

FÍSICA TEÓRICA

FÍSICA,
ESTADÍSTICA

PARTE II

LIFSHITZ Y PITAEVSKIÍ

VOLÚMEN 9

L. D. LANDAU **E. M. LIFSHITZ**
Academia de Ciencias, U.R.S.S.

CURSO DE FÍSICA TEÓRICA

Volumen 9

FÍSICA ESTADÍSTICA
PARTE II

E. M. LIFSHITZ L. P. PITAEVSKIÍ

Academia de Ciencias, U.R.S.S.

FÍSICA ESTADÍSTICA

PARTE II

Volumen 9
del
CURSO DE FÍSICA TEÓRICA



EDITORIAL REVERTÉ, S. A.
BARCELONA-BOGOTÁ-BUENOS AIRES-CARACAS-MÉXICO

Título de la obra original

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Часть 2

Теория конденсированного состояния

Edición original en lengua rusa publicada por

MEZHDUNARODNAYA KNIGA, Moscou

Copyright © MEZHDUNARODNAYA KNIGA

Versión española por el

Prof. Dr. J. Aguilar Peris

Catedrático de Terminología

Facultad de Física de la Universidad Complutense de Madrid

y el

Prof. Dr. J. de la Rubia Pacheco

Catedrático de Mecánica Estadística

Facultad de Física de la Universidad de Valencia

Propiedad de:

EDITORIAL REVERTÉ, S. A.

Encarnación 86

08024 Barcelona

Reservados todos los derechos. Ninguna parte del material cubierto por este título de propiedad literaria puede ser reproducida, almacenada en un sistema de informática o transmitida de cualquier forma o por cualquier medio electrónico, mecánico, fotocopia, grabación u otros métodos sin el previo y expreso permiso por escrito del editor.

Edición en español

© EDITORIAL REVERTÉ, S. A., 1986

Impreso en España - Printed in Spain

ISBN - 84 - 291 - 4080 - 8 obra completa

ISBN - 84 - 291 - 4078 - 6 tomo 9

Depósito Legal: B-12874 - 1986

Impreso por GERSA, Industria Gráfica
Tambor del Bruc, 6 - Sant Joan Despí (Barcelona)

PREFACIO

Resumiendo las características de su contenido podemos decir que este noveno volumen del Curso de Física Teórica trata de la teoría cuántica del estado condensado de la materia. Se inicia con una exposición detallada de la teoría de los líquidos cuánticos de Bose y Fermi. Esta teoría, establecida por L. D. Landau a partir de los descubrimientos experimentales de P. L. Kapitza, constituye ahora una rama independiente de la física teórica. Su importancia reside no sólo en los notables fenómenos que se presentan en los isótopos líquidos del helio, sino en el hecho de que los conceptos de un líquido cuántico y su espectro son esencialmente el fundamento de la descripción cuántica de los cuerpos macroscópicos.

Por ejemplo, un entendimiento completo de las propiedades de los metales implica el tratamiento de los electrones como un líquido de Fermi. Sin embargo, las propiedades del líquido electrónico son complicadas por la presencia de la red cristalina y para el desarrollo de la teoría es necesario como etapa preliminar el estudio del caso más simple de un líquido homogéneo isotrópico. De igual modo, la superconductividad de los metales, que puede considerarse como la superfluidez del líquido electrónico, es difícil de entender claramente sin un conocimiento previo de la teoría más simple de la superfluidez en un líquido de Bose.

El enfoque mediante la función de Green es una parte indispensable del formalismo matemático de la física estadística moderna. No sólo por la conveniencia del cálculo de las funciones de Green por la técnica de diagramas, sino especialmente por el hecho de que las funciones de Green determinan directamente el espectro de las excitaciones elementales del cuerpo y por tanto, constituyen el lenguaje que ofrece la descripción más natural de las propiedades de estas excitaciones. Por ello, en este volumen se ha dedicado una atención considerable a los problemas metodológicos en la teoría de las funciones de Green de los cuerpos macroscópicos. Aunque las ideas básicas del método son las mismas para todos los sistemas, la forma específica de la técnica diagramática es diferente en cada caso. Es, en consecuencia, natural el desarrollo de estos métodos para los líquidos cuánticos isotrópicos, en donde la esencia del procedimiento se ve en su forma más pura, sin las complicaciones que surgen de la inhomogeneidad espacial, la presencia de más de un tipo de partículas, etc.

Por razones semejantes, la teoría macroscópica de la superconductividad viene descrita por el modelo simple de un gas isotrópico de Fermi con interacción débil, prescindiendo de las complicaciones debidas a la presencia de la red cristalina y a la interacción de Coulomb.

En cuanto a los capítulos que tratan de los electrones en la red cristalina y de la teoría del magnetismo, debemos insistir en que este libro es parte de un curso de física

teórica y de ningún modo intenta ser un texto de teoría del estado sólido. En consecuencia, sólo se discuten aquí los tópicos más generales y no se hace ninguna referencia a los problemas que llevan consigo el uso de resultados experimentales específicos ni a los métodos de cálculo que no tienen una evidente base teórica. Además este volumen no incluye las propiedades de transporte de los sólidos, de las cuales trataremos en el siguiente y último volumen del Curso.

Finalmente este libro discute también la teoría de las fluctuaciones electromagnéticas en medios materiales y la teoría de las fluctuaciones hidrodinámicas. La primera se incluyó previamente en el volumen 8, Electrodinámica de los medios continuos. Su transferencia al presente volumen es una consecuencia de la necesidad del uso de las funciones de Green con lo cual la teoría completa puede simplificarse y hacerse más conveniente en sus aplicaciones. También es más razonable tratar en el mismo volumen las fluctuaciones electromagnéticas e hidrodinámicas.

Éste es el volumen 9 del Curso de Física Teórica (*la parte 1 de la Física estadística es el volumen 5*). La lógica de la distribución es que los tópicos tratados aquí están íntimamente relacionados con los de la mecánica de fluidos (volumen 6) y la electrodinámica macroscópica (volumen 8).

L. D. Landau no se encuentra entre los que han escrito realmente este libro. Pero el lector observará fácilmente la frecuencia con que aparece su nombre en el mismo: una parte considerable de los resultados dados aquí son debidos a él, solo o con sus alumnos y colegas. Nuestra asociación con Landau durante muchos años nos permite pensar que hemos reflejado exactamente sus puntos de vista en estos temas, aunque naturalmente se han tenido en cuenta los desarrollos habidos en los 15 años transcurridos desde que su trabajo concluyó trágicamente.

Deseamos expresar aquí nuestro agradecimiento a A. F. Andreev, I. E. Dzyaloshinskii e I. M. Lifshitz por muchas de las discusiones sobre temas de este libro. Una gran ayuda ha sido el libro bien conocido Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics (Pergamon, Oxford 1965) de A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov e I. E. Dzyaloshinskii, uno de los primeros textos en la bibliografía de física relacionados con los nuevos métodos de física estadística. Por último, agradecemos a L. P. Gor'kov y Yu. L. Klimontovich por la lectura del libro en su etapa de manuscrito y sus numerosos comentarios.

E. M. LIFSHITZ
L. P. PITAEVSKIÍ

NOTACIÓN

Los subíndices que se asignan a los vectores utilizan letras latinas i, k, \dots . Los subíndices del spin se designan con las letras griegas α, β, \dots . La operación de sumar aparece implicada en todos los subíndices que aparezcan repetidos.

Los «4-vectores» [ver la nota a pie de página correspondiente a la ecuación (13.8)] se designarán con letras mayúsculas X, P, \dots .

Elemento de volumen dV o d^3x .

Límite al tender a cero desde arriba o desde abajo $+0$ o -0 .

Los operadores se designan mediante un acento circunflejo.

Hamiltoniano \hat{H} , $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$.

Operador perturbación \hat{V} .

Operadores Ψ en la representación de Schrödinger $\hat{\psi}, \hat{\psi}^+$; en la representación de Heisenberg Ψ, Ψ^+ ; en la representación de Matsubara $\hat{\Psi}^M, \hat{\Psi}^M$.

Funciones de Green G, D .

Las magnitudes termodinámicas se designan del mismo modo que en la Parte 1, por ejemplo, T temperatura, V volumen, P presión, μ potencial químico.

Campo magnético H ; inducción magnética B ; campo magnético externo Φ .

Referencias a otros volúmenes anteriores del curso de Física Teórica:

Mecánica = Vol. 1 (*Mecánica*).

Campos = Vol. 2 (*Teoría clásica de campos*).

MC = Vol. 3 (*Mecánica Cuántica*).

TCR = Vol. 4 (*Teoría Cuántica Relativista*).

Parte 1 = Vol. 5 (*Física Estadística*, Parte 1).

MF = Vol. 6 (*Mecánica de Fluidos*).

EMC = Vol. 8 (*Electrodinámica de Medios Continuos*).

Todos están publicados por la Editorial Reverté.

ÍNDICE ANALÍTICO

Prefacio	V
Notación	VII
I. Líquido normal de Fermi	
§ 1 Excitaciones elementales en un líquido cuántico de Fermi	1
§ 2 Interacción de cuasipartículas	9
§ 3 Susceptibilidad magnética de un líquido de Fermi	13
§ 4 Sonido cero	15
§ 5 Ondas de spin en un líquido de Fermi	22
§ 6 Gas de Fermi casi ideal degenerado con repulsión entre las partículas	24
II. Funciones de Green en un sistema de Fermi a $T = 0$	
§ 7 Funciones de Green en un sistema macroscópico	33
§ 8 Determinación del espectro de energía a partir de la función de Green	39
§ 9 Función de Green en un gas de Fermi ideal	45
§ 10 Distribución de los impulsos de las partículas en un líquido de Fermi	47
§ 11 Cálculo de magnitudes termodinámicas a partir de la función de Green	49
§ 12 Operadores Ψ en la representación de la interacción	50
§ 13 La técnica de los diagramas para los sistemas de Fermi	54
§ 14 Función de autoenergía	63
§ 15 Función de Green de dos partículas	66
§ 16 Relación existente entre la función vértice y la amplitud de dispersión o scattering de las cuasipartículas	71
§ 17 Función vértice para pequeñas transferencias de impulso	73
§ 18 Relación entre la función vértice y la función de interacción de las cuasipartículas	80
§ 19 Identidades para las derivadas de la función de Green	83

§ 20	Deducción de la relación existente entre el impulso límite y la densidad	88
§ 21	Función de Green de un gas de Fermi casi ideal	91

III. Superfluidez

§ 22	Excitaciones elementales en un líquido de Bose cuántico	99
§ 23	Superfluidez	103
§ 24	Fonones en un líquido	109
§ 25	Gas de Bose casi ideal degenerado	114
§ 26	Función de onda del condensado	119
§ 27	Relación entre la densidad del condensado y la temperatura	124
§ 28	Comportamiento de la densidad superfluida cerca del punto λ	127
§ 29	Filamentos de vórtices cuantizados	129
§ 30	Un filamento de vórtices en un gas de Bose casi ideal	136
§ 31	Funciones de Green en un líquido de Bose	138
§ 32	Técnica diagramática para un líquido de Bose	145
§ 33	Funciones de autoenergía	147
§ 34	Desintegración de las cuasipartículas	152
§ 35	Propiedades del espectro cerca de su punto final	157

IV. Funciones de Green a temperaturas no nulas

§ 36	Funciones de Green a temperaturas distintas de cero	165
§ 37	Funciones de Green de la temperatura	170
§ 38	Técnica diagramática para las funciones de Green de la temperatura	174

V. Superconductividad

§ 39	Gas de Fermi superfluido. El espectro de energía	179
§ 40	Gas de Fermi. Propiedades termodinámicas	186
§ 41	Funciones de Green en un gas superfluido	191
§ 42	Funciones de Green de temperatura en un gas de Fermi superfluido	198
§ 43	Superconductividad en metales	201
§ 44	Corriente en el caso de superconductividad	202
§ 45	Ecuaciones de Ginzburg-Landau	208
§ 46	Tensión superficial en la frontera entre las fases superconductora y normal	215
§ 47	Los dos tipos de superconductor	221
§ 48	Estructura del estado mezcla	225
§ 49	Susceptibilidad diamagnética por encima del punto de transición	234
§ 50	Efecto Josephson	238
§ 51	Relación entre la corriente el campo magnético en un superconductor	242
§ 52	Profundidad de penetración de un campo magnético dentro de un superconductor	250
§ 53	Aleaciones superconductoras	252

- § 54 Efecto Cooper en el caso de momentos angulares orbitales no nulos del par

255

VI. Electrones en la red cristalina

- § 55 Un electrón en un campo periódico
- § 56 Efecto de un campo externo sobre el movimiento de los electrones en una red
- § 57 Trayectorias cuasiclásicas
- § 58 Niveles de energía cuasiclásicos
- § 59 Tensor de masa efectiva del electrón en la red
- § 60 Simetría de los estados del electrón en una red dentro de un campo magnético
- § 61 Espectros electrónicos de los metales normales
- § 62 Función de Green de los electrones en un metal
- § 63 Efecto de Haas-van Alphen
- § 64 Interacción electrón-fonón
- § 65 Influencia de la interacción electrón-fonón sobre el espectro de los electrones en un metal
- § 66 Espectro electrónico de los aislantes sólidos
- § 67 Electrones y huecos en semiconductores
- § 68 Espectro electrónico cerca del punto de degeneración

VII. Magnetismo

- § 69 Ecuación del movimiento de un momento magnético en un ferroimán (ferromagneto)
- § 70 Magnones en un ferromagneto. El espectro
- § 71 Magnones en un ferromagneto. Magnitudes termodinámicas
- § 72 El hamiltoniano del spin
- § 73 Interacciones de los magnones
- § 74 Magnones en un antiferromagneto

VIII. Fluctuaciones electromagnéticas

- § 75 Función de Green de un fotón en un medio material
- § 76 Fluctuaciones del campo electromagnético
- § 77 Fluctuaciones electromagnéticas en un medio infinito
- § 78 Fluctuaciones de corriente en circuitos lineales
- § 79 Función de Green de la temperatura de un fotón en un medio
- § 80 Tensor de tensiones de van der Waals
- § 81 Fuerzas de la interacción molecular entre cuerpos sólidos. Fórmula general
- § 82 Fuerzas de integración molecular entre cuerpos sólidos. Casos límites
- § 83 Comportamiento asintótico de la función de correlación en un líquido

§ 84	Expresión del operador para la permitividad	412
§ 85	Un plasma degenerado	414

IX. Fluctuaciones hidrodinámicas

§ 86	Factor de forma dinámico de un líquido	423
§ 87	Reglas de la suma para los factores de forma	428
§ 88	Fluctuaciones hidrodinámicas	434
§ 89	Fluctuaciones hidrodinámicas en un medio infinito	438
§ 90	Expresiones de los operadores para los coeficientes de transporte	444
§ 91	Factor de forma dinámica de un líquido de Fermi	447

Índice alfabético	451
-------------------------	-----

CAPÍTULO I

LÍQUIDO NORMAL DE FERMI

§ 1. Excitaciones elementales en un líquido cuántico de Fermi

A temperaturas tan bajas que la longitud de onda de Broglie correspondiente al movimiento térmico de los átomos en un líquido resulte comparable con las distancias existentes entre los átomos, las propiedades macroscópicas del líquido están determinadas por los efectos cuánticos. La teoría de dichos líquidos cuánticos es de un interés fundamental considerable, aunque en la naturaleza sólo existan dos de ellos que sean realmente líquidos; son los líquidos correspondientes a los isótopos He^3 y He^4 del helio a temperaturas $\sim 1 - 2$ K. Todas las demás sustancias solidifican mucho antes de que empiecen a resultar importantes en ellos los efectos cuánticos. En conexión con este punto puede recordarse que de acuerdo con la mecánica clásica, todos los cuerpos deberían ser sólidos en el cero absoluto (ver Parte 1, § 64). Sin embargo, el helio debido a la interacción peculiarmente débil que existe entre sus átomos, permanece líquido hasta temperaturas suficientemente bajas para que se hagan notar los efectos cuánticos, de tal modo que no es necesario que llegue a solidificar.

El cálculo de las magnitudes termodinámicas para un cuerpo macroscópico exige el conocimiento de su espectro de niveles de energía. En un sistema de partículas fuertemente interactivas tal como un líquido cuántico, podemos referirnos, como es natural, sólo a aquellos niveles que corresponden a estados estacionarios del líquido total, y no a estados de los átomos individuales. Al calcular la función de partición a temperaturas suficientemente bajas, hemos de tener en cuenta únicamente los niveles de energía débilmente excitados del líquido, los cuales están bastante próximos al estado fundamental.

El extremo siguiente tiene una importancia fundamental en toda la teoría. En mecánica cuántica, cualquier estado débilmente excitado de un cuerpo macroscópico puede considerarse como un conjunto de *excitaciones elementales* separadas. Estas se comportan como *cuasipartículas* que se mueven dentro del volumen ocupado por el cuerpo y que poseen energías ϵ e impulsos p definidos. Una característica importante del espectro energético del cuerpo es la forma de la función $\epsilon(p)$, o *relación de dispersión* para las excitaciones elementales. Debe resaltarse de nuevo

que el concepto de excitaciones elementales surge como un procedimiento de descripción mecánica-cuántica del movimiento colectivo de los átomos de un cuerpo y que no pueden identificarse las cuasipartículas con los átomos o moléculas individuales.

En los líquidos cuánticos pueden en principio existir diversos tipos de espectros de energía. Existirán también propiedades macroscópicas completamente diferentes que dependerán de la clase del espectro. Empezaremos considerando un líquido con un espectro que muy bien podría denominarse de tipo *Fermi*. La teoría de dicho líquido de Fermi se debe a L. D. Landau (1956-58), quien dedujo los resultados que se van a resumir en §§ 1-4.†

El espectro de energía de un líquido cuántico de Fermi tiene una estructura que en cierta medida es semejante a la de un gas de Fermi ideal (de partículas con spin $\frac{1}{2}$). El estado fundamental de este último corresponde a la ocupación por las partículas de todos los estados contenidos dentro de la *esfera de Fermi*, que es una esfera en el espacio de los impulsos cuyo radio p_F está relacionado con la densidad del gas N/V (número de partículas por unidad de volumen) por la expresión

$$\begin{aligned} N/V &= 2 \cdot 4\pi p_F^3 / 3(2\pi\hbar)^3 \\ &= p_F^3 / 3\pi^2 \hbar^3; \end{aligned} \quad (1.1)$$

ver Parte 1, § 57. Los estados excitados del gas aparecen cuando las partículas pasan desde estados del interior de la esfera ocupada a algún otro estado con $p > p_F$.

Como es natural, en un líquido no existen estados cuánticos para las partículas individuales, de modo que para construir el espectro de un líquido de Fermi debemos partir de la hipótesis de que la clasificación de los niveles de energía permanece invariable cuando se «conectan» gradualmente las interacciones entre los átomos, es decir cuando pasamos del gas al líquido. En esta clasificación, el papel de partículas de gas lo juegan las excitaciones elementales (cuasipartículas), cuyo número es igual al número de átomos y que obedecen a la estadística de Fermi.

Es evidente que dicho espectro sólo puede aparecer en un líquido de partículas con spin semientero: el estado de un sistema de bosones (partículas con spin entero) no puede describirse en función de cuasipartículas que obedecen la estadística de Fermi. Al mismo tiempo debe resaltarse que un espectro de esta clase no puede ser una propiedad universal de todos los líquidos de esta clase. El tipo de espectro depende también de la naturaleza específica de la interacción entre los átomos. Esto resulta evidente a partir de la consideración siguiente: si la interacción es tal que tienda a asociar los átomos en parejas, entonces en el límite obtenemos un líquido molecular compuesto de partículas (moléculas) con spin entero para el cual es ciertamente imposible la existencia del espectro que estamos considerando.

† Para anticiparnos a cualquier dificultad, podemos mencionar aquí que para evitar malas interpretaciones nos estamos refiriendo a un líquido de Fermi no superfluido (*normal*), como es el caso del isótopo líquido He^3 , con la reserva hecha en la tercera nota a pie de página a § 54.

Cada una de las cuasipartículas tiene un impulso definido \mathbf{p} (volveremos más adelante a considerar la validez de esta afirmación). Sea $n(\mathbf{p})$ la función de distribución de los impulsos de las cuasipartículas, normalizada mediante la condición

$$\int n \, d\tau = N/V, \quad d\tau = d^3p/(2\pi\hbar)^3;$$

esta condición se hará más precisa en su momento. El principio de clasificación mencionado anteriormente consiste en suponer que, si se especifica esta función, la energía E del líquido queda unívocamente determinada y que el estado fundamental corresponde a una función de distribución en la que todos los estados están ocupados dentro de la esfera de Fermi, cuyo radio p_F está relacionado con la densidad del líquido mediante la misma fórmula (1.1) que es válida para un gas ideal.

Es importante subrayar que la energía total E del líquido no es simplemente la suma de las energías ϵ de las cuasipartículas. En otras palabras, E es una magnitud funcional de la función de distribución que no se reduce a la integral $\int n \epsilon \, d\tau$ (como ocurre en el caso de un gas ideal, en donde las partículas coinciden con las partículas reales y no interaccionan entre sí). Puesto que el concepto primario es E , se plantea la cuestión de cómo hay que definir la energía de las cuasipartículas, para tener en cuenta su interacción.

Con este objetivo, consideraremos la variación que experimenta E debida a un cambio infinitesimal de la función de distribución. Está claro que puede definirse como la integral de una expresión lineal respecto a la variación δn , es decir, tiene la forma

$$\delta E/V = \int \epsilon(p) \delta n \, d\tau.$$

La magnitud ϵ es la derivada funcional de la energía E respecto a la función de distribución. Corresponde a la variación de la energía del sistema cuando se adiciona una sola cuasipartícula con impulso \mathbf{p} . Esta magnitud juega el papel de la función de Hamilton de una cuasipartícula en el campo de las demás cuasipartículas. Es también una funcional de la función de distribución, es decir, la forma de la función $\epsilon(\mathbf{p})$ depende de la distribución de todas las partículas en el líquido.

En conexión con esto debe señalarse que una excitación elemental en el tipo de espectro considerado puede considerarse en cierto sentido como un átomo situado en el campo autoconsistente de los demás átomos. Esta autoconsistencia no ha de entenderse, como es natural, en el sentido usual de la mecánica cuántica. Aquí su naturaleza es más profunda; el hamiltoniano del átomo se ve modificado no sólo lo previsto para tener en cuenta el efecto de las partículas que la rodean sobre la energía potencial, sino también la dependencia del operador de energía cinética sobre el operador del impulso.

Hasta ahora hemos ignorado el posible spin de las cuasipartículas. Puesto que el spin es una magnitud cuántica, no puede tratarse clásicamente y, por consiguiente,

debemos considerar la función de distribución como una matriz estadística respecto al spin. La energía ε de una excitación elemental no es en general sólo una función del impulso sino que es también un operador respecto a las variables de spin, que puede expresarse en función del operador del spin de la cuasipartícula \hat{s} . En un líquido homogéneo isótropo (no en el interior de un campo magnético ni ferromagnético) el operador \hat{s} sólo puede aparecer en la función escalar ε en la forma de los escalares \hat{s}^2 y $(\hat{s} \cdot \mathbf{p})^2$; es inadmisible la primera potencia del producto $\hat{s} \cdot \mathbf{p}$ puesto que el vector spin es un vector axial y, por tanto, este producto es un pseudoescalar. El cuadrado $\hat{s}^2 = s(s+1)$ y en el caso del spin $s = \frac{1}{2}$ el escalar $(\hat{s} \cdot \mathbf{p})^2 = p^2/4$ se reduce también a una constante independiente de \hat{s} . Así pues, en este caso la energía de una cuasipartícula es independiente del operador de spin y todos los niveles energéticos de las cuasipartículas tienen una degeneración doble.

