Física de la materia condensada
Octavo Semestre 2021

Jorge Alejandro Rodriguez Aldana

6 de agosto de 2021

Capítulo 1

Introducción

1.1. ¿Qué es la materia condensada?

- Fases condensadas: aparecen cuando los sistemas físicos están formados por un número grande de elementos que interactúan fuertemente.
- Fases condensadas bastante conocidas: sólidos, líquidos.
- Otras fases condensadas: superconductores, superfluidos, ferromagnetos, antiferromagnetos, condensados Bose-Einstein.
- Otras mesofases: cristales líquidos, membranas autoensambladas, geles, coloides, cristales, vidrios, etc.

Categorías de la física:

- Teórico
- Experimental
- Fenomenológica
- Computacional

1.1.1. De la física del estado sólido a la física de la materia condensada

- La física del estado sólido en los 30 (siglo XX):
  - Cristalografía por Rayos X
  - Difracción de electrones
  - M cuántica + M estadística

1.1.2. Tipos de fuerzas

- Van der Waals
- Interacción electromagnética

- Interacción de intercambio
- Potencial de London
- Potencial de Lenard-Jones

1.2. ¿Qué estudia la materia condensada?

Se vale de muchos métodos para estudiar la materia.

- Mecánica estadística
  - Modelo de campo medio
  - Movimiento Browniano
  - Dinámica molecular
- Mecánica cuántica
  - Modelo de Hubbard (1963-1966)

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} + C_{j\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} \right) + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

    Donde:
    - $C_{i\sigma}^{\dagger}$: Operador bosónico de creación de partículas de espín σ en la posición i.
    - $C_{j\sigma}$: Operador bosónico de aniquilación de partículas de espín σ en la posición j.
    - n_i: Operador número en la posición i.

Un mol es $6.022E23$.

1.2.1. Objetivo de la materia condensada

- El objetivo de la Física de la materia condensada es el entendimiento de las propiedades de grandes conjuntos de átomos y moléculas en términos de las interacciones entre ellas.
- Propiedades macroscópicas
  - Temperatura
  - Presión
  - Volumen
  - Energía de enlace
  - Opacidad
- De lo más notable de la física de la materia condensada, es el poder explicar la fenomenología de un sistema que surge de un Hamiltoniano relativamente simple.

1.2.2. Hitos de la física de la materia condensada

- Efecto fotoeléctrico (Einstein, 1905)
- Capacidad Calorífica (Einstein, 1907)
- Ferromagnetismo (Weiss, 1907)
- Licuefacción de He @ 4.1K (Kemerling Onnes, 1908)
- Superconductividad (Kamerling Onnes, 1911)
- Difracción de Rayos X (Von Laue, 1912)
- Cuantización de las vibraciones de una red cristalina (Max Born, 1912)
- Corrección de la aproximación de la capacidad calorífica (Debye, 1912)
- Ecuación de Schrodinger (Schrodinger, 1926)
- Principio de exclusión de Pauli (Pauli, 1926)
- Aproximación Born-Oppenheimer (1927) Desacoplan dinámicas de núcleos y electrones.
- Descripción cuántica del modelo de electrones libres (Sommerfeld, 1928)

1.2.3. Materia Blanda y Materia Sólida

Orden (desorden) estadístico:

$$\text{Entropía}$$
$$S = -k \log \omega$$

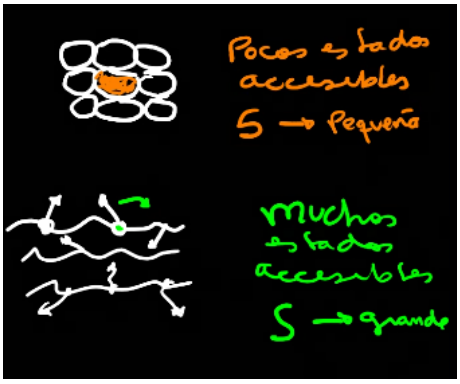

Figura 1.1: Sólidos ordenados, líquidos desordenados

Tres categorías:

1. Orden de largo alcance

2. Orden de corto alcance
3. Desorden

Materia blanda:

- Escalas de longitud: Desde escalas atómicas a escalas macroscópicas.
- Fluctuaciones
- Autoreorganización
- **Macroscópicas**
  - Polímeros
  - Interfaces
- **Microscópicas**
  - Coloides
  - Geles
  - Cristales líquidos

Fluctuaciones y Movimiento Browniano

- Partes pequeñas que tienen movimiento aleatorio
- Fluctuaciones térmicas

1.2.4. Materia sólida

Cristalografía clásica: Sistemas que se representan como puntos con patrons específicos.

