}) - \sum_{i=1}^n \bar{E}_{r_i} \Big|_{r_i=0} \bullet q \bar{r}_i \\ &= nq\varphi(\bar{0}) - \bar{E}_0 \bullet \sum_{i=1}^n q \bar{r}_i. \end{aligned}$$

Considerando al potencial V como $V - nq\varphi(\bar{0})$ obtenemos

$$V = -\bar{E}_0 \bullet \sum_{i=1}^n q \bar{r}_i \quad \text{Aproximación lineal del potencial de perturbación.}$$

En la relación anterior, el campo eléctrico se encuentra evaluado en el origen del sistema de coordenadas, "q" corresponde a la carga que porta cada una de las partículas y \bar{r}_i su correspondiente vector de posición.

La interacción entre una partícula y el campo eléctrico externo podemos caracterizarla como una variable dinámica asociada a una i -ésima partícula considerando $n = 1$ en el potencial de perturbación, por lo que

$$V_i = - \vec{E}_0 \cdot q \vec{r}_i \quad \text{Perturbación de la } i\text{-ésima partícula.}$$

Expresando la relación anterior en términos de las componentes vectoriales obtenemos

$$V_i = - E_{0x} q x_i - E_{0y} q y_i - E_{0z} q z_i .$$

En la dirección x tenemos que la variable dinámica que caracteriza a la i -ésima partícula perturbada corresponde a: $- E_{0x} q x_i$. En este sentido si consideramos un sistema compuesto por un número arbitrario de partículas cada una de ellas con su correspondiente vector de posición, podemos caracterizar la variable dinámica asociada a la perturbación en la dirección x a través de cada uno de los valores propios proporcionales a x_i en la base³⁵ $\{ | M_i \rangle \}$, mientras que el operador que mide el valor total de dicha cantidad corresponde a

$$V_x = - E_{0x} \sum_i q x_i N_i , \quad (2.5.7)$$

donde N_i representa al operador de número de las i -ésimas partículas con momento dipolar³⁶ $q x_i$.

³⁵ En dicho caso partimos de una base de vectores propios distinta que en el caso del operador asociado a la densidad de corriente eléctrica ya que dicho operador es proporcional al momento de las partículas, por lo que no podemos suponer una base que simultáneamente corresponda a estados propios del momento y de la posición.

³⁶ Aunque cada partícula se encuentra caracterizada por su correspondiente vector de posición esto no excluye que del sistema de partículas idénticas algunas se localicen con una misma componente en la dirección x (materiales ordenados) y por ello con un mismo valor propio $-E_{0x} q x_i$ (en el caso de bosones ó una condensación de Bose).

Notemos que la suma en (2.5.7) podemos corresponderla con la componente en x del operador de polarización (\mathbf{P}_x) del sistema de partículas idénticas, por lo que una expresión equivalente para el operador asociado a la perturbación en dicha dirección la establecemos como

$$\mathbf{v}_x = -E_{0x} \mathbf{P}_x \quad \text{donde} \quad \mathbf{P}_x = \sum_i q x_i \mathbf{N}_i.$$

Análogamente para las direcciones y , z obtenemos respectivamente que

$$\mathbf{v}_y = -E_{0y} \mathbf{P}_y \quad \text{donde} \quad \mathbf{P}_y = \sum_i q y_i \mathbf{N}_i \quad y$$

$$\mathbf{v}_z = -E_{0z} \mathbf{P}_z \quad \text{donde} \quad \mathbf{P}_z = \sum_i q z_i \mathbf{N}_i.$$

A través de las relaciones anteriores podemos representar el operador asociado a la perturbación en su aproximación lineal como

$$\mathbf{v} = -\sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \mathbf{P}_\beta \quad \text{tal que} \quad \mathbf{P}_\beta = \sum_i q \beta_i \mathbf{N}_i, \quad (2.5.8)$$

en donde con $\beta = 1, \beta = 2, \beta = 3$ designamos respectivamente a x, y, z .

Para caracterizar al operador que representa la perturbación a través de un conjunto de vectores común al operador asociado a la densidad de corriente eléctrica, expresamos en términos de los vectores $\{ |L_q\rangle \}$ al operador de número N_i en (2.5.8), es decir,

$$P_\beta = \sum_i q \beta_i \sum_{s,t} c_{si} c_{ti}^* b_s^\dagger b_t,$$

considerando de (2.2.1) que $c_{si} = \langle L_s | M_i \rangle$, $c_{ti}^* = \langle M_i | L_t \rangle$ y reagrupando términos, obtenemos que la relación anterior corresponde a

$$P_\beta = \sum_{s,t} q \langle L_s | \sum_i \beta_i | M_i \rangle \langle M_i | L_t \rangle b_s^\dagger b_t. \quad (2.5.9)$$

Como $-E_{0x}$ q x_i lo supusimos valor propio en $\{ |M_i\rangle \}$ tenemos que dicho conjunto corresponde a una base de vectores propios del operador X (análogamente para los operadores asociados a Y , Z) por lo que

$$\beta |M_i\rangle = \beta_i |M_i\rangle.$$

Substituyendo la relación anterior en (2.5.9) y aplicando relación de completéz obtenemos

$$P_\beta = \sum_{s,t} q \langle L_s | \beta | L_t \rangle b_s^\dagger b_t. \quad (2.5.10)$$

Substituyendo (2.5.10) en (2.5.8) tenemos que el operador asociado a la perturbación lineal debida al campo eléctrico externo corresponde a

$$\mathbf{v} = - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \mathbf{P}_{\beta} \quad \text{con} \quad \mathbf{P}_{\beta} = \sum_{s,t} q(\beta)_{st} \mathbf{b}_s^{\dagger} \mathbf{b}_t \quad , \quad (2.5.11)$$

donde “ $(\beta)_{st}$ ” representa al elemento de matriz “ $\langle \mathbf{L}_s | \beta | \mathbf{L}_t \rangle$ ” el cual se interpreta de forma análoga que en el caso del operador asociado a la densidad de corriente eléctrica pero ahora considerando a los operadores: “ x ” para $\beta = 1$, “ y ” para $\beta = 2$, “ z ” para $\beta = 3$.

Finalmente, notemos que de (2.5.11) tenemos que el operador de perturbación lineal en la representación de Heisenberg corresponde a

$$\mathbf{v}(\tau) = - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \mathbf{P}_{\beta}(\tau) \quad , \quad (2.5.12)$$

donde

$$\mathbf{P}_{\beta}(\tau) = \sum_{s,t} q(\beta)_{st} \mathbf{b}_s^{\dagger}(\tau) \mathbf{b}_t(\tau) \quad ,$$

$$\mathbf{b}_t(\tau) = e^{i\mathbf{H}'\tau/\hbar} \mathbf{b}_t e^{-i\mathbf{H}'\tau/\hbar} \quad \text{y}$$

$$\mathbf{b}_s^{\dagger}(\tau) = e^{i\mathbf{H}'\tau/\hbar} \mathbf{b}_s^{\dagger} e^{-i\mathbf{H}'\tau/\hbar} \quad .$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

3. FUNCIÓN DE GREEN.

En el presente capítulo "justificaremos" algunas propiedades de las funciones de Green retardada y avanzada estableciendo la relación que guardan sus correspondientes transformadas de Fourier, lo que permitirá caracterizar la aproximación lineal del valor medio asociado a la densidad de corriente para un sistema de partículas idénticas perturbadas por un campo eléctrico alterno, en términos de la transformada de Fourier de la función de Green retardada.

A su vez, exhibiremos dos posibles desarrollos del tensor de conductividad (ó negativo de la transformada de Fourier de la función de Green retardada) considerando en uno, los valores propios del Hamiltoniano no perturbado y en el otro (prescindiendo explícitamente de dichos valores) una serie de potencias en $(\omega + i\epsilon)^{-1}$ con las que podremos establecer una aproximación al tensor de conductividad a través del cálculo de conmutadores entre los operadores presentes en la función de Green retardada y el Hamiltoniano del sistema.

3.1 FUNCIONES DE GREEN RETARDADA Y AVANZADA.

En mecánica estadística y teoría de campos podemos considerar la función de Green retardada

$G_{\alpha\beta}^R(t', t)$ y avanzada $G_{\alpha\beta}^A(t', t)$ como³⁷

$$G_{\alpha\beta}^R(t', t) = \frac{1}{i\hbar} \theta(t' - t) \langle [J_{\alpha}(t'), P_{\beta}(t)] \rangle_0 \quad y \quad (3.1.1)$$

$$G_{\alpha\beta}^A(t', t) = -\frac{1}{i\hbar} \theta(t - t') \langle [J_{\alpha}(t'), P_{\beta}(t)] \rangle_0 \quad (3.1.2)$$

donde $\langle \dots \rangle_0 = \text{Tr}(\rho_0 \dots)$, ρ_0 representa el operador asociado a la matriz de densidad para el caso de una distribución canónica principal, $\theta(t' - t)$ y $\theta(t - t')$ corresponden a funciones escalón mientras que $J_{\alpha}(t')$ y $P_{\beta}(t)$ caracterizan operadores en la dirección α y β respectivamente en la representación de Heisenberg. En el caso donde dichos operadores describan partículas idénticas correspondientes a bosones tenemos que los corchetes suelen definirse como conmutador mientras que para fermiones como anticonmutador.

Las funciones de Green se encuentran íntimamente relacionadas con el cálculo de cantidades "observables" ya que por ejemplo: en la aproximación a segundo orden del valor medio de una variable dinámica para sistemas perturbados (1.4.8) tenemos que el integrando del término lineal podemos corresponderlo con una función de Green retardada con la debida aclaración de que los corchetes

³⁷ Cf. Zubarev D.N. Nonequilibrium Statistical Thermodynamics en Studies in Soviet Science 1974. Consultants Boreas New York-London. p 176.

representan un conmutador³⁸. A continuación exhibiremos algunas propiedades de las funciones de Green y sus respectivas transformadas de Fourier que serán necesarias en el cálculo antes mencionado.

En las funciones retardada y avanzada la dependencia temporal de los operadores podemos expresarla en términos de una sola variable temporal, para ello notemos que de $\langle \dots \rangle_0 = \text{Tr}(\rho_0 \dots)$ tenemos

$$\begin{aligned}
 \langle [J_\alpha(t'), P_\beta(t)] \rangle_0 &= \sum_n \langle n | \rho_0 [J_\alpha(t'), P_\beta(t)] | n \rangle \\
 &= \sum_n \langle n | \rho_0 e^{iH't'/\hbar} J_\alpha e^{-iH'(t'-t)/\hbar} P_\beta e^{-iH't/\hbar} | n \rangle \\
 &\quad - \sum_n \langle n | \rho_0 e^{iH't/\hbar} P_\beta e^{iH'(t'-t)/\hbar} J_\alpha e^{-iH't'/\hbar} | n \rangle
 \end{aligned}$$

Aplicando relación de completéz, considerando que $[\rho_0, e^{iH't/\hbar}] = 0$ y reagrupando elementos de matriz, la traza anterior corresponde a

$$\begin{aligned}
 &\sum_{n,m} \langle m | e^{-iH't/\hbar} | n \rangle \langle n | \rho_0 e^{iH't'/\hbar} J_\alpha e^{-iH'(t'-t)/\hbar} P_\beta | m \rangle \\
 &- \sum_{n,m} \langle m | \rho_0 P_\beta e^{iH'(t'-t)/\hbar} J_\alpha e^{-iH't'/\hbar} | n \rangle \langle n | e^{iH't/\hbar} | m \rangle.
 \end{aligned}$$

³⁸ El valor medio de la expresión en (1.4.8) se obtuvo considerando la ley de evolución del operador asociado a la "función de distribución" la cual se define a través de un conmutador. En este sentido tenemos que aunque los operadores involucrados en la aproximación del valor medio de alguna variable dinámica caractericen un sistema de fermiones, consideraremos inicialmente un conmutador en la función de Green retardada que asociemos al término lineal en dicha aproximación. Al realizar alguna particularización del cálculo del término lineal para variables dinámicas asociadas a fermiones aplicaremos relaciones de anticonmutación para obtener $[J_\alpha(t'), P_\beta(t)]$ pero considerándolo como un conmutador.

Aplicando nuevamente relación de completéz pero ahora sobre los n vectores y considerando que

$$[e^{-iH't/h}, \rho_0] = 0 \text{ obtenemos}$$

$$\begin{aligned} \langle [J_\alpha(t'), P_\beta(t)] \rangle_0 &= \sum_m \langle m | \rho_0 e^{iH'(t'-t)/h} J_\alpha e^{-iH'(t'-t)/h} P_\beta | m \rangle \\ &\quad - \sum_m \langle m | \rho_0 P_\beta e^{iH'(t'-t)/h} J_\alpha e^{-iH'(t'-t)/h} | m \rangle \\ &= \langle [J_\alpha(t'-t), P_\beta] \rangle_0 . \end{aligned}$$

Por lo que para $\tau = t' - t$ tenemos que

$$\langle [J_\alpha(t'), P_\beta(t)] \rangle_0 = \langle [J_\alpha(\tau), P_\beta] \rangle_0 . \quad (3.1.3)$$

Incorporando la relación anterior en las funciones de Green retardada y avanzada podemos establecer lo siguiente,

$$G^R_{\alpha\beta}(\tau, 0) = \frac{1}{i\hbar} \theta(\tau - 0) \langle [J_\alpha(\tau), P_\beta] \rangle_0 \quad y \quad (3.1.4)$$

$$G^A_{\alpha\beta}(\tau, 0) = -\frac{1}{i\hbar} \theta(0 - \tau) \langle [J_\alpha(\tau), P_\beta] \rangle_0 . \quad (3.1.5)$$

La relación entre la función de Green retardada y avanzada podemos obtenerla considerando la expresión en (3.1.5) para un orden inverso en los subíndices, es decir,

$$\begin{aligned}
 G^{\Lambda}_{\beta\alpha}(\tau, 0) &= -\frac{1}{i\hbar} \theta(0-\tau) \langle [\mathbf{P}_{\beta}(\tau), \mathbf{J}_{\alpha}] \rangle_0 \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \theta(-\tau) \langle [\mathbf{J}_{\alpha}, \mathbf{P}_{\beta}(\tau)] \rangle_0
 \end{aligned}
 \tag{3.1.6}$$

y de la relación en (3.1.4) para una dependencia temporal en el segundo operador

$$G^R_{\alpha\beta}(0, \tau) = \frac{1}{i\hbar} \theta(-\tau) \langle [\mathbf{J}_{\alpha}, \mathbf{P}_{\beta}(\tau)] \rangle_0 .
 \tag{3.1.7}$$

Comparando las expresiones anteriores tenemos que la **relación entre las funciones retardada y avanzada** corresponde a

$$G^R_{\alpha\beta}(0, \tau) = G^{\Lambda}_{\beta\alpha}(\tau, 0) .
 \tag{3.1.8}$$

Calculando la transformada de Fourier con respecto a $\omega + i\varepsilon$ de las funciones relacionadas en (3.1.8)

obtenemos

$$G^R_{\alpha\beta}(0, \omega + i\varepsilon) = G^A_{\beta\alpha}(\omega + i\varepsilon, 0), \quad (3.1.9)$$

donde

$$G^R_{\alpha\beta}(0, \omega + i\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} G^R_{\alpha\beta}(0, \tau) e^{-i(\omega + i\varepsilon)\tau} d\tau \quad (3.1.9.a)$$

$$G^A_{\beta\alpha}(\omega + i\varepsilon, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} G^A_{\beta\alpha}(\tau, 0) e^{-i(\omega + i\varepsilon)\tau} d\tau.$$

Por otro lado, la traza es invariante ante una transposición por lo que

$$\langle [J_\alpha, P_\beta(\tau)] \rangle_0^* = \langle [J_\alpha, P_\beta(\tau)] \rangle_0^{\dagger*}.$$

Como $\rho_0 = \rho_0^\dagger$ y puesto que ${}^{39} \text{Tr}(\rho_0 [J_\alpha, P_\beta(\tau)]^\dagger) = \text{Tr}([J_\alpha, P_\beta(\tau)]^\dagger \rho_0)$ tenemos que

la relación anterior corresponde a

$$\langle [J_\alpha, P_\beta(\tau)] \rangle_0^* = \langle [J_\alpha, P_\beta(\tau)] \rangle_0^{\dagger*}. \quad (3.1.10)$$

³⁹ Aplicando relación de completéz notemos que la traza del producto entre dos operadores no depende del orden entre dichos operadores.