La afirmación de que una cuasipartícula posee spin expresa esencialmente el hecho de que existe esta degeneración. En este sentido podemos decir que el spin de las cuasipartículas en un espectro del tipo considerado es siempre $\frac{1}{2}$, cualquiera que sea el spin de las partículas reales del líquido. En efecto, en el caso de cualquier otro spin diferente de $\frac{1}{2}$ los términos de la forma $(\hat{s} \cdot \mathbf{p})^2$ originarían una descomposición de los niveles con degeneración $(2s+1)$ en $\frac{1}{2}(2s+1)$ niveles doblemente degenerados. En otras palabras, aparecerían $\frac{1}{2}(2s+1)$ ramas diferentes de la función $\varepsilon(\mathbf{p})$, correspondiendo cada una de ellas a «cuasipartículas con spin $\frac{1}{2}$ ».

Como ya se ha mencionado, cuando se tiene en cuenta el spin de las cuasipartículas, la función de distribución se transforma en una matriz o un operador $\hat{n}(\mathbf{p})$ respecto a las variables de spin. Este operador puede escribirse explícitamente como una matriz estadística hermítica $n_{\alpha\beta}(\mathbf{p})$, en donde α y β son índices de la matriz de spin que toman los valores $\pm \frac{1}{2}$. Los elementos diagonales de la matriz determinan el número de cuasipartículas que pertenecen a estados de spin particulares. La condición de normalización para la función de distribución de las cuasipartículas debe escribirse ahora, por consiguiente, en la forma

$$\text{tr } \int \hat{n} d\tau \equiv \int n_{\alpha\alpha} d\tau = N/V, \quad d\tau = d^3p/(2\pi\hbar)^3, \quad (1.2)$$

en donde tr designa la traza de la matriz respecto a los índices de spin.[†]

La energía $\hat{\varepsilon}$ de la cuasipartícula es en general también un operador (una matriz respecto a las variables de spin). Debe definirse mediante

$$\delta E/V = \text{tr } \int \hat{\varepsilon} \delta \hat{n} d\tau \equiv \int \varepsilon_{\alpha\beta} \delta n_{\beta\alpha} d\tau. \quad (1.3)$$

Si no existe ninguna dependencia o relación entre la función de distribución y la energía con el spin, de modo que $n_{\alpha\beta}$ y $\varepsilon_{\alpha\beta}$ se reducen a matrices unidad:

$$n_{\alpha\beta} = n\delta_{\alpha\beta}, \quad \varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon\delta_{\alpha\beta}, \quad (1.4)$$

[†] En esta expresión y en todas las siguientes, la repetición de índices implica la suma, como es usual.

entonces la operación de obtener la traza en (1.2) y en (1.3) equivale a multiplicar simplemente por 2:

$$2 \int n d\tau = N/V, \quad \delta E/V = 2 \int \varepsilon \delta n d\tau. \quad (1.5)$$

Es fácil ver que en el equilibrio estadístico la función de distribución de las cuasipartículas es una distribución de Fermi ordinaria, en la cual la energía está representada por la magnitud $\hat{\varepsilon}$ definida en (1.3). En efecto, como los niveles de energía del gas de Fermi ideal y del líquido se clasifican del mismo modo, la entropía S del líquido se determina mediante una expresión estadística semejante

$$S/V = -\text{tr} \int \{\hat{n} \log \hat{n} - (1-\hat{n}) \log (1-\hat{n})\} d\tau \quad (1.6)$$

a la correspondiente a un gas (Parte 1, § 55). Variando esta expresión con las condiciones adicionales de número de partículas total constante y energía total constante,

$$\delta N/V = \text{tr} \int \delta \hat{n} d\tau = 0, \quad \delta E/V = \text{tr} \int \hat{\varepsilon} \delta \hat{n} d\tau = 0,$$

obtenemos la distribución buscada:

$$\hat{n} = [e^{\hat{\varepsilon}-\mu}/T + 1]^{-1}, \quad (1.7)$$

siendo μ el potencial químico del líquido.

Cuando la energía de la cuasipartícula es independiente del spin, la fórmula (1.7) equivale a una relación análoga entre n y ε :

$$n = [e^{(\varepsilon-\mu)T} + 1]^{-1}. \quad (1.8)$$

A $T = 0$, el potencial químico es igual a la energía límite que corresponde a la superficie de la esfera de Fermi:

$$[\mu]_{T=0} = \varepsilon_F \equiv \varepsilon(p_F). \quad (1.9)$$

Debe resaltarse que, a pesar de la analogía formal entre la expresión (1.8) y la distribución de Fermi ordinaria, no es idéntica a la última: puesto que la propia ε es una funcional de n , la fórmula (1.8) es hablando estrictamente una expresión implícita complicada de n .

Volvamos ahora a la hipótesis de que puede asignarse a cada cuasipartícula un impulso definido. La condición precisa para que sea válida esta hipótesis es que la incertidumbre del impulso (debido al recorrido libre medio finito de la cuasipartícula) sea pequeña no sólo en comparación con el propio impulso, sino también en relación con la anchura Δp de la «zona de transición» de la distribución, en la que difiere apreciablemente de una función escalón:[†]

$$\left. \begin{array}{ll} \theta(\mathbf{p}) \equiv \theta(p) = 1 & \text{para } p < p_F, \\ & \\ & = 0 \quad \text{para } p > p_F. \end{array} \right\} \quad (1.10)$$

Es fácil ver que se satisface esta condición si la distribución $n(\mathbf{p})$ difiere de (1.10) sólo en una pequeña región cerca de la superficie de la esfera de Fermi. Está claro, por el principio de Pauli, que únicamente las cuasipartículas que se encuentran en la zona de transición de la distribución pueden sufrir el scattering o dispersión mutua, como resultado del cual deben aparecer estados libres en dicha zona. De aquí que la probabilidad de la colisión sea proporcional al cuadrado de la anchura de la zona. De acuerdo con ello, la incertidumbre en la energía y, por consiguiente, en el impulso de la cuasipartícula son ambas proporcionales a $(\Delta p)^2$. Por consiguiente resulta claro que, cuando Δp es suficientemente pequeña, la incertidumbre en el impulso será pequeña no sólo en comparación con p_F , sino también con Δp .

Así pues, el método descrito es válido solamente para los estados excitados del líquido que resultan descritos mediante una función de distribución de cuasipartículas, la cual difiere de una función escalón justo en una estrecha región próxima a la superficie de Fermi. En particular, y en el caso de funciones de distribución de equilibrio sólo son permisibles temperaturas suficientemente bajas. La anchura (en energía) de la zona de transición de la distribución de equilibrio es del orden de T . La incertidumbre cuántica en la energía de una cuasipartícula, debida a las colisiones, es del orden de \hbar/τ , siendo τ el tiempo correspondiente al recorrido libre medio de la cuasipartícula. Por tanto, la condición para que sea aplicable la teoría es

$$\hbar/\tau \ll T. \quad (1.11)$$

De acuerdo con el análisis precedente, el tiempo τ es inversamente proporcional al cuadrado de la anchura de la zona de transición:

$$\tau \propto T^{-2}.$$

de modo que (1.11) se satisface ciertamente cuando $T \rightarrow 0$. En el caso de un líquido en el que no sea débil la interacción entre partículas, todos los parámetros de la

[†] Para futuras referencias, puede señalarse que la derivada $\theta'(p) = -\delta(p - p_F)$, puesto que ambos miembros dan la unidad al integrar sobre un intervalo cualquiera de valores de p que incluya el punto $p = p_F$.

energía son del mismo orden que la energía límite ε_F ; en este sentido la condición (1.11) es equivalente a $T \ll |\varepsilon_F|$.†

En el caso de distribuciones que sean casi una función escalón (es decir, todas aquellas que son aproximadamente iguales a la distribución para $T = 0$), se puede sustituir en primera aproximación la función ε por su valor calculado con $n(\mathbf{p}) = \theta(\mathbf{p})$. Entonces ε resulta una función definida del módulo del impulso y (1.7) se convierte en la distribución de Fermi ordinaria.

Cerca de la superficie de la esfera de Fermi, en donde únicamente la función $\varepsilon(\mathbf{p})$ tiene un significado físico directo, puede ésta desarrollarse entonces en potencias de la diferencia $p - p_F$. Tenemos

$$\varepsilon - \varepsilon_F \approx v_F(p - p_F), \quad (1.12)$$

en donde

$$\mathbf{v}_F = [\partial\varepsilon/\partial\mathbf{p}]_{\mathbf{p} = p_F} \quad (1.13)$$

es la «velocidad» de las cuasipartículas en la superficie de Fermi. En un gas de Fermi ideal, en donde las cuasipartículas son idénticas a las partículas reales, tenemos $\varepsilon = p^2/2m$ y, por tanto, $v_F = p_F/m$. Por analogía, podemos definir para un líquido de Fermi la magnitud

$$m^* = p_F/v_F, \quad (1.14)$$

denominada *masa efectiva* de la cuasipartícula y resulta ser positiva (ver el final de § 2).

En función de las magnitudes así definidas, la condición para que pueda ser aplicable la teoría puede escribirse como $T \ll v_F p_F$, y sólo aquellas cuasipartículas con impulsos p tales que $|p - p_F| \ll p_F$ tienen un significado real. En particular este hecho importante hace que deje de ser trivial la relación (1.1) existente entre p_F y la densidad del líquido, puesto que su deducción intuitiva (en el caso de un gas de Fermi) se basa en el concepto de partículas en estados que ocupan la totalidad de la esfera de Fermi y no sólo en la proximidad de su superficie.‡

La masa efectiva determina, en particular, la entropía S y el calor específico C del líquido a temperaturas bajas. Estas magnitudes vienen dadas por las mismas fórmulas que en el caso de un gas ideal (Parte 1, § 58), bastando sustituir en ellas la masa de la partícula m por la masa efectiva m^* :

$$S = C = V\gamma T, \quad \gamma = m^* p_F / 3\hbar^3 = (\frac{1}{3}\pi)^{2/3} (m^*/\hbar^2) (N/V)^{1/3}; \quad (1.15)$$

† Sin embargo, en el caso del He^3 líquido, se demuestra experimentalmente que el margen de aplicabilidad cuantitativa de la teoría está de hecho limitada a $T \lesssim 0,1 \text{ }^\circ\text{K}$ (mientras que $|\varepsilon_F| \approx 2,5 \text{ }^\circ\text{K}$).

‡ La demostración de (1.1) exige el empleo de métodos matemáticos más complicados y se dará en § 20.

debido a que la dependencia lineal entre T , S y C es la misma. Esto es consecuencia de que la expresión (1.6) que nos da la entropía en función de la función de distribución es la misma, tanto para un líquido como para un gas y en el cálculo de esta integral sólo tiene importancia el intervalo de valores de los impulsos cercanos a p_F , en donde la función de distribución de cuasipartículas en el líquido y la función de distribución de partículas en el gas vienen dadas por la misma expresión (1.8).†

Antes de desarrollar más a fondo estas teorías, debe señalarse el punto siguiente. Aunque este método de definir las cuasipartículas en un líquido de Fermi por una analogía exacta con las partículas de un gas es el más conveniente a la hora de deducir sistemáticamente la teoría, la descripción física correspondiente tiene el inconveniente de hacer intervenir la inobservable esfera de Fermi llena de cuasipartículas. Esta dificultad podría eliminarse mediante una formulación en la que sólo apareciesen las excitaciones elementales cuando $T \neq 0$. En dicha descripción, las excitaciones elementales están representadas mediante cuasipartículas fuera de la esfera de Fermi y por «huecos» dentro de ella; a los primeros hay que asignarles, en la aproximación correspondiente a (1.12), la energía $\epsilon = v_F(p - p_F)$ y a los últimos la energía $\epsilon = -v_F(p_F - p)$. La distribución estadística de cada una de ellas viene dada por la fórmula de la distribución de Fermi con potencial de Fermi nulo (de acuerdo con el hecho de que ahora no es constante el número de excitaciones elementales, sino que está determinado por la temperatura)‡.

$$n = [e^{\epsilon/T} + 1]^{-1}. \quad (1.16)$$

En esta descripción las excitaciones elementales aparecen o desaparecen sólo en parejas y, por tanto, los números totales de excitaciones con $p > p_F$ y $p < p_F$ son siempre iguales.

Con esta definición de las excitaciones elementales, su energía es ciertamente positiva y corresponde al exceso de energía del nivel excitado sobre la que posee el nivel fundamental del sistema. La energía de las cuasipartículas definidas mediante (1.3) puede ser o positiva o negativa.

Además, en el caso de un líquido a temperatura cero y presión cero, la magnitud $\epsilon_F = \mu$ es ciertamente negativa y los valores de ϵ próximos a ϵ_F son, por consiguiente, también negativos. Esto es evidente puesto que, cuando $T = 0$ y $P = 0$, $-\mu$ es una magnitud positiva, que corresponde al valor límite del calor de vaporización del líquido por partícula.

† En el caso del He^3 líquido a presión cero, $p_F/\hbar = 0,8 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$; $m^* = 3,1 \text{ m}$ (He^3); p_F se halla a partir de la densidad del líquido y m^* a partir de su calor específico.

‡ Deberá recordarse (cf. Parte 1, § 63) que bajo estas condiciones el número de cuasipartículas N_{qp} está determinado por la condición correspondiente al equilibrio termodinámico: la energía libre F en función de N_{qp} es un mínimo para un volumen y temperatura dados: $(\partial F/\partial N_{qp})_{T,V} = 0$. Sin embargo, esta derivada es precisamente el «potencial químico de las cuasipartículas»; no deberá confundirse con el potencial μ del líquido, que está determinado por la derivada de F respecto al número de partículas reales N .

§ 2. Interacción de cuasipartículas

La energía de las cuasipartículas, al ser una funcional de su función de distribución, varía con dicha función. La variación de la energía en el caso de una pequeña desviación δn de la función de distribución respecto a la función escalón (1.10) debe ser

$$\delta E_{\alpha\beta}(\mathbf{p}) = \int f_{\alpha\gamma, \beta\delta}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n_{\delta\gamma}(\mathbf{p}') d\tau' \quad (2.1)$$

o, en forma más simbólica,

$$\hat{\delta E}(\mathbf{p}) = \text{tr}' \int \hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta \hat{n}(\mathbf{p}') d\tau',$$

en donde tr' designa la traza respecto al par de índices de spin que corresponden al impulso \mathbf{p}' . La función f puede denominarse *función de interacción* de las cuasipartículas; en un gas de Fermi, $\hat{f} \equiv 0$. Por definición representa la segunda derivada variacional de la energía total E del líquido y, por tanto, es simétrica en las variables \mathbf{p} , \mathbf{p}' y los pares de índices correspondientes:

$$f_{\alpha\gamma, \beta\delta}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = f_{\gamma\alpha, \delta\beta}(\mathbf{p}', \mathbf{p}). \quad (2.2)$$

Con la variación (2.1), la energía de las cuasipartículas cerca de la superficie de la esfera de Fermi viene dada por la suma

$$\hat{E}(\mathbf{p}) - E_F = v_F(p - p_F) + \text{tr}' \int \hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta \hat{n}(\mathbf{p}') d\tau'. \quad (2.3)$$

En particular, en el caso de distribución de equilibrio termodinámico, el segundo término en (2.3) da la dependencia con la temperatura de la energía de la cuasipartícula. La desviación $\delta \hat{n}'$ es apreciablemente diferente de cero sólo en una banda estrecha de valores de \mathbf{p}' cerca de la superficie de la esfera de Fermi y en ella se contienen los impulsos \mathbf{p} de las cuasipartículas reales. La función $\hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ en (2.1) y (2.3) puede, por consiguiente, sustituirse en la práctica por su valor en esta superficie, haciendo $p = p' = p_F$, de modo que \hat{f} dependerá solamente de las direcciones de los vectores \mathbf{p} y \mathbf{p}' .

La dependencia con el spin de la función \hat{f} se debe tanto a los efectos relativistas (interacciones spin-spin y spin-órbita) como a la interacción de canje o intercambio. Esta última es la más importante. Cuando se tiene en cuenta, la función de interacción de las cuasipartículas tiene la forma (en la superficie de Fermi)

$$(p_F m^*/\pi^2 \hbar^3) \hat{f}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = F(\vartheta) + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}' G(\vartheta), \quad (2.4)$$

en donde $\boldsymbol{\sigma}$ y $\boldsymbol{\sigma}'$ son las matrices de Pauli que actúan sobre los índices de spin correspondientes (es decir, que corresponden a las variables \mathbf{p} y \mathbf{p}') mientras que F y G

son dos funciones del ángulo θ formado entre \mathbf{p} y \mathbf{p}' .[†] La forma de esta expresión se debe a la propiedad característica de la interacción de intercambio, que es independiente de la orientación espacial del momento angular total del sistema, de modo que en ella sólo pueden aparecer los dos operadores de spin como un producto escalar. Las funciones F y G , según están definidas en (2.4), son adimensionales. El factor separado con este objeto a la izquierda de (2.4) en su primer miembro es el número de estados de cuasipartículas sobre la superficie de Fermi por unidad de intervalo de energía:

$$v(\epsilon_F) = [2d\tau/d\varepsilon]_{\varepsilon=\epsilon_F} = \frac{2 \cdot 4\pi p_F^2}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{dp}{d\varepsilon} \right)_{p_F}$$

o sea,

$$v_F = p_F^2/\pi^2\hbar^3 v_F = p_F m^*/\pi^2\hbar^3. \quad (2.5)$$

Como la traza de una matriz de Pauli es nula, se hace cero el segundo miembro de (2.4) cuando se toma la traza tr' y $\text{tr}'f$ es también independiente de σ . De hecho, esto ocurre también cuando se tienen en cuenta las interacciones spin-órbita y spin-spin. La razón es que la función escalar $\text{tr}'f$ sólo podría contener el operador de spin en forma de producto $\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{p}'$ de los dos vectores axiales $\hat{\mathbf{s}}$ y $\mathbf{p} \times \mathbf{p}'$; no es necesario considerar expresiones cuadráticas de las componentes de $\hat{\mathbf{s}}$ puesto que en el caso de spin $\frac{1}{2}$ todas ellas se reducen a términos lineales en $\hat{\mathbf{s}}$ o independientes de $\hat{\mathbf{s}}$. Pero este producto no es invariante bajo la inversión del tiempo y, por consiguiente, no puede aparecer en la magnitud invariante $\text{tr}'f$.

Resultará conveniente la siguiente notación:

$$f_{\alpha\gamma, \beta\delta}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \delta_{\alpha\beta} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}'), \quad f = \frac{1}{2} \text{tr} \text{tr}' f. \quad (2.6)$$

A partir de la expresión (2.4) tenemos

$$(p_F m^*/\pi^2\hbar^3) f(\vartheta) = 2F(\vartheta). \quad (2.7)$$

La función de interacción de las cuasipartículas satisface una cierta relación integral que se deduce del principio de relatividad de Galileo. Una consecuencia directa de este principio es que el impulso del líquido por unidad de volumen es igual a su densidad de flujo máscio. La velocidad de una cuasipartícula es $\partial\varepsilon/\partial\mathbf{p}$, de modo que el flujo de cuasipartículas es

$$\text{tr} \int \hat{n} (\partial\hat{\varepsilon}/\partial\mathbf{p}) d\tau.$$

[†] En forma matricial explícita.

$$(p_F m^*/\pi^2\hbar^3) f_{\alpha\gamma, \beta\delta} = F \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + G \sigma_{\alpha\beta} \cdot \sigma_{\gamma\delta}. \quad (2.4a)$$

Como el número de cuasipartículas en el líquido es el mismo que el de partículas reales, es evidente que la transferencia de masa total mediante cuasipartículas se encuentra multiplicando su flujo numérico por la masa de la partícula real m . Así obtenemos la ecuación

$$\text{tr} \int \mathbf{p} \hat{n} d\tau = \text{tr} \int m(\partial \hat{\varepsilon} / \partial \mathbf{p}) \hat{n} d\tau. \quad (2.8)$$

Haciendo $n_{ab} = n\delta_{ab}$, $\varepsilon_{ab} = \varepsilon\delta_{ab}$, podemos obtener la variación de ambos miembros de (2.8) para lo cual utilizaremos (2.1) y tomaremos f de (2.6):

$$\begin{aligned} \int \mathbf{p} \delta n d\tau &= m \int \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} \delta n d\tau + m \int \frac{\partial f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')}{\partial \mathbf{p}} n \delta n' d\tau d\tau', \\ &= m \int \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}} \delta n d\tau - m \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial n'}{\partial \mathbf{p}'} \delta n d\tau d\tau', \end{aligned}$$

en donde $n' \equiv n(\mathbf{p}')$; en la segunda integral hemos vuelto a denominar a las variables e integrado por partes. Como δn es arbitrario, esto nos da la relación buscada:

$$\mathbf{p}/m = \partial \varepsilon / \partial \mathbf{p} - \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [\partial n(\mathbf{p}') / \partial \mathbf{p}'] d\tau'. \quad (2.9)$$

En el caso de una función escalón $n(\mathbf{p}') = \theta(\mathbf{p}')$, la derivada $\partial n'/\partial \mathbf{p}'$ se reduce a la función delta

$$\partial \theta(p)/\partial \mathbf{p} = -(\mathbf{p}/p) \delta(p - p_F). \quad (2.10)$$

Sustituyendo en (2.9) la función $\varepsilon(\mathbf{p})$ tomada de (1.12) y sustituyendo luego el impulso $\mathbf{p} = p\mathbf{n}$ en todas partes por el valor $\mathbf{p}_F = p_F \mathbf{n}$ sobre la superficie de Fermi y multiplicando ambos miembros de la ecuación por \mathbf{p}_F , se consigue la relación siguiente entre la masa m de las partículas reales y la masa efectiva de las cuasipartículas:

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m^*} + \frac{p_F}{(2\pi\hbar)^3} \int f(\vartheta) \cos \vartheta d\sigma', \quad (2.11)$$

en donde $d\sigma'$ es el elemento de ángulo sólido en la dirección de \mathbf{p}' . Si sustituimos aquí la expresión (2.7) para $f(\theta)$, esta ecuación se reduce a

$$m^*/m = 1 + \overline{F(\vartheta)} \cos \vartheta, \quad (2.12)$$

en donde la barra designa el proceso de promediar respecto a las direcciones, es decir, la integración respecto a $d\sigma'/4\pi = \frac{1}{2} \sin \vartheta d\theta$.