- Grupos de traslación (redes Bravais)
- Traslación y simetría (grupos de Schontlis)

1.2.5. Fases de la materia

	Ordenadas	No ordenadas
Clásica	Hielo de agua	Agua líquida
Cuántica	Ferromagnética	
	Antiferromagnética	

1.2.6. Conjuntos de puntos:

- Conjunto unitario: tiene un solo elementos.
- La union contable de conjuntos unitarios suma un conjunto de puntos.
- Un conjunto de puntos, $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, es un conjunto discreto si $x \in \Lambda$ tiene una vecindad abierta $U = U(x) \subset \mathbb{R}^d$ que no tiene ningún elemento de Λ.
- Para cada $x \in \Lambda$, exite un radio de empaquetamiento $r > 0$ tal que $B(r)$ es una hiperesfera de radio r tal que $B_r(x) \cap \Lambda = \{x\}$.
- Por otro lado, Λ es uniformemente discreto si hay una vecindad abierta, U, de $0 \in \mathbb{R}^d$ tal que $(x+U) \cap (y+U) = \emptyset$. Se cumple para todo $x, y \in \Lambda$ la suma y diferencia de Minkowski para dos conjuntos $U \pm V := \{u \pm v | u \in U, v \in V\}$
- Para un conjunto discreto se tiene una distancia mínima entre puntos. Los subconjuntos de $\mathbb{Z}$ son uniformemente discretos. Pero podemos construir conjuntos discretos no uniformes, por ejemplo: $A = \left\{\frac{1}{n} | n \in \mathbb{N}\right\}$
- Un conjunto Λ es localmente finito, si para todos los conjuntos $K \subset \mathbb{R}^d$, $K \cap \Lambda$ es un conjunto finito o $\emptyset$. “Cuando Λ es un conjunto de puntos, también es localmente finito si y solo si es discreto y cerrado.” Además, Λ es relativamente denso si existe un conjunto compacto $K \subset \mathbb{R}^d$ tal que $\Lambda + K = \mathbb{R}^d$.
- Un conjunto de puntos $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ es un conjunto de Delone (Delany), “un Delone” si es uniformemente discreto y relativamente denso.
- Para cualquier conjunto de Delone, $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ se puede elegir un radio de empaquetamiento r y otro de “recubrimiento”, R tal que $U = B_r(0)$ (hiperesfera) y $K = \overline{B_R(0)}$ son vecindades apropiadas para confinar Λ.
- Un conjunto de puntos $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ es un conjunto de Meyer, “un Meyer”, si Λ es relativamente denso y $\Lambda - \Lambda$ es uniformemente discreto.
- Todos los conjuntos de Meyer son de Delone, pero no todos los conjuntos de Delone son de Meyer.

Por ejemplo:

$$\begin{aligned}\Lambda &= \left\{n + \frac{1}{n} | n \in \mathbb{Z} \backslash 0\right\} \\ &= \left\{2, 2\frac{1}{2}, 3\frac{1}{3}, \cdots\right\}\end{aligned}$$

- Es uniformemente discreto.
- Tiene un radio de empaquetamiento $r = 1/4$
- Es relativamente denso

- Radio de recubrimiento $R = 2$

Es un conjunto de Delone. No es un conjunto de Meyer.

- Un conjunto de puntos $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$ son puntos de red (grid). O simplemente una red en $\mathbb{R}^d$ si existen d vectores $\vec{b}_1, \cdots, \vec{b}_d$ tal que

$$\Gamma = \mathbb{Z}b_1 \oplus \cdots \oplus \mathbb{Z}b_d := \left\{ \sum_{i=1}^{d} m_i b_i | \forall m_i \in \mathbb{Z} \right\}$$

  y que además, si $\mathbb{R}^d$ es generado por $\{b_1, \cdots, b_d\}$ es una base de la red Γ. Es un conjunto de Meyer, y consecuentemente, es un conjunto de Delone.