Desarrollando el conmutador y calculando el operador adjunto del producto entre operadores, obtenemos que la expresión en (3.1.10) equivale a

$$\langle [J_\alpha, P_\beta(\tau)] \rangle_0^* = \langle (P_\beta(\tau)^\dagger J_\alpha^\dagger - J_\alpha^\dagger P_\beta(\tau)^\dagger) \rangle_0.$$

Como H' corresponde a un operador hermitiano obtenemos que⁴⁰ $P_\beta(\tau)^\dagger = P_\beta^\dagger(\tau)$. En caso de que los operadores J_α y P_β representen operadores hermitianos $P_\beta^\dagger(\tau) = P_\beta(\tau)$ y $J_\alpha^\dagger = J_\alpha$ por lo que, en la relación anterior tendríamos

$$\langle [J_\alpha, P_\beta(\tau)] \rangle_0^* = \langle [P_\beta(\tau), J_\alpha] \rangle_0. \quad (3.1.11)$$

De la definición de la función de Green retardada (3.1.4) podemos establecer su conjugado como

$$G_{\alpha\beta}^{R*}(0, \tau) = -\frac{1}{i\hbar} \theta(-\tau) \langle [J_\alpha, P_\beta(\tau)] \rangle_0^*.$$

Substituyendo (3.1.11) en la relación anterior obtenemos

⁴⁰

$$P_\beta(\tau)^\dagger = (e^{iH'\tau/\hbar} P_\beta e^{-iH'\tau/\hbar})^\dagger = (e^{-iH'\tau/\hbar})^\dagger P_\beta^\dagger (e^{iH'\tau/\hbar})^\dagger. \quad (i)$$

Como el Hamiltoniano corresponde a un operador hermitiano $H' = H'^\dagger$, por lo que la relación en (i) podemos representarla como

$$P_\beta(\tau)^\dagger = e^{iH'\tau/\hbar} P_\beta^\dagger e^{-iH'\tau/\hbar} = P_\beta^\dagger(\tau).$$

$$G_{\alpha}^R *_{\beta}(0, \tau) = \frac{1}{i h} \theta(-\tau) < [J_{\alpha}, P_{\beta}(\tau)] >_0.$$

Comparando esta expresión con la relación en (3.1.6) tenemos que ⁴¹

$$G_{\alpha}^R *_{\beta}(0, \tau) = G^{\wedge}_{\beta\alpha}(\tau, 0). \quad (3.1.12)$$

Por otro lado, de la definición de transformada de Fourier,

$$G^R_{\alpha\beta}(0, -(\omega - i\varepsilon)) = \int_{-\infty}^{\infty} G^R_{\alpha\beta}(0, \tau) e^{i(\omega - i\varepsilon)\tau} d\tau.$$

Notemos que el conjugado de dicha relación corresponde a

$$G^R_{\alpha\beta}(0, -(\omega - i\varepsilon)) = \int_{-\infty}^{\infty} G^R_{\alpha\beta}(0, \tau) e^{-i(\omega + i\varepsilon)\tau} d\tau.$$

Substituyendo (3.1.12) en la igualdad anterior obtenemos

$$G^R_{\alpha\beta}(0, -(\omega - i\varepsilon)) = \int_{-\infty}^{\infty} G^{\wedge}_{\beta\alpha}(\tau, 0) e^{-i(\omega + i\varepsilon)\tau} d\tau$$

ó bien, aplicando la definición de transformada de Fourier tenemos que

⁴¹ Este resultado junto con la expresión en (3.1.8) permiten mostrar que la función de Green retardada corresponde a una función real cuando los operadores asociados a dicha función se caracterizan por la propiedad de hermiticidad.

$$G_{\alpha \beta}^{R*}(0, -(\omega - i\varepsilon)) = G_{\beta \alpha}^{\wedge}(\omega + i\varepsilon, 0). \quad (3.1.13)$$

Finalmente, notemos que de (3.1.9) y (3.1.13) obtenemos

$$G_{\alpha \beta}^{R*}(0, -(\omega - i\varepsilon)) = G_{\alpha \beta}^R(0, \omega + i\varepsilon)$$

y calculando el conjugado de la igualdad anterior

$$G_{\alpha \beta}^R(0, -(\omega - i\varepsilon)) = G_{\alpha \beta}^{R*}(0, \omega + i\varepsilon). \quad (3.1.14)$$

La relación en (3.1.14) exhibe que el conjugado de la transformada de Fourier de la función de Green retardada corresponde a la transformada de Fourier de dicha función con respecto al negativo de la frecuencia conjugada, lo que permitirá simplificar la representación del valor medio de una variable dinámica en su aproximación lineal como mostraremos en el siguiente apartado.

3.2 FUNCIÓN DE GREEN RETARDADA Y DENSIDAD DE CORRIENTE ELÉCTRICA.

En la presente sección caracterizaremos la relación entre la función de Green retardada y el valor medio de la densidad de corriente eléctrica, considerando un sistema de partículas idénticas perturbado por un campo eléctrico alterno. De la relación en (1.4.8) tenemos que el valor medio de una variable dinámica hasta un término lineal para el caso del operador asociado a la densidad de corriente eléctrica en la dirección α equivale a

$$\langle \mathbf{J}_\alpha \rangle = \langle \mathbf{J}_\alpha \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t'-t) \langle [\mathbf{J}_\alpha(t'), \mathbf{H}_t(t)] \rangle_0 dt. \quad (3.2.1)$$

$\mathbf{H}_t(t)$ corresponde a un operador en la representación de Heisenberg asociado a la perturbación (dependiente del tiempo) debida al campo eléctrico externo. En el caso de un campo eléctrico cuyo vector potencial represente a un movimiento estacionario, el operador asociado a la perturbación producida por el campo eléctrico constante podemos establecerlo a través de la relación en (2.5.12) como

$$\mathbf{H}(t) = - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \mathbf{P}_\beta(t) \quad (3.2.2)$$

donde $\mathbf{P}_\beta(t)$ corresponde al operador asociado a la componente β del vector de polarización del sistema en la representación de Heisenberg, mientras que con $E_{0\beta}$ asignamos la componente en dicha dirección del campo eléctrico externo.

En la perturbación dependiente del tiempo debida a un campo eléctrico con un espaciamiento uniformemente alterno a un tiempo periódico propondremos la siguiente relación⁴²

$$H_t(t) = H(t) e^{\varepsilon t} \cos(\omega t).$$

Substituyendo (3.2.2) en la propuesta anterior, obtenemos que el operador en la representación de Heisenberg asociado a la perturbación dependiente del tiempo podemos caracterizarlo como

$$H_t(t) = - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} P_{\beta}(t) e^{\varepsilon t} \cos(\omega t). \quad (3.2.3)$$

De la relación en (3.2.3) y suponiendo como condición inicial que la densidad de corriente en ausencia del campo eléctrico externo corresponde a un termino nulo, obtenemos que el valor medio de dicha densidad (3.2.1) equivale a

$$\langle J_{\alpha} \rangle = - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(t'-t)}{i\hbar} \langle [J_{\alpha}(t'), P_{\beta}(t)] \rangle_0 e^{\varepsilon t} \cos \omega t dt. \quad (3.2.4)$$

La dependencia temporal de los operadores podemos expresarla a través de una sola variable temporal por lo que, procediendo de forma análoga a la obtención del resultado en (3.1.3) tenemos que

$$\langle [J_{\alpha}(t'), P_{\beta}(t)] \rangle_0 = \langle [J_{\alpha}, P_{\beta}(t-t')] \rangle_0.$$

⁴² Cf. Zubarev. p 168.

Definiendo $\tau = t - t'$ en la relación anterior e incorporándola en (3.2.4) así como expresando $\cos \omega t$ en términos de funciones exponenciales⁴³ obtenemos

$$\begin{aligned} \langle J_{\alpha} \rangle &= - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} e^{(i\omega+\varepsilon)t'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(-\tau)}{2ih} \langle [J_{\alpha}, P_{\beta}(\tau)] \rangle_0 e^{(i\omega+\varepsilon)\tau} d\tau \\ &\quad - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} e^{(-i\omega+\varepsilon)t'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(-\tau)}{2ih} \langle [J_{\alpha}, P_{\beta}(\tau)] \rangle_0 e^{(-i\omega+\varepsilon)\tau} d\tau. \end{aligned}$$

Notemos que los dos primeros términos en los integrandos corresponden según (3.1.7) a la función de Green retardada $G^R_{\alpha\beta}(0, \tau)$ por lo que,

$$\begin{aligned} \langle J_{\alpha} \rangle &= - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} e^{(i\omega+\varepsilon)t'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} G^R_{\alpha\beta}(0, \tau) e^{i(\omega-i\varepsilon)\tau} d\tau \\ &\quad - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} e^{(-i\omega+\varepsilon)t'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} G^R_{\alpha\beta}(0, \tau) e^{-i(\omega+i\varepsilon)\tau} d\tau \end{aligned}$$

ó bien, considerando la definición de la transformada de Fourier establecemos que

⁴³ Para $\tau = t - t'$ tenemos que $e^{\varepsilon t} \cos \omega t = (1/2)(e^{(i\omega+\varepsilon)(\tau+t')} + e^{(-i\omega+\varepsilon)(\tau+t')})$.

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{J}_\alpha \rangle = & - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \frac{1}{2} e^{(i\omega+\varepsilon)t'} G_{\alpha\beta}^R(0, -(\omega-i\varepsilon)) \\
 & - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \frac{1}{2} e^{(-i\omega+\varepsilon)t'} G_{\alpha\beta}^R(0, \omega+i\varepsilon). \quad (3.2.5)
 \end{aligned}$$

De (3.1.14) tenemos que $G_{\alpha\beta}^R(0, -(\omega-i\varepsilon)) = G_{\alpha\beta}^{R*}(0, \omega+i\varepsilon)$ por lo que la relación en (3.2.5) corresponde a

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{J}_\alpha \rangle = & - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \frac{1}{2} e^{(i\omega+\varepsilon)t'} G_{\alpha\beta}^{R*}(0, \omega+i\varepsilon) \\
 & - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \frac{1}{2} e^{(-i\omega+\varepsilon)t'} G_{\alpha\beta}^R(0, \omega+i\varepsilon).
 \end{aligned}$$

Finalmente, notemos que el primer término en la relación anterior equivale al conjugado del segundo término por lo que,

$$\langle \mathbf{J}_\alpha \rangle = - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \operatorname{Re} \left\{ e^{(-i\omega+\varepsilon)t'} G_{\alpha\beta}^R(0, \omega+i\varepsilon) \right\} \quad (3.2.6)$$

donde

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \omega+i\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{\alpha\beta}^R(0, \tau) e^{-i(\omega+i\varepsilon)\tau} d\tau.$$

La relación en (3.2.6) representa una aproximación lineal al valor medio de la densidad de corriente eléctrica en términos de la transformada de Fourier de la función de Green retardada para un sistema de partículas idénticas sometidas a un campo eléctrico externo alterno. En dicha relación tenemos que $-G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon)$ se define⁴⁴ como el tensor de conductividad eléctrica en el campo periódico donde el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ suele efectuarse después de tomar el límite termodinámico $V \rightarrow \infty$ (tal que $V/N = \text{cte.}$)

⁴⁴ Cf. Zubarev. p 170.