Calculemos también la compresibilidad de un líquido de Fermi en el cero absoluto, es decir la cantidad $u^2 = \partial P / \partial \rho$.[†] La densidad del líquido es $\rho = mN/V$, de modo que

$$u^2 = -(V^2/mN) \partial P / \partial V.$$

Para calcular esta derivada es conveniente expresarla en función de la derivada del potencial químico. Como este último depende de N y V a través solamente del cociente N/V y puesto que para $T = \text{constante} = 0$ se tiene $d\mu = VdP/N$, resultando

$$\frac{\partial \mu}{\partial N} = -\frac{V}{N} \frac{\partial \mu}{\partial V} = -\frac{V^2}{N^2} \frac{\partial P}{\partial V},$$

y, por tanto,

$$u^2 = \frac{N}{m} \frac{\partial \mu}{\partial N}. \quad (2.13)$$

Como $\mu = \varepsilon_F$ para $T = 0$, la variación $\delta\mu$ que se obtiene cuando el número de partículas varía en δN es

$$\delta\mu = \int f(\mathbf{p}_F, \mathbf{p}') \delta n' d\tau' + (\partial \varepsilon_F / \partial p_F) \delta p_F. \quad (2.14)$$

El primer término de esta expresión nos da la variación de $\varepsilon(p_F)$ debida a la variación de la función de distribución. El segundo término aparece porque una variación en el número total de partículas influye también sobre el valor del impulso límite a partir de (1.1), tenemos que $\delta N = Vp_F^2 \delta p_F / \pi^2 \hbar^3$. Como $\delta n'$ es apreciablemente diferente de cero sólo cuando $p' \approx p_F$, podemos escribir, si sustituimos f en la integral por su valor en la superficie de Fermi,

$$\int f \delta n' d\tau' \approx \frac{1}{2} \int f do' \int \delta n' \frac{2 d\tau'}{4\pi} = \frac{1}{2} 4\pi \vec{f} \frac{\delta N}{4\pi V}.$$

Sustituyendo esta expresión en (2.14) y haciendo $\partial \varepsilon_F / \partial p_F = p_F m^*$, se obtiene

$$\frac{\partial \mu}{\partial N} = \frac{\vec{f}}{2V} + \frac{\pi^2 \hbar^3}{p_F m^* V}. \quad (2.15)$$

[†] Cuando $T = 0$ también $S = 0$ y entonces no es necesario distinguir entre compresibilidad isotérmica y adiabática. Se define la magnitud u mediante la expresión usual para la velocidad del sonido en el líquido. Sin embargo, debe recordarse que a $T = 0$ el sonido ordinario no puede realmente propagarse en un líquido de Fermi; ver al principio de § 4.

Finalmente, sustituyendo $1/m^*$ de (2.11) y utilizando una vez más (1.1), resulta

$$u^2 = \frac{p_F^2}{3m^2} + \frac{1}{3m} \left(\frac{p_F}{2\pi\hbar} \right)^3 \int f(\vartheta) (1 - \cos \vartheta) d\vartheta. \quad (2.16)$$

Con $f(\vartheta)$ tomada de (2.7) y utilizando (2.12) podemos poner esta expresión en la forma

$$u^2 = \frac{p_F^2}{3mm^*} [1 + \overline{F(\vartheta)}]. \quad (2.17)$$

La función f debe satisfacer ciertas condiciones que son el resultado del requisito de estabilidad del estado fundamental del líquido. Este estado corresponde a la ocupación de todos los estados de cuasipartículas que hay dentro de la esfera de Fermi y su energía debe ser un mínimo respecto a cualquier pequeña deformación de la esfera. No daremos todos los cálculos detalladamente, sino únicamente los resultados finales,[†] que pueden expresarse de modo conveniente mediante el desarrollo de las funciones $F(\theta)$ y $G(\theta)$ definidas en (2.4) en serie de polinomios de Legendre:

$$F(\vartheta) = \sum_l (2l+1) F_l P_l(\cos \vartheta), \quad G(\vartheta) = \sum_l (2l+1) G_l P_l(\cos \vartheta); \quad (2.18)$$

con esta definición, los coeficientes F_1 y G_1 son los valores medios de los productos FP_1 y GP_1 . Entonces las condiciones de estabilidad son las desigualdades

$$F_l + 1 > 0, \quad (2.19)$$

$$G_l + 1 > 0. \quad (2.20)$$

Una comparación de (2.19) para $l = 1$ con la expresión (2.12) de la masa efectiva muestra que esta última es positiva. La condición (2.19) para $l = 0$ asegura que (2.17) es positiva.[‡]

§ 3. Susceptibilidad magnética de un líquido de Fermi

Una cuasipartícula con spin no nulo tiene en general también un momento magnético. En el caso de spin $\frac{1}{2}$, el operador de este momento es $\beta\sigma$ (la componente z del momento magnético es $\pm\beta$). La constante $2\beta/\hbar$ que da el cociente entre el momento magnético de la cuasipartícula y su momento angular $\frac{1}{2}\hbar$ es igual a la cons-

[†] Ver I. Ya. Pomeranchuk, *Soviet Physics JETP*, **8**, 361, 1959.

[‡] En el caso $l = 1$, tenemos también la desigualdad $F_1 > G_1$ como ha demostrado A. J. Leggett, *Annals of Physics* **46**, 76, 1968.

tante correspondiente para las partículas reales; evidentemente el valor de este cociente resulta invariable cualquiera que sea el modo de adicionar spins de partícula al spin de la cuasipartícula.

La existencia del momento magnético de la cuasipartícula conduce a su vez al paramagnetismo del líquido. La susceptibilidad magnética correspondiente puede calcularse del modo siguiente.

En el caso de una cuasipartícula «libre», el operador de su energía adicional cuando está en el interior del campo magnético \mathbf{H} será $-\beta\sigma \cdot \mathbf{H}$. Sin embargo, en un líquido de Fermi, debemos tener en cuenta que la interacción entre las cuasipartículas hace que varíe la energía de cada una de ellas, puesto que la función de distribución resulta alterada en presencia del campo magnético. Por consiguiente, al calcular la susceptibilidad magnética debemos escribir el operador de variación de la energía de la cuasipartícula como

$$\delta\hat{\epsilon} = -\beta\sigma \cdot \mathbf{H} + \text{tr}' \int f \delta\hat{n}' d\tau'. \quad (3.1)$$

La variación de la función de distribución viene dada en función de $\delta\hat{\epsilon}$ por $\delta\hat{n} = (\delta n/\delta\epsilon)\delta\hat{\epsilon}$;† así pues, tenemos

$$\delta\hat{\epsilon}(\mathbf{p}) = -\beta\sigma \cdot \mathbf{H} + \text{tr}' \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (dn'/d\epsilon') \delta\hat{\epsilon}(\mathbf{p}') d\tau'. \quad (3.2)$$

Sólo necesitamos la solución de esta ecuación en la superficie de la esfera de Fermi y la buscaremos en la forma

$$\delta\hat{\epsilon} = -\frac{1}{2}\beta g\sigma \cdot \mathbf{H}, \quad (3.3)$$

siendo g una constante. En el caso de una función escalón $n(\mathbf{p}') = \theta(p')$, tenemos

$$dn'/d\epsilon' = -\delta(\epsilon' - \epsilon_F),$$

de modo que la integración sobre $d\epsilon' = d\epsilon'/v_F$ se reduce a tomar el valor del integrando en la superficie de Fermi. Sustituyendo f a partir de (2.4) y observando que las matrices de Pauli satisfacen

$$\text{tr } \sigma = 0, \quad \text{tr}'(\sigma \cdot \sigma') \sigma' = \frac{1}{3} \sigma \text{ tr}' \sigma' \cdot \sigma' = 2\sigma,$$

se tiene

$$g = 2 - \overline{gG(\vartheta)},$$

† Al calcular el incremento dependiente del tiempo δn , podemos despreciar la variación del potencial químico. La variación de la magnitud macroscópica μ en un líquido isotrópico sólo puede ser cuadrática con el campo \mathbf{H} (que se supone que es pequeño al calcular la susceptibilidad) mientras que $\delta\hat{\epsilon}$ es del primer orden en el campo. Como la susceptibilidad magnética del líquido es pequeña, no necesitamos distinguir entre el campo y la inducción en él.

o bien

$$g = 2/[1 + \bar{G}(\theta)], \quad (3.4)$$

en donde de nuevo designamos con la barra un promedio respecto a las direcciones como en (2.12).

La susceptibilidad χ se determina a partir de la expresión que nos da el momento magnético por unidad de volumen del líquido:

$$\chi \mathbf{H} = \beta \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma} \delta \hat{n} d\tau = \beta \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma} \delta \hat{e} (\partial n / \partial e) d\tau$$

o, después de integrar con la función escalón $n(\mathbf{p})$,

$$\chi \mathbf{H} = -\beta \frac{p_F m^*}{2\pi^2 \hbar^3} \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma} \delta \hat{e}(p_F).$$

Finalmente sustituyendo (3.3) y (3.4) y observando que $\operatorname{tr} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H}) \boldsymbol{\sigma} = 2\mathbf{H}$, se encuentra

$$\chi = \frac{\beta^2 p_F m^*}{\pi^2 \hbar^3 (1 + \bar{G})} = \frac{3\gamma \beta^2}{\pi^2 (1 + \bar{G})}, \quad (3.5)$$

en donde γ es el coeficiente de la ley lineal del calor específico (1.15). La expresión $\chi = 3\gamma \beta^2 / \pi^2$ nos da la susceptibilidad de un gas de Fermi degenerado de partículas con momento magnético β ; ver Parte 1, (59.5). El factor $1/(1 + \bar{G})$ representa la diferencia entre un líquido de Fermi y un gas de Fermi.[†]

La condición de estabilidad (2.20) con $l = 0$ es la misma que la condición $\chi > 0$.

§ 4. Sonido cero

Los estados de no equilibrio de un líquido de Fermi se describen mediante funciones de distribución de cuasipartículas que dependen no sólo de los momentos, sino también de las coordenadas y del tiempo. Estas funciones $\hat{n}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ satisfacen una ecuación de transporte

$$d\hat{n}/dt = I(\hat{n}), \quad (4.1)$$

en donde $I(\hat{n})$ es la *integral de colisión* que da la variación del número de cuasipartículas en un elemento dado del volumen de fases debida a las colisiones entre ellas.[‡]

[†] En el caso del He³, $\bar{G} \approx -2/3$.

[‡] Esta sección presupone que el lector está familiarizado con la ecuación de transporte y en este aspecto se sale del objetivo del libro. Sin embargo, la teoría de los líquidos de Fermi resultaría incompletamente formulada sin la ecuación de transporte (y su aplicación en §§ 4 y 5). Sólo necesitaremos la ecuación sin la integral de colisión; los problemas en que interviene la forma específica de esta integral se estudiarán en otro volumen que trata de cinética física.

La derivada total respecto al tiempo en (4.1) incluye tanto la dependencia explícita de \hat{n} con t como la dependencia implícita debida a la variación de las coordenadas, impulso y variables de spin de las cuasipartículas de acuerdo con sus ecuaciones del movimiento. La característica distintiva del líquido de Fermi puesto que la energía de la cuasipartícula es una funcional de la función de distribución, en un líquido inhomogéneo, es que tanto ϵ como \hat{n} dependen de las coordenadas.

En el caso de distribuciones n que difieren sólo ligeramente de la distribución de equilibrio n_0 , escribiremos

$$\hat{n}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = n_0(\mathbf{p}) + \delta\hat{n}(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t). \quad (4.2)$$

La energía de la cuasipartícula es entonces $\hat{\epsilon} = \epsilon_0 + \delta\hat{\epsilon}$, siendo ϵ_0 la energía correspondiente a la distribución de equilibrio mientras que $\delta\hat{\epsilon}$ viene dada por (2.1), de modo que

$$\frac{\partial \hat{\epsilon}}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial \delta\hat{\epsilon}}{\partial \mathbf{r}} = \text{tr}' \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{\partial \delta\hat{n}(\mathbf{p}')}{\partial \mathbf{r}} d\mathbf{r}'. \quad (4.3)$$

Si no existe ningún campo magnético externo, ϵ_0 y n_0 son independientes del spin.

La dependencia temporal explícita de \hat{n} da un término en $d\hat{n}/dt$

$$\partial\hat{n}/\partial t = \partial\delta\hat{n}/\partial t.$$

La dependencia de las coordenadas y el impulso da los términos

$$\frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{r}} + \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}.$$

La energía $\hat{\epsilon}$ de la cuasipartícula juega el papel del hamiltoniano. A partir de las ecuaciones de Hamilton,

$$\hat{\mathbf{r}} = \partial\hat{\epsilon}/\partial\mathbf{p}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -\partial\hat{\epsilon}/\partial\mathbf{r}.$$

Así tenemos, hasta los términos de primer orden en $\delta\hat{n}$,

$$\frac{\partial\delta\hat{n}}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \epsilon_0}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \delta\hat{\epsilon}}{\partial \mathbf{r}}.$$

Finalmente, la variación respecto al tiempo de la función \hat{n} considerada como un operador respecto a las variables de spin viene dada, de acuerdo con las reglas generales de la mecánica cuántica, por el comutador

$$(i/\hbar) [\hat{\epsilon}, \hat{n}]. \quad (4.4)$$

Sin embargo, cuando n_0 y ε_0 son independientes del spin, no existen en este conmutador términos de primer orden en $\delta\hat{n}$.

Reuniendo los diversos términos, obtenemos la ecuación

$$\frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \delta\varepsilon}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = I(\hat{n}). \quad (4.5)$$

Antes de pasar a aplicar la ecuación de transporte, estudiemos las condiciones para que resulte válida. Al utilizar las ecuaciones clásicas respecto a las coordenadas y el impulso, hemos admitido que el movimiento de las cuasipartículas es cuasiclásico; la misma hipótesis subyace ya de modo esencial en la descripción del líquido mediante una función de distribución que depende a la vez de las coordenadas y de los impulsos de las cuasipartículas. La condición para que se tenga el movimiento cuasiclásico es que la longitud de onda de Broglie \hbar/p_F de la cuasipartícula sea pequeña en comparación con la longitud característica L sobre la cual varía n de modo considerable. Si se utiliza en lugar de L el «número de ondas» de la inhomogeneidad, $k \sim 1/L$, podemos escribir esta condición como†

$$\hbar k \ll p_F. \quad (4.6)$$

La frecuencia ω de la variación de la función de distribución que se establece para un k dado es del orden de $v_F k$ y automáticamente satisface la condición

$$\hbar\omega \ll \varepsilon_F. \quad (4.7)$$

Puede existir cualquier relación entre $\hbar\omega$ y la temperatura T . Si $\hbar\omega \gg T$, la anchura de la zona de transición de la función de distribución es $\hbar\omega$; entonces (4.7) es la condición necesaria para que sea válida toda la teoría, asegurando que la incertidumbre cuántica de la energía de la cuasipartícula (debida a sus colisiones) es pequeña en comparación con $\hbar\omega$.

Apliquemos ahora la ecuación de transporte para estudiar el movimiento de vibración en un líquido de Fermi.

A temperaturas bajas (pero no cero), se producen colisiones entre las cuasipartículas de un líquido de Fermi y el tiempo libre medio es $\tau \propto T^{-2}$. La naturaleza de las ondas que se propagan en el líquido depende esencialmente del valor de $\omega\tau$.

Cuando $\omega\tau \ll 1$ (que es efectivamente la condición para que el recorrido libre medio de las cuasipartículas l sea pequeño en comparación con la longitud de onda λ), las colisiones son capaces de llevar al equilibrio termodinámico en cada elemento de volumen del líquido (pequeño en comparación con λ). Esto significa que tenemos ondas sonoras hidrodinámicas ordinarias propagándose con velocidad $u = \sqrt{\partial P/\partial \rho}$.

† De acuerdo con la definición (1.1), \hbar/p_F es del orden de las distancias interatómicas, de modo que la condición (4.6) es muy débil.

La absorción de las ondas sonoras es pequeña cuando $\omega\tau \ll 1$, pero aumenta con $\omega\tau$, y para $\omega\tau \sim 1$ resulta muy intensa, de modo que se hace imposible su propagación.[†]

Cuando $\omega\tau$ aumenta aún más, hasta ser $\omega\tau \gg 1$, resulta de nuevo posible la propagación de las ondas sonoras en el líquido de Fermi, pero ahora las ondas tienen un carácter físico diferente. En estas vibraciones, carecen de importancia las colisiones de las cuasipartículas y no se establece el equilibrio termodinámico en cada elemento de volumen. Puede considerarse que el proceso ocurre como si se produjese en el cero absoluto de temperatura. Estas ondas se denominan *sonido cero*.

De acuerdo con el análisis anterior, puede omitirse la integral de colisión en la ecuación de transporte cuando $\omega\tau \gg 1$; entonces

$$\frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \delta\hat{e}}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad (4.8)$$

en donde $\mathbf{v} = \partial\varepsilon/\partial\mathbf{p}$ es la velocidad de la cuasipartícula calculada a partir de la energía sin perturbar ε ($\mathbf{v} = v_F \mathbf{n}$, en donde \mathbf{n} es un vector unitario en la dirección de \mathbf{p}); en esta ecuación y en lo sucesivo se omite el subíndice 0.

Cuando $T = 0$, la función de distribución de equilibrio n_0 es una función escalaón $\theta(p)$ que corta en el impulso límite $p = p_F$. Su derivada es

$$\frac{\partial n_0}{\partial \mathbf{p}} = -\mathbf{n}\delta(p - p_F) = -\mathbf{v}\delta(\varepsilon - \varepsilon_F).$$

Suponiendo que la dependencia con el tiempo y las coordenadas de δn en la onda viene dada por el factor $\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$, buscaremos una solución de la ecuación de transporte en la forma

$$\delta\hat{n} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)\hat{v}(\mathbf{n}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}. \quad (4.9)$$

Entonces (4.8) con $\partial\delta\hat{e}/\partial\mathbf{r}$ dada en (4.3), se transforma en

$$(\omega - v_F \mathbf{n} \cdot \mathbf{k}) \hat{v}(\mathbf{n}) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{k} \frac{p_F^2}{(2\pi\hbar)^3} \text{tr}' \int \hat{f}(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \hat{v}(\mathbf{n}') d\mathbf{o}, \quad (4.10)$$

en donde \mathbf{n} y \mathbf{n}' son vectores unitarios en las direcciones \mathbf{p} y \mathbf{p}' y la integración se realiza sobre las direcciones de \mathbf{n}' .

Consideremos vibraciones (sonido cero) que no afecten a las propiedades de spin del líquido. Esto significa que tanto la distribución de equilibrio como su «per-

[†] Cuando $\omega\tau \ll 1$, el coeficiente de absorción del sonido $\gamma \sim \omega^2 \eta / \rho u^3$ siendo η la viscosidad del líquido. En órdenes de magnitud, $u \sim v_F$, $\eta/\rho \sim v_F/l \sim v_F^2\tau$, siendo v_F la velocidad de la cuasipartícula (independiente de la temperatura), de modo que $\eta \propto T^{-2}$ (I. Ya. Pomeranchuk 1950). Entonces $\gamma u/\omega \sim \omega\tau \propto \omega T^2$.

turbación» δn son independientes de las variables de spin. En una onda de este tipo la variación de la función de distribución durante la vibración equivale a una deformación de la superficie límite de Fermi (que es una esfera en la distribución sin perturbar) y que sigue siendo un límite nítido entre los estados de las cuasipartículas ocupados y sin ocupar. La función $v(\mathbf{n})$ es el desplazamiento (en unidades de energía) de esta superficie en una dirección \mathbf{n} dada.

Como $v(\mathbf{n}')$ es independiente de las variables de spin, la operación tr' en (4.10) se aplica sólo a f . Escribiendo f en la forma (2.4) tenemos $\text{tr}'f = (2\pi^2\hbar^3/p_F m^*)F(\theta)$. Así pues, el operador σ deja de aparecer en esta ecuación, que se convierte ahora en

$$(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) v(\mathbf{n}) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \int F(\theta) v(\mathbf{n}') d\theta' / 4\pi. \quad (4.11)$$

Tomemos la dirección de \mathbf{k} como el eje polar y definamos la dirección de \mathbf{n} por los ángulos θ y ϕ . Introduciendo la velocidad de propagación de la onda $u_0 = \omega/k$ y la notación $s = u_0/v_F$, podemos escribir la ecuación en la forma final

$$(s - \cos \theta) v(\theta, \phi) = \cos \theta \int F(\theta) v(\theta', \phi') d\theta' / 4\pi. \quad (4.12)$$

Esta ecuación integral determina en principio la velocidad de propagación de la onda y la función $v(\mathbf{n}')$ de las ondas. Puede verse también que en el caso de vibraciones no amortiguadas (las únicas que estamos considerando aquí), s debe ser mayor que la unidad, es decir

$$u_0 > v_F. \quad (4.13)$$

Puede comprenderse el origen de esta desigualdad si volvemos a escribir (4.12) como

$$\tilde{v}(\theta, \phi) = \cos \theta \int F(\theta) \frac{\tilde{v}(\theta', \phi')}{s - \cos \theta'} \frac{d\theta'}{4\pi},$$

en donde se ha reemplazado v por otra función desconocida $\tilde{v} = (s - \cos \theta)v$. Cuando $s = \omega/kv_F < 1$, el integrando tiene un polo en $\cos \theta' = s$ y con objeto de hacer que esta integral tenga significado debe evitarse este polo en el plano de la variable compleja $\cos \theta'$ mediante alguna regla definida. Esta regla adiciona una parte imaginaria a la integral; por consiguiente, la frecuencia ω adquiere también una parte imaginaria (para un valor real dado de k) y la onda está amortiguada. El significado físico de la ecuación $\cos \theta = u'_0 v_F$, correspondiente al polo, es que esta condición es la necesaria para que las cuasipartículas emitan ondas de Cherenkov de sonido cero.[†]

[†] Este fenómeno se denomina *amortiguamiento de Landau*; se estudiará detalladamente en conexión con las oscilaciones del plasma, en el último volumen del curso. La regla para evitar el polo en la integral viene dada por la sustitución de ω por $\omega + i0$ (es decir, $s \rightarrow s + i0$); esto significa que la perturbación se hace finita en todos los instantes anteriores (incluyendo $t \rightarrow -\infty$).

Como ejemplo, consideremos el caso en el que $F(\theta)$ es una constante F_0 . La integral del segundo miembro de (4.12) es entonces independiente de los ángulos θ y ϕ y, por consiguiente, la función requerida v es

$$v = \text{constante} \times \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta}. \quad (4.14)$$

La superficie de Fermi resulta así una superficie de revolución alargada hacia la propia dirección de la propagación de la onda y aplastada en la dirección opuesta. Esta anisotropía es una consecuencia del estado de no equilibrio del líquido en cada uno de sus elementos de volumen: en el equilibrio todas las propiedades del líquido deben ser isótropas y, por tanto, la superficie de Fermi debe ser esférica. Para comparación conviene mencionar que una onda sonora ordinaria corresponde a una superficie esférica de Fermi con radio oscilante (el impulso límite p_F varía con la densidad del líquido) que se desplaza como un todo en una cantidad que depende de la velocidad del líquido en la onda; la función correspondiente v es $v = \delta p_F^+ \text{constante} \times \cos \theta$.

Para hallar la velocidad de propagación de la onda de sonido cero u_0 , sustituimos (4.14) en (4.12):

$$F_0 \int_0^\pi \frac{\cos \theta}{s - \cos \theta} \frac{2\pi \sin \theta d\theta}{4\pi} = 1.$$

Al integrar se obtiene una ecuación que implícitamente determina u_0 para un valor dado de F_0 :

$$\frac{1}{2} s \log \frac{s+1}{s-1} - 1 = 1/F_0. \quad (4.15)$$

La función del primer miembro desciende desde el infinito hasta cero cuando s varía desde 1 hasta ∞ y es siempre positiva. De aquí se deduce que las ondas que estamos considerando sólo pueden existir cuando $F_0 > 0$. Debe resaltarse que la posibilidad de propagación del sonido cero depende de las propiedades de la interacción de las cuasipartículas en el líquido de Fermi.