Celda de Voroni y celda de Delone:

Considere un conjunto de puntos localmente finito $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ y $\Lambda \neq \emptyset$. Entonces el dominio de Voronoi o celda de Voronoi para $a \in \Lambda$ es $V(a) := \left\{ x \in \mathbb{R}^d | \|x - a\| \leq \|x - b\| \forall b \in \Lambda \right\}$
Donde $\|\bullet\|$ es la métrica euclideana.
$V(a)$ es cerrada en volumen y es abierta en muchas ocasiones en las fronteras.
$V(a)$ tiene un hipervolumen finito y no nulo.
$V(a)$ no necesariamente es compacta. ($A \cup B$ =Universo, $A \cap B = \emptyset$), $\Rightarrow A$ es compacto).
La colección de todas las celdas de Voronoi forman una teselación cara a cara de $\mathbb{R}^d$.
En particular, dos celdas de Voronoi distintas pueden intersectarse.
El conjunto de celdas forma un espacio euclidano llamado Complejo de Voronoi.
El dual geométrico del complejo de Voronoi, es otro conjunto de celdas de Delone y se llama Complejo de Delone.

1.2.7. Grupos finitos:

- En cristalografía son importantes los grupos de moléculas
- Grupo lineal general en $\mathbb{R}^d$ $GL(d, \mathbb{R})$: Todas las matrices de dimensión $d \times d$ y que todas sus entradas son invertibles.
- Grupo ortonormal especial o grupo de rotación: el subgrupo de rotaciones que preservan la orientación.

Grupos finitos más usados en cristalografía

- Grupo cíclico de orden n, C_n que satisface que si $g^n = e$ entonces $g^{ln} = e \forall l \in \mathbb{Z}$ y e : elemento neutro.
- Grupo didral de orden $2n$:

$$D_n = \langle g, h | g^n = h^2 = (gh)^2 = e \rangle$$

- 4-grupo de Kein.

$$D_2 = C_2 \times C_2$$

- Grupo de permutación: tiene n símbolos S_n, para $n > 1$ su subgrupo de índice 2 permutaciones se llama grupo alternado o alternante.

$$A_n = \{\sigma \in S_n : \|\sigma\| \text{ es par}\}$$

- Grupos de simetría de politopos regulares:

  - Grupo tetraedro $T_d \approxeq S_4$: rotaciones y reflecciones del tetraedro.
  - Grupo octaedro $O \approxeq S_4$: Preserva orientaciones de cubo y octaedro.
  - Grupo icosaedro $Y_h = Y \times C_2$: Y subgrupo de rotaciones.

1.2.8. Cálculo de las celdas de Voronoi y de Delone

Propiedades de la celda de Voronoi $V(a)$:

1. Es una celda cerrada.
2. Hipervolumen no nulo.
3. No es necesariamente compacta.
4. Cada punto de conjunto de puntos tiene su propia celda.

El conjunto de celdas de Voronoi forma un complejo de Voronoi, que es una teselación del espacio.
El dual geométrico del complejo de Voronoi se llama complejo de Delone.
Se llama celda de Voronoi en honor de Georgy Voronoi (1868-1908).
Se llama celda de Delone en honor a Boris Delone (1890-1980).

Algoritmo de Fortune

Propuesto por Steve Fortune.
Entrada: El conjunto de puntos $\{p_1, \cdots, p_n\}$. El índice del punto donde se calcula
Salida: La celda de Voronoi.

1. Iniciar
2. $cell_i \leftarrow S$
3. $P_i \leftarrow (x_i, y_i)$
4. Para todos los puntos $i \neq j$ hacer:
   a) $P_j \leftarrow (x_i, y_i)$
   b) $R_j \leftarrow$ linea que une P_i y P_j.
   c) $PM_i \leftarrow$ punto medio entre P_i y P_j.
   d) $\bar{R}_j \leftarrow$ línea perpendicular a R_j en PM_i

e) Hallar la intersección de $cell_i$ y $\bar{R}_j$.

f) Si R_j y L se cruzan en 0 o 1 punto, continua.

g) Si no, $cell_i \leftarrow$