1904

3.3 CÁLCULO DE LA TRANSFORMADA DE FOURIER DE LA FUNCIÓN DE GREEN RETÁRDADA.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

La función de Green retardada $G_{\alpha\beta}^R(0, \tau)$ según la relación (3.1.7) corresponde a

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \tau) = \frac{1}{i\hbar} \theta(-\tau) \langle [\mathbf{J}_\alpha, \mathbf{P}_\beta(\tau)] \rangle_0.$$

Calculando la derivada con respecto a τ ,

$$\frac{d}{d\tau} G_{\alpha\beta}^R(0, \tau) = \frac{1}{i\hbar} \frac{d}{d\tau} \theta(-\tau) \langle [\mathbf{J}_\alpha, \mathbf{P}_\beta(\tau)] \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \theta(-\tau) \frac{d}{d\tau} \langle [\mathbf{J}_\alpha, \mathbf{P}_\beta(\tau)] \rangle_0.$$

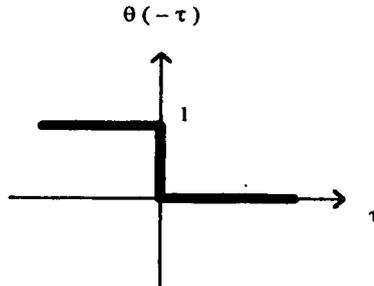
Suponiendo en la representación de Heisenberg a los vectores con los que caracterizamos los estados del sistema obtenemos,

$$\frac{d}{d\tau} \langle [\mathbf{J}_\alpha, \mathbf{P}_\beta(\tau)] \rangle_0 = \langle [\mathbf{J}_\alpha, \frac{d}{d\tau} \mathbf{P}_\beta(\tau)] \rangle_0.$$

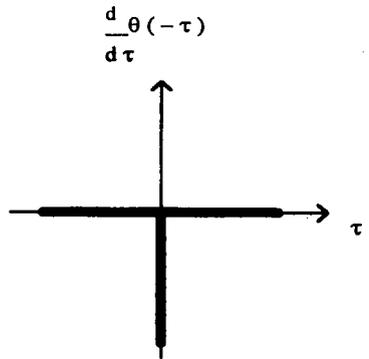
Aplicando la ecuación de evolución para el operador $\mathbf{P}_\beta(\tau)$ en la relación anterior establecemos que,

$$\frac{d}{d\tau} \langle [\mathbf{J}_\alpha, \mathbf{P}_\beta(\tau)] \rangle_0 = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathbf{J}_\alpha, [\mathbf{P}_\beta(\tau), \mathbf{H}']] \rangle_0. \quad (3.3.1)$$

Redefiniendo $\theta(-\tau)$ en términos de una función continua como se muestra en la siguiente figura ,



notamos que la derivada con respecto a τ corresponde a



La gráfica anterior representa precisamente al negativo de la función delta de Dirac por lo que proponemos la siguiente relación ,

$$\frac{d}{d\tau} \theta(-\tau) = -\delta(\tau) . \quad (3.3.2)$$

Substituyendo (3.3.1) y (3.3.2) en la derivada con respecto a τ de $G_{\alpha\beta}^R(0, \tau)$ tenemos que

$$\frac{d}{d\tau} G_{\alpha\beta}^R(0, \tau) = -\frac{\delta(\tau)}{i\hbar} \langle [J_{\alpha}, \mathbf{P}_{\beta}(\tau)] \rangle_0 + \frac{\theta(-\tau)}{(i\hbar)^2} \langle [J_{\alpha}, [\mathbf{P}_{\beta}(\tau), \mathbf{H}']] \rangle_0. \quad (3.3.3)$$

La relación en (3.3.3) corresponde a la ecuación de evolución de la función de Green retardada a partir de la cual obtendremos $G_{\alpha\beta}^R(0, \omega)$. Para ello multipliquemos dicha relación por $e^{-i\omega\tau}$ e integremos respecto a τ en $\langle -\infty, \infty \rangle$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{d\tau} G_{\alpha\beta}^R(0, \tau) e^{-i\omega\tau} d\tau = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(\tau)}{i\hbar} \langle [J_{\alpha}, \mathbf{P}_{\beta}(\tau)] \rangle_0 e^{-i\omega\tau} d\tau + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(-\tau)}{(i\hbar)^2} \langle [J_{\alpha}, [\mathbf{P}_{\beta}(\tau), \mathbf{H}']] \rangle_0 e^{-i\omega\tau} d\tau.$$

Resolviendo por partes la integral del miembro izquierdo considerando el caso en donde⁴⁵

$G_{\alpha\beta}^R(0, \tau \rightarrow \pm\infty) = 0$ y la definición de transformada de Fourier de la función de Green retardada

⁴⁵ De la relación en (3.1.7) y procediendo de forma análoga al resultado obtenido en (3.1.3) establecemos

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \tau) = \frac{1}{i\hbar} \theta(-\tau) \langle [J_{\alpha}, \mathbf{P}_{\beta}(\tau)] \rangle_0 = \frac{1}{i\hbar} \theta(-\tau) \langle [J_{\alpha}(-\tau), \mathbf{P}_{\beta}] \rangle_0.$$

Suponiendo que la densidad de corriente en el sistema considerado se debe exclusivamente a la aplicación del campo eléctrico externo y que desconectarlo da como "resultado" el que dicha densidad se aproxime a un término nulo, tenemos que $J_{\alpha}(-\tau \rightarrow \pm\infty) = 0$. Bajo dicho supuesto la relación anterior corresponde a

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \tau \rightarrow \pm\infty) = 0.$$

(3.1.9.a), así como aplicando la definición $\int \delta(\tau) f(\tau) d\tau = f(0)$ en la primera integral del miembro derecho, obtenemos que la relación anterior corresponde a

$$i\omega G_{\alpha\beta}^R(0, \omega) = -\frac{1}{i\hbar} \langle [J_\alpha, P_\beta] \rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(-\tau)}{(i\hbar)^2} \langle [J_\alpha, [P_\beta(\tau), H']] \rangle_0 e^{-i\omega\tau} d\tau. \quad (3.3.4)$$

La integral explícita en la relación anterior podemos resolverla "directamente" cuando los estados del sistema corresponden a estados propios del Hamiltoniano no perturbado ($H'|n\rangle = E_n|n\rangle$).

Comencemos caracterizando la traza del conmutador en el integrando, a partir de dicho supuesto.

$$\begin{aligned} \langle [J_\alpha, [P_\beta(\tau), H']] \rangle_0 &= \sum_n \langle n | \rho_0 J_\alpha [e^{iH'\tau/\hbar} P_\beta e^{-iH'\tau/\hbar}, H'] | n \rangle \\ &\quad - \sum_n \langle n | \rho_0 [e^{iH'\tau/\hbar} P_\beta e^{-iH'\tau/\hbar}, H'] J_\alpha | n \rangle. \end{aligned}$$

Substituyendo $\rho_0 = A e^{-H'/T}$ (distribución canónica principal), considerando que $[H', e^{\pm iH'\tau/\hbar}] = 0$

y los estados como propios del Hamiltoniano H' , tenemos que,

$$\begin{aligned} \langle [J_\alpha, [P_\beta(\tau), H']] \rangle_0 &= A \sum_n e^{-E_n/T} \langle n | J_\alpha e^{iH'\tau/\hbar} [P_\beta, H'] | n \rangle e^{-iE_n\tau/\hbar} \\ &\quad - A \sum_n e^{-E_n/T} e^{iE_n\tau/\hbar} \langle n | [P_\beta, H'] e^{-iH'\tau/\hbar} J_\alpha | n \rangle. \end{aligned}$$

Aplicando relación de completitud en ambas sumas y substituyendo los valores propios de H' ,

$$\langle [J_\alpha, [P_\beta(\tau), H']] \rangle_0 =$$

$$A \sum_{n,m} e^{-E_n/T} \langle n | J_\alpha | m \rangle e^{iE_m \tau / \hbar} \langle m | [P_\beta, H'] | n \rangle e^{-iE_n \tau / \hbar}$$

$$- A \sum_{n,m} e^{-E_n/T} e^{iE_n \tau / \hbar} \langle n | [P_\beta, H'] | m \rangle e^{-iE_m \tau / \hbar} \langle m | J_\alpha | n \rangle.$$

Intercambiando los subíndices en la segunda suma y factorizando,

$$\langle [J_\alpha, [P_\beta(\tau), H']] \rangle_0 =$$

$$A \sum_{n,m} \langle n | J_\alpha | m \rangle \langle m | [P_\beta, H'] | n \rangle (e^{-E_n/T} - e^{-E_m/T}) e^{i(E_m - E_n) \tau / \hbar}.$$

Por otro lado el elemento de matriz de $[P_\beta, H']$ corresponde a

$$\begin{aligned} \langle m | [P_\beta, H'] | n \rangle &= \langle m | P_\beta H' | n \rangle - \langle m | H' P_\beta | n \rangle \\ &= \langle m | P_\beta | n \rangle E_n - E_m \langle m | P_\beta | n \rangle \\ &= \langle m | P_\beta | n \rangle (E_n - E_m). \end{aligned}$$

Substituyendo esta expresión en la relación anterior obtenemos que,

$$\langle [J_\alpha, [P_\beta(\tau), H']] \rangle_0 = \sum_{n,m} I_{nm} (E_n - E_m) e^{i(E_m - E_n) \tau / \hbar} \quad (3.3.5)$$

donde

$$I_{nm} = A \langle n | J_\alpha | m \rangle \langle m | P_\beta | n \rangle (e^{-E_n/T} - e^{-E_m/T}).$$

En el caso de $\langle [J_\alpha, P_\beta] \rangle_0$ (primer término en la relación (3.3.4)) tenemos lo siguiente,

$$\langle [J_\alpha, P_\beta] \rangle_0 = A \sum_n e^{-E_n/T} \langle n | J_\alpha P_\beta | n \rangle - A \sum_n e^{-E_n/T} \langle n | P_\beta J_\alpha | n \rangle.$$

Aplicando relación de completez en ambas sumas e intercambiando los subíndices en la segunda, establecemos

$$\begin{aligned} \langle [J_\alpha, P_\beta] \rangle_0 &= A \sum_{n,m} e^{-E_n/T} \langle n | J_\alpha | m \rangle \langle m | P_\beta | n \rangle \\ &\quad - A \sum_{m,n} e^{-E_m/T} \langle m | P_\beta | n \rangle \langle n | J_\alpha | m \rangle \\ &= A \sum_{n,m} \langle n | J_\alpha | m \rangle \langle m | P_\beta | n \rangle (e^{-E_n/T} - e^{-E_m/T}) \end{aligned}$$

ó bien, considerando la definición en (3.3.5) obtenemos

$$\langle [J_\alpha, P_\beta] \rangle_0 = \sum_{n,m} I_{nm} \quad (3.3.6)$$

Substituyendo las relaciones (3.3.5) y (3.3.6) en (3.3.4) tenemos que

$$i\omega G_{\alpha\beta}^R(0, \omega) = \sum_{n,m} I_{nm} \left\{ -\frac{1}{ih} + \frac{E_n - E_m}{(ih)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(-\tau) e^{i\{[(E_m - E_n)/h] - \omega\}\tau} d\tau \right\}. \quad (3.3.7)$$

Realizando un cambio de variable ($\tau \rightarrow -t$) e incorporando ⁴⁶

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x+i\varepsilon} dx$$

en la integral presentada en la relación (3.3.7) obtenemos

⁴⁶ Dicha relación podemos exhibirla a través del cálculo de residuos, para ello notemos que la singularidad del integrando ($x_0 = -i\varepsilon$) corresponde a un polo simple pues satisface el siguiente criterio: llamemos $g(x) = \exp(-ixt)$ y $h(x) = x + i\varepsilon$ (estas funciones podemos expresarlas en series de potencias convergentes en x_0 , por lo que corresponden a funciones analíticas en dicho punto), puesto que $g(x_0) = \exp(-\varepsilon t) \neq 0$ (para t finita), $h(x_0) = 0$ y $h'(x_0) = 1$, la función $g(x)/h(x)$ tiene un polo simple en x_0 y su residuo corresponde a $g(x_0)/h'(x_0) = \exp(-\varepsilon t)$ (Cf. Marsden J. y Hoffman "Basic Complex Analysis" Segunda edición. Ed. Freeman and Company. Nueva York. 1987. Cap 4). Debido a que x_0 representa un punto en el eje imaginario tal que $\text{Im } x_0 < 0$ tenemos para $-t < 0$ (ó $t > 0$) que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x+i\varepsilon} dx = -2\pi i \sum \text{residuos} = -2\pi i e^{-\varepsilon t}$$

ó bien

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x+i\varepsilon} dx = e^{-\varepsilon t} \quad \text{para } t > 0, \quad (i)$$

mientras que para $t < 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x+i\varepsilon} dx = 2\pi i \sum \text{residuos} = 0 \quad \text{para } t < 0. \quad (ii)$$

Al calcular el tensor de conductividad consideraremos el límite $\varepsilon \rightarrow 0$, por lo que (i) y (ii) describen adecuadamente $\theta(t) = \{ 1 \text{ para } t > 0 \text{ y } 0 \text{ para } t < 0 \}$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta(-\tau) e^{i\{(E_m - E_n)/h - \omega\}\tau} d\tau = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (x + i\varepsilon)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\{(E_m - E_n)/h - \omega + x\}t} dt dx. \quad (3.3.8)$$

Por otro lado, considerando la representación de la función delta de Dirac⁴⁷

$$\delta(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\alpha t} dt$$

tenemos que, la integral en (3.3.8) corresponde a

⁴⁷ La transformada de Fourier de la función $\delta(\alpha)$ equivale a

$$F[\delta(\alpha)] = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\alpha) e^{-i\alpha t} d\alpha. \quad (i)$$

Considerando la definición $\int \delta(\alpha) f(\alpha) d\alpha = f(0)$ en (i) obtenemos,

$$F[\delta(\alpha)] = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\alpha) e^{-i\alpha t} d\alpha = e^{-i\alpha t}|_{\alpha=0} = 1.$$

Aplicando la transformada inversa de Fourier en la relación anterior,

$$F^{-1}F[\delta(\alpha)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha t} dt$$

ó bien

$$\delta(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha t} dt$$

Realizando el cambio de variable $\alpha \rightarrow -\alpha$ y puesto que $\delta(\alpha) = \delta(-\alpha)$ tenemos que una posible representación de la función delta de Dirac corresponde a

$$\delta(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\alpha t} dt.$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta(-\tau) e^{i\{[(E_m - E_n)/h] - \omega\}\tau} d\tau = i \int_{-\infty}^{\infty} (x + i\varepsilon)^{-1} \delta\{[(E_m - E_n)/h] - \omega + x\} dx.$$

Aplicando la definición de la función delta de Dirac utilizada en la caracterización de la relación en (3.3.4) establecemos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta(-\tau) e^{i\{[(E_m - E_n)/h] - \omega\}\tau} d\tau = i \{ \omega + i\varepsilon + [(E_n - E_m)/h] \}^{-1}.$$

Substituyendo la relación anterior en (3.3.7) obtenemos,

$$\begin{aligned} i \omega G_{\alpha\beta}^R(0, \omega) &= \sum_{n,m} I_{nm} \left\{ -\frac{1}{ih} + \frac{(E_n - E_m)}{(ih)^2} i \{ \omega + i\varepsilon + [(E_n - E_m)/h] \}^{-1} \right\} \\ &= \sum_{n,m} I_{nm} \frac{i}{h} \left\{ 1 - (E_n - E_m) \{ h(\omega + i\varepsilon) + E_n - E_m \}^{-1} \right\} \\ &= \sum_{n,m} I_{nm} \frac{i}{h} \left\{ h(\omega + i\varepsilon) \{ h(\omega + i\varepsilon) + E_n - E_m \}^{-1} \right\}. \end{aligned}$$

Expresando a " ω " de la forma " $\omega + i\varepsilon$ " tal que $\varepsilon \rightarrow 0$, el desarrollo anterior corresponde a

$$i(\omega + i\varepsilon) G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon) = \sum_{n,m} I_{nm} \frac{i}{h} \left\{ h(\omega + i2\varepsilon) \{ h(\omega + i2\varepsilon) + E_n - E_m \}^{-1} \right\}. \quad (3.3.9)$$

Despejando la transformada de Fourier de la función de Green retardada en la relación (3.3.9) y aproximando $(\omega + i2\varepsilon) / (\omega + i\varepsilon)$ a la unidad, obtenemos que,

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon) = \sum_{n,m} I_{nm} \{h(\omega + i2\varepsilon) + E_n - E_m\}^{-1}.$$

Substituyendo I_{nm} finalmente concluimos que

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon) = A \sum_{n,m} \frac{\langle n | J_{\alpha} | m \rangle \langle m | P_{\beta} | n \rangle}{h(\omega + i2\varepsilon) + E_n - E_m} (e^{-E_n/T} - e^{-E_m/T}). \quad (3.3.10)$$

Con el negativo de la relación anterior (sección 3.2) caracterizamos al tensor de conductividad a partir del cual podemos obtener una aproximación lineal en el valor medio de la densidad de corriente.