Cuando $F_0 \rightarrow 0$, (4.15) muestra que s tiende hacia la unidad:

$$s - 1 \approx \frac{2}{e^2} e^{-2/F_0}. \quad (4.16)$$

Este caso tiene una mayor significación general que (4.15) (en el que se supone que F es una constante $\equiv F_0$): corresponde al sonido cero en un gas de Fermi casi ideal para una función cualquiera $F(\theta)$. Un gas casi ideal tiene una función $F(\theta)$ cuyo

valor es pequeño. Se ve a partir de (4.12) que entonces s resulta próxima a 1 y v es apreciablemente diferente de cero sólo para ángulos θ pequeños. De aquí que, al considerar sólo el intervalo de ángulos pequeños, podemos sustituir $F(\theta)$ en el segundo miembro de (4.12) por su valor cuando $\theta = 0$ (que corresponde a $\theta = \theta' = 0$). Volvamos luego a (4.14) y (4.16) sustituyendo la constante F_0 por $F(0)$.† En un gas ligeramente no ideal, la velocidad del sonido cero supera a la del sonido ordinario en un factor $1/3$: para el primero $u_0 \approx v_F$ y para el último (2.17) da (despreciando F y haciendo $m \approx m^*$) $u^2 \approx p_F^2/3m^{*2} = v_F^2/3$.

En el caso general de una función $F(\theta)$ arbitraria, la solución de (4.12) no es única. En principio, la ecuación permite la existencia de diversos tipos de sonido cero que difieren en la dependencia que con los ángulos tiene la amplitud $v(\theta, \phi)$ y que se propagan con diversas velocidades. Del mismo modo que las soluciones axialmente simétricas $v(\theta)$, pueden existir también soluciones asimétricas en las que v contiene factores azimutales $e^{\pm im\phi}$ siendo m un número entero (ver problema). Para todas estas soluciones la integral $\int v d\Omega = 0$, es decir, el volumen dentro de la esfera de Fermi es fijo. Esto significa que las vibraciones no alteran la densidad del líquido.

La posibilidad de la propagación de ondas en un líquido de Fermi en el cero absoluto implica que su espectro de energía puede contener una rama correspondiente a excitaciones elementales con impulso $p = \hbar k$ y energía $\epsilon = \hbar\omega = u_0 p$, que son «cuantos de sonido cero». El hecho de que el sonido cero (para cualquier valor de k) pueda tener una intensidad arbitraria (pequeña) significa, en función de las excitaciones elementales, que éstas pueden ocupar sus estados cuánticos en número cualquiera; es decir, obedecen a la estadística de Bose y forman lo que se denomina la *rama de Bose* del espectro del líquido de Fermi. Sin embargo, debe llamarse la atención sobre el hecho de que en la teoría de Landau sería impropio aplicar las correcciones correspondientes a esta rama a las magnitudes termodinámicas del líquido de Fermi, puesto que éstas contienen potencias de la temperatura (T^3 en el calor específico) superiores incluso a las primeras correcciones a la teoría aproximada dada anteriormente.

El problema de la absorción del sonido cero exige la consideración de las colisiones de las cuasipartículas y está fuera del objetivo de este libro.

PROBLEMA

Hallar la velocidad de propagación de ondas asimétricas de sonido cero cuando

$$F = F_0 + F_1 \cos \theta.$$

SOLUCIÓN. Cuando

$$F = F_0 + F_0 + F_1 [\cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi' - \phi)],$$

† Las vibraciones correspondientes al sonido cero en un gas de Fermi ligeramente no ideal fueron estudiadas en primer lugar por Yu. L. Klimontovich y V. P. Silin (1952).

pueden existir con $v \propto e^{\pm i\phi}$; haciendo $v = f(\theta)e^{i\phi}$, sustituyendo en (4.12) e integrando respecto a ϕ' , obtenemos

$$(s - \cos \theta)f = \frac{1}{4}F_1 \cos \theta \operatorname{sen} \theta \int_0^\pi \operatorname{sen}^2 \theta' f(\theta') d\theta'.$$

De aquí que

$$v = \text{constante} \times \frac{\operatorname{sen} \theta \cos \theta}{s - \cos \theta} e^{i\phi}.$$

Sustituyendo esta expresión de nuevo en la ecuación, se tiene

$$\int_0^\pi \frac{\operatorname{sen}^3 \theta \cos \theta}{s - \cos \theta} d\theta = 4/F_1,$$

que da la dependencia de la velocidad de propagación con F_1 . La integral del segundo miembro es una función monótonamente decreciente con s . Por lo tanto, se da su máximo valor cuando $s = 1$. Calculando la integral para $s = 1$, encontramos que puede propagarse una onda asimétrica del tipo considerado si $F_1 > 6$.†

§ 5. Ondas de spin en un líquido de Fermi

Igual que las soluciones independientes del spin $v(\mathbf{n})$ consideradas en § 4, la expresión (4.10) tiene soluciones de la forma

$$\hat{v} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}(\mathbf{n}), \quad (5.1)$$

y en ellas, la variación de la función de distribución de las cuasipartículas depende de la componente del spin. Estas ondas pueden llamarse *ondas de spin*.

Sustituyendo (5.1) en (4.10), tomando de nuevo f en la forma (2.4), y observando que $\operatorname{tr}' \boldsymbol{\sigma}' (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma}') = 2\boldsymbol{\sigma}$, obtenemos (después de eliminar $\boldsymbol{\sigma}$)

$$(s - \cos \theta) \boldsymbol{\mu}(\theta, \phi) = \cos \theta \int G(\theta') \boldsymbol{\mu}(\theta', \phi') d\theta'/4\pi. \quad (5.2)$$

Así pues, para cada componente del vector $\boldsymbol{\mu}$, obtenemos una ecuación que difiere de (4.12) sólo en que se ha sustituido F por G . De aquí que también sean aplicables los cálculos subsiguientes dados en § 4 a las ondas de spin.‡

† En el caso del He^3 líquido, pueden calcularse F_0 y F_1 a partir de los valores conocidos de m^* y u^2 mediante (2.12) y (2.17): $F_0 = 10,8$, $F_1 = 6,3$ (a presión cero).

‡ En el He^3 líquido, $G_0 = \overline{G(\theta)} < 0$; ver la segunda nota a pie de página a § 3. Por tanto, dichas ondas no pueden propagarse en él.

En un líquido de Fermi pueden propagarse ondas de spin de otra clase cuando se encuentra presente un campo magnético (V. P. Silin 1958). Aquí únicamente consideraremos vibraciones con $\mathbf{k} = 0$ en las que $\delta\hat{n}$ es independiente de las coordenadas.

Cuando está presente un campo magnético \mathbf{H} , incluso la energía de la cuasipartícula y la función de distribución «sin perturbar» por las vibraciones son dependientes del spin. Estas dependencias están interrelacionadas y vienen dadas por (ver § 3)

$$\hat{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0(\mathbf{p}) - \beta_1 \sigma \cdot \mathbf{H}, \quad \beta_1 = \beta/(1 + \tilde{G}), \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \hat{n}_0 &= n_0(\mathbf{p}) - (dn_0/d\varepsilon) \beta_1 \sigma \cdot \mathbf{H} \\ &= n_0(\mathbf{p}) + \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \beta_1 \sigma \cdot \mathbf{H}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

en donde $\varepsilon_0(\mathbf{p})$ es la energía en ausencia del campo; el subíndice 0 indica una vez más que estas expresiones se relacionan con el líquido en equilibrio.

Busquemos de nuevo la parte variable pequeña de la función de distribución en la onda de la forma

$$\delta\hat{n} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \sigma \cdot \mu(\mathbf{n}) e^{-i\omega t}.$$

La variación correspondiente de la energía de la cuasipartícula es

$$\delta\hat{\varepsilon} = \sigma \cdot \int \mu(\mathbf{n}') G(\vartheta) \frac{d\sigma'}{4\pi} e^{-i\omega t}.$$

En la ecuación de transporte debemos ahora tener en cuenta el término (4.4) que contiene el comutador $[\hat{\varepsilon}, \hat{n}]$; en el caso de distribuciones independientes de las coordenadas se transforma en

$$\frac{\partial \delta\hat{n}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\varepsilon, \hat{n}] = 0. \quad (5.5)$$

Hasta los términos lineales en $\delta\hat{n}$ tenemos

$$[\hat{\varepsilon}, \hat{n}] = -\beta_1 [\sigma \cdot \mathbf{H}, \delta\hat{n}] + \beta_1 \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) [\delta\hat{\varepsilon}, \sigma \cdot \mathbf{H}].$$

Los comutadores vienen dados por la fórmula

$$[\sigma \cdot \mathbf{a}, \sigma \cdot \mathbf{b}] = 2i\sigma \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b},$$

en donde \mathbf{a} y \mathbf{b} son vectores; ver MC (55.10). La ecuación de transporte se reduce así a

$$i\omega \mu(\mathbf{n}) = (2\beta_1/\hbar) \mathbf{H} \times \rho(\mathbf{n}), \quad (5.6)$$

en donde

$$\rho(\mathbf{n}) = \mu(\mathbf{n}) + \int \mu(\mathbf{n}') G(\theta) d\sigma'/4\pi. \quad (5.7)$$

En el caso general, la solución de (5.6) puede desarrollarse como una serie de armónicos esféricos $Y_{lm}(\theta, \phi)$ teniendo el eje polar la dirección de \mathbf{H} . Cada término del desarrollo representa un tipo particular de vibración con su frecuencia ω_{lm} .

La primera frecuencia ω_{00} corresponde a vibraciones con $\mu = \text{constante}$; entonces $\rho = \mu(1 + \bar{G})$ y (5.6) se reduce a

$$i\omega_{00}\mu = (2\beta/\hbar)\mathbf{H} \times \boldsymbol{\mu};$$

las vibraciones son transversales al campo ($\boldsymbol{\mu} \perp \mathbf{H}$). Escribiendo la ecuación en sus componentes en el plano perpendicular a \mathbf{H} y calculando el determinante se halla la frecuencia

$$\omega_{00} = 2\beta H/\hbar. \quad (5.8)$$

En esta expresión β es el momento magnético de una partícula (real) en el líquido. Así pues, ω_{00} es independiente de las propiedades específicas del líquido. Sin embargo, los valores de todas las demás frecuencias ω_{lm} dependen de la forma específica de la función $G(\theta)$.

§ 6. Gas de Fermi casi ideal degenerado con repulsión entre las partículas

El problema de las propiedades termodinámicas de un gas degenerado «casi ideal» no tiene ningún significado físico directo, puesto que los gases que realmente existen en la naturaleza condensan a temperaturas próximas al cero absoluto. No obstante, en vista del considerable interés metodológico de este problema, tiene gran interés su estudio para un modelo hipotético de gas cuyas partículas interaccionan de tal modo que el gas no puede condensar.

La condición para que el gas sea casi ideal es que el alcance r_0 de las fuerzas moleculares sea pequeño en comparación con la distancia media $1 \sim (V/N)^{1/3}$ existente entre las partículas. Igual que la condición $r_0 \ll l$, la desigualdad

$$p r_0 / \hbar \ll 1 \quad (6.1)$$

es válida para los impulsos p de las partículas: en un gas degenerado de Fermi, el impulso límite p_F se estima a partir de (1.1), lo que da $p_F/\hbar \sim (N/V)^{1/3} \ll 1/r_0$.

Consideraremos aquí sólo una interacción por parejas de partículas y admitiremos por sencillez que la interacción $U(r)$ es independiente de los spines de las

partículas. Nuestro objetivo consiste en calcular los términos principales de los desarrollos de las magnitudes termodinámicas en potencias del cociente r_0/l mediante la teoría cuántica de las perturbaciones. La dificultad del método consiste en que, debido al rápido aumento de la energía de interacción a distancias pequeñas entre partículas, de hecho la teoría de perturbaciones (la «aproximación de Born») no es aplicable a las colisiones entre partículas. Sin embargo, esta dificultad puede soslayarse del modo siguiente.

En el caso límite de colisiones «lentas» (como, por ejemplo, cuando es válida la condición (6.1)), la amplitud de scattering mutua de partículas con masa m tiende a un límite constante $-a$, que en la aproximación de Born [ver MC, (126.13)] es

$$-a = -mU_0/4\pi\hbar^2, \quad U_0 = \int U(r) d^3x; \quad (6.2)$$

este límite corresponde al estado s del par de partículas (con spin $\frac{1}{2}$). La constante a se denomina *longitud de scattering*.† Como esta longitud es la que especifica completamente las propiedades de las colisiones, debe determinar también las propiedades termodinámicas del gas.

Esto conduce a la posibilidad de aplicar un procedimiento conocido como *renormalización*. Sustituyamos formalmente la energía verdadera $U(r)$ por una función diferente que tenga el mismo valor de a pero de tal modo que sea posible utilizar la teoría de perturbaciones. Siempre y cuando (es decir, en una aproximación conveniente) el resultado final de los cálculos contenga a U sólo en la amplitud de scattering, éste coincidirá con el resultado que se obtendrá mediante la interacción real.

El alcance de la interacción real es en general del mismo orden de magnitud que la longitud de scattering a . En el caso del campo ficticio $U(r)$ que sirve un objetivo auxiliar, la condición para que sea válida la aproximación de Born es $a \ll r_0$. Como es natural, en esta teoría el parámetro real pequeño de la teoría es ap_F/\hbar .

Necesitaremos la relación entre U_0 y a no sólo en la primera aproximación (6.2), sino también en la segunda aproximación de Born. Para ver este punto recordemos que, si la probabilidad de transición del sistema sometido a la acción de una perturbación constante \hat{V} viene dada en primera aproximación por el elemento de matriz V_{00} , entonces en segunda aproximación V_{00} se sustituye por

$$V_{00} + \sum'_n \frac{V_{0n}V_{n0}}{E_0 - E_n},$$

en donde la suma se extiende a los estados (con $n \neq 0$) del sistema sin perturbar (ver MC, § 43). En el caso presente tenemos un sistema de dos partículas en colisión

† La expresión (6.2) no tiene en cuenta la identidad cuántica de las partículas. En el límite de colisiones lentas de partículas idénticas con spin $\frac{1}{2}$, sólo se produce la dispersión o scattering en el caso de spins antiparalelos y la sección eficaz diferencial para la dispersión dentro del ángulo sólido $d\sigma$ (en el sistema de centro de masas) es $d\sigma = 4a^2 d\Omega$; se obtiene la sección eficaz total integrando $d\sigma$ en una semiesfera y vale $\sigma = 8\pi a^2$ (ver MC, § 137).

y la perturbación en su interacción $U(r)$. Los elementos de la matriz de la perturbación para aquellas transiciones en las que los impulsos de las partículas \mathbf{p}_1 y \mathbf{p}_2 se transforman en \mathbf{p}'_1 y \mathbf{p}'_2 (con $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$) son

$$\langle \mathbf{p}'_1 \alpha_1, \mathbf{p}'_2 \alpha_2 | U | \mathbf{p}_1 \alpha_1, \mathbf{p}_2 \alpha_2 \rangle = \frac{1}{V} \int U(r) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} d^3x, \quad (6.3)$$

en donde $\mathbf{p} = \mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_2 = -(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1)$; puesto que la interacción es independiente del spin, los componentes α_1 y α_2 del spin de la partícula resultan inalterados por la colisión. Juega el papel de V_{00} el elemento de matriz U_0/V correspondiente a los impulsos cero. Así pues, al pasar de la primera aproximación a la segunda debemos sustituir U_0 por

$$U_0 + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'_1} \left[\frac{p_1^2 + p_2^2 - p'^2_1 - p'^2_2}{2m} \right]^{-1} |\int U e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} d^3x|^2;$$

donde la suma se realiza para \mathbf{p}_1 y \mathbf{p}_2 dados, para todo $\mathbf{p}'_1 \neq \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$. Como en nuestro caso se suponen pequeños los impulsos de las partículas, en todos los términos de importancia en la suma debemos reemplazar los elementos de matriz por sus valores a $p = 0$. Entonces se tiene la expresión siguiente para la longitud de scattering:[†]

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \left[U_0 + \frac{U_0^2}{V} \sum_{\mathbf{p}'_1} \frac{2m}{p_1^2 + p_2^2 - p'^2_1 - p'^2_2} \right]. \quad (6.4)$$

De aquí que se tenga con la misma exactitud,

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \left[1 - \frac{4\pi\hbar^2 a}{mV} \sum_{\mathbf{p}'_1} \frac{2m}{p_1^2 + p_2^2 - p'^2_1 - p'^2_2} \right]. \quad (6.5)$$

La divergencia que resulta en la suma que aparece en la expresión (6.4) para \mathbf{p}'_1 y \mathbf{p}'_2 grandes se debe a la sustitución de todos los elementos de matriz por constantes y carece de importancia, puesto que cuando posteriormente se utilice esta fórmula para calcular la energía del sistema se seguirá obteniendo una expresión convergente, en la que carecen de significado los impulsos de valor grande. Consideraremos a a como la longitud de scattering de las partículas lentas, que es independiente de su energía. A primera vista parece que la fórmula (6.4) depende de los impulsos \mathbf{p}_1 y \mathbf{p}_2 pero de hecho esta dependencia está restringida a la parte imaginaria de la amplitud de scattering [que existe cuando se define de modo apropiado el método

[†] En todas las fórmulas intermedias escribimos las sumas respecto a valores discretos de los impulsos de las partículas con las partículas contenidas en un volumen finito V ; en el cálculo final se sustituye la suma como es usual por la integración respecto a $V d^3p (2\pi\hbar)^3$.

de suma; cf. *MC*, (130.9)], que no es necesario considerar puesto que sabemos que el resultado final será real. Este tema se resume en § 21.

En la sección actual, consideraremos el modelo de un gas de Fermi con una interacción repulsiva entre las partículas; para dicho tipo de interacción, $a > 0$. En este caso, el gas tiene un espectro de energía del tipo de Fermi descrito en §§ 1 y 2.

El hamiltoniano de un sistema de partículas (con spin $\frac{1}{2}$) que tenga una interacción por pares o parejas es, según el método de la segunda cuantización,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha} + \frac{1}{2} \sum \langle \mathbf{p}'_1 \alpha_1, \mathbf{p}'_2 \alpha_2 | U | \mathbf{p}_1 \alpha_1, \mathbf{p}_2 \alpha_2 \rangle \hat{a}_{\mathbf{p}'_1 \alpha_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}'_2 \alpha_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2 \alpha_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_1 \alpha_1}; \quad (6.6)$$

ver *MC*, § 64. En esta expresión $\hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+$ y $\hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}$ son los operadores de creación y aniquilación para una partícula con impulso \mathbf{p} y componente de spin α ($= \pm \frac{1}{2}$). El primer término de (6.6) corresponde a la energía cinética de las partículas y el segundo a su energía potencial; en este último la suma debe extenderse a todos los valores de los impulsos y de los componentes de spin, sometidos a la conservación del impulso en las colisiones.

De acuerdo con la hipótesis de que los impulsos de las partículas son pequeños, sustituiremos de nuevo los elementos de matriz de (6.6) por sus valores para impulsos cero: $\langle 0 \alpha_{a1}, 0 \alpha_{a2} | U | 0_{a1}, 0_{a2} \rangle = U_0/V$. A continuación debe observarse que, puesto que los operadores $\hat{a}_{\mathbf{p}, \alpha}^+$ y $\hat{a}_{\mathbf{p}, \alpha}^+$ anticommutan en la estadística de Fermi, su producto es antisimétrico frente al intercambio de subíndices; lo mismo se aplica a los productos $\hat{a}_{\mathbf{p}, \alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}, \alpha}^+$. En consecuencia, se anulan todos los términos de la segunda suma en (6.6) que contengan pares de subíndices iguales α_1, α_2 (físicamente, esto es debido al hecho ya mencionado de que, en el límite de colisiones lentas, sólo pueden dispersarse aquellas partículas que tengan spines opuestos).

El hamiltoniano del sistema se reduce así a

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha} + \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1} \hat{a}'_{1+}^+ \hat{a}'_{2+}^+ \hat{a}_{2-} \hat{a}_{1+}, \quad (6.7)$$

en donde $\hat{a}_{1+} \equiv \hat{a}_{\mathbf{p}_1+}$, $\hat{a}'_{1+} \equiv \hat{a}_{\mathbf{p}'_1+}$, etc., y donde se han sustituido los valores $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$ por los subíndices $+$ y $-$, regla que se seguirá en adelante.

Los valores propios de este hamiltoniano se calculan mediante la teoría de perturbaciones ordinarias; el segundo término de (6.6) se trata como una pequeña corrección al primer término. El primer término es diagonal y sus valores propios son

$$E^{(0)} = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} (p^2/2m) n_{\mathbf{p}\alpha}, \quad (6.8)$$

en donde n_{pa} son los números de ocupación de los estados \mathbf{p} , a .†

La corrección de primer orden viene dada por los elementos de la matriz diagonal de la energía de interacción:

$$E_1^{(1)} = \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} n_{1+} n_{2-}, \quad (6.9)$$

en donde $n_{1+} \equiv n_{\mathbf{p}1+}$, etc.

Para hallar la corrección de segundo orden, utilicemos la conocida fórmula de la teoría de perturbaciones

$$E_n^{(2)} = \sum_m' \frac{|V_{nm}|^2}{E_n - E_m},$$

en donde los sufijos n y m sirven para etiquetar los estados del sistema sin perturbar. Un cálculo sencillo (con los elementos conocidos de las matrices de los operadores \hat{a}_{pa} y \hat{a}_{pa}^\dagger) nos da

$$\frac{U_0^2}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1} \frac{n_{1+} n_{2-} (1 - n'_{1+}) (1 - n'_{2-})}{(p_1^2 + p_2^2 - p'_1^2 - p'_2^2)/2m}. \quad (6.10)$$

La estructura de esta expresión es muy clara: el cuadrado del elemento de la matriz de la transición $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rightarrow \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$ es proporcional a los números de ocupación de los estados $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ y a los números de posiciones no ocupadas en los estados $\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$.

La integral U_0 en (6.9) y (6.10) debe expresarse en función de una magnitud física real, la amplitud de scattering $-a$. En los términos de segundo orden, esto puede hacerse a partir de (6.2); en los términos de primer orden se necesita utilizar la fórmula más exacta (6.5). Después de estas sustituciones, encontramos que la corrección de primer orden en a es

$$E^{(1)} = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} n_{1+} n_{2-} \quad (6.11)$$

y la corrección de segundo orden

$$E^{(2)} = \frac{2mg^2}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'_1} \frac{n_{1+} n_{2-} [(1 - n'_{1+}) (1 - n'_{2-}) - 1]}{p_1^2 + p_2^2 - p'_1^2 - p'_2^2};$$

por brevedad, utilizamos en las fórmulas intermedias la «constante de acople» de las partículas del gas‡ $g = 4\pi\hbar^2 a/m$. Al desarrollar la expresión que aparece en el

† Admitiendo que las partículas tienen valores definidos de la componente de spin, admitimos que la matriz estadística $n_{ap}(\mathbf{p})$ se reduce también a la forma diagonal; las funciones $n_a(\mathbf{p})$ con $\alpha = \pm \frac{1}{2}$ son entonces sus elementos diagonales.

‡ Despues de la renormalización de la amplitud de dispersión o scattering, esta magnitud deja de ser igual a la constante U_0 en (6.2).

numerador, se observa que los términos con productos de cuatro n se anulan debido a que sus numeradores son simétricos y sus denominadores antisimétricos respecto al intercambio de \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 y \mathbf{p}'_1 , \mathbf{p}'_2 ; y la suma respecto a estas variables es simétrica. El resultado final es

$$E^{(2)} = -\frac{2mg^2}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}'} \frac{n_{1+}n_{2-}(n'_{1+} + n'_{2-})}{p_1^2 + p_2^2 - p'^2_1 - p'^2_2}. \quad (6.12)$$

Esta suma (en la que todos los $n_{pa} \rightarrow 0$ cuando $\mathbf{p} \rightarrow \infty$) es convergente.