Alternativamente a dicha relación, podemos corresponder la transformada de Fourier de la función de Green retardada con una función proporcional a una serie de potencias en $(\omega + i\varepsilon)^{-1}$, prescindiendo explícitamente de los valores propios del Hamiltoniano no perturbado, lo que permite aproximar

$G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon)$ a través del cálculo de conmutadores entre los operadores J_{α} , P_{β} y H' como mostraremos a continuación.

La transformada de Fourier de la función de Green retardada con operadores J_{α} y $\frac{d}{dt} P_{\beta}(\tau)$ corresponde a

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(-\tau)}{i h} \langle [J_{\alpha}, \frac{d}{dt} P_{\beta}(\tau)] \rangle_0 e^{-i(\omega + i\varepsilon)\tau} d\tau.$$

Expresando (3.3.4) en términos de " $\omega + i\varepsilon$ " e incorporando la relación anterior, establecemos,

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon) = \frac{1}{h(\omega + i\varepsilon)} \langle [J_{\alpha}, P_{\beta}] \rangle_0 - \frac{i}{\omega + i\varepsilon} G_{\alpha\beta'}^R(0, \omega + i\varepsilon). \quad (3.3.11)$$

Aplicando iteradamente la caracterización anterior (en la primera iteración substituímos

P_{β} por $\frac{d}{d\tau} P_{\beta}$ mientras que $\frac{d}{d\tau} P_{\beta}(\tau)$ por $\frac{d^2}{d\tau^2} P_{\beta}(\tau)$) obtenemos

$$G_{\alpha\beta'}^R(0, \omega + i\varepsilon) = \frac{1}{h(\omega + i\varepsilon)} \langle [J_{\alpha}, \frac{d}{d\tau} P_{\beta}] \rangle_0 - \frac{i}{\omega + i\varepsilon} G_{\alpha\beta''}^R(0, \omega + i\varepsilon). \quad (3.3.12)$$

Substituyendo (3.3.12) en (3.3.11) y considerando la ecuación de evolución del operador P_{β}

tenemos que

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon) = \frac{1}{h(\omega + i\varepsilon)} \langle [J_{\alpha}, P_{\beta}] \rangle_0 - \frac{1}{[h(\omega + i\varepsilon)]^2} \langle [J_{\alpha}, [P_{\beta}, H']] \rangle_0 + \dots (3.3.13)$$

La relación en (3.3.13) permite caracterizar la transformada de Fourier de la función de Green retardada como una serie de potencias en $(\omega + i\varepsilon)^{-1}$ tal que para altas frecuencias podemos aproximarla como

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon) \approx \frac{1}{h(\omega + i\varepsilon)} \langle [J_{\alpha}, P_{\beta}] \rangle_0.$$

4 DENSIDAD DE CORRIENTE MEDIA EN UN SISTEMA CON ONDAS DE DENSIDAD DE CARGA (ODC).

En el presente capítulo exponemos las propiedades que describen a un sistema con ODC a partir de las cuales caracterizamos la masa asociada a la onda de densidad de carga (m^*) considerando la interacción (descrita por medio de una perturbación a primer orden) entre un electrón en la superficie de Fermi y un fonón con frecuencia ω_Q (donde $Q = 2k_f$), interacción que asociamos con el ancho del vado energético en el espectro del electrón a través de la relación que Fröhlich establece entre el número-C en el Hamiltoniano de interacción electrón-fonón y el ancho de dicho vado energético, la cual a su vez depende de la constante de interacción entre electrones y vibraciones de la red que aplicamos al caso de una vibración atómica con frecuencia ω_Q a $T = 0$ K.

A través de la masa asociada a la onda de densidad de carga caracterizamos al Hamiltoniano de un sistema con ODC, considerando a este último, como un sistema de fermiones libres con masa m^* . Así mismo, establecemos los correspondientes operadores densidad de corriente y vector de polarización en el caso de dichos sistemas, operadores con los que determinamos al tensor de conductividad (negativo de la transformada de Fourier de la función de Green retardada) en un sistema con ODC y a partir del cual obtenemos la caracterización de la densidad de corriente media.

4.1 ONDAS DE DENSIDAD DE CARGA .

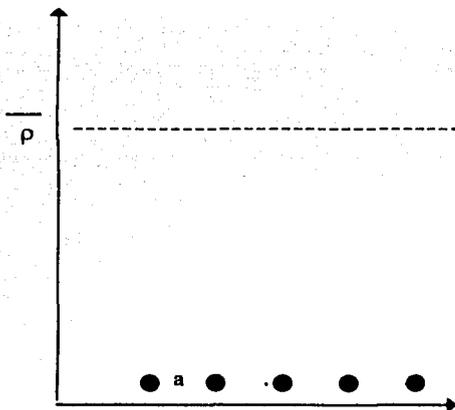
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Las ondas de densidad de carga podemos describirlas matemáticamente a través de la siguiente relación:

$$\rho(x) = \bar{\rho} + \rho_0 \cos(Qx + \phi) \quad (4.1.1)$$

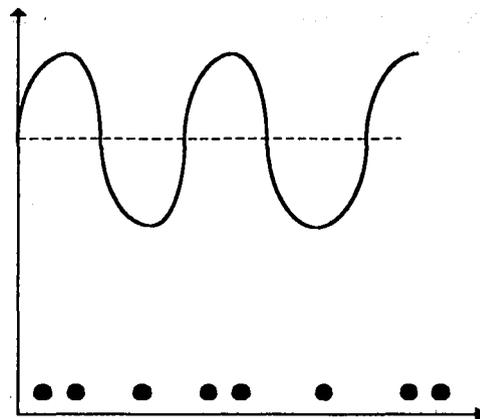
donde " $\bar{\rho}$ " representa una densidad uniforme de electrones, " ρ_0 " corresponde a la amplitud de la ODC, " $Q = 2k_F$ " el vector de onda y " ϕ " la fase de la onda relativa a una cadena uniforme de átomos separados inicialmente una distancia " a ", como se muestra a continuación.

$\rho(x)$



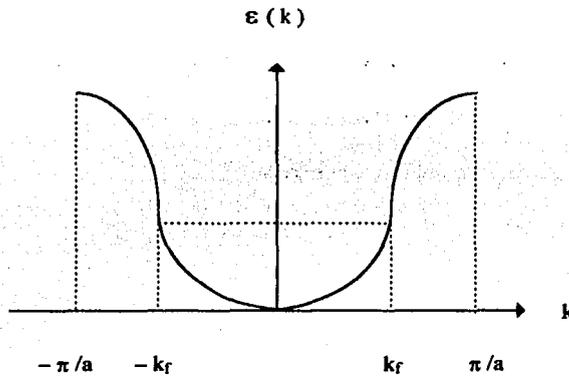
Densidad de electrones en un metal unidimensional.

$\rho(x)$

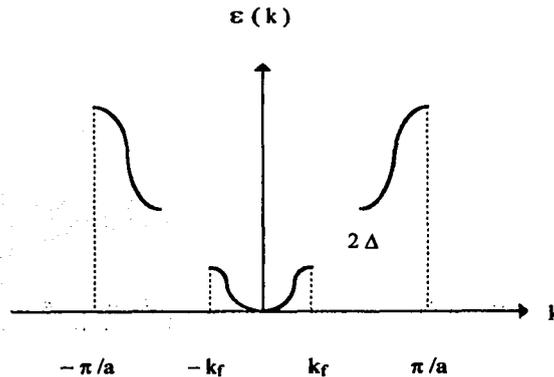


ODC en un metal unidimensional.

Los sistemas con ODC corresponden a metales cuasiunidimensionales tal que, el espectro energético de sus electrones presenta un vado energético a partir de la energía de Fermi debido a las variaciones en el potencial periódico de la red atómica. La formación del vado energético es acompañada de una disminución en la energía del sistema y los electrones se caracterizan en ocupar los niveles de energía menor ó igual a $\epsilon(k_f)$.



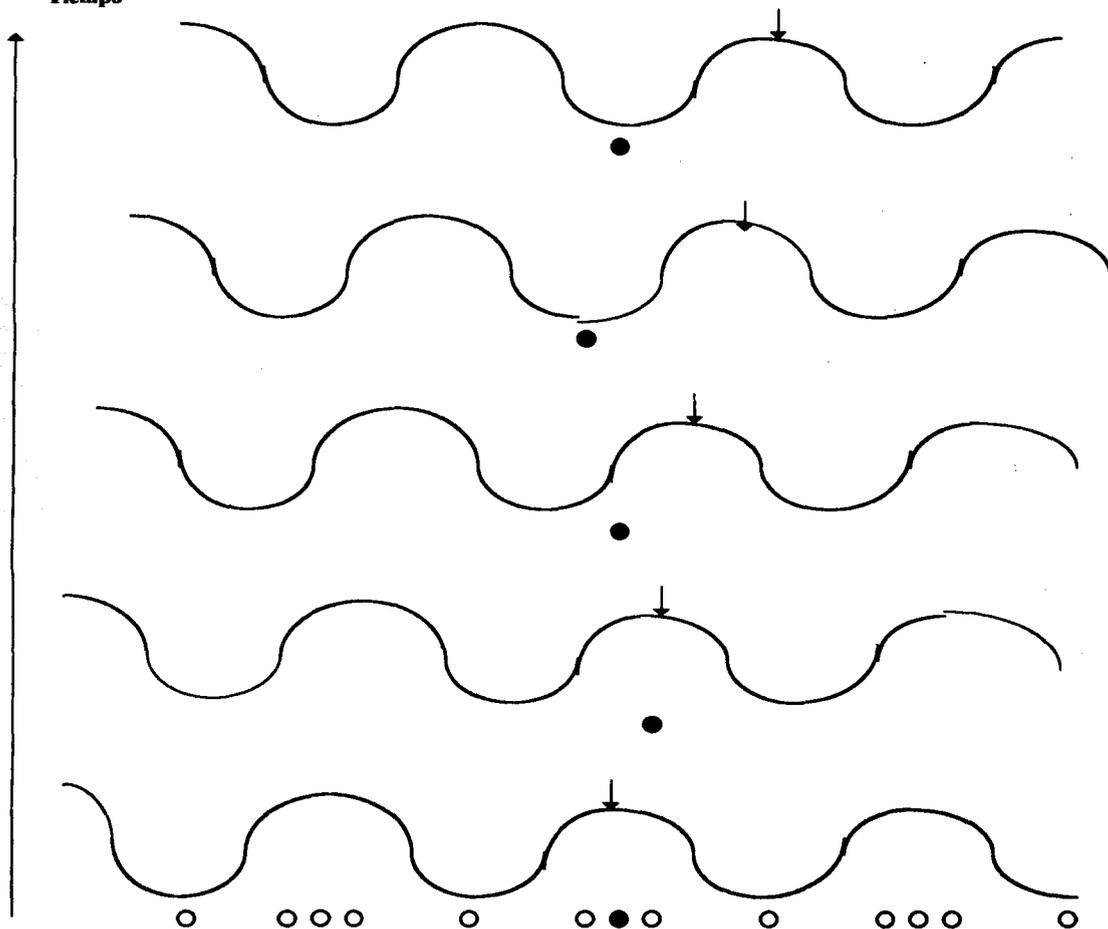
Espectro energético del electrón en un potencial periódico (primera zona de Brillouin).



Espectro energético del electrón en un sistema con ODC (2Δ corresponde al ancho del vado energético).

El vado energético y la restricción de que los electrones ocupen la mínima banda energética corresponden a características propias de los dieléctricos y semiconductores sin embargo, los sistemas con ODC presentan fenómenos colectivos en el transporte de carga ya que al aplicarles un campo eléctrico mayor al umbral (determinado por las impurezas en el material) las ODC pueden deslizarse de una posición relativa a la red, lo que permite caracterizar a los materiales que presentan dichas ondas como metales.

Tiempo



Transporte colectivo de la ODC al aplicar un campo eléctrico externo.

Las vibraciones normales en una cadena de átomos unidimensional , producen variaciones en el potencial periódico de la red atómica. En los sistemas con ODC estas vibraciones corresponden a modulaciones en las posiciones “ u_n ” de los átomos tal que $\delta u_n = \delta u \cos (Qx + \phi)$ (“ u ” representa la amplitud de la oscilación , “ $Q = 2 k_f$ ” el vector de onda y “ ϕ ” la fase que describe la posición del n -ésimo átomo). Estas modulaciones a su vez, producen modulaciones en la densidad de electrones de conducción (segundo término en la relación (4.1.1)). Algunos autores consideran que el acoplamiento entre dichas modulaciones, es decir, la formación de las ODC, se debe a la interacción entre los electrones y los fonones asociados a las vibraciones de la red , en distinción a aquellos que consideran la interacción entre electrones a través de fonones virtuales como la responsable de dicha formación.

Las ODC han sido observadas tanto en conductores orgánicos como inorgánicos (TTF - TCNQ , NbSe₃ , TaS₃ , (TaSe₄)₂ , K_{0.3}MoO₃ , (fluoranthene)₂ PF₆ , (perylene)₂ Au (maleonitriledithiolate)₂) siendo que, la temperatura a la que se forman dichas ondas podemos situarla entre 0 K y 350 K (dependiendo del conductor que consideremos) .

4.2 HAMILTONIANO ASOCIADO A UN SISTEMA CON ODC.

Los metales cuasiunidimensionales caracterizados a través de la energía cinética de los electrones, las vibraciones de la red monoatómica y la interacción electrón-fonón en el modelo de Fröhlich⁴⁸, podemos representarlos por medio del siguiente Hamiltoniano,

$$\mathbf{H} = \sum_m \varepsilon(m) \mathbf{b}_m^\dagger \mathbf{b}_m + \sum_q \omega_q \mathbf{c}_q^\dagger \mathbf{c}_q + i g \sum_{m,q} \mathbf{b}_{m+q}^\dagger \mathbf{b}_m (\mathbf{c}_q + \mathbf{c}_{-q}^\dagger) \quad (4.2.1)$$

donde con “ \mathbf{b}_m^\dagger , \mathbf{b}_m ” y “ \mathbf{c}_q^\dagger , \mathbf{c}_q ” denotamos a los operadores de creación y aniquilación asociados a fermiones (electrones) y bosones (fonones) respectivamente, mientras que “ g ” representa un número-C característico del material.

En los sistemas con ODC en la banda de energía de los electrones se origina un vado energético a partir de la energía de Fermi $\varepsilon(k_f)$ debido a distorsiones periódicas en el potencial de la red con vector de onda $Q = 2k_f$. Como los átomos en la red vibran con frecuencia ω_Q , caracterizaremos el estado asociado a la interacción electrón-fonón por medio de una perturbación a primer orden en donde la energía del fonón corresponda a $\hbar\omega_Q$, la cual denotaremos como ω_Q . A partir de dicho estado obtendremos el elemento de matriz del operador \mathbf{H} en (4.2.1), el cual nos permitirá caracterizar la energía del k -ésimo electrón perturbado $\varepsilon^{(1)}(k)$. Evaluando esta energía en $k = -k_f$ y proponiéndola como energía cinética, caracterizaremos la masa asociada al electrón con momento $-k_f$ que absorbe un fonón con energía ω_Q .

Considerando la relación establecida por Peierls-Fröhlich entre el ancho del vado energético y el número-C

⁴⁸ El término asociado a la interacción electrón-fonón corresponde al Hamiltoniano de Fröhlich, expuesto por Lee P.A., et. al. en “Conductivity from charge or spin density waves”. Solid State Communications, Vol. 14, p 703. 1974. Aunque el coeficiente del Hamiltoniano asociado a la interacción electrón-fonón equivale al producto entre un número-C y un término “ h_q ” asociado a las energías del electrón y del fonón (el cual exhibiremos más adelante), supondremos en (4.2.1) que “ g ” representa un número-C, lo que nos permitirá caracterizar la constante de interacción entre electrones y vibraciones de la red en unidades de “ h_Q ”. El número de átomos se incorpora posteriormente a través de dicha constante.

asociado a la interacción electrón-fonón, así como la constante de interacción entre los electrones y las vibraciones de la red con frecuencia ω_Q a $T = 0$ K, corresponderemos la masa del electrón perturbado con la masa asociada a la onda de densidad de carga (m^*). A través de esta masa caracterizaremos el Hamiltoniano de un sistema con ODC.

El estado asociado al k -ésimo electrón que absorbe un fonón con energía ω_Q , lo podemos caracterizar a través de una perturbación a primer orden como⁴⁹

(4.2.2)

$$|k; l_Q\rangle^{(1)} = |k; l_Q\rangle + \lambda \sum_{k'} |k' + Q; 0\rangle \langle k' + Q; 0 | H_{e-f} | k; l_Q\rangle (\epsilon_k + \omega_Q - \epsilon_{k+Q})^{-1}$$

donde λ representa un parámetro asociado al orden de la perturbación ó interacción electrón-fonón y H_{e-f} es el operador asociado a dicha interacción (ver relación (4.2.1)).

El elemento de matriz del operador H_{e-f} en (4.2.2) lo calculamos directamente considerando las caracterizaciones de los operadores de creación y aniquilación para bosones y fermiones establecidas en el capítulo 2, es decir,

$$\begin{aligned} \langle k' + Q; 0 | H_{e-f} | k; l_Q \rangle &= \\ &= i g \sum_{m, q} \{ \langle k' + Q; 0 | b_{m+q}^\dagger b_m c_q | k; l_Q \rangle + \langle k' + Q; 0 | b_{m+q}^\dagger b_m c_{-q}^\dagger | k; l_Q \rangle \} \\ &= i g \sum_{m, q} \{ \delta_{qQ} \delta_{mk} \langle k' + Q; 0 | m+q; 0 \rangle + \delta_{mk} \langle k' + Q; 0 | m+q; l_{-q}, l_Q \rangle \} \\ &= i g \{ \langle k' + Q; 0 | k+Q; 0 \rangle + \sum_q \langle k' + Q; 0 | k+q; l_{-q}, l_Q \rangle \} \end{aligned}$$

⁴⁹ Cf. Kittel C. "Quantum theory of solids." Editorial John Wiley and Sons. Segunda edición revisada. 1986. pp. 134-136. E.U.A. En la presente notación tenemos que la primera componente en $|k; l_Q\rangle$ representa un fermión (electrón) en el estado "k" y la segunda componente un bosón (fonón) en el estado "Q" por lo que, $|k; l_Q\rangle = |0, 0, \dots, n_k = 1, 0, 0, \dots\rangle |0, 0, \dots, n_Q = 1, 0, 0, \dots\rangle$.

Considerando las bases de bosones y fermiones ortonormalizadas a la unidad, tenemos que

$$\langle k'+Q; 0 | k+Q; 0 \rangle = \delta_{kk'} \quad \text{y} \quad \forall q \quad \langle k'+Q; 0 | k+q; 1_{-q}, 1_Q \rangle = 0.$$

Substituyendo dichas relaciones en el elemento de matriz del operador H_{e-f} obtenemos

$$\langle k'+Q; 0 | H_{e-f} | k; 1_Q \rangle = i g \delta_{kk'}. \quad (4.2.3)$$

Incorporando (4.2.3) en (4.2.2) establecemos que el estado asociado al k -ésimo electrón que absorbe un fonón con energía ω_Q corresponde a

$$| k; 1_Q \rangle^{(1)} = | k; 1_Q \rangle + i \lambda g (\varepsilon_k + \omega_Q - \varepsilon_{k+Q})^{-1} | k+Q; 0 \rangle. \quad (4.2.4)$$

Aplicando el operador en (4.2.1) al estado anterior,

$$\begin{aligned} H | k; 1_Q \rangle^{(1)} = & \sum_m \varepsilon(m) b_m^\dagger b_m | k; 1_Q \rangle + \sum_q \omega_q c_q^\dagger c_q | k; 1_Q \rangle \\ & + i g \sum_{m,q} b_{m+q}^\dagger b_m c_q | k; 1_Q \rangle + i g \sum_{m,q} b_{m+q}^\dagger b_m c_{-q}^\dagger | k; 1_Q \rangle \\ & + (\varepsilon_k + \omega_Q - \varepsilon_{k+Q})^{-1} \left\{ i \lambda g \sum_m \varepsilon(m) b_m^\dagger b_m | k+Q; 0 \rangle \right. \\ & + i \lambda g \sum_q \omega_q c_q^\dagger c_q | k+Q; 0 \rangle - \lambda g^2 \sum_{m,q} b_{m+q}^\dagger b_m c_q | k+Q; 0 \rangle \\ & \left. - \lambda g^2 \sum_{m,q} b_{m+q}^\dagger b_m c_{-q}^\dagger | k+Q; 0 \rangle \right\}. \quad (4.2.5) \end{aligned}$$

A su vez, aplicando los operadores de creación y aniquilación tanto para bosones como fermiones considerando sus correspondientes componentes en el vector de estado obtenemos de (4.2.5) que,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} |k; l_Q\rangle^{(1)} = & \sum_m \varepsilon(m) \delta_{mk} |m; l_Q\rangle + \sum_q \omega_q \delta_{qQ} |k; l_Q\rangle \\
 & + ig \sum_{m,q} \delta_{qQ} \delta_{mk} |m+q; 0\rangle + ig \alpha \sum_{m,q} \delta_{mk} |m+q; l_{-q}, l_Q\rangle \\
 & + (\varepsilon_k + \omega_Q - \varepsilon_{k+Q})^{-1} \left\{ i \lambda g \sum_m \varepsilon(m) \delta_{m, k+Q} |m; 0\rangle \right. \\
 & \left. - \lambda g^2 \sum_{m,q} \delta_{m, k+Q} |m+q; l_{-q}\rangle \right\},
 \end{aligned}$$

donde $\alpha = \{ 1 \text{ si } -q \neq Q \text{ y } \sqrt{2} \text{ si } -q = Q \}$.

Desarrollando las sumas en la relación anterior tomando en cuenta las deltas de Kronecker, obtenemos que el operador \mathbf{H} sobre el estado perturbado equivale a

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} |k; l_Q\rangle^{(1)} = & \varepsilon(k) |k; l_Q\rangle + \omega_Q |k; l_Q\rangle + ig |k+Q; 0\rangle + ig \alpha \sum_q |k+q; l_{-q}, l_Q\rangle \\
 & + (\varepsilon_k + \omega_Q - \varepsilon_{k+Q})^{-1} \left\{ i \lambda g \varepsilon(k+Q) |k+Q; 0\rangle - \lambda g^2 \sum_q |k+Q+q; l_{-q}\rangle \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.2.6}$$

De la relación (4.2.4), el conjugado del vector asociado a la perturbación corresponde a

$$\langle k; l_Q |^{(1)} = \langle k; l_Q | - i \lambda g (\varepsilon_k + \omega_Q - \varepsilon_{k+Q})^{-1} \langle k+Q; 0 |. \tag{4.2.7}$$

Aplicando (4.2.7) por la izquierda en la relación (4.2.6) y considerando los vectores ortonormalizados a la unidad tenemos que,

$$\begin{aligned} \langle k; l_Q | \mathbf{H} | k; l_Q \rangle^{(1)} &= \varepsilon(k) + \omega_Q + i g \alpha \sum_q \langle k; l_Q | k+q; l_{-q}, l_Q \rangle \\ &+ (\varepsilon_k + \omega_Q - \varepsilon_{k+Q})^{-1} \left\{ -\lambda g^2 \sum_q \langle k; l_Q | k+Q+q; l_{-q} \rangle + \lambda g^2 \right\} \\ &+ (\varepsilon_k + \omega_Q - \varepsilon_{k+Q})^{-2} (\lambda g)^2 \varepsilon(k+Q). \end{aligned}$$

El producto interno en el tercer término corresponde a cero pues si $-q=Q$ entonces $\langle k | k-Q \rangle = 0$ y para $-q \neq Q$ $\langle l_Q | l_{-q}, l_Q \rangle = 0$, mientras que el cuarto término (el único producto interno distinto de cero en dicho término lo tenemos en el caso $-q=Q$) equivale al negativo del siguiente. En este sentido el elemento de matriz del operador \mathbf{H} , es decir, la energía del sistema compuesto por el k -ésimo electrón, la vibración atómica con frecuencia ω_Q y la absorción del fonón (asociado a dicha vibración) por parte del electrón, corresponde a

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(1)}(k; l_Q) &= \langle k; l_Q | \mathbf{H} | k; l_Q \rangle^{(1)} \\ &= \varepsilon(k) + \omega_Q + (\varepsilon_k + \omega_Q - \varepsilon_{k+Q})^{-2} (\lambda g)^2 \varepsilon(k+Q). \end{aligned}$$

La relación anterior nos permite caracterizar la energía del k -ésimo electrón y su interacción con el fonón con número de onda $Q=2k_f$, la cual llamaremos $\varepsilon^{(1)}(k)$. Evaluando a dicha energía en $k=-k_f$ y considerando que $\varepsilon(-k_f) = (-k_f)^2/2m = \varepsilon(k_f)$, llegamos al siguiente resultado:

$$\varepsilon^{(1)}(-k_f) = [1 + (\lambda g/\omega_Q)^2] \varepsilon(k_f). \quad (4.2.8)$$

Proponiendo a $\varepsilon^{(1)}(-k_f)$ como la energía cinética del electrón con masa m^* (la cual depende de la interacción con el fonón) tenemos que $\varepsilon^{(1)}(-k_f) = (1/2) m^* v_f^2$. Substituyendo dicha caracterización y $\varepsilon(k_f) = (1/2) m v_f^2$ en (4.2.8),

$$m^* = [1 + (\lambda g / \omega_Q)^2] m . \quad (4.2.9)$$

La relación (4.2.9) podemos corresponderla con la masa asociada a la onda de densidad de carga considerando lo siguiente. La interacción entre electrones y fonones depende de las características del material, descritas a través de un número-C, que en el caso de fonones con frecuencia ω_Q definiremos como⁵⁰ $C = \langle c_Q + c_{-Q}^\dagger \rangle (D/2 \varepsilon_f)$ donde " c_Q y c_{-Q}^\dagger " representan respectivamente a operadores de aniquilación y creación que actúan sobre fonones con vector de onda $Q = 2k_f$, "D" corresponde a una constante de interacción y " ε_f " a la energía de Fermi. Por otro lado, en los sistemas con ODC los electrones se encuentran confinados dentro de la banda con energía menor ó igual a la de Fermi por lo que, las posibles excitaciones térmicas como resultado de la interacción con los fonones (pues sus frecuencias de oscilación corresponden a vibraciones térmicas) influirán inicialmente sobre los electrones que se encuentran en el tope de dicha banda. Considerando lo anterior, podemos restringir la interacción electrón-fonón al caso de los electrones con momento $\pm k_f$, lo que nos permite proponer la base $\{ |k_f; 1_Q\rangle^{(1)}, |-k_f; 1_Q\rangle^{(1)} \}$ para el cálculo de $\langle c_Q + c_{-Q}^\dagger \rangle$ que presentaremos a continuación.

⁵⁰ Cf. Fröhlich H. "On the theory of superconductivity: the one-dimensional case". Proc.R.Soc., Lond. A223, p 302. 1954.

Evaluando (4.2.4) en $k = k_f$ obtenemos,

$$|k_f; 1_Q\rangle^{(1)} = |k_f; 1_Q\rangle + i\lambda g (\varepsilon_f + \omega_Q - \varepsilon_{f+Q})^{-1} |k_f+Q; 0\rangle.$$

Aplicando el operador c_Q al vector anterior establecemos que,

$$c_Q |k_f; 1_Q\rangle^{(1)} = |k_f; 0\rangle. \quad (4.2.10)$$

La relación (4.2.7) evaluada en $k = -k_f$ corresponde a

$$\langle -k_f; 1_Q |^{(1)} = \langle -k_f; 1_Q | - (i\lambda g / \omega_Q) \langle k_f; 0 |. \quad (4.2.11)$$

De (4.2.10) y (4.2.11),

$$\langle -k_f; 1_Q | c_Q |k_f; 1_Q\rangle^{(1)} = - (i\lambda g / \omega_Q). \quad (4.2.12)$$

A través de procedimientos análogos al anterior obtenemos que los restantes elementos de matriz del operador c_Q y los elementos de matriz del operador c_{-Q}^\dagger corresponden a cero en la base $\{ |k_f; 1_Q\rangle^{(1)}, | -k_f; 1_Q\rangle^{(1)} \}$ por lo que, de (4.2.12) y suponiendo al estado del fonón ω_Q como único establecemos la siguiente igualdad, $\langle c_Q + c_{-Q}^\dagger \rangle = - (i\lambda g / \omega_Q)$. Calculando la norma al cuadrado de la relación anterior obtenemos, en la base propuesta, que $|\langle c_Q + c_{-Q}^\dagger \rangle|^2 = (\lambda g / \omega_Q)^2$. Incorporando esta última igualdad en (4.2.9) llegamos al siguiente resultado:

$$m^* = [1 + | \langle c_Q + c_{-Q}^\dagger \rangle |^2] m . \quad (4.2.13)$$

La interacción electrón-electrón a través de fonones virtuales da la posibilidad de que se formen pares ligados de electrones tal que la atracción entre ellos provoca que la energía total del sistema disminuya, siendo máximo este decrecimiento cuando los electrones ligados tienen momentos antiparalelos (pares de Cooper) y dando lugar a la formación de un vado energético cuya anchura 2Δ corresponde a la energía de disminución del sistema. El vado energético y la disminución de la energía del sistema son características que presentan los sistemas con ODC por lo que, podemos considerar la formación de pares de Cooper como representativo de dichos sistemas. Aunque en la caracterización de la masa en (4.2.13) partimos de la interacción electrón-fonón y no de la interacción electrón-electrón, en el cálculo de $| \langle c_Q + c_{-Q}^\dagger \rangle |^2$ supusimos como base de los estados perturbados a $\{ | k_f; 1_Q \rangle^{(1)}, | -k_f; 1_Q \rangle^{(1)} \}$, es decir, los electrones antiparalelos con momento k_f que interaccionan con el fonón ω_Q . Estos estados los interpretaremos como estados que representan indirectamente al par de Cooper k_f cuya energía de enlace corresponde a 2Δ , en este sentido $| \langle c_Q + c_{-Q}^\dagger \rangle |^2$ es una cantidad proporcional al cuadrado del ancho del vado energético. Para mostrar lo anterior, consideremos la relación que Fröhlich establece entre el ancho del vado energético y la norma del número-C, la cual corresponde a⁵¹ $2 |C| \epsilon_f = 2\Delta$. De la definición del número-C, $|C| = | \langle c_Q + c_{-Q}^\dagger \rangle | (D/2 \epsilon_f)$, por lo que de las igualdades anteriores obtenemos $| \langle c_Q + c_{-Q}^\dagger \rangle |^2 = 4\Delta^2 / D^2$. Substituyendo la última relación en (4.2.13) establecemos el siguiente resultado,

$$m^* = [1 + 4\Delta^2 / D^2] m . \quad (4.2.14)$$

⁵¹ Cf. Ibidem. p.303

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

La constante de interacción entre electrones y vibraciones de la red con frecuencia ω_Q a $T = 0$ K corresponde a⁵²

$$D^2 = \lambda E_Q^2 (\epsilon_Q / N_{el} E_Q) \quad (4.2.15)$$

donde " $\lambda = 2 F v / 3$ ", " F " representa un parámetro de interacción, " v " el número de electrones libres por átomo, " E_Q " la energía asociada a las vibraciones de la red con frecuencia ω_Q a $T = 0$ K y " ϵ_Q " la energía del electrón con vector de onda $Q = 2k_f$.