A partir de estas fórmulas podemos calcular, en primer lugar, la energía del estado fundamental. Para ello, debemos hacer iguales a la unidad a todos los n_{pa} dentro de la esfera de Fermi ($p < p_F = \hbar(3\pi^2N/V)^{1/3}$) y cero a los que están en el exterior. Aquí debe señalarse que, aunque en el hamiltoniano original los valores propios de los productos de operadores $\hat{a}_{\mathbf{p},a}^+ \hat{a}_{\mathbf{p},a}$ dan los números de ocupación de los estados de las propias partículas del gas, después de la diagonalización del hamiltoniano mediante la teoría de perturbaciones, estamos ahora tratando con la función de distribución de cuasipartículas (designada, como en las secciones anteriores, por n_{pa}).

Como $\sum_{\mathbf{p}+} n_{\mathbf{p}+} = \sum_{\mathbf{p}-} n_{\mathbf{p}-} = \frac{1}{2}N$, encontramos a partir de (6.11) la corrección de primer orden

$$E_0^{(1)} = gN^2/4V.$$

Sustituyamos en (6.12) la suma extendida a los tres impulsos, junto con la condición $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$, por integración respecto a

$$\frac{V^3}{(2\pi\hbar)^9} \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2) d^3p_1 d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2,$$

de modo que

$$E_0^{(2)} = -\frac{4mg^2V}{(2\pi\hbar)^9} \int \frac{\delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}'_2)}{p_1^2 + p_2^2 - p'^2_1 - p'^2_2} d^3p_1 d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2,$$

realizándose la integración en el intervalo $p_1, p_2, p'_1 \leq p_F$. El cálculo de la integral [†] da el resultado final siguiente para la energía del estado fundamental:

$$E_0 = N \frac{3p_F^2}{10m} \left[1 + \frac{10}{9\pi} \frac{p_F a}{\hbar} + \frac{4(11 - 2 \log 2)}{21\pi^2} \left(\frac{p_F a}{\hbar} \right)^2 \right], \quad (6.13)$$

en donde el coeficiente que multiplica al corchete es la energía de un gas ideal de Fermi (K. Huang y C. N. Yang 1957).

[†] En la práctica es más simple proceder en un orden diferente, empezando con el cálculo de la función f (ver más adelante).

El potencial químico del gas en el cero absoluto viene dado por la derivada $\mu = (\partial E_0 / \partial N)_V$. Expresada en función del impulso límite p_F , vale

$$\mu = \frac{p_F^2}{2m} \left[1 + \frac{4}{3\pi} \frac{p_F a}{\hbar} + \frac{4(11 - 2 \log 2)}{15\pi^2} \left(\frac{p_F a}{\hbar} \right)^2 \right]. \quad (6.14)$$

De acuerdo con las ideas generales de la teoría de Landau, el espectro de oscilaciones elementales $\varepsilon(\mathbf{p})$ y la función de interacción de las cuasipartículas $f_{\alpha\alpha'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ están determinados por la primera y segunda variaciones de la energía total respecto a la función de distribución de las cuasipartículas.[†] Si se escribe E como una suma discreta extendida a \mathbf{p} y a α , tenemos por definición

$$\delta E = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \varepsilon_\alpha(\mathbf{p}) \delta n_{\mathbf{p}\alpha} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}, \alpha, \mathbf{p}', \alpha'} f_{\alpha\alpha'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n_{\mathbf{p}\alpha} \delta n_{\mathbf{p}'\alpha'}, \quad (6.15)$$

(después de la diferenciación de la energía, $n_{\mathbf{p}\alpha}$ ha de sustituirse por la unidad dentro de la esfera de Fermi y por cero en el exterior). Sin embargo, no es necesario calcular de este modo la masa efectiva m^* de las cuasipartículas, puesto que puede hallarse de un modo más sencillo, como se verá poco después.

Para calcular la función $f_{\alpha\alpha'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ (sobre la superficie de Fermi), derivaremos dos veces la suma de las expresiones (6.11) y (6.12) y luego pondremos $\mathbf{p} = \mathbf{p}' = \mathbf{p}_F$. Después de hacer este cálculo simple y cambiar de suma a integración, se tiene

$$\begin{aligned} f_{+-}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= g - \frac{4mg^2}{(2\pi\hbar)^3} \int \left\{ \frac{\delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}' - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)}{2p_F^2 - p_1^2 - p_2^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}_2) + \delta(\mathbf{p}' + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{p}_2)}{2(p_1^2 - p_2^2)} \right\} d^3p_1 d^3p_2, \\ f_{++}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= f_{--}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \\ &= \frac{2mg^2}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{\delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}' - \mathbf{p}_2) + \delta(\mathbf{p}' + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{p}_2)}{p_1^2 - p_2^2} d^3p_1 d^3p_2. \end{aligned}$$

La integración de estas fórmulas es comparativamente sencilla, debido a la menor multiplicidad de las integrales.

El resultado final se ha de poner en la forma (2.4), que es independiente de la selección del eje de cuantización del spin. De esta forma resulta

$$\begin{aligned} f_{\alpha\gamma, \beta\delta} &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left\{ \left[1 + \frac{2ap_F}{\pi\hbar} \left(2 + \frac{\cos \vartheta}{2 \sin \frac{1}{2}\vartheta} \log \frac{1 + \sin \frac{1}{2}\vartheta}{1 - \sin \frac{1}{2}\vartheta} \right) \right] \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right. \\ &\quad \left. - \left[1 + \frac{2ap_F}{\pi\hbar^2} \left(1 - \frac{1}{2} \sin \frac{1}{2}\vartheta \log \frac{1 + \sin \frac{1}{2}\vartheta}{1 - \sin \frac{1}{2}\vartheta} \right) \right] \sigma_{\alpha\beta} \cdot \sigma_{\gamma\delta} \right\}, \quad (6.16) \end{aligned}$$

[†] En esta sección la matriz $f_{\alpha\alpha'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ está constituida por los elementos de matriz $f_{\alpha\gamma, \beta\delta}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ que sean diagonales en dos pares de subíndices (α, β y γ, δ).

en donde ϑ es el ángulo formado entre los vectores \mathbf{p}_F y \mathbf{p}'_F (A. A. Abrikosov e I. M. Khalatnikov 1957).‡

La masa efectiva de las cuasipartículas se encuentra a partir de esta expresión mediante integración como en (2.12):

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{8}{15\pi^2} (7 \log 2 - 1) \left(\frac{ap_F}{\hbar} \right)^2. \quad (6.17)$$

La fórmula (2.17) da la velocidad del sonido en el gas:

$$u^2 = \frac{p_F^2}{3m^2} \left[1 + \frac{2}{\pi} \frac{ap_F}{\hbar} + \frac{8(11 - 2 \log 2)}{15\pi^2} \left(\frac{ap_F}{\hbar} \right)^2 \right]. \quad (6.18)$$

Por tanto, integrando $u^2 m/N$ (expresado en función de N/V en lugar de p_F) respecto a N , encontramos a partir de (2.13) el potencial químico del gas y una integración adicional respecto a N nos da la expresión (6.13) para la energía del estado fundamental.

La fórmula (6.13) representa los primeros términos de un desarrollo de la energía del gas en potencias del «parámetro gaseoso» $\eta = p_F a / \hbar \sim a(N/V)^{1/3}$. Mediante cálculos semejantes, pero considerablemente más laboriosos, se pueden deducir algunos términos más del desarrollo. La razón es que, en el caso de un gas de Fermi, las colisiones triples contribuyen a la energía sólo en una aproximación ya de orden muy elevado. De las tres partículas que intervienen en la colisión, al menos dos tienen los mismos componentes de spin; la función de onda de las coordenadas del sistema debe ser entonces antisimétrica respecto a estas dos partículas. Así pues, el momento angular o cinético orbital del movimiento relativo de estas partículas es por lo menos 1 (estado p). La función de ondas correspondiente contiene una potencia extra de p/\hbar en comparación con la función de onda del estado s (ver MC, § 33) y, por consiguiente, la probabilidad de que dicha colisión contenga un factor extra p^2 , está reducida por un factor $\sim (pa/\hbar)^2 \sim \eta^2$ en comparación con la colisión «frontal» de las partículas que no obedecen al principio de Pauli. En consecuencia, las colisiones triples contribuyen a la energía sólo en términos que contienen al volumen como $V^{-2} V^{-2/3}$. En otras palabras, todos los términos del desarrollo de la energía hasta los de orden $N(p_F^2/m)\eta^5$ inclusive, es decir, tres más de los indicados en (6.13) se expresan únicamente en función de las características de las colisiones por pares de partículas. Sin embargo, estas características incluirán no sólo la amplitud del scattering de la onda s para colisiones lentas, sino también sus derivadas respecto a la energía y la amplitud de scattering de la onda p .

‡ La función (6.16) se hace logarítmicamente infinita para $\vartheta = \pi$. Esto se debe a la aproximación realizada. Un análisis más exacto muestra que, aunque $\vartheta = \pi$ es realmente una singularidad de la función, esta última es cero y no infinito; ver la tercera nota de página a § 54. La falta de validez de (6.16) cerca de $\vartheta = \pi$ carece de importancia en las aplicaciones siguientes en las que intervienen integrales convergentes en este punto.

CAPÍTULO II

FUNCIONES DE GREEN EN UN SISTEMA DE FERMI A $T = 0$

§ 7. Funciones de Green en un sistema macroscópico

El método utilizado en § 6 resulta laborioso y en la práctica resulta imposible de utilizar en los órdenes más elevados de la teoría de perturbaciones. Esta desventaja resulta de la máxima importancia teniendo en cuenta que la interacción entre las partículas en los problemas físicos reales no es ciertamente pequeña y, por ello, para averiguar las diversas propiedades generales de los sistemas macroscópicos hemos de considerar secuencias infinitas de términos en las series de la teoría de perturbaciones. Para dominar dichas dificultades podemos utilizar un formalismo matemático semejante al que se emplea en la teoría cuántica de campos.

La forma específica de este método depende esencialmente de la naturaleza del sistema macroscópico al que ha de aplicarse. Las secciones siguientes de este capítulo tratan del desarrollo del formalismo para un líquido de Fermi en el cero absoluto.† El objetivo de esta exposición no es sólo la aplicación práctica del método a dicho sistema, sino también mostrar cómo se construye el propio formalismo.

El punto de partida radica en los operadores de la segunda cuantización ψ , cuyas propiedades se conocen a partir de la mecánica cuántica (ver *MC*, §§ 64, 65). Aquí las vamos a necesitar en la representación de Heisenberg, en la cual dependen explícitamente del tiempo. Por consiguiente, empezaremos por establecer algunas propiedades de los operadores ψ en dicha representación.

Consideraremos sistemas con partículas de spin $\frac{1}{2}$. De acuerdo con ello, los operadores ψ recibirán un subíndice que indicará el valor del componente del spin y que toma los valores $\pm \frac{1}{2}$; estos subíndices se escribirán como antes mediante letras griegas y siempre que aparezca repetido un subíndice se implica la suma respecto al mismo.

Según la regla general (ver *MC*, § 13), el operador $\hat{f}(t)$ de cualquier magnitud física en la representación de Heisenberg se expresa en función del operador \hat{f} independiente del tiempo (Schrödinger) de la misma magnitud por‡

$$\hat{f}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{f} e^{-i\hat{H}t},$$

siendo H el hamiltoniano del sistema.

† La construcción sistemática de este formalismo se debe a V. M. Galitskiy y A. B. Migdal (1958).

Sin embargo, será apropiado modificar ligeramente esta definición. La razón es que en estadística cuántica es más conveniente considerar los estados del sistema no para un número específico de partículas N , sino para un potencial químico μ específico. Entonces puede definirse el estado fundamental del sistema para $T = 0$, como aquel estado que posee el valor propio más bajo del operador

$$\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}, \quad (7.1)$$

y no de \hat{H} , como era el caso en que se especificaba N : la probabilidad de que el sistema esté (para un valor especificado de μ) en un estado con energía E_n y número de partículas N_n es

$$w \propto \exp\left(-\frac{E_n - \mu N_n}{T}\right) = \exp\left(-\frac{E'_n}{T}\right);$$

ver Parte 1, (35.1). En esta expresión E'_n son los valores propios del operador H' . Vemos que para $T = 0$ únicamente persiste el estado con menor valor de E'_n .†

Así pues, definiremos los operadores de Heisenberg ψ por las fórmulas

$$\left. \begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) &= e^{i\hat{H}'t} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}'t}, \\ \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) &= e^{i\hat{H}'t} \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}'t}. \end{aligned} \right\} \quad (7.2)$$

Los operadores ψ de Heisenberg se designarán mediante la letra mayúscula Ψ y el operador de Schrödinger ψ por $\hat{\psi}$.

Los operadores de Schrödinger ψ obedecen las reglas de conmutación familiares. Sin embargo, los conmutadores de los operadores de Heisenberg tomados a tiempos diferentes t y t' no pueden calcularse de una forma general. Cuando $t = t'$, las reglas de conmutación son las mismas que para los operadores de Schrödinger. Así pues, a partir de la regla

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\beta^+(\mathbf{r}') + \hat{\psi}_\beta^+(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

tenemos la regla correspondiente

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) \\ = e^{i\hat{H}'t} [\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\beta^+(\mathbf{r}') + \hat{\psi}_\beta^+(\mathbf{r}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r})] e^{-i\hat{H}'t} \\ = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (7.3)$$

† Con objeto de simplificar las fórmulas, utilizaremos con frecuencia unidades adecuadas en las que $\hbar = 1$ (de modo que el impulso y la energía tengan dimensiones de inversa de la longitud e inversa del tiempo, respectivamente). Para pasar de estas unidades a las ordinarias, todos los impulsos \mathbf{p} y energías E en las fórmulas han de sustituirse por \mathbf{p}/\hbar y E/\hbar . Estas unidades se utilizarán en particular en el capítulo presente.

* Se utilizará el término «hamiltoniano» tanto para \hat{H} como para \hat{H}' .

Análogamente

$$\left. \begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) &= 0, \\ \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') + \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (7.4)$$

Derivando la definición (7.2) respecto al tiempo, se encuentra que el operador de Heisenberg ψ satisface la ecuación

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) = \hat{H}' \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) - \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) \hat{H}'; \quad (7.5)$$

cf. MC, (13.7).

Las representaciones de Heisenberg y Schrödinger son idénticas para el operador de cualquier magnitud que se conserva (es decir, para un operador que commuta con el hamiltoniano). Esto es cierto, en particular, para el propio hamiltoniano y para el operador número de partículas, que como es natural también corresponde a una magnitud conservada. Las expresiones correspondientes a estos operadores en función de los operadores ψ de Heisenberg y Schrödinger son las mismas. Por ejemplo, el operador número de partículas es

$$\begin{aligned} \hat{N} &= \int \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) d^3x \\ &= \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x. \end{aligned} \quad (7.6)$$

El hamiltoniano de un sistema de partículas interactivas es

$$\left. \begin{aligned} \hat{H}' &= \hat{H}'^{(0)} + \hat{\mathcal{V}}^{(1)} + \hat{\mathcal{V}}^{(2)} + \dots, \\ \hat{H}'^{(0)} &= -\frac{1}{2m} \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) \Delta \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x - \mu \hat{N}, \\ \hat{\mathcal{V}}^{(1)} &= \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) U^{(1)}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x, \\ \hat{\mathcal{V}}^{(2)} &= \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}') U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}) d^3x d^3x', \end{aligned} \right\} \quad (7.7)$$

en donde $\hat{H}'^{(0)}$ es el hamiltoniano de un sistema de partículas libres; $\hat{\mathcal{V}}^{(1)}$ es el operador de su interacción con el campo exterior $U^{(1)}(\mathbf{r})$; $\hat{\mathcal{V}}^{(2)}$ es el operador de su interacción por pares mientras que $U^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ corresponde a la energía de interacción de dos partículas. Los términos que se omiten representan interacciones triples, etc.; cf. MC, (64.25). Por sencillez, se supone que todas las interacciones son independientes de los spines de las partículas.

El commutador de \hat{H}' y $\hat{\Psi}_\alpha$ en (7.5), se calcula mediante las reglas (7.3) y (7.4); las

funciones delta que aparecen se eliminan por integración. Así se obtiene una «ecuación de Schrödinger» para $\hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r})$ en la forma

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) &= \left(-\frac{1}{2m} \Delta - \mu + U^{(1)}(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) \\ &+ \int \hat{\Psi}_\beta^+(t, \mathbf{r}') U^{(2)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \hat{\Psi}_\beta(t, \mathbf{r}') d^3x'. \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) + \dots \end{aligned} \quad (7.8)$$

El concepto de *función de Green* para un sistema macroscópico es fundamental en el método que vamos a describir. Esta función se define por †

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -i\langle T \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \rangle. \quad (7.9)$$

En dicha expresión y en lo que sigue, X designa para mayor brevedad el tiempo t junto con el vector de posición \mathbf{r} . El paréntesis angular $\langle \dots \rangle$ designa el proceso de promediar respecto al estado fundamental del sistema, en lugar de utilizar la notación mucho más engorrosa $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$ para el elemento de la matriz diagonal. El símbolo T designa el producto cronológico: los operadores que siguen al mismo han de disponerse de derecha a izquierda ordenados según los tiempos crecientes t_1, t_2 . En el caso de los fermiones, el intercambio de un par de operadores ψ (en comparación con su disposición en la escritura original del producto) debe cambiar el signo del producto. Explícitamente,

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \begin{cases} -i\langle \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \rangle & \text{para } t_1 > t_2, \\ i\langle \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \rangle & \text{para } t_1 < t_2. \end{cases} \quad (7.10)$$

Existen algunas propiedades evidentes de la función de Green. Si el sistema no es ferromagnético y no está dentro de un campo externo, la dependencia de la función de Green con el spin se reduce a la matriz unidad:

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta} G(X_1, X_2); \quad (7.11)$$

cualquier otra dependencia haría distinguir una dirección particular del espacio, el eje z de la cuantización del spin.‡ Puesto que el tiempo es homogéneo, en la función de Green aparecen t_1 y t_2 sólo como la diferencia $t = t_1 - t_2$. Si además el sistema es macroscópicamente homogéneo en el espacio, las coordenadas de los dos puntos aparecerán sólo en forma de la diferencia $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. En otras palabras, para este caso se tiene

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta} G(X), \quad X = X_1 - X_2. \quad (7.12)$$

† Esta definición es análoga a la de las funciones de Green exactas (propagadores) en electrodinámica cuántica (ver *TCR*, §§ 100, 102).

‡ Esta afirmación exige alguna aclaración. Los componentes de spin $\hat{\Psi}_\alpha$ forman un espín contravariante de rango uno (y en este sentido sería más correcto poner el índice en la parte superior: $\hat{\Psi}^\alpha$). Los componentes $\hat{\Psi}_\beta^+$ forman un espín covariante. Así pues, $G_{\alpha\beta}$ es un espín mezcla de rango dos y $\delta_{\alpha\beta}$ es un espín unidad de esta clase.

Debe resaltarse que homogeneidad microscópica significa que se supone que el cuerpo es homogéneo no sólo respecto a su densidad media (macroscópica) sino también a la densidad de probabilidad de las diversas posiciones (microscópicas) de sus partículas en el espacio. Los líquidos y gases poseen esta propiedad (pero los sólidos, no). Su isotropía conduce al resultado de que $G(t, \mathbf{r}) = G(t, -\mathbf{r})$. En conexión con esto señalemos una vez más que la función $G(t, \mathbf{r})$ no es ciertamente, según su definición, una función par de t . Por esta razón resulta significativo el orden de t_1 y t_2 en la diferencia $t = t_1 - t_2$.

La matriz de densidad de las coordenadas de una partícula del sistema se define como el valor medio

$$\varrho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{N} \langle \hat{\Psi}_{\beta}^{+}(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}_1) \rangle. \quad (7.13)$$

A partir del conocimiento de esta matriz podemos hallar el valor medio de cualquier magnitud correspondiente a una partícula individual. Supongamos que $\hat{F}_{\alpha\beta}$ es un operador de «una partícula», es decir un operador de la forma

$$\hat{F}_{\alpha\beta} = \sum_a \hat{f}_{\alpha\beta}^{(a)}, \quad (7.14)$$

en donde $\hat{f}_{\alpha\beta}^{(a)}$ es un operador que actúa sobre las coordenadas y el spin de una sola partícula (la partícula a), extendiéndose la suma a todas las partículas del sistema. En el formalismo de la segunda cuantización, dicho operador se escribe (en la representación de Heisenberg) como

$$\hat{F}_{\alpha\beta}(t) = \int \hat{\Psi}_{\alpha}^{+}(t, \mathbf{r}) \hat{f}_{\beta\gamma} \hat{\Psi}_{\gamma}(t, \mathbf{r}) d^3x; \quad (7.15)$$

cf. MC, (64.23). De aquí resulta evidente que el valor medio de F puede expresarse en función de la matriz de densidad en la forma

$$\langle F \rangle = N \langle f \rangle = \int [\hat{f}_{\beta\alpha}^{(1)} \varrho_{\beta\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)]_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2} d^3x_1, \quad (7.16)$$

en donde $\hat{f}_{\alpha\beta}^{(1)}$ es un operador que actúa sobre las coordenadas \mathbf{r}_1 (podemos $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$ después de aplicar este operador, pero antes de integrar).

De acuerdo con (7.10), la matriz de densidad puede expresarse mediante la función de Green:

$$\varrho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{i}{N} G_{\alpha\beta}(t_1, \mathbf{r}_1; t_1 + 0, \mathbf{r}_2). \quad (7.17)$$

En esta expresión y de ahora en adelante, el escribir el argumento de la función como $t_1 + 0$ significa que hay que tomar el límite cuando se tiende a t_1 desde arriba. Esto asegura la disposición correcta de los operadores ψ , como en el producto (7.13).

En el caso de un sistema microscópicamente homogéneo, la matriz de densidad depende únicamente de la diferencia $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ y, si no existe dependencia respecto al spin, $\rho_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}\rho$ con

$$\varrho(\mathbf{r}) = -\frac{i}{N} G(t = -0, \mathbf{r}); \quad (7.18)$$

en esta ecuación hemos sustituido $G_{\alpha\beta}(X_1, X_2)$ por $G(X_1 - X_2) \equiv G(X)$ de acuerdo con (7.12). Con $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, después de tomar la traza respecto a las variables de spin, el operador producto presente en (7.13) se transforma en $\hat{\Psi}_a^+ \hat{\Psi}_a$, el operador de la densidad numérica de partículas del sistema. Por tanto, la densidad media del cuerpo es

$$N/V = 2N\rho(0) = -2iG(t = -0, \mathbf{r} = 0), \quad (7.19)$$

en donde t tiende a cero desde abajo. Esta ecuación relaciona el potencial químico μ a $T = 0$ (del cual como parámetro depende G) con la densidad numérica de partículas N/V .

El desarrollo de Fourier de la función $\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ determina la distribución de los impulsos de las partículas:[†]

$$\begin{aligned} N(\mathbf{p}) &= N \int \varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} d^3(x_1 - x_2) \\ &= -i \int [G(t, \mathbf{r})]_{t=-0} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3x. \end{aligned} \quad (7.20)$$

Este es el número de partículas (por unidad de volumen con un valor especificado del componente de spin y con impulsos comprendidos dentro del intervalo $d^3p/(2\pi)^3$). En este caso nos referimos a partículas reales y no a cuasipartículas (que todavía no han hecho su aparición en el formalismo que estamos describiendo). Se utiliza la notación $N(\mathbf{p})$ para resaltar el contraste con la función de distribución de cuasipartículas $n(\mathbf{p})$.

Normalmente nos interesará la función de Green en la representación de los impulsos, definida como la componente del desarrollo de Fourier de $G(t, \mathbf{r})$ respecto a t y \mathbf{r} :

$$G(t, \mathbf{r}) = \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d\omega d^3p/(2\pi)^4, \quad (7.21)$$

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \int G(t, \mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} dt d^3x. \quad (7.22)$$

[†] La matriz de densidad de una partícula es (ver MC, § 14) la integral

$$\varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int \Psi^*(\mathbf{r}_2, q) \Psi(\mathbf{r}_1, q) dq,$$

en donde $\Psi(\mathbf{r}, q)$ es la función de onda del sistema tomado globalmente, designando el vector \mathbf{r} la posición de una partícula y q el conjunto de coordenadas de todas las demás partículas, con integración respecto a todas éstas. Los componentes de Fourier de la matriz de densidad son iguales a

$$\int |\int \Psi(\mathbf{r}, q) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3x|^2 dq,$$

y esta expresión da su relación con la distribución de los impulsos de las partículas.

La distribución de los impulsos de las partículas se expresa en función de G por

$$N(\mathbf{p}) = -i \lim_{t \rightarrow -0} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}, \quad (7.23)$$

resultado que se encuentra sustituyendo (7.21) en (7.20). Se normaliza así:

$$-2i \lim_{t \rightarrow -0} \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega d^3 p}{(2\pi)^4} = \frac{N}{V}, \quad (7.24)$$

que es la condición (7.19) en la representación de los impulsos. Así pues, automáticamente la distribución $N(\mathbf{p})$ tiene la normalización correcta.

$$2 \int N(\mathbf{p}) d^3 p / (2\pi)^3 = N/V.$$

El límite en que se toman las integrales (7.23) y (7.24) es equivalente a una regla de contorno particular en el plano complejo de la variable ω . La presencia del factor $e^{-i\omega t}$ con $t < 0$ permite que el trayecto de integración (el eje real) sea cerrado por una semicircunferencia infinita en el semiplano superior de ω , de modo que la integral queda determinada por los residuos de $G(\omega, \mathbf{p})$ en sus polos en dicho semiplano.

§ 8. Determinación del espectro de energía a partir de la función de Green

En el caso de un sistema microscópicamente homogéneo, es sencillo determinar la dependencia con el tiempo y las coordenadas de los elementos de matriz del operador de Heisenberg ψ respecto a estados estacionarios que tengan valores definidos de la energía y del impulso.

La dependencia temporal viene dada por el factor exponencial usual:

$$\langle n | \hat{\Psi}_a(t, \mathbf{r}) | m \rangle = e^{i\omega_{nm} t} \langle n | \hat{\psi}_a(\mathbf{r}) | m \rangle, \quad (8.1)$$

pero, puesto que el operador ψ de Heisenberg se define mediante el hamiltoniano \hat{H}' , tenemos

$$\begin{aligned} \omega_{nm} &= E'_n - E'_m \\ &= E_n - E_m - \mu(N_n - N_m). \end{aligned}$$

De acuerdo con las propiedades generales de los operadores ψ , $\hat{\Psi}$ disminuye (y aumenta) en una unidad el número de partículas del sistema. De aquí que $N_n = N_m - 1$ en el elemento de matriz (8.1), de modo que

$$\omega_{nm} = E_n(N) - E_m(N+1) + \mu, \quad (8.2)$$

en donde los argumentos son los números de partículas en los estados correspondientes.

Para determinar la dependencia con las coordenadas, observemos que, al ser el sistema homogéneo, no se pueden alterar los elementos de matriz de sus operadores ψ por la realización de un desplazamiento relativo al sistema a través de una distancia arbitraria \mathbf{r} . Sin embargo, esto no significa que los elementos de la matriz sean independientes de las coordenadas. La razón de esto último es que la diferencia entre $\psi_{nm}(\mathbf{r})$ y el valor $\psi_{nm}(0)$ en un cierto punto especificado $\mathbf{r} = 0$ se debe a dos causas: el desplazamiento a través de \mathbf{r} respecto al propio sistema y el movimiento del punto de observación a una posición diferente, que hace cambiar también las fases de la función de onda. Con objeto de excluir esta última variación, desplazaremos el sistema en $-\mathbf{r}$, es decir, aplicaremos a su función de onda el operador de traslación paralela

$$\hat{T}(-\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{P}}},$$

en donde \mathbf{P} es el operador del impulso total del sistema; ver *MC*, (15.13). Estas operaciones hacen volver el punto de observación a su posición original, pero permanece desplazado en \mathbf{r} respecto al sistema. La invariancia de los elementos de la matriz bajo esta transformación se expresa por

$$\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle = \langle n | e^{i\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{P}}} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{r}\cdot\hat{\mathbf{P}}} | m \rangle. \quad (8.3)$$

Si el sistema tiene impulsos definidos P_n y P_m en los estados n y m , resulta

$$\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle = e^{i\mathbf{k}_{nm}\cdot\mathbf{r}} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) | m \rangle,$$

y por tanto

$$\left. \begin{aligned} \langle n | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | m \rangle &= e^{i(\omega_{nm}t - \mathbf{k}_{nm}\cdot\mathbf{r})} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle, \\ \langle n | \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) | m \rangle &= \langle m | \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) | n \rangle^*, \end{aligned} \right\} \quad (8.4)$$

en donde $\mathbf{k}_{nm} = \mathbf{P}_n - \mathbf{P}_m$.

Utilizando estas fórmulas, podemos deducir un desarrollo importante de la función de Green en el espacio de los impulsos, que clarifica su significado físico.

Debido a la definición «discontinua» de la función $G(t, \mathbf{r})$, al calcular $G(\omega, \mathbf{p})$ debemos separar la integral respecto a t en (7.22) en otras dos, desde $-\infty$ hasta 0 y desde 0 hasta ∞ . En la segunda (es decir, cuando $t = t_1 - t_2 > 0$), desarrollando la definición (7.10) por la regla de multiplicación de matrices encontramos

$$G(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} i G_{\alpha\alpha} = -\frac{1}{2} i \sum_m \langle 0 | \hat{\Psi}_\alpha(X_1) | m \rangle \langle m | \hat{\Psi}_\alpha^+(X_2) | 0 \rangle,$$

con la suma extendida a todos los estados cuánticos del sistema. Sustituyendo (8.4) y observando que $\mathbf{P}_0 = 0$ en el estado fundamental, tendremos

$$G(t, \mathbf{r}) = -\frac{1}{2} i \sum_m |\langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2 \hat{\psi}|^2 e^{i(\omega_{0m}t + \mathbf{P}_m \cdot \mathbf{r})}, \quad (8.5)$$

en donde $\omega_{0m} = E_0(N) - E_m(N+1) + \mu$.

La integral espacial en (7.22) con $G(t, \mathbf{r})$ tomada de (8.5) determina la función delta $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)$ en cada término de la suma. En la integración respecto a $t (> 0)$, y para asegurar la convergencia, debemos sumar a ω una parte imaginaria positiva infinitesimal, es decir, sustituir ω por $\omega + i0$.[†] Entonces

$$\int_0^\infty \int G(t, \mathbf{r}) e^{i(\omega t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} d^3x dt = \frac{1}{2} (2\pi)^3 \sum_m |\langle 0 | \psi_\alpha(0) | m \rangle|^2 \frac{\delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + \omega_{0m} + i0}.$$

La integral respecto a t desde $-\infty$ hasta 0 se calcula análogamente. Para $t < 0$ tenemos, en lugar de (8.5)

$$G(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} i \sum_m |\langle m | \hat{\psi}_\alpha(0) | 0 \rangle|^2 e^{i(\omega_{m0}t - \mathbf{P}_m \cdot \mathbf{r})}, \quad (8.6)$$

en donde $\omega_{m0} = E_m(N-1) - E_0(N) + \mu$. Ahora, calculando la integral desde $-\infty$ hasta 0 y sumándola a la otra, obtenemos

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} (2\pi)^3 \sum_m \left\{ \frac{A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu + E_0(N) - E_m(N+1) + i0} + \right. \\ \left. + \frac{B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu + E_m(N-1) - E_0(N) - i0} \right\}, \quad (8.7)$$

con la notación

$$A_m = |\langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2, \quad B_m = |\langle m | \hat{\psi}_\alpha(0) | 0 \rangle|^2. \quad (8.8)$$

Este desarrollo es el buscado.[‡]

Utilizaremos la notación

$$\varepsilon_m^{(+)} = E_m(N+1) - E_0(N), \quad \varepsilon_m^{(-)} = E_0(N) - E_m(N-1) \quad (8.9)$$

para las energías de excitación dadas por las diferencias entre el nivel excitado del sistema con un número particular de partículas y el estado fundamental del sistema con una partícula de más o de menos. Los superíndices (+) y (-) indican las desigualdades

$$\varepsilon_m^{(+)} > \mu, \quad \varepsilon_m^{(-)} < \mu. \quad (8.10)$$

[†] Este procedimiento es análogo al método de calcular las funciones de Green en electrodinámica cuántica (ver TCR, § 76).

[‡] El desarrollo correspondiente en la teoría cuántica de campos es el desarrollo de Källén-Lehmann (cf. TCR, §§ 101 y 108).

Puesto que $E_0(N+1) - E_0(N) \approx \partial E_0 / \partial N = \mu$, potencial químico a $T = 0$, podemos escribir, por ejemplo,

$$\begin{aligned}\varepsilon_m^{(+)} &= E_m(N+1) - E_0(N+1) + E_0(N+1) - E_0(N) \\ &\approx [E_m(N+1) - E_0(N+1)] + \mu.\end{aligned}$$

La diferencia encerrada entre corchetes (en donde ambas energías se relacionan con sistemas que poseen el mismo número de partículas) es positiva por la definición de estado fundamental; de aquí que $\varepsilon_m^{(+)} > \mu$. El significado de la definición (8.9) será estudiado de nuevo más adelante.

El desplazamiento de los polos de los términos de la suma (como funciones de ω), expresado por los términos $\pm i0$ en su denominador, es equivalente a la presencia de partes imaginarias en forma de función delta de acuerdo con†

$$\frac{1}{x \pm i0} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x). \quad (8.11)$$

Aplicando esta expresión a (8.7), encontramos como parte real de la función de Green

$$\operatorname{re} G(\omega, \mathbf{p}) = 4\pi^3 \sum_m P \left[\frac{A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu - \varepsilon_m^{(+)}} + \frac{B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega + \mu - \varepsilon_m^{(-)}} \right], \quad (8.12)$$

y como su parte imaginaria (puesto que cada diferencia $\varepsilon_m^{(+)} - \mu > 0$ y cada diferencia $\varepsilon_m^{(-)} - \mu < 0$)

$$\operatorname{im} G(\omega, \mathbf{p}) = \begin{cases} -4\pi^4 \sum_m A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m^{(+)}) & \text{para } \omega > 0, \\ 4\pi^4 \sum_m B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m) \delta(\omega + \mu - \varepsilon_m^{(-)}) & \text{para } \omega < 0. \end{cases} \quad (8.13)$$

De aquí que tengamos siempre

$$\operatorname{sgn} \operatorname{im} G(\omega, \mathbf{p}) = -\operatorname{sgn} \omega. \quad (8.14)$$

† Ver MC (43.10). El símbolo P indica que en la integración de expresiones de la forma $f(x)/(x \pm i0)$ la integral ha de tomarse como un valor principal:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x \pm i0} dx = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx \mp i\pi f(0).$$

El segundo término procede del paso alrededor del polo $x = -i0$ o $x = i0$ a lo largo de una semicircunferencia por encima o por debajo, respectivamente, del polo.

Podemos observar también el comportamiento asintótico de la función $G(\omega, \mathbf{p})$ cuando $\omega \rightarrow \infty$. A partir de (8.7),

$$G(\omega, \mathbf{p}) \approx \frac{4\pi^3}{\omega} \sum_m [A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m) + B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)].$$

Se ve fácilmente que el coeficiente de $1/\omega$ es el componente de Fourier respecto a $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ de

$$\frac{1}{2} \{ \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}_2) + \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}_1) \} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

es decir, la unidad. Así pues,

$$G(\omega, \mathbf{p}) \rightarrow 1/\omega \quad \text{cuando } |\omega| \rightarrow \infty. \quad (8.15)$$

La principal propiedad de la función de Green en la representación de los impulsos es que sus polos sólo pueden estar en los puntos $\omega = \varepsilon_m - \mu$, en donde ε_m son los valores discretos de las energías de excitación del sistema, definidos como se indicaron anteriormente. Cada una de estas energías corresponde a un valor definido del impulso \mathbf{P}_m del sistema, como resulta evidente a partir de la presencia de una función delta correspondiente en cada término polo de la función de Green.

Sin embargo, estamos interesados en la función de Green de un cuerpo macroscópico. Esto significa que estamos considerando el límite en el que el volumen V y el número de partículas N tienden a infinito (para un valor fijo del cociente N/V). En este límite las separaciones o desviaciones existentes entre los niveles del sistema tienden a cero, surgen los polos de la función $G(\omega, \mathbf{p})$ y únicamente podemos decir que esta función tiene una parte imaginaria para valores de $\omega + \mu$ en el intervalo continuo de valores posibles de la energía de excitación del sistema. Aquellas excitaciones en las que puede adscribirse el impulso total \mathbf{p} del sistema macroscópico a una cuasipartícula con una relación de dispersión definida $\varepsilon(\mathbf{p})$ (en el estado fundamental del sistema, $\mathbf{p} = 0$) constituyen una excepción; dichos valores corresponden a polos aislados de la función de Green.

Si el impulso \mathbf{p} está formado por los impulsos de más de una cuasipartícula, la energía del sistema no está únicamente determinada por el valor de \mathbf{p} : un impulso dado del sistema puede componerse de varias maneras por impulsos de cuasipartículas, cubriendo la energía total de las cuasipartículas un intervalo continuo de valores; se elimina el polo mediante integración respecto a todos estos estados.

Así pues, la relación de dispersión de las cuasipartículas está definida por la ecuación

$$G^{-1}(\varepsilon - \mu, \mathbf{p}) = 0 \quad (8.16)$$

(V. L. Bonch-Bruevich 1955).

Debe resaltarse que la definición de la energía de excitación dada en (8.9) corresponde realmente a la definición de energía de la cuasipartícula en la teoría de Landau: la diferencia $\varepsilon_m^{(+)}$ es la variación de energía del sistema cuando se le adiciona una partícula y, si se adscribe la totalidad de esta variación a una cuasipartícula, resulta la energía ε definida de acuerdo con (1.3). Análogamente, $-\varepsilon_m^{(-)}$ es la variación de energía cuando se elimina una partícula y así $\varepsilon_m^{(-)}$ es la energía de la cuasipartícula suprimida. Por consiguiente, es natural que $\varepsilon_m^{(-)} < \mu$ puesto que en la teoría de Landau sólo puede eliminarse una cuasipartícula desde dentro de la esfera de Fermi.[†]

Como todos los estados excitados que aparecen en el desarrollo (8.7) se obtienen a partir del estado fundamental añadiendo o eliminando una partícula con spin $\frac{1}{2}$, resulta claro que, en el caso de un sistema de fermiones, los polos de la función de Green determinan únicamente el espectro de las excitaciones elementales de tipo Fermi. En § 18 se mostrará cómo puede determinarse la rama de Bose.

La descripción del espectro de un sistema macroscópico mediante el concepto de cuasipartículas con una dependencia definida entre ε y \mathbf{p} es sólo aproximada, y de tal forma que su exactitud disminuye al aumentar $|\varepsilon - \mu|$. La separación respecto a la descripción de cuasipartículas independientes está indicada por el desplazamiento del polo de la función de Green dentro del dominio complejo, resultando $\varepsilon(\mathbf{p})$ compleja. De acuerdo con los principios generales de la mecánica cuántica (ver MC, § 134), la existencia de niveles de energía complejos significa la existencia también de un periodo de vida τ finito del estado excitado del sistema: $\tau \sim \sim 1/|\text{im } \varepsilon|$. La propia cantidad $\text{im } \varepsilon$ representa el grado de «ensanchamiento» de los valores de la energía de la cuasipartícula (anchura del nivel). Como es natural, este tratamiento sólo tiene significado si la parte imaginaria es suficientemente pequeña, $|\text{im } \varepsilon| \ll |\varepsilon - \mu|$. Como se explicó en § 1, esta condición se satisface de hecho para estados débilmente excitados del sistema, puesto que $|\text{im } \varepsilon| \sim 1/\tau \propto \propto (p - p_F)^2$, mientras que $\text{re}(\varepsilon - \mu) \propto |p - p_F|$.

El signo requerido de $\text{im } \varepsilon$ está asegurado por el signo fijo de la parte imaginaria de la función de Green: cerca de su polo esta función tiene la forma

$$G(\omega, \mathbf{p}) \approx Z/[\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{p})], \quad (8.17)$$

y la constante $Z > 0$, como resulta del hecho de que son positivos los coeficientes A_m y B_m del desarrollo (8.7); Z suele denominarse *constante de renormalización* (por analogía con la electrodinámica cuántica). La parte imaginaria de la función de Green es

$$\text{im } G \approx Z \text{ im } \varepsilon / |\omega + \mu - \varepsilon|^2.$$

[†] Debe señalarse que el nivel excitado E_m del sistema aparece con signo negativo en la definición de la energía de la cuasipartícula $\varepsilon_m^{(-)}$. Ésta es la razón por la cual el impulso de estas cuasipartículas $\mathbf{p} = -\mathbf{P}_m$, como se ve a partir de la función $\delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)$ en los términos correspondientes del desarrollo (8.7).

Como esta expresión se relaciona con los valores de $\omega \approx \varepsilon - \mu$, se encuentra, al comparar su signo con la regla (8.14), que

$$\left. \begin{array}{l} \text{im } \varepsilon < 0 \text{ cuando } \text{re } \varepsilon > \mu, \\ \text{im } \varepsilon > 0 \text{ cuando } \text{re } \varepsilon < \mu, \end{array} \right\} \quad (8.18)$$

como debería ser: el signo de $\text{im } \varepsilon$ corresponde en ambos casos [$\varepsilon_m^{(+)} y \varepsilon_m^{(-)}$ en (8.9)] al incremento imaginario negativo correcto dado a la energía E_m del estado ex-citado.

Las propiedades analíticas de la función de Green se estudiarán posteriormente en § 36, en donde se considerará esta cuestión para el caso general de temperaturas arbitrarias.

§ 9. Función de Green de un gas de Fermi ideal

Para ilustrar las relaciones generales dadas en § 8, calculemos la función de Green de un gas ideal.

Los operadores ψ de Schrödinger pueden escribirse siempre como un desarrollo

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma} \psi_{\mathbf{p}\alpha}(\mathbf{r}, \sigma) \quad (9.1)$$

en función de un conjunto completo de funciones $\psi_{\mathbf{p}\alpha}$, funciones de onda de spinor de una partícula libre con impulso \mathbf{p} (y proyección del spin σ), es decir en ondas planas

$$\psi_{\mathbf{p}\alpha} = \frac{u_\alpha}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}, \quad (9.2)$$

en donde u_α es la amplitud del spinor normalizada mediante la condición $u_\alpha u_\alpha^* = 1$; esta selección de las funciones $\psi_{\mathbf{p}\alpha}$ no tiene ninguna conexión con la interacción real de las partículas del sistema.

En el caso de un sistema de partículas no interactivas, el operador ψ de Heisenberg puede escribirse también en una forma explícita. En este caso, el paso de la representación de Schrödinger a la de Heisenberg consiste en colocar en cada término de la suma en (9.1) el factor temporal correspondiente:

$$\Psi_\alpha(t, \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma} \psi_{\mathbf{p}\alpha}(\mathbf{r}, \sigma) \exp \left[-i \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu \right) t \right]. \quad (9.3)$$

Esto se ve fácilmente si observamos que los elementos de matriz del operador de Heisenberg para cada transición $i \rightarrow f$ debe contener factores $\exp[-i(E'_i - E'_f)t]$,

en donde E'_i y E'_f son las energías de los estados inicial y final (en este caso valores propios del hamiltoniano $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$). En el caso de una transición con una disminución del número de partículas en el estado p , α en una unidad, la diferencia $E'_i - E'_f = p^2/2m - \mu$, de modo que se satisface la condición establecida.

Sin embargo, en lugar de calcular directamente la función de Green mediante (9.3) a partir de la definición (7.10), es más conveniente empezar convirtiendo esta definición en una ecuación diferencial equivalente. Para ello, derivemos $G_{\alpha\beta}(X_1 - X_2)$ respecto a t_1 . Es necesario tener en cuenta la discontinuidad de esta función para $t_1 = t_2$: de acuerdo con la definición (7.10), la cuantía de la discontinuidad es

$$\begin{aligned}[G_{\alpha\beta}] &\equiv [G_{\alpha\beta}]_{t_1=t_2+0} - [G_{\alpha\beta}]_{t_1=t_2-0} \\ &= -i\langle \hat{\Psi}_\alpha(t_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_\beta^+(t_1, \mathbf{r}_2) + \hat{\Psi}_\beta^-(t_1, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_\alpha(t_1, \mathbf{r}_1) \rangle\end{aligned}$$

o sea, a partir de (7.3),†

$$[G_{\alpha\beta}] = -i\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (9.4)$$

La presencia de la discontinuidad da lugar al derivar a un término $[G_{\alpha\beta}]\delta(t_1 - t_2)$. De aquí que

$$\frac{\partial}{\partial t_1} G_{\alpha\beta} = -i \left\langle T \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha(X_1)}{\partial t_1} \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \right\rangle - i\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta(t_1 - t_2). \quad (9.5)$$

Para un sistema de partículas libres, el operador de Heisenberg ψ satisface la ecuación

$$i \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \Delta \hat{\Psi}_\alpha - \mu \hat{\Psi}_\alpha;$$

cf. (7.8). Sustituyendo esta derivada en (9.5) y utilizando de nuevo la definición (7.10), obtenemos como ecuación para la función de Green

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \right) G^{(0)}(t, \mathbf{r}) = \delta(t) \delta(\mathbf{r}), \quad (9.6)$$

en donde hemos puesto $G_{\alpha\beta}^{(0)} = \delta_{\alpha\beta}G^{(0)}$; el superíndice (0) en G indica que no existen interacciones entre las partículas.

Esta ecuación tiene la transformada de Fourier

$$\left(\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \right) G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = 1.$$

† Debe resaltarse que el valor de la discontinuidad no depende de la interacción de las partículas.

Al determinar la función de Green a partir de esta expresión, debemos sumar a ω una parte imaginaria infinitesimal de tal modo que la parte imaginaria de G tenga el signo correcto de acuerdo con (8.14):

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = \left[\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu + i0 \cdot \text{signo } \omega \right]^{-1}. \quad (9.7)$$

El polo de esta expresión está en $\omega + \mu = \varepsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m$, de acuerdo con el hecho de que en un gas ideal las cuasipartículas son iguales que las partículas reales. El potencial químico de un gas ideal de Fermi es $\mu = p_F^2/2m$. En los estados débilmente excitados p es próximo a p_F , de modo que podemos escribir $p^2/2m \approx \mu + v_F(p - p_F)$, en donde $v_F = p_F/m$ y podemos expresar la función de Green para dichos estados en la forma

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = [\omega - v_F(p - p_F) + i0 \cdot \text{signo } \omega]^{-1}. \quad (9.8)$$

En todas las integraciones en que interviene la función $G^{(0)}$, la presencia de la parte imaginaria infinitesimal en su denominador es sólo importante cerca del polo, en donde $\omega \approx v_F(p - p_F)$. En este sentido $\text{sgn } \omega$ en (9.7) puede sustituirse por $\text{sgn } (p - p_F)$, y escribirse $G^{(0)}$ como

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = [\omega^2 - p^2/2m + \mu + i0 \cdot \text{signo } (p - p_F)]^{-1}. \quad (9.9)$$

Este cambio tiene importancia puesto que $G^{(0)}$ en la forma (9.9) es una función simple de la variable compleja ω , analítica en todo el plano, y pueden utilizarse los métodos de la teoría de las funciones analíticas para calcular las integrales.