Por otro lado, el coeficiente del Hamiltoniano caracterizado por Fröhlich que representa la interacción electrón-fonón, tiene una dependencia en las energías asociadas al electrón y al fonón. Extrapolando esta última dependencia al caso de la energía asociada a las vibraciones de la red (incluyendo la energía del punto cero) obtenemos que el coeficiente del Hamiltoniano que representa la interacción electrón-red, en el caso de vibraciones con frecuencia ω_Q a $T = 0$ K, equivale a⁵³

⁵² Fröhlich expone la constante de interacción entre los electrones y las vibraciones de la red a través de la siguiente relación $D_q^2 = (4F/3N) \epsilon_f h q v_s$, donde " F " representa un parámetro de interacción, " N " el número de átomos, " q " el número de onda asociado a las vibraciones de la red y " v_s " la velocidad del sonido. Cf. Ibidem.p.300. Aplicando dicha constante de interacción en el caso $q = 2k_f$, expresándola en términos del número de electrones libres por átomo $v = N_{el} / N$ y de la constante $\lambda = 2Fv/3$ así como substituyendo $4\epsilon_f = \epsilon_Q$, tenemos que $D_Q^2 = D^2 = \lambda \epsilon_Q (hk_f v_s) / N_{el}$. Considerando que la energía asociada a las vibraciones de una cadena monoatómica con frecuencia ω_Q corresponde a $E_Q = h\omega_Q(n+1/2)$ tal que a $T = 0$ K, $n = 0$ y que $\omega_Q \approx 2k_f v_s$ (aproximación lineal), obtenemos $E_Q(T = 0$ K) = $hk_f v_s$. Tomando en cuenta lo anterior, la constante de interacción en el caso de las vibraciones de la red con frecuencia ω_Q a $T = 0$ K corresponde a $D^2 = \lambda E_Q^2 (\epsilon_Q / N_{el} E_Q)$.

⁵³ En el modelo de Fröhlich el Hamiltoniano asociado a la interacción electrón-fonón corresponde a

$$H_{int.} = \sum_{k, q} v_q (h/2 v \omega_q)^{1/2} b_{k+q}^\dagger b_k (c_q + c_{-q}^\dagger)$$

donde " ω_q " representa la frecuencia del fonón y " $v_q \sim |q|$ " la energía de la interacción entre los electrones y el potencial deformado de la red como resultado del movimiento de los átomos (la proporcionalidad de " v_q " en el número de onda " q " se origina como resultado de las interacciones Coulombianas entre los electrones). Cf. Zubarev D.N. et. al. "Nonequilibrium Statistical Thermodynamics". Studies in Soviet Science. Consultants Borea•New York-London. 1974. p.169. Evaluando al coeficiente

$$h_Q^2 = \epsilon_Q / N_{el} E_Q \quad (4.2.16)$$

Substituyendo la relación (4.2.16) en (4.2.15) obtenemos que,

$$D^2 = \lambda E_Q^2 h_Q^2 .$$

El coeficiente del Hamiltoniano asociado a la interacción electrón-fonón⁵⁴ lo podemos representar a través del producto entre un número-C y h_q . Como inicialmente caracterizamos a dicho coeficiente (ver relación (4.2.1)) en términos de un número-C , implícitamente supusimos al Hamiltoniano asociado a la interacción electrón-fonón en unidades de h_Q ($h_Q = 1$) por lo que , en nuestro caso la constante de interacción entre los electrones y las vibraciones de la red a $T = 0$ K (en unidades de h_Q) corresponde a

$$D^2 = \lambda E_Q^2 \quad (4.2.17)$$

(llamémosle h_q) del Hamiltoniano anterior en $q = Q$ tenemos que $h_Q = \hbar \nu_Q / (2 V \hbar \omega_Q)^{1/2}$.
Extrapolando dicho coeficiente al caso de la energía asociada a las vibraciones de la red incluyendo la energía del punto cero, proponemos $h_Q = \hbar \nu_Q / (2 V E_Q)^{1/2}$ donde $E_Q = \hbar \omega_Q (n + 1/2)$. Substituyendo $\nu_Q = |Q| / (\rho_{el})^{1/2}$ en h_Q y elevando al cuadrado obtenemos, $h_Q^2 = |hQ|^2 / 2\rho_{el} V E_Q$. Multiplicando la relación anterior por m / m (donde "m" representa la masa del electrón) , substituyendo $\rho_{el} = N_{el} m / V$ y considerando que $\epsilon_Q = |hQ|^2 / 2m$, llegamos a la siguiente igualdad $h_Q^2 = \epsilon_Q / N_{el} E_Q$.

⁵⁴ El Hamiltoniano asociado a la interacción electrón-fonón corresponde a

$$H_{c-f} = i C \sum_{k, q} h_q b_{k+q}^\dagger b_k (c_q - c_{-q}^\dagger)$$

donde $h_q = (2 \rho \omega_q)^{-1/2} |q|$. Cf. Kittel C. "Quantum Theory of Solids". Segunda edición revisada. Editorial John Wiley and Sons. New York. 1987. p. 133.

Substituyendo (4.2.17) en (4.2.14) obtenemos la masa asociada a la onda de densidad de carga⁵⁵, es decir,

$$m^* = [1 + 4\Delta^2 / \lambda E_Q^2] m \tag{4.2.18}$$

donde "2Δ" representa el ancho del vado energético, "E_Q" la energía asociada a la vibración de la red con frecuencia ω_Q a T = 0 K (E_Q = h ω_Q / 2) y "λ" corresponde a una constante que depende del parámetro de interacción "F" y el número de electrones libres por átomo "ν" (λ = 2Fν / 3).

La caracterización de m* corresponde a un término asociado a la masa de la partícula (electrón) y a un término asociado a la masa de la cuasipartícula resultante de la interacción entre el electrón y la variación en el potencial de la red debida a la vibración atómica con frecuencia ω_Q a T = 0 K por lo que, el objeto físico con dicha masa representa simultáneamente a una partícula y a una cuasipartícula tal que su caracterización en el espacio de número la supondremos a través de operadores asociados a fermiones⁵⁶. En este sentido, a través de la masa asociada a la onda de densidad de carga modelaremos al

⁵⁵ La masa asociada a la onda de densidad de carga equivale a la obtenida por Fröhlich en " On the theory of superconductivity: the one dimensional case ". Proc.R.Soc., Lond. A223, p.305. 1954. En dicho artículo caracteriza la masa "m₁" en términos del parámetro de interacción "F" a través de la siguiente relación (Fν / 3) m₁ν_s² = 16 ε_f e^{-3/Fν}. Incorporando λ = 2Fν / 3 y la masa (m) del electrón, obtenemos que la igualdad anterior equivale a m₁ / m = (4 ε_f e^{-1/λ})² / λ ε_f (mν_s² / 2). A su vez, Fröhlich caracteriza el ancho del vado energético como 2Δ = 8 ε_f e^{-1/λ} por lo que m₁ / m = Δ² / λ ε_f (mν_s² / 2). Considerando (ε_f) (mν_s² / 2) = (h² k_f² / 2m) (mν_s² / 2) = (h k_f ν_s)² / 4, ω_Q ≈ 2k_fν_s (aproximación lineal) y la energía asociada a la vibración de la red con frecuencia ω_Q a T = 0 K, es decir, E_Q = hω_Q / 2 obtenemos que m₁ / m = 4Δ² / λ E_Q². Definiendo la masa total asociada a la interacción como m* = m₁ + m tenemos que la relación anterior corresponde a m* / m = 1 + 4Δ² / λ E_Q².

⁵⁶ Eliminando la interacción electrón-red obtenemos que la masa m* corresponde a la masa asociada al electrón. Suponiendo que el tipo de partícula no varía al interaccionar con la red, representaremos a los objetos físicos con masa m* como fermiones. Al respecto cabe mencionar que si consideramos la interacción electrón-electrón a través de fonones virtuales, con la cual es posible obtener pares de Cooper representativos de un sistema con ODC, el tipo de partícula resultante sí varía pues satisface la estadística de Bose-Einstein.

sistema con ODC como un sistema de fermiones libres con masa m^* (y carga q), pues en dicha masa ya se encuentra caracterizada la interacción electrón-red representativa de dichos sistemas.

Considerando lo enunciado en el párrafo anterior, el Hamiltoniano H' en el caso de un sistema con ODC corresponde a

$$H' = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon^*(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \mu \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \quad (4.2.19)$$

donde " $\varepsilon^*(\mathbf{k})$ " representa al elemento de matriz asociado a la energía cinética del \mathbf{k} -ésimo fermión con masa m^* , la cual supondremos constante para todos los fermiones⁵⁷, a su vez " $b_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}}$ " corresponden respectivamente a operadores de creación y aniquilación que actúan sobre dichas partículas.

Así mismo, los operadores involucrados en el cálculo de la densidad de corriente media los consideraremos representativos de fermiones con masa m^* . En este sentido el operador densidad de corriente (2.4.5) equivale a

$$J_{\alpha}^* = (q/m^*) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{r}} (P_{\alpha})_{\mathbf{k}\mathbf{r}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{r}} \quad (4.2.20)$$

⁵⁷ Aunque dicho supuesto no satisface la dependencia de m^* en el vector de onda, propondremos la masa obtenida ($m^*(k_r)$) en la relación (4.2.18) como la masa representativa de un sistema con ODC y por ello de cada una de los fermiones en dicho sistema.

donde en (4.2.20) " $(P_\alpha)_{kr}$ " representa al elemento de matriz kr del momento en la dirección α del fermión con masa m^* y " b_k^\dagger, b_r " a operadores de creación y aniquilación que actúan sobre fermiones en una base arbitraria.

El operador asociado al vector de polarización en la perturbación lineal debida al campo eléctrico externo (2.5.11), en el caso de un sistema con ODC corresponde entonces a

$$P_\beta^* = q \sum_{s,t} (\beta)_{st} b_s^\dagger b_t \quad (4.2.21)$$

donde " $(\beta)_{st}$ " representa al elemento de matriz st de la β coordenada de un fermión con masa m^* y carga q , mientras que " b_s^\dagger, b_t " a operadores de creación y aniquilación que actúan sobre dichas partículas.

134

4.3 CARACTERIZACIÓN DEL VALOR MEDIO DE LA DENSIDAD DE CORRIENTE EN UN SISTEMA CON ODC.

El valor medio (considerando un desarrollo a primer orden en el operador asociado a la matriz de densidad) para un sistema de partículas idénticas perturbado por un campo eléctrico alterno ha sido caracterizado a través de la relación en (3.2.6) . A su vez, tenemos que dicha expresión depende de la transformada de Fourier de la función de Green retardada (ó negativo del tensor de conductividad) la cual podemos representar por medio de un desarrollo en serie de potencias en $(\omega + i\epsilon)^{-1}$ como se muestra en (3.3.13) . Para obtener la traza de los conmutadores exhibidos en dicho desarrollo (los operadores asociados caracterizan fermiones sin embargo con los corchetes asignamos un conmutador) consideremos la siguiente relación⁵⁸

$$[b_k^\dagger b_r, b_s^\dagger b_t] = \delta_{rs} b_k^\dagger b_t - \delta_{tk} b_s^\dagger b_r. \quad (4.3.1)$$

⁵⁸ Notemos lo siguiente,

$$[b_k^\dagger b_r, b_s^\dagger b_t] = b_k^\dagger b_r b_s^\dagger b_t - b_s^\dagger b_t b_k^\dagger b_r.$$

En el caso de fermiones $b_m b_n^\dagger = \delta_{mn} - b_n^\dagger b_m$, por lo que la relación anterior corresponde a

$$\begin{aligned} [b_k^\dagger b_r, b_s^\dagger b_t] &= b_k^\dagger (\delta_{rs} - b_s^\dagger b_r) b_t - b_s^\dagger (\delta_{tk} - b_k^\dagger b_t) b_r \\ &= \delta_{rs} b_k^\dagger b_t - b_k^\dagger b_s^\dagger b_r b_t - \delta_{tk} b_s^\dagger b_r + b_s^\dagger b_k^\dagger b_t b_r. \quad (i) \end{aligned}$$

Aplicando relaciones de anticonmutación ($b_k^\dagger b_k^\dagger = -b_k^\dagger b_k^\dagger$ y $b_r b_t = -b_t b_r$) en el segundo término en (i) obtenemos que corresponde al negativo del cuarto término, por lo que

$$[b_k^\dagger b_r, b_s^\dagger b_t] = \delta_{rs} b_k^\dagger b_t - \delta_{tk} b_s^\dagger b_r.$$

Representando los operadores \mathbf{J}_α^* y \mathbf{P}_β^* a través de las relaciones (4.2.20) y (4.2.21)

respectivamente, la traza del primer término en la transformada de Fourier de la función de Green retardada (3.3.13) en el caso de un sistema con ODC corresponde a

$$\langle [\mathbf{J}_\alpha^*, \mathbf{P}_\beta^*] \rangle_0 = (q^2 / m^*) \sum_{k, r, s, t} (P_\alpha)_{kr} (\beta)_{st} \langle [\mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_t] \rangle_0.$$