Por ejemplo, para calcular la integral (7.23) (la distribución de impulsos de partículas) en el caso de t negativo no cero, cerraremos el contorno de integración (el eje ω real) por una semicircunferencia infinita en el semiplano superior (y puede ponerse entonces $t = 0$). La integral

$$N(\mathbf{p}) = -\frac{i}{2\pi} \int \frac{d\omega}{\omega - p^2/2m + \mu + i0 \cdot \text{signo } (p - p_F)}$$

está determinada ahora por el residuo del integrando en el polo en el semiplano superior. Cuando $p > p_F$ no existe dicho polo y $N(\mathbf{p}) = 0$. Sin embargo, si $p < p_F$, se encuentra que $N(\mathbf{p}) = 1$ como debería ocurrir en el estado fundamental de un gas de Fermi ideal.

§ 10. Distribución de los impulsos de las partículas en un líquido de Fermi

La función de Green de un líquido de Fermi no puede calcularse, como es natural, de una forma general como se hizo en el caso de un gas de Fermi. Pero la afirmación

de que un líquido de Fermi tiene un espectro del tipo descrito en § 1 implica que su función de Green tiene un polo en

$$\omega = \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu \approx v_F(p - p_F), \quad v_F = p_F/m^*. \quad (10.1)$$

Por consiguiente, puede escribirse como

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \frac{Z}{\omega - v_F(p - p_F) + i0 \cdot \text{signo } \omega} + g(\omega, \mathbf{p}), \quad (10.2)$$

en donde $g(\omega, \mathbf{p})$ es una función finita en el punto (10.1). Como ya se hizo notar en conexión con (8.17), el coeficiente Z es positivo (el residuo de G en el polo).

Puede sacarse una conclusión interesante a partir de (10.2) acerca de la naturaleza de la distribución de los impulsos de la partícula (no cuasipartícula) en el líquido. Calculemos la diferencia entre los valores de la función de distribución $N(\mathbf{p})$ (que en la práctica depende únicamente del módulo \mathbf{p}) en las dos caras de la superficie de la esfera de Fermi, es decir, el límite de la diferencia $N(p_F - q) - N(p_F + q)$ cuando $q \rightarrow +0$.

La distribución $N(\mathbf{p})$ se expresa mediante la función de Green utilizando la integral (7.23). Como $g(\omega, \mathbf{p})$ es finita, es evidente que la diferencia entre las integrales de g tiende a cero con q . Por consiguiente, resulta suficiente considerar la diferencia entre los términos de los polos en (10.2). Puesto que en esta integración sólo es importante el término $i0$ del denominador cerca del polo, podemos sustituir $\text{sgn } \omega$ por $\text{sgn}(p - p_F)$, como ya se mencionó en § 9. Entonces

$$N(p_F - q) - N(p_F + q) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{Z}{\omega + v_F q - i0} - \frac{Z}{\omega - v_F q + i0} \right\} \frac{d\omega}{2\pi};$$

puesto que esta integral de la diferencia converge, puede omitirse el factor $e^{-i\omega t}$, con $t = -0$. Ahora bien, cerrando el contorno de integración por una semicircunferencia infinita en cualquier semiplano, se encuentra que la integral completa es igual a Z e independiente de q . Así pues,

$$N(p_F - 0) - N(p_F + 0) = Z \quad (10.3)$$

(A. B. Migdal 1957).

Ya se ha mencionado anteriormente que $Z > 0$. Puesto que $N(\mathbf{p}) \leq 1$, se deduce de (10.3) que

$$0 < Z \leq 1; \quad (10.4)$$

el valor $Z = 1$ se alcanza sólo en el límite de gas ideal.

La distribución de impulsos de las partículas en un líquido de Fermi a $T = 0$ tiene, por consiguiente, como en un gas, una discontinuidad en la superficie de la esfera de Fermi, disminuyendo hacia el exterior. Sin embargo, a diferencia del gas, el valor de la discontinuidad es menor que la unidad y $N(\mathbf{p})$ permanece no nulo para $p > p_F$, como se ha indicado en la figura 1 mediante una curva continua; la curva a trazos corresponde a un gas

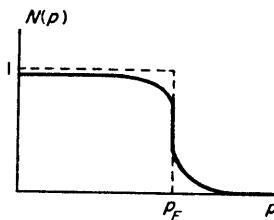


FIG. 1.

§ 11. Cálculo de magnitudes termodinámicas a partir de la función de Green

El conocimiento de la función de Green de un sistema es suficiente para describir sus propiedades termodinámicas. Cuando $T = 0$, estas propiedades se expresan mediante la dependencia de la energía del sistema (que es la energía del estado fundamental E_0) con la densidad N/V .

Cuando se ha determinado la relación $\epsilon(p)$ de dispersión de las cuasipartículas [resolviendo la ecuación (8.16)], puede hallarse esta dependencia haciendo uso de la expresión

$$\epsilon(p_F) = \mu. \quad (11.1)$$

Como se conoce la dependencia entre p_F y N/V , a partir de (1.1):

$$p_F = (3\pi^2)^{1/3}(N/V)^{1/3}, \quad (11.2)$$

la ecuación (11.1) determina la función $\mu(N/V)$ [aunque en forma implícita, puesto que en general la relación de dispersión $\epsilon(\mathbf{p})$ contiene μ como parámetro]. A $T = 0$ (y, por tanto, $S = 0$), el potencial químico $\mu = (\partial E_0 / \partial N)_V$; la integración de esta expresión de la energía buscada

$$E_0 = \int_0^N \mu(N/V) dN; \quad (11.3)$$

como es natural, cuando $N = 0$, $E_0 = 0$.

Otro modo de describir las propiedades termodinámicas a $T = 0$ consiste en calcular el potencial termodinámico Ω . De acuerdo con la definición general (ver Parte 1, § 24), este potencial $\Omega = E - TS - \mu N = -PV$ y su diferencial $d\Omega = -SdT - Nd\mu$; cuando $T = 0$, también $S = 0$ y estas expresiones se reducen a

$$\Omega = E - \mu N, \quad (11.4)$$

$$d\Omega = -N d\mu. \quad (11.5)$$

El significado del potencial Ω estriba en que describe las propiedades del sistema a V constante.

El método más sencillo de expresar Ω en función de G (función de Green) es el de utilizar la relación (7.24) entre N/V y G . Sustituyendo N a partir de (7.24) en (11.5) e integrando respecto a μ (con V constante), se obtiene

$$\Omega(\mu) = 2iV \int_0^\mu d\mu \cdot \lim_{t \rightarrow -0} \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d^3 p d\omega}{(2\pi)^4}, \quad (11.6)$$

puesto que de nuevo $\Omega = 0$ cuando $\mu = 0$.

§ 12. Operadores Ψ en la representación de la interacción

La función de Green para un sistema de partículas interactivas no puede calcularse, como es natural, de una forma general. Sin embargo, existe una técnica matemática (análoga a la técnica de diagramas utilizada en la teoría cuántica de campos) mediante la cual puede calcularse como una serie de potencias de la energía de interacción de las partículas, expresándose cada término mediante las funciones de Green de un sistema de partículas libres y el operador de interacción.

Utilizaremos, igual que en la representación de Heisenberg, una representación de operadores cuya dependencia temporal no venga dada por el hamiltoniano real del sistema

$$\hat{H}' = \hat{H}'^{(0)} + \hat{V} = \hat{H}^{(0)} - \mu \hat{N} + \hat{V}$$

(siendo \hat{V} el operador de interacción), sino por el hamiltoniano de partícula libre $\hat{H}'(0)$:

$$\hat{\Psi}_0(t, \mathbf{r}) = \exp(i\hat{H}'^{(0)}t) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \exp(-i\hat{H}'^{(0)}t). \quad (12.1)$$

Los operadores y las funciones de onda en esta *representación de la interacción* se distinguirán mediante el subíndice 0. Expresando la función de Green mediante

los operadores $\hat{\Psi}_0$ (en lugar de los operadores de Heisenberg $\hat{\Psi}$) la primera etapa hacia el objetivo, consiste en expresar G en función de $G^{(0)}$ y V .

En esta sección, Φ o ϕ designarán funciones de onda en el «espacio de los números de ocupación» (en contraste con las funciones de onda Ψ o ψ que son funciones de las coordenadas); estas funciones están sometidas a la acción de los operadores de la segunda cuantización. Sea ϕ una de estas funciones en la representación de Schrödinger; su dependencia temporal viene dada por la ecuación de onda

$$i\partial\phi/\partial t = (\hat{H}'^{(0)} + \hat{V})\phi. \quad (12.2)$$

En la representación de Heisenberg, en donde la totalidad de la dependencia temporal se transfiere a los operadores, la función de onda Φ del sistema es una constante, independiente del tiempo. Sin embargo, en la representación de la interacción la función de onda Φ_0 depende del tiempo, pero sólo debido a la interacción de las partículas del sistema, y viene dada por

$$i\partial\Phi_0(t)/\partial t = \hat{V}_0(t)\Phi_0(t), \quad (12.3)$$

en donde

$$\hat{V}_0(t) = \exp(i\hat{H}'^{(0)}t)\hat{V}\exp(-i\hat{H}'^{(0)}t) \quad (12.4)$$

es el operador de interacción en dicha representación; en el caso de operadores que tengan la forma (7.6), (7.7), se obtiene el cambio a la nueva representación sustituyendo simplemente $\hat{\Psi}_0$ por $\hat{\Psi}$. La ecuación (12.3) se deduce fácilmente puesto que la transformación de operadores mediante (12.1) corresponde a la transformación de las funciones de onda de acuerdo con

$$\Phi_0 = \exp(i\hat{H}'^{(0)}t)\phi; \quad (12.5)$$

ver MC, § 12. Derivando esta expresión y haciendo uso de (12.2) se obtiene (12.3).†

Según (12.3), los valores de $\Phi_0(t)$ en dos instantes sucesivos están relacionados por

$$\begin{aligned} \Phi_0(t+\delta t) &= [1 - i\delta t.\hat{V}_0(t)]\Phi_0(t) \\ &= \exp\{-i\delta t.\hat{V}_0(t)\}\Phi_0(t). \end{aligned}$$

De acuerdo con ello, el valor de Φ_0 en un instante cualquiera t puede expresarse en función del valor en un cierto instante inicial $t_0 (< t)$ por

$$\Phi_0(t) = \hat{S}(t, t_0)\Phi_0(t_0), \quad (12.6)$$

† La ecuación (12.3) es la misma que TCR (73.5) y el método de resolución que sigue repite el dado en TCR, § 73.

en donde

$$\hat{S}(t, t_0) = \prod_{t_i=t_0}^t \exp \{-i\delta t_i \hat{V}_0(t_i)\}; \quad (12.7)$$

los factores de este producto están claramente ordenados de derecha a izquierda en orden de valores crecientes del tiempo t_i ; ha de entenderse que tomamos el límite del producto extendido a todos los intervalos infinitesimales δt entre t_0 y t . Si $V_0(t)$ fuese una función ordinaria, este límite se reduciría simplemente a

$$\exp \left\{ -i \int_{t_0}^t V_0(t) dt \right\},$$

pero este resultado depende de la conmutatividad de los factores correspondientes a instantes diferentes, que se ha supuesto al pasar del producto que aparece en (12.7) a la suma en el exponente. En el caso del operador $\hat{V}_0(t)$ no existe dicha conmutatividad y no es posible la reducción a una integral ordinaria. En lugar de ello, podemos escribir (12.7) en la forma simbólica

$$\hat{S}(t, t_0) = T \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t \hat{V}_0(t) dt \right\}, \quad (12.8)$$

en donde T designa la ordenación cronológica de los factores en la misma secuencia que en (12.7), es decir de forma que el tiempo vaya creciendo de derecha a izquierda.

El operador \hat{S} es unitario ($\hat{S}^{-1} = \hat{S}^+$) y tiene las propiedades evidentes

$$\left. \begin{aligned} \hat{S}(t_3, t_2) \hat{S}(t_2, t_1) &= \hat{S}(t_3, t_1), \\ \hat{S}^{-1}(t_2, t_1) \hat{S}^{-1}(t_3, t_2) &= \hat{S}^{-1}(t_3, t_1). \end{aligned} \right\} \quad (12.9)$$

Para simplificar el análisis siguiente, hagamos la hipótesis formal (que no influye en el resultado final) de que la interacción $\hat{V}_0(t)$ se «conecta» adiabáticamente entre $t = -\infty$ y un tiempo finito y que se «desconecta» adiabáticamente en $t = +\infty$. Entonces, cuando $t \rightarrow -\infty$, antes de que empiece la interacción, la función de ondas $\Phi_0(t)$ coincide con la función de Heisenberg Φ . Haciendo $t_0 = -\infty$ en (12.6), se tiene

$$\Phi_0(t) = \hat{S}(t, -\infty) \Phi. \quad (12.10)$$

Habiendo establecido así la relación existente entre las funciones de onda en las dos representaciones, tenemos también la regla de transformación para los operadores, incluyendo los operadores ψ :

$$\Psi = \hat{S}^{-1}(t, -\infty) \hat{\Psi}_0 \hat{S}(t, -\infty). \quad (12.11)$$

Puesto que \hat{S} es unitario, los operadores $\hat{\Psi}^+$ se transforman del mismo modo. Expresemos a continuación la función de Green mediante los operadores ψ en la representación de la interacción.[†] Sea $t_1 > t_2$; entonces

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) &= -i\langle \hat{\Psi}_\alpha(t_1) \hat{\Psi}_\beta^+(t_2) \rangle \\ &= -i\langle \hat{S}^{-1}(t_1, -\infty) \hat{\Psi}_{0\alpha}(t_1) \hat{S}(t_1, -\infty) \times \\ &\quad \times \hat{S}^{-1}(t_2, -\infty) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(t_2) \hat{S}(t_2, -\infty) \rangle. \end{aligned}$$

De acuerdo con (12.9),

$$\begin{aligned} \hat{S}(t_1, -\infty) \hat{S}^{-1}(t_2, -\infty) &= \hat{S}(t_1, t_2) \hat{S}(t_2, -\infty) \hat{S}^{-1}(t_2, -\infty) \\ &= \hat{S}(t_1, t_2), \\ \hat{S}^{-1}(t_1, -\infty) &= \hat{S}^{-1}(t_1, -\infty) \hat{S}^{-1}(-\infty, t_1) \hat{S}(-\infty, t_1) \\ &= \hat{S}^{-1}(-\infty, -\infty) \hat{S}(-\infty, t_1). \end{aligned}$$

Al sustituir en la expresión precedente se tiene

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -i\langle \hat{S}^{-1}(-\infty, -\infty) \hat{S}(-\infty, t_1) \hat{\Psi}_{0\alpha}(t_1) \hat{S}(t_1, t_2) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(t_2) \hat{S}(t_2, -\infty) \rangle.$$

Tomando los operadores \hat{S} como los productos (12.7) vemos que todos los factores desde el segundo hacia adelante en la expresión promediada están en orden cronológico de derecha a izquierda, $t = -\infty$ hasta $t = \infty$. Por consiguiente, podemos escribir

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -i\langle \hat{S}^{-1} T[\hat{\Psi}_{0\alpha}(t_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(t_2) \hat{S}] \rangle, \quad (12.12)$$

con

$$\hat{S} = \hat{S}(-\infty, -\infty) = T \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{\infty} \hat{V}_0(t) dt \right\}. \quad (12.13)$$

El cálculo con $t_1 < t_2$ difiere del anterior sólo en la notación y el resultado final (12.12), (12.13) es válido para cualquier t_1 y t_2 .

La transformación hecha no depende del estado del sistema respecto al que se realiza la operación de promediar. Sin embargo, si se toma el promedio respecto al estado fundamental [como en (12.12)], la transformación puede proseguirse. Para ello, debemos observar que la conmutación o supresión de la interacción, como cualquier perturbación adiabática, no puede originar una transición con cambio

[†] Esta deducción repite la dada en TCR, § 100.

de energía del sistema cuántico (ver MC, § 41). De aquí que un sistema en un estado no degenerado (como el estado fundamental) permanecerá en dicho estado. Es decir, el efecto del operador S sobre la función de onda $\Phi = \Phi_0(-\infty)$ debe reducirse a la multiplicación por un factor de fase (que no influye en el estado), que es el valor medio de \hat{S} en el estado fundamental: $\hat{S}\Phi = \langle \hat{S} \rangle \Phi$. Análogamente, $\Phi^* \hat{S}^{-1} = \langle \hat{S} \rangle^{-1} \Phi^*$. Así pues, tenemos finalmente la fórmula siguiente para la función de Green en función de operadores en la representación de la interacción:[†]

$$iG_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \frac{1}{\langle \hat{S} \rangle} \langle T[\hat{\Psi}_{0\alpha}(X_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(X_2) \hat{S}] \rangle. \quad (12.14)$$

De acuerdo con el significado de esta representación, la operación de promedio en (12.14) se refiere al estado fundamental de un sistema de partículas libres; las propiedades de los operadores $\hat{\Psi}_0$, son las mismas que las de los operadores $\hat{\Psi}$ de Heisenberg en ausencia de interacciones, y la función de onda Φ de Heisenberg es independiente del tiempo, de forma que coincide con su valor a $t = -\infty$, cuando no existe interacción. De aquí que, en particular,

$$\langle T\hat{\Psi}_{0\alpha}(X_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(X_2) \rangle = iG_{\alpha\beta}^{(0)}(X_1, X_2) \quad (12.15)$$

es la función de Green de un sistema de partículas no interactivas.

§ 13. La técnica de los diagramas para los sistemas de Fermi

El significado de las expresiones simbólicas como (12.14) estriba en que hacen posible escribir fácilmente los términos sucesivos de los desarrollos en potencias de \hat{V} . Por ejemplo,

$$\begin{aligned} & \langle T\hat{\Psi}_{0\alpha}(X) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(X') \hat{S} \rangle = \\ & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle T\hat{\Psi}_{0\alpha}(X) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(X') \hat{V}_0(t_1) \dots \hat{V}_0(t_n) \rangle, \end{aligned} \quad (13.1)$$

y la expresión correspondiente a $\langle \hat{S} \rangle$ difiere de la anterior solamente en que no aparecen los factores $\hat{\Psi}_{0\alpha} \hat{\Psi}_{0\beta}^+$ en el producto T . Como ya se ha mencionado, se obtiene el operador $\hat{V}_0(t)$ en la representación de la interacción a partir de (7.7) sustituyendo todos los $\hat{\Psi}$ por $\hat{\Psi}_0$. El cálculo de los términos sucesivos en el desarrollo (13.1) se

[†] La notación de (12.14) es en cierto modo convencional: aunque contiene el símbolo T dos veces (una vez explícitamente y otra en la definición de S), todos los factores del producto deben ordenarse realmente en una sola secuencia cronológica.

reduce así a la operación de promedio, respecto al estado fundamental, el producto T de los diversos números de operadores ψ de partículas libres.

Estos cálculos se consiguen automatizar ampliamente mediante las reglas de la técnica diagramática, que depende, sin embargo, esencialmente de la naturaleza del sistema físico considerado. La técnica descrita en esta sección se relaciona con los sistemas de Fermi no superfluidos, admitiéndose que las partículas tienen una interacción por pares independientes del spin. El operador de interacción correspondiente es

$$\hat{V}_0(t) = \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}_{0\gamma}^+(t, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_{0\delta}^+(t, \mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_{0\delta}(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_{0\gamma}(t, \mathbf{r}_1) d^3x_1 d^3x_2, \quad (13.2)$$

en donde $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ es la energía de interacción de dos partículas; se han omitido los superíndices (2) en \hat{V} y U .

El valor medio de los productos de operadores ψ se calcula mediante el *teorema de Wick*:† el valor promedio del producto de un número (par) cualquiera de operadores $\hat{\Psi}$ y $\hat{\Psi}^+$ es igual a la suma de los productos de todas las medias (contracciones) posibles de pares de estos operadores. En cada par los operadores están en el mismo orden que en el producto original. El signo de cada término de la suma viene dado por el factor $(-1)^P$, en donde P es el número de intercambios de operadores necesarios para reunir a todos los operadores que se promedian.

Unicamente son no nulas aquellas contracciones que contienen un operador $\hat{\Psi}$ y un operador $\hat{\Psi}^+$; en el elemento de matriz diagonal, todas las partículas aniquiladas por el operador $\hat{\Psi}$ deben ser creadas de nuevo por el operador $\hat{\Psi}^+$. Por consiguiente, resulta claro que el valor medio del producto de varios operadores ψ sólo puede ser no nulo si contiene el mismo número de operadores $\hat{\Psi}$ que de operadores $\hat{\Psi}^+$.

Cuando se aplica al promedio del producto T , el teorema de Wick permite expresarlo en función de las medias de productos T emparejados, es decir, de acuerdo con (12.15), mediante las funciones de Green de partículas libres. Realizaremos este cálculo para la corrección de primer orden a la función de Green de un sistema de partículas interactivas.

En primer lugar, observemos que, al desarrollar la expresión que aparece en el numerador de (12.14) mediante el teorema de Wick, se tendrán en particular términos de la forma

$$\langle T \hat{\Psi}_{0\alpha}(X_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(X_2) \rangle \langle \hat{S} \rangle = iG_{\alpha\beta}^{(0)}(X_1, X_2) \langle \hat{S} \rangle, \quad (13.3)$$

en los que se «contraen» los pares de operadores ψ que están «fuera» de \hat{S} ; el desarrollo de $\langle \hat{S} \rangle$ contiene en cada término sólo contracciones de operadores en su «interior». El factor $\langle \hat{S} \rangle$ se compensa exactamente con el denominador de (12.14) y así

† Su prueba se da al final de esta sección y no impide seguir el estudio realizado ahora.

todos estos términos dan exactamente la función de Green «sin perturbar» $iG_{\alpha\beta}^{(0)}$.

Reteniendo los dos primeros términos del desarrollo de (13.1), sustituyendo (13.2) y volviendo a denominar las variables, se encuentra

$$iG_{\alpha\beta}(X_1, X_2) \approx iG_{\alpha\beta}^{(0)} + iG_{\alpha\beta}^{(1)},$$

en donde

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}^{(1)} = & -\frac{1}{2} i \langle T \hat{\Psi}_{0\alpha}(X_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^+(X_2) \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3x_3 d^3x_4 \hat{\Psi}_{0\gamma}^+(t, \mathbf{r}_3) \hat{\Psi}_{0\delta}^+(t, \mathbf{r}_4) U(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \hat{\Psi}_{0\delta}(t, \mathbf{r}_4) \hat{\Psi}_{0\gamma}(t, \mathbf{r}_3) \rangle. \end{aligned}$$

Para tener unas fórmulas más compactas utilizaremos la notación

$$U(X_1 - X_2) = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2). \quad (13.4)$$

Entonces†

$$iG_{12}^{(1)} = -\frac{1}{2} i \int \langle T \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^+ \hat{\Psi}_3^+ \hat{\Psi}_4^+ \hat{\Psi}_4 \hat{\Psi}_3 \rangle U_{34} d^4X_3 d^4X_4,$$

en donde $d^4X = dt d^3x$.