Substituyendo la relación (4.3.1) en la expresión anterior obtenemos

$$\begin{aligned} \langle [\mathbf{J}_\alpha^*, \mathbf{P}_\beta^*] \rangle_0 &= (q^2 / m^*) \sum_{k, r, s, t} (P_\alpha)_{kr} (\beta)_{st} \{ \delta_{rs} \langle \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_t \rangle_0 - \delta_{tk} \langle \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_r \rangle_0 \} \\ &= (q^2 / m^*) \{ \sum_{k, s, t} (P_\alpha)_{ks} (\beta)_{st} \langle \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_t \rangle_0 - \sum_{r, s, t} (P_\alpha)_{tr} (\beta)_{st} \langle \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_r \rangle_0 \}. \end{aligned}$$

Escribiendo los elementos de matriz en forma explícita,

$$\begin{aligned} \langle [\mathbf{J}_\alpha^*, \mathbf{P}_\beta^*] \rangle_0 &= (q^2 / m^*) \left\{ \sum_{k, t} \langle \mathbf{L}_k | \mathbf{P}_\alpha \sum_s | \mathbf{L}_s \rangle \langle \mathbf{L}_s | \beta | \mathbf{L}_t \rangle \langle \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_t \rangle_0 \right. \\ &\quad \left. - \sum_{r, s} \langle \mathbf{L}_s | \beta \sum_t | \mathbf{L}_t \rangle \langle \mathbf{L}_t | \mathbf{P}_\alpha | \mathbf{L}_r \rangle \langle \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_r \rangle_0 \right\}. \end{aligned}$$

Aplicando relación de completéz en la expresión anterior:

$$\begin{aligned} \langle [J_{\alpha}^*, P_{\beta}^*] \rangle_0 &= (q^2 / m^*) \left\{ \sum_{k,t} \langle L_k | P_{\alpha} \beta | L_t \rangle \langle b_k^{\dagger} b_t \rangle_0 \right. \\ &\quad \left. - \sum_{r,s} \langle L_s | \beta P_{\alpha} | L_r \rangle \langle b_s^{\dagger} b_r \rangle_0 \right\}. \end{aligned}$$

Realizando cambio de variables mudas en el segundo término ($s \rightarrow k$, $r \rightarrow t$) y factorizando, obtenemos

$$\langle [J_{\alpha}^*, P_{\beta}^*] \rangle_0 = (q^2 / m^*) \sum_{k,t} \langle L_k | [P_{\alpha}, \beta] | L_t \rangle \langle b_k^{\dagger} b_t \rangle_0.$$

Puesto que los operadores de momento y posición satisfacen la relación $[P_{\alpha}, \beta] = -i \hbar \delta_{\alpha\beta}$ establecemos,

$$\langle [J_{\alpha}^*, P_{\beta}^*] \rangle_0 = (q^2 / m^*) \sum_{k,t} (-i \hbar \delta_{\alpha\beta}) \langle L_k | L_t \rangle \langle b_k^{\dagger} b_t \rangle_0.$$

La base $\{ | L_n \rangle \}$ inicialmente la supusimos ortonormalizada a la unidad (2.2.4) por lo que,

$$\begin{aligned} \langle [J_{\alpha}^*, P_{\beta}^*] \rangle_0 &= (-i \hbar q^2 / m^*) \delta_{\alpha\beta} \sum_{k,t} \delta_{kt} \langle b_k^{\dagger} b_t \rangle_0 \\ &= (-i \hbar q^2 / m^*) \delta_{\alpha\beta} \sum_k \langle b_k^{\dagger} b_k \rangle_0. \end{aligned}$$

Substituyendo la caracterización del operador de número del k -ésimo fermión con masa m^* , la expresión anterior corresponde a

$$\langle [J_{\alpha}^*, P_{\beta}^*] \rangle_0 = (-i \hbar q^2 / m^*) \delta_{\alpha\beta} \sum_k \langle n_k \rangle_0. \quad (4.3.2)$$

En la relación (4.3.2), $\langle n_k \rangle_0$ representa el promedio del operador de número del k -ésimo fermión con masa m^* considerando una distribución canónico principal, el cual corresponderemos con la función de distribución Fermi-Dirac⁵⁹ tal que, a $T = 0 \text{ K}$ $\langle n_k \rangle_0 = 1$ si $k_f \geq k$ y $\langle n_k \rangle_0 = 0$ si $k_f < k$. En este sentido la suma de $\langle n_k \rangle_0$ a $T = 0 \text{ K}$ equivale al número total de fermiones con energía menor-igual a la de Fermi, es decir, al número total (N) de fermiones⁶⁰ por lo que,

$$\langle [J_{\alpha}^*, P_{\beta}^*] \rangle_0 = (-i \hbar q^2 N / m^*) \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.3.3)$$

⁵⁹ Al modelar el sistema con ODC como un sistema de fermiones libres con masa m^* , representamos a dicho sistema como un sistema de fermiones sin interacción (la interacción con la red previamente la incorporamos al objeto físico con masa m^*). El promedio del operador de número del k -ésimo fermión sin interacción en una distribución canónico principal corresponde a la función de distribución Fermi-Dirac. Cf. Cabrera M. "Modelo de jalea deformable para el gas de electrones a temperatura finita". Tesina para exámenes predoctorales. I.P.N. Agosto de 1998. pp. 19-22.

⁶⁰ A $T = 0 \text{ K}$ todos los fermiones libres podemos caracterizarlos a través de energías menores ó iguales a la de Fermi (E_f) pues la distribución de electrones obedece la siguiente representación $\rho(E_n) = \{ 1 \text{ para } E_n \leq E_f \text{ y } 0 \text{ para } E_n > E_f \}$. La suma sobre $\langle n_k \rangle_0$ a $T = 0 \text{ K}$ corresponde entonces al número total de fermiones libres.

Para el caso en donde $T > 0 \text{ K}$ los fermiones cercanos al nivel de Fermi se excitan pasando a niveles energéticamente mayores (no ocupados inicialmente). En dicho caso $\langle n_k \rangle_0$ suele establecerse a través de aproximaciones. Cf. Ibidem. pp.22-24.

En la determinación de la traza de los conmutadores en los términos de orden "superior" de la transformada de Fourier de la función de Green retardada, consideraremos el Hamiltoniano asociado a un sistema con ODC caracterizado en (4.2.19), el cual representaremos en una base arbitraria a través del siguiente operador,

$$\mathbf{H}' = \sum_{n,m} \gamma_{nm} \mathbf{b}_n^\dagger \mathbf{b}_m \quad (4.3.4)$$

donde " \mathbf{b}_n^\dagger y \mathbf{b}_m " corresponden respectivamente a operadores de creación y aniquilación asociados a fermiones y con " γ_{nm} " denotamos al elemento de matriz $n m$ del operador asociado a la energía cinética de los fermiones con masa m^* ó al potencial químico del sistema.

Para calcular $\langle [\mathbf{J}_\alpha^*, [\mathbf{P}_\beta^*, \mathbf{H}']] \rangle_0$ primero obtendremos el conmutador interno. Por lo que de (4.3.4) y representando \mathbf{P}_β^* en términos de la relación en (4.2.21) establecemos que

$$[\mathbf{P}_\beta^*, \mathbf{H}'] = q \sum_{s,t,n,m} (\beta)_{st} \gamma_{nm} [\mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_t, \mathbf{b}_n^\dagger \mathbf{b}_m].$$

Considerando la relación en (4.3.1) obtenemos que el conmutador anterior corresponde a

$$[\mathbf{P}_\beta^*, \mathbf{H}'] = q \sum_{s,t,n,m} (\beta)_{st} \gamma_{nm} \{ \delta_{tn} \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_m - \delta_{ms} \mathbf{b}_n^\dagger \mathbf{b}_t \}$$

$$[\mathbf{P}_{\beta^*}, \mathbf{H}'] = q \left\{ \sum_{s, n, m} (\beta)_{sn} \gamma_{nm} \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_m - \sum_{t, n, m} (\beta)_{mt} \gamma_{nm} \mathbf{b}_n^\dagger \mathbf{b}_t \right\}.$$

Realizando cambio de variables mudas en la segunda suma ($n \rightarrow s, t \rightarrow m, m \rightarrow n$) y factorizando,

$$[\mathbf{P}_{\beta^*}, \mathbf{H}'] = q \sum_{s, n, m} \{ (\beta)_{sn} \gamma_{nm} - (\beta)_{nm} \gamma_{sn} \} \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_m.$$

De la relación anterior y expresando \mathbf{J}_{α^*} como en (4.2.20) obtenemos

$$[\mathbf{J}_{\alpha^*}, [\mathbf{P}_{\beta^*}, \mathbf{H}']] = (q^2/m^*) \sum_{k, r, s, n, m} (P_{\alpha})_{kr} \{ (\beta)_{sn} \gamma_{nm} - (\beta)_{nm} \gamma_{sn} \} [\mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_r, \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_m].$$

Nuevamente considerando la relación en (4.3.1) tenemos que,

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}_{\alpha^*}, [\mathbf{P}_{\beta^*}, \mathbf{H}']] &= (q^2/m^*) \sum_{k, r, s, n, m} (P_{\alpha})_{kr} \{ (\beta)_{sn} \gamma_{nm} - (\beta)_{nm} \gamma_{sn} \} \{ \delta_{rs} \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_m - \delta_{mk} \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_r \} \\ &= (q^2/m^*) \left\{ \sum_{k, s, n, m} (P_{\alpha})_{ks} (\beta)_{sn} \gamma_{nm} \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_m \right. \\ &\quad - \sum_{k, s, n, m} (P_{\alpha})_{ks} (\beta)_{nm} \gamma_{sn} \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{b}_m \\ &\quad - \sum_{r, s, n, m} (P_{\alpha})_{mr} (\beta)_{sn} \gamma_{nm} \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_r \\ &\quad \left. + \sum_{r, s, n, m} (P_{\alpha})_{mr} (\beta)_{nm} \gamma_{sn} \mathbf{b}_s^\dagger \mathbf{b}_r \right\}. \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

Commutando y escribiendo los elementos de matriz en forma explícita tenemos que la relación en (4.3.5) corresponde a

$$\begin{aligned}
 [J_{\alpha}^*, [P_{\beta}^*, H']] &= (q^2/m^*) \left\{ \sum_{k,m} \langle L_k | P_{\alpha} \sum_s | L_s \rangle \langle L_s | \beta \sum_n | L_n \rangle \langle L_n | \gamma | L_m \rangle b_{k,m}^{\dagger} \right. \\
 &\quad - \sum_{k,m} \langle L_k | P_{\alpha} \sum_s | L_s \rangle \langle L_s | \gamma \sum_n | L_n \rangle \langle L_n | \beta | L_m \rangle b_{k,m}^{\dagger} \\
 &\quad - \sum_{s,r} \langle L_s | \beta \sum_n | L_n \rangle \langle L_n | \gamma \sum_m | L_m \rangle \langle L_m | P_{\alpha} | L_r \rangle b_{s,r}^{\dagger} \\
 &\quad \left. + \sum_{s,r} \langle L_s | \gamma \sum_n | L_n \rangle \langle L_n | \beta \sum_m | L_m \rangle \langle L_m | P_{\alpha} | L_r \rangle b_{s,r}^{\dagger} \right\}.
 \end{aligned}$$

Aplicando relación de completéz, realizando cambio de variables mudas ($s \rightarrow k$, $r \rightarrow m$) en la tercera y cuarta suma así como factorizando,

$$\begin{aligned}
 [J_{\alpha}^*, [P_{\beta}^*, H']] &= (q^2/m^*) \sum_{k,m} \langle L_k | P_{\alpha} \beta \gamma - P_{\alpha} \gamma \beta - \beta \gamma P_{\alpha} + \gamma \beta P_{\alpha} | L_m \rangle b_{k,m}^{\dagger} \\
 &= (q^2/m^*) \sum_{k,m} \langle L_k | P_{\alpha} [\beta, \gamma] - [\beta, \gamma] P_{\alpha} | L_m \rangle b_{k,m}^{\dagger} \\
 &= (q^2/m^*) \sum_{k,m} \langle L_k | [P_{\alpha}, [\beta, \gamma]] | L_m \rangle b_{k,m}^{\dagger}. \quad (4.3.6)
 \end{aligned}$$

Considerando la "identidad de Jacobi" y que $[P_{\alpha}, \beta] = -i\hbar \delta_{\alpha\beta}$ establecemos que⁶¹

⁶¹ De la "identidad de Jacobi" tenemos que,

$$[\mathbf{P}_\alpha, [\beta, \gamma]] = [[\gamma, \mathbf{P}_\alpha], \beta].$$

Substituyendo la relación anterior en (4.3.6) obtenemos

$$[\mathbf{J}_\alpha^*, [\mathbf{P}_\beta^*, \mathbf{H}']] = (\hbar^2/m^*) \sum_{k,m} \langle \mathbf{L}_k | [[\gamma, \mathbf{P}_\alpha], \beta] | \mathbf{L}_m \rangle b_k^\dagger b_m. \quad (4.3.7)$$

En el caso donde γ represente el operador asociado a la energía cinética de los fermiones con masa m^* ($\gamma = \mathbf{p}^2/2m^*$) ó el potencial químico del sistema⁶² ($\gamma = \mu$),

$$\langle [\mathbf{J}_\alpha^*, [\mathbf{P}_\beta^*, \mathbf{H}']] \rangle_0 = 0. \quad (4.3.8)$$

$$[\mathbf{P}_\alpha, [\beta, \gamma]] + [\beta, [\gamma, \mathbf{P}_\alpha]] + [\gamma, [\mathbf{P}_\alpha, \beta]] = 0.$$

Como $[\mathbf{P}_\alpha, \beta] = -i\hbar \delta_\alpha \beta$ el tercer término corresponde a "cero" por lo que la relación anterior equivale a

$$[\mathbf{P}_\alpha, [\beta, \gamma]] = -[\beta, [\gamma, \mathbf{P}_\alpha]].$$

Finalmente, considerando que $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = -[\mathbf{B}, \mathbf{A}]$ concluimos que

$$[\mathbf{P}_\alpha, [\beta, \gamma]] = [[\gamma, \mathbf{P}_\alpha], \beta].$$

⁶² Si γ corresponde a la energía cinética de los fermiones $[\gamma, \mathbf{P}_\alpha] = [\mathbf{p}^2/2m^*, \mathbf{P}_\alpha] = 0$, mientras que si γ representa al potencial químico $[\gamma, \mathbf{P}_\alpha] = [\mu, \mathbf{P}_\alpha] = 0$. De la relación en (4.3.7) obtenemos que $[\mathbf{J}_\alpha^*, [\mathbf{P}_\beta^*, \mathbf{H}']] = 0$ ó bien $\langle [\mathbf{J}_\alpha^*, [\mathbf{P}_\beta^*, \mathbf{H}']] \rangle_0 = 0$.

A través de construcciones análogas a la anterior podemos proponer que la traza de los conmutadores presentes en los términos de orden "superior" en la transformada de Fourier de la función de Green retardada corresponde a "cero"⁶³. Considerando lo anterior y substituyendo la relación (4.3.3) en el desarrollo en serie de potencias de la transformada de Fourier de la función de Green retardada (3.3.13) obtenemos a $T = 0$ K que

$$G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon) = \{-i q^2 N / m^* (\omega + i\varepsilon)\} \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.3.9)$$

De la relación (4.3.9) establecemos que el tensor de conductividad ($\lim \varepsilon \rightarrow 0$ de $-G_{\alpha\beta}^R(0, \omega + i\varepsilon)$) para un sistema con ODC modelado a través de un sistema de fermiones libres con masa m^* y perturbado por un campo eléctrico alterno con frecuencia ω (a $T = 0$ K) corresponde a

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \{i q^2 N / m^* \omega\} \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.3.10)$$

donde "q" representa la carga del electrón, " m^* " la masa asociada a la ODC caracterizada en (4.2.18) y "N" el número total de fermiones libres con dicha masa.

⁶³ Por ejemplo: en el siguiente término de la transformada de Fourier de la función de Green retardada tendríamos que calcular $[P_{\alpha}, [[\beta, \gamma_1], \gamma_1]], [P_{\alpha}, [[\beta, \gamma_2], \gamma_2]], [P_{\alpha}, [[\beta, \gamma_1], \gamma_2]]$ y $[P_{\alpha}, [[\beta, \gamma_2], \gamma_1]]$ donde $\gamma_1 = \mu$ y $\gamma_2 = P^2 / 2m^*$. Notemos que $[\beta, \gamma_1] = [\beta, \mu] = 0$ y $[\beta, \gamma_2] = (2m^*)^{-1}[\beta, P^2] = (2m^*)^{-1}\{P[\beta, P] + [\beta, P]P\} = (2m^*)^{-1}\{Pih + ihP\} = ihP/m^*$ por lo que, $[[\beta, \gamma_2], \gamma_2] = [ihP/m^*, P^2/2m^*] = 0$ y $[[\beta, \gamma_2], \gamma_1] = [ihP/m^*, \mu] = 0$. De lo anterior tenemos que los conmutadores en el siguiente término de la transformada de Fourier de la función de Green retardada corresponden a "cero".

Aplicando la relación (4.3.9) en el valor medio de la densidad de corriente (3.2.6) obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}_\alpha^* \rangle &= - \sum_{\beta=1}^3 E_{0\beta} \operatorname{Re} \left\{ -i e^{(-i\omega + \varepsilon)t'} q^2 N / m^* (\omega + i\varepsilon) \right\} \delta_{\alpha\beta} \\ &= (q^2 N / m^*) E_{0\alpha} \operatorname{Re} \left\{ i e^{(-i\omega + \varepsilon)t'} / (\omega + i\varepsilon) \right\}. \end{aligned}$$

Desarrollando el término entre corchetes considerando que $(\omega + i\varepsilon)^{-1} = (\omega - i\varepsilon) / (\omega^2 + \varepsilon^2)$

llegamos a la siguiente expresión,

$$i e^{(-i\omega + \varepsilon)t'} / (\omega + i\varepsilon) = \left\{ e^{\varepsilon t'} / (\omega^2 + \varepsilon^2) \right\} \left\{ \omega \operatorname{sen} \omega t' + \varepsilon \cos \omega t' + i (\omega \cos \omega t' - \varepsilon \operatorname{sen} \omega t') \right\},$$

tomando la parte real en dicha relación tenemos que el valor medio de la densidad de corriente podemos representarlo como

$$\langle \mathbf{J}_\alpha^* \rangle = (q^2 N / m^*) \left\{ e^{\varepsilon t'} / (\omega^2 + \varepsilon^2) \right\} \left\{ \omega \operatorname{sen} \omega t' + \varepsilon \cos \omega t' \right\} E_{0\alpha}.$$

Evaluando el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ obtenemos

$$\langle \mathbf{J}_\alpha^* \rangle = (q^2 N / m^* \omega) E_{0\alpha} \operatorname{sen} \omega t'. \quad (4.3.11)$$

La relación en (4.3.11) expresa la densidad de corriente media en la dirección α para un sistema con ODC caracterizada a través de "N" fermiones libres con masa "m*" y carga "q", perturbado por un campo eléctrico alterno con frecuencia " ω " e intensidad constante " $E_{0\alpha}$ " a $T = 0$ K.

Por otro lado, notemos que los términos de orden “superior” corresponden a “cero” independientemente de la temperatura del sistema (4.3.8) por lo que substituyendo la relación (4.3.2) en el desarrollo en serie de potencias de la transformada de Fourier de la función de Green retardada (3.3.13) obtenemos a $T \geq 0$ K que el tensor de conductividad corresponde a

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \{ i q^2 \sum_k \langle n_{k>0} / m^* \omega \} \delta_{\alpha\beta}.$$

Finalmente, considerando la relación anterior y procediendo de forma análoga que en la caracterización de la relación (4.3.11) concluimos que el valor medio de la densidad de corriente a $T \geq 0$ K equivale a

$$\langle J_{\alpha}^* \rangle = (q^2 \sum_k \langle n_{k>0} / m^* \omega) E_{0\alpha} \text{ sen } \omega t' \quad (4.3.12)$$

donde “q” representa la carga del electrón, “m^{*}” la masa de la ODC caracterizada en (4.3.18), “ $\langle n_{k>0} \rangle$ ” el número de fermiones con masa m^{*} en el estado k a temperatura T (tal que a T = 0 K la suma sobre k en $\langle n_{k>0} \rangle$ corresponde al número total (N) de fermiones libres) y “ ω ” la frecuencia del campo externo alterno con intensidad constante “E_{0 α ”.}

146

5 RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

En el presente trabajo establecemos explícitamente la densidad de corriente media para un sistema con ondas de densidad de carga (ODC) sin impurezas a $T = 0 \text{ K}$ y exhibimos su correspondiente formalización a temperatura finita considerando lo siguiente:

A partir del Hamiltoniano con el que describimos un metal unidimensional caracterizado a través de la energía cinética de los electrones, las vibraciones atómicas y la interacción electrón-fonón en el modelo de Fröhlich así como, del estado que representa (por medio de una perturbación a primer orden) la interacción entre un electrón y un fonón, caracterizamos la energía del electrón en la superficie de Fermi que absorbe un fonón con frecuencia ω_Q (donde $Q = 2k_f$) tal que al suponerla como energía cinética obtuvimos la masa asociada a dicha interacción. Incorporando la relación que Fröhlich establece entre el número-C (coeficiente del Hamiltoniano con el que representamos la interacción electrón-fonón) y el ancho del vado energético en el espectro del electrón – la cual evaluamos en la base $\{ |k_f; 1_Q\rangle^{(1)}, | -k_f; 1_Q\rangle^{(1)} \}$ y que a su vez depende del coeficiente de interacción entre electrones y vibraciones de la red que aplicamos al caso de una vibración atómica con frecuencia ω_Q a $T = 0 \text{ K}$ –, correspondimos la masa representativa de la interacción electrón-fonón con la masa (m^*) asociada a la onda de densidad de carga obteniendo que,

$$m^* = \left[1 + 4\Delta^2 / \lambda E_Q^2 \right] m$$

donde “ 2Δ ” representa el ancho del vado energético, “ E_Q ” la energía asociada a la vibración de la red con frecuencia ω_Q a $T = 0 \text{ K}$ ($E_Q = h \omega_Q / 2$) y “ λ ” corresponde a una constante que depende del parámetro de interacción “ F ” y el número de electrones libres por átomo “ v ” ($\lambda = 2Fv / 3$).

Los objetos físicos caracterizados a través de m^* fueron representados por medio de fermiones, lo que nos permitió proponer al sistema con ODC como un sistema de fermiones libres con masa m^* . En este sentido el Hamiltoniano H' asociado a dichos sistemas lo establecimos como

$$H' = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon^*(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \mu \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}$$

donde " $\varepsilon^*(\mathbf{k})$ " representa al elemento de matriz asociado a la energía cinética del k -ésimo fermión con masa m^* y " $b_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}}$ " corresponden respectivamente a operadores de creación y aniquilación que actúan sobre dichas partículas.

A su vez, los operadores densidad de corriente y vector de polarización los consideramos representativos de fermiones con masa m^* . A partir de dichos operadores y el Hamiltoniano del sistema con ODC calculamos la transformada de Fourier de la función de Green retardada desarrollada en términos de serie de potencias en la frecuencia del campo eléctrico externo, obteniendo que los términos de orden superior corresponden a cero independientemente de la temperatura del sistema⁶⁴, mientras que el término a primer orden nos permitió establecer el siguiente tensor de conductividad

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \{ i q^2 \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle_0 / m^* \omega \} \delta_{\alpha\beta}$$

⁶⁴ Interpretando a los términos de orden superior como representativos de interacciones tenemos que no aportaron información en la caracterización del tensor de conductividad debido a que la única interacción que consideramos (electrón-fonón) previamente la habíamos caracterizada a través de la masa m^* .

A partir de $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$ caracterizamos la densidad de corriente media en un sistema con ODC sin impurezas, la cual correspondió a

$$\langle J_{\alpha}^* \rangle = (q^2 \sum_k \langle n_k \rangle_0 / m^* \omega) E_{0\alpha} \text{ sen } \omega t'$$

donde "q" representa la carga del electrón, "m*" la masa de la ODC, " $\langle n_k \rangle_0$ " el número de fermiones con masa m* en el estado k a temperatura T (tal que a T = 0 K la suma sobre k en $\langle n_k \rangle_0$ corresponde al número total (N) de fermiones libres) y "ω" la frecuencia del campo externo alterno con intensidad constante "E_{0α}".

La masa m* equivale a la caracterizada por Fröhlich⁶⁵ por lo que, describiendo la interacción entre un electrón en la superficie de Fermi y un fonón con frecuencia ω_Q (donde Q = 2k_f), considerando la relación que dicho autor establece entre el número-C y el ancho del vado energético en el espectro del electrón así cómo, aplicando la constante de interacción entre electrones y vibraciones de la red en el caso de vibraciones atómicas con frecuencia ω_Q a T = 0 K, es posible caracterizar la masa m*.

A su vez, el tensor de conductividad obtenido a T = 0 K corresponde a la caracterización establecida por Fukuyama en el caso de un sistema con ODC sin impurezas⁶⁶, el cual considera el Hamiltoniano descrito a

⁶⁵ Cf. Fröhlich H. "On the theory of superconductivity: the one-dimensional case". Proc. R. Soc., Lond. A 223, p.305. 1954.

⁶⁶ Cf. Fukuyama H. "Pinning in Peierls-Fröhlich State and Conductivity." Journal of Physical Society of Japón. Vol.41, No.2. p. 516. August, 1976.

través de la densidad de energía cinética y la energía potencial ó energía elástica debida a las variaciones locales de la fase de la ODC , por lo que dicha descripción equivale a representar el sistema con ODC como un sistema de fermiones libres con masa m^* .

La masa m^* fue caracterizada a $T = 0$ K sin embargo, las ODC suelen formarse a temperatura finita dependiendo del conductor que consideremos, lo que representa una posible insuficiencia descriptiva en la aproximación realizada, así como la caracterización de $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle_0$ a temperatura finita y la incorporación de algún parámetro asociado al campo umbral a partir del cual el sistema presenta conducción que a su vez, depende de las impurezas en el sistema pues estas influyen en la inserción de las ODC en la red atómica.

La presente caracterización de la densidad de corriente media en un sistema con ODC muestra una posible aplicación de la teoría asociada a sistemas de partículas idénticas y segunda cuantización ya que a través de dicha caracterización podemos representar a los sistemas con ODC como sistemas de fermiones libres con masa m^* , lo que permite desarrollar una descripción formal y relativamente simple de dichos sistemas.

6 BIBLIOGRAFÍA.

- Cabrera M.A.** "Modelo de jalea deformable para el gas de electrones a temperatura finita". Tesina para exámenes predoctorales. I.P.N. México Agosto de 1998.
- Callen.H.A.** "Thermodynamics and an introduction to thermostatics". John Wiley and Sons.EUA.1985
- De la Peña Luis.** "Introducción a la Mecánica Cuántica". UNAM y Fondo de Cultura. México. Segunda edición 1991.
- Di Salvo Francis J. y Rice Maurice.** "Charge-density waves in transition-metal compounds." Physics Today. April 1979.
- Fröhlich H.** "On the theory of superconductivity: the one-dimensional case". Proc. R.Soc., Lond. A 223 , p.296 (1954).
- Fukuyama H.** "Pinning in Peierls-Fröhlich State and Conductivity. Journal of the Physical Society of Japón. Vol. 41, No.2, August, 1976.
- Gill J.C. y Wills H.H.** "Charge-density wave transport" Contemp. Phys., Vol. 27. No 1 , pp. 37-59. 1986
- Kant I.** "Crítica de la razón pura".Editorial Colofón S.A.Tercera edición 1996. México.
- Kittel C.** "Quantum Theory of solids." Editorial John Wiley and Sons. Segunda edición revisada. 1986. E.U.A.
- Landau L. y Lifshitz E.** "Curso abreviado de Física Teórica". Libro I Mecánica y Electrodinámica. Editorial MIR.Moscú. Traducción al español por Molina García A. Cuarta edición. 1987.
- Landau L.D. y Lifshitz E.M.** "Física estadística" Vol. 5 Curso de Física Teórica. España. Editorial Reverté S.A. 1969.
- Lee P.A. , Rice T.M. y Anderson P.W.** "Conductivity from charge or spin density waves". Solid State Communications, Vol. 14, pp 703-709, 1974
- Marsden J. y Hoffman.** "Basic Complex Analysis". Editorial Freeman and Company. Nueva York. Segunda Edición 1987.
- Merzbacher Eugen.** "Quantum Mechanics" . John Wiley and Sons.Segunda edición.EUA.1970
- Nicole E.** "Los principios de la ciencia". Fondo de cultura económica. México. Tercera reimpresión. 1984.
- Nietzsche F.** "Así habló Zarathustra". Editorial Origen, S.A.- Editorial Omgsa,S.A. Traducción de García Borrón.1983.México.

Pávlov P.V. y Joliov A.F. "Física del estado sólido". Editorial MIR Moscú. Traducción al español por Molina García A..1987.

Reitz R. John et.al. "Fundamentos de la teoría electromagnética". Unión tipográfica editorial Hispano-Americana. México. Primera reimpresión 1972.

Thorne Robert E. "Charge-Density-Wave conductors". Physics Today, May 1996. p.42.

Zubarev D. N et. al. "Nonequilibrium Statistical Thermodynamics" Studies in Soviet Science. Consultants Borea•New York-London.1974.