Con objeto de promediar mediante el teorema de Wick, escribamos todos los operadores separadamente y mostremos todas las contracciones que tienen interés:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^+ \hat{\Psi}_3^+ \hat{\Psi}_4^+ \hat{\Psi}_4 \hat{\Psi}_3 \rangle \rightarrow & \overbrace{\hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^+}^{} \overbrace{\hat{\Psi}_3^+ \hat{\Psi}_4^+}^{} \overbrace{\hat{\Psi}_4}^{} \hat{\Psi}_3 + \overbrace{\hat{\Psi}_1}^{} \overbrace{\hat{\Psi}_2^+ \hat{\Psi}_3^+}^{} \overbrace{\hat{\Psi}_4^+ \hat{\Psi}_4}^{} \hat{\Psi}_3 + \\ & + \overbrace{\hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^+}^{} \overbrace{\hat{\Psi}_3^+ \hat{\Psi}_4^+}^{} \overbrace{\hat{\Psi}_4}^{} \hat{\Psi}_3 + \overbrace{\hat{\Psi}_1}^{} \overbrace{\hat{\Psi}_2^+ \hat{\Psi}_3^+}^{} \overbrace{\hat{\Psi}_4^+ \hat{\Psi}_4}^{} \hat{\Psi}_3. \end{aligned}$$

Se han omitido los términos que contienen contracciones $\hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2^+$ de acuerdo con nuestro análisis previo. Los operadores contraídos por parejas (unidos por líneas) se han intercambiado de modo que resulten adyacentes. Por ejemplo, el primer término escrito anteriormente designa el producto

$$\langle T \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_3^+ \rangle \langle T \hat{\Psi}_2^+ \hat{\Psi}_4 \rangle \langle T \hat{\Psi}_4^+ \hat{\Psi}_3 \rangle,$$

† De ahora en adelante para simplificar algunas expresiones particularmente engorrosas, omitiremos el subíndice en $\hat{\Psi}_0$ y designaremos mediante los cardinales 1, 2... el conjunto de valores del argumento X y del subíndice de spin:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_1 &\equiv \hat{\Psi}_\alpha(X_1), & \hat{\Psi}_2 &\equiv \hat{\Psi}_\beta(X_2), \\ G_{12} &\equiv G_{\alpha\beta}(X_1, X_2), & U_{12} &\equiv U(X_1 - X_2), \dots \end{aligned}$$

y el último es

$$-\langle T\hat{\Psi}_1\hat{\Psi}_4^+ \rangle \langle T\hat{\Psi}_2^+\hat{\Psi}_4 \rangle \langle \hat{\Psi}_3^+\hat{\Psi}_3 \rangle.$$

Se sustituyen las contracciones de productos de operadores ψ con diferentes argumentos de acuerdo con la expresión

$$\widehat{\Psi_1\Psi_3^+} \equiv \langle T\hat{\Psi}_1\hat{\Psi}_3^+ \rangle = iG_{13}^0, \quad \widehat{\Psi_2^+\Psi_4} = -iG_{24}^0, \text{ etc.}$$

Aquellos operadores ψ que tengan el mismo argumento representan la densidad numérica espacial de partículas en un gas ideal (designada por $n^{(0)}$), considerada como una función del potencial químico:[†]

$$\langle \hat{\Psi}^+\hat{\Psi} \rangle = n^{(0)}(\mu) = (2m\mu)^{3/2}/3\pi^2. \quad (13.5)$$

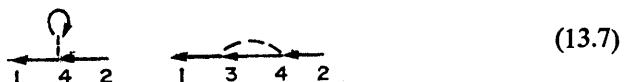
Así pues tenemos

$$iG_{12}^{(1)} = \frac{1}{2} \int d^4X_3 d^4X_4 U_{34} [-G_{13}^{(0)}G_{34}^{(0)}G_{42}^{(0)} - G_{14}^{(0)}G_{43}^{(0)}G_{32}^{(0)} + in^{(0)}G_{13}^{(0)}G_{32}^{(0)} + in^{(0)}G_{14}^{(0)}G_{42}^{(0)}].$$

Estos cuatro términos son iguales por parejas, difiriendo únicamente en la denominación de las variables de integración X_3 y X_4 . Así pues, desaparece el factor $\frac{1}{2}$ y la corrección de primer orden a la función de Green tiene dos términos:

$$iG_{12}^{(1)} = \int U_{34} [in^{(0)}G_{14}^{(0)}G_{42}^{(0)} - G_{13}^{(0)}G_{34}^{(0)}G_{42}^{(0)}] d^4X_3 d^4X_4. \quad (13.6)$$

La estructura de estos términos se representa gráficamente de un modo más conveniente mediante los *diagramas de Feynman*



En ellos la línea continua $4 \leftarrow 2$ designa la contracción $\widehat{\Psi}_4\widehat{\Psi}_2^+$ (es decir, la función $iG_{42}^{(0)}$); los números se refieren a las variables X_4 y X_2 de las que dependen los operadores contraídos y el sentido de la flecha corresponde a la dirección desde $\widehat{\Psi}^+$ hacia $\widehat{\Psi}$ en la contracción. La contracción $\widehat{\Psi}^+\widehat{\Psi}$ de dos operadores que dependen de las mismas variables (es decir, la densidad $n^{(0)}$) está representada por un lazo (una línea continua cerrada). La línea a trazos $3 \dashv 4$ designa el factor U_{34} . La integra-

[†] Dichas contracciones surgen siempre por operadores ψ que aparecen en el operador de interacción \hat{V} . De aquí que $\widehat{\Psi}^+$ en dichos términos esté siempre a la izquierda de $\widehat{\Psi}$.

ción está implicada respecto a todas las variables indicadas en los puntos interiores del diagrama (puntos de intersección de líneas). Las variables (X_1 y X_2) indicadas en las líneas externas del diagrama permanecen libres.

Los términos de primer orden que proceden de (13.3) deberán tener diagramas separados en dos partes: un segmento recto ($iG_{\alpha\beta}^{(0)}$) y un diagrama con lazos cerrados de líneas continuas, como



Si se comprende el método de la contracción de operadores y se entiende la estructura de los diagramas correspondientes podremos ver el origen de la regla general de acuerdo con la cual, en todos los órdenes de la teoría de perturbaciones, ha de tenerse en cuenta el papel del factor $\langle \hat{S} \rangle^{-1}$ en (12.14) solamente en los diagramas «conectados» con dos líneas externas, que no contengan lazos separados sin líneas externas que estén sin conectar al resto del diagrama por líneas continuas o a trazos, cf. TCR, § 100 para una situación semejante en la electrodinámica cuántica.

La supresión del factor $\frac{1}{2}$ en (13.6) es un ejemplo de una regla general: no es necesario incluir (en los términos de orden n) el factor $1/n!$ a partir del desarrollo (13.1) o el factor 2^{-n} de los coeficientes $\frac{1}{2}$ en (13.2). La razón es que los diagramas de orden n contienen n líneas a trazos $i \dots k$. El factor $1/n!$ se compensa con la combinación de términos que difieren entre sí por intercambios de pares de números i, k entre todas las n líneas a trazos. El factor 2^{-n} se cancela a partir del intercambio de los números i, k entre los extremos de cada línea.

Las reglas de las técnicas de los diagramas se formularán finalmente para el cálculo de la función de Green, no en la representación de coordenadas sino directamente en la representación de los impulsos, que es la más importante en las aplicaciones físicas.

El cambio a la representación del impulso se hace mediante el desarrollo de Fourier (7.21), (7.22), que escribiremos en la forma cuadridimensional†

$$\left. \begin{aligned} G(X) &= \int G(P) e^{-iPX} d^4P/(2\pi)^4, \\ G(P) &= \int G(X) e^{iPX} d^4X, \end{aligned} \right\} \quad (13.8)$$

en donde el «cuadri-impulso» o «4-impulso» es $P = (\omega, \mathbf{p})$ y $PX = \omega t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}$. Podemos de modo análogo desarrollar el potencial de interacción:

$$U(X) = \delta(t) U(\mathbf{r}) = \int U(Q) e^{-iQX} d^4Q/(2\pi)^4, \quad (13.9)$$

† Aunque se utilice por conveniencia una terminología cuadridimensional tanto durante el estudio de los temas como en la notación, conviene reiterar que está totalmente desconectada de la invarianza relativista.

en donde $Q = (q_0, \mathbf{q})$; $U(Q)$ es el mismo que el componente del desarrollo tridimensional,

$$U(Q) \equiv U(\mathbf{q}) = \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d^3x. \quad (13.10)$$

Puesto que $U(\mathbf{r})$ es par, resulta claro que $U(-\mathbf{q}) = U(\mathbf{q})$.

Realicemos este desarrollo para la corrección de primer orden $G_{12}^{(1)} \equiv G_{\alpha\beta}^{(1)}(X_1 - X_2)$. Para ello, multipliquemos la ecuación (13.6) por $\exp[iP(X_1 - X_2)]$ e integremos respecto a $d^4(X_1 - X_2)$.

En primer término escribamos

$$e^{iP(X_1 - X_2)} = e^{iP(X_1 - X_3)} e^{iP(X_3 - X_2)}$$

y, cambiando las variables de integración, se obtiene

$$\begin{aligned} & i n^{(0)} \int G_{\alpha\gamma}^{(0)}(X_1 - X_3) e^{iP(X_1 - X_3)} d^4(X_1 - X_3) \times \\ & \times G_{\gamma\beta}^{(0)}(X_3 - X_2) e^{iP(X_3 - X_2)} d^4(X_3 - X_2) \int U(X_3 - X_4) d^4(X_3 - X_4). \end{aligned}$$

Las dos primeras integrales dan $G_{\alpha\gamma}^{(0)}(P)G_{\gamma\beta}^{(0)}(P)$ y la tercera es $U(0) = \int U(\mathbf{r}) d^3x$, que es el valor de $U(\mathbf{q})$ para $\mathbf{q} = 0$.

Análogamente, en el segundo término escribiremos

$$e^{iP(X_1 - X_2)} = e^{iP(X_1 - X_3)} e^{iP(X_3 - X_4)} e^{iP(X_4 - X_2)}$$

y, después de pasar a una integración respecto a $X_1 - X_3$, $X_3 - X_4$, $X_4 - X_2$, obtenemos

$$-G_{\alpha\gamma}^{(0)}(P) \int G_{\gamma\delta}^{(0)}(X) U(X) e^{iPX} d^4X \cdot G_{\delta\beta}^{(0)}(P).$$

La integral restante se expresa en función de los componentes de Fourier de $G_{\gamma\delta}^{(0)}$ y U mediante la fórmula que nos da los componentes de Fourier del producto de dos funciones†

$$\int f(X) g(X) e^{iPX} d^4X = \int f(P_1) g(P - P_1) d^4P_1 / (2\pi)^4. \quad (13.11)$$

† Para demostrar esta fórmula, debemos sustituir a la izquierda las funciones $f(X)$ y $g(X)$ por desarrollos de Fourier:

$$\int f(X) g(X) e^{iPX} d^4X = \int f(P_1) g(P_2) e^{i(P-P_1-P_2)} d^4X d^4P_1 d^4P_2 / (2\pi)^4.$$

Así pues, la corrección de primer orden a las funciones de Green en la representación de los impulsos es finalmente

$$iG_{\alpha\beta}^{(1)}(P) = i n^{(0)} U(0) G_{\alpha\gamma}^{(0)}(P) G_{\gamma\beta}^{(0)}(P) - \\ - \int G_{\alpha\gamma}^{(0)}(P) G_{\gamma\delta}^{(0)}(P_1) G_{\delta\beta}^{(0)}(P) U(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) d^4 P_1 / (2\pi)^4. \quad (13.12)$$

Cada uno de los dos términos de (13.12) corresponde a un diagrama particular de Feynman y esta ecuación puede escribirse en la forma

$$iG_{\alpha\beta}^{(1)}(P) = \text{(a)} + \text{(b)} \quad (13.13)$$

Los puntos de intersección de las líneas se denominan *vertices* del diagrama. Cada diagrama tiene $2n$ vértices, siendo n el orden de la teoría de perturbaciones. En cada vértice se encuentran dos líneas continuas y una a trazos. A cada línea continua está unida su «4-impulso» P en la dirección y sentido indicados por la flecha (y el sentido de las flechas resulta invariable a lo largo de cada secuencia continua de dichas líneas). Cada línea a trazos está unida a un 4-impulso Q ; en el caso de estas líneas puede escogerse por convenio cualquier sentido de la flecha.[†] En los vértices del diagrama se cumple la «conservación de los 4-impulsos»: la suma de los 4-impulsos correspondientes a las líneas de entrada es igual a la correspondiente a las líneas de salida en cada vértice. También cada vértice tiene un índice particular de spin α . Todos los diagramas tienen dos líneas *externas* (una que entra y otra que sale) cuyo 4-impulso es el argumento de la función de Green buscada $iG_{\alpha\beta}(P)$; estas dos líneas tienen también los índices de spin α y β de esta función. Las demás líneas del diagrama se denominan líneas *internas*.

La integración respecto a $d^4 X$ se efectúa mediante la fórmula

$$e^{iP_X} d^4 X = (2\pi)^4 \delta^4(P),$$

en donde la función delta «cuadridimensional» δ^4 se define como el producto de funciones delta de los componentes del «4-vector» P . El factor resultante $\delta^4(P - P_1 - P_2)$ se elimina al integrar respecto a $d^4 P_2$, y así se tiene el segundo miembro de (13.11).

[†] Los componentes «temporales» de los 4-vectores $Q = (q_0, \mathbf{q})$ son en general no nulos, pero la función $U(Q)$ es independiente de q_0 por la definición (13.10). La arbitrariedad del sentido de la línea a trazos se debe a que la función $U(-Q) = U(Q)$ es par.

La forma analítica de los términos correspondientes a cada diagrama se deduce mediante las reglas siguientes:

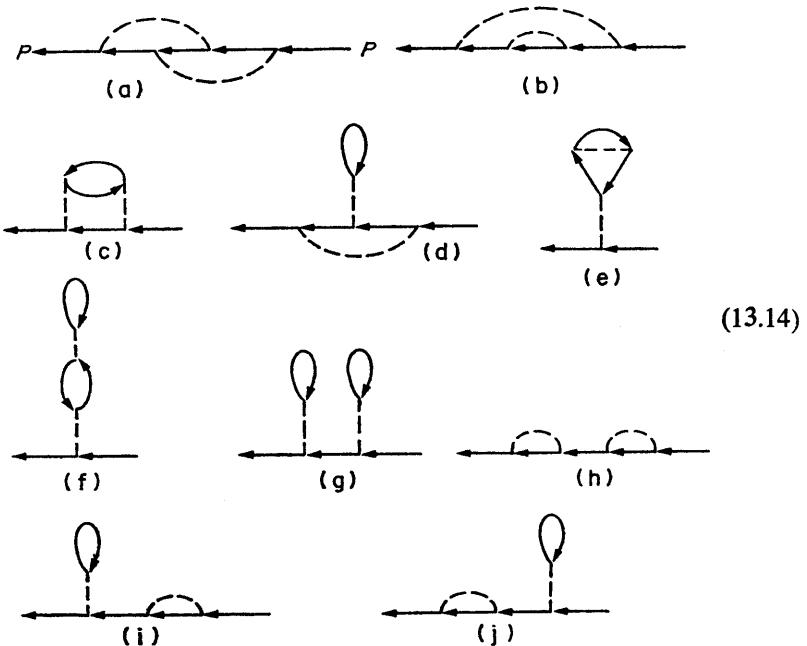
1. Cada línea continua entre vértices α y β está asociada con el factor $iG_{\alpha\beta}^{(0)}(P)$ y cada línea a trazos con el factor $-iU(Q)$. Un lazo cerrado con un vértice está asociado al factor $n^{(0)}(\mu)$.
2. En cada vértice se cumple la conservación del 4-impulso. Existe una integración respecto a $d^4P/(2\pi)^4$ para el 4-impulso de las líneas internas que se dejan indeterminadas. En cada vértice existe una suma respecto a un par de índices mudos de spin, uno de cada uno de los factores $G^{(0)}$ adyacentes.
3. El factor común del diagrama en $iG_{\alpha\beta}$ es $(-1)^L$, siendo L el número de lazos cerrados de líneas continuas con más de un vértice en el diagrama.

Esta última regla surge del modo siguiente. Un lazo cerrado con $k (> 1)$ vértices procede de la contracción de operadores ψ en la forma

$$\underbrace{\Psi_1^+ \Psi_1^- \Psi_2^+ \Psi_2^- \dots \Psi_k^+ \Psi_k^-}$$

Aquí las contracciones son iguales a $iG_{12}^{(0)}, \dots, iG_{k-1,k}^{(0)}$, y finalmente $-iG_{k1}^{(0)}$. En el caso de lazos con un solo vértice, se obtiene ya el signo correcto por la presencia de $n^{(0)}$ según la regla 1.

Como ejemplo, damos a continuación una serie de diagramas que corresponden a la corrección de segundo orden de las funciones de Green:



Finalmente, volvamos al teorema de Wick y demostrémosle en el «límite macroscópico» (es decir, cuando $V \rightarrow \infty$ o, lo que es equivalente para una densidad dada del sistema, cuando $N \rightarrow \infty$).

Consideremos por ejemplo, el producto promediado de cuatro operadores ψ del tipo

$$\langle \hat{\Psi}_{01} \hat{\Psi}_{02} \hat{\Psi}_{03}^+ \hat{\Psi}_{04}^+ \rangle = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_4} \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_3}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_4}^+ \rangle \exp(\dots); \quad (13.15)$$

los operadores ψ están en la forma (9.3) y se han omitido los exponentes evidentes pero excesivamente largos. En esta suma, los únicos términos no nulos son aquellos que contienen números iguales de operadores \hat{a}_p y \hat{a}_p^+ con los mismos valores de los impulsos. Incluyen términos en los que los impulsos son iguales en parejas, por ejemplo, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_4$ y $\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3$. Estos corresponden a la contracción por parejas

$$\underline{\hat{\Psi}_{01} \hat{\Psi}_{02} \hat{\Psi}_{03}^+ \hat{\Psi}_{04}^+}$$

y se expresan mediante una suma de la forma

$$\frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \rangle \exp(\dots).$$

En el límite $V \rightarrow \infty$, la suma respecto a \mathbf{p}_1 y \mathbf{p}_2 se sustituye por una integración respecto a $V^2 d^3 p_1 d^3 p_2 / (2\pi)^6$; el volumen V se elimina y la expresión permanece finita. En la suma (13.15) los términos con $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 = \mathbf{p}_4$ son también no nulos; forman una suma

$$\frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}} \langle \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \rangle \exp(\dots),$$

pero después del paso a integración persiste un factor $1/V$ y esta expresión se anula en el límite $V \rightarrow \infty$.

Claramente este resultado es general: en el límite $V \rightarrow \infty$, únicamente los resultados de contracciones en parejas son no nulos en el valor medio de un producto de operadores ψ .

En la prueba dada no se ha realizado ningún uso esencial del hecho de que el promediado se refiere al estado fundamental y, por consiguiente, sigue siendo válido para promedios respecto a cualquier estado cuántico del sistema.

§ 14. Función de autoenergía

Las reglas de la técnica diagramática formuladas en § 13 tienen una propiedad importante: el factor común del diagrama es independiente de su orden. En consecuencia, cada «figura» del diagrama tiene un significado analítico definido en cualquier diagrama en que aparezca, y puede calcularse independientemente y con antelación. De hecho hemos calculado previamente la suma de varias figuras que tienen un número definido de líneas externas y luego se sustituye como un «bloque» en diagramas más complejos. Esto constituye una de las ventajas principales de la técnica diagramática.

Uno de estos bloques, que independientemente tiene también una importancia considerable, es la *función de autoenergía*.[†] Con objeto de llegar a este concepto consideraremos todos los diagramas de la función de Green que no puedan separarse en dos partes unidas solamente por una línea continua. Entre ellos podemos incluir, por ejemplo, los dos diagramas de la teoría de perturbaciones de primer orden (13.13) y los diagramas de segundo orden (13.14a-f). Todos tienen el mismo tipo de estructura: un factor $iG_{\alpha\beta}^{(0)}(P)$ en cada extremo y una parte interna (una función de P), denominada función de autoenergía. La suma de todas las partes posibles de este tipo se denomina función de autoenergía exacta o completa o bien el *operador de masa*; lo designaremos por $-i\Sigma_{\alpha\beta}(P)$.

Todos los diagramas del tipo de autoenergía dan una contribución a la función de Green

$$iG_{\alpha\beta}^{(0)}(P)[-i\Sigma_{\beta\gamma}(P)]iG_{\gamma\delta}^{(0)}(P) = iG^{(0)}(P)\Sigma(P)G^{(0)}(P)\delta_{\alpha\delta}, \quad (14.1)$$

en donde hemos escrito $G_{\alpha\beta}^{(0)} = G^{(0)}\delta_{\alpha\beta}$ y también

$$\Sigma_{\alpha\beta}(P) = \delta_{\alpha\beta}\Sigma(P). \quad (14.2)$$

La función completa de Green (representada gráficamente por una línea continua gruesa) viene dada por la suma de una serie infinita

$$\overleftarrow{\text{---}} = \overleftarrow{\text{---}} + \overleftarrow{\text{---}} \circlearrowleft + \overleftarrow{\text{---}} \circlearrowleft \circlearrowleft + \cdots, \quad (14.3)$$

en donde los círculos representan funciones de autoenergía exactas $-i\Sigma_{\alpha\beta}$. Cada término de esta serie desde el tercero en adelante es un conjunto de diagramas que puede descomponerse en dos, tres, ... partes unidas por una línea continua.

[†] Comparar la definición correspondiente de la función de autoenergía compacta en electrodinámica cuántica (*TCR*, §§100, 102).

Si separamos de cada término de la serie (14.3) desde el segundo en adelante, un círculo y la línea a su derecha, la serie restante es de nuevo una función completa. Así pues,

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \circ \text{---} \quad (14.4)$$

Analíticamente esta expresión se escribe en la forma

$$G = G^{(0)} + G \Sigma G^{(0)} \quad (14.5)$$

o bien, dividiendo por $G^{(0)}G$,

$$\frac{1}{G(P)} = \frac{1}{G^{(0)}(P)} - \Sigma(P). \quad (14.6)$$

Obsérvese que el signo de la parte imaginaria de Σ es el mismo que el de $\text{im } G$ y según (8.14)

$$\text{sgn im } \Sigma(\omega, \mathbf{p}) = -\text{sgn } \omega. \quad (14.7)$$

Esto se deduce de (14.6), puesto que el signo de $\text{im } G^{-1}$ es el opuesto del que posee $\text{im } G$ y según (9.7) $\text{im } [G^{(0)}]^{-1} = 0$.

Así pues, el cálculo de G se reduce al de Σ , que requiere el empleo de un número menor de diagramas. Todavía puede reducirse aún más este número, puesto que algunos de los diagramas restantes pueden sumarse simultáneamente de una forma muy simple.

Seleccionemos entre todos los diagramas que determinan Σ (con una interacción por pares entre partículas) aquellos que representan varios «vástagos» conectados a las líneas externas mediante una línea a trazos y designemos su suma por Σ_a . Todos estos diagramas están presentes en un *diagrama esqueleto*[†] de la forma

$$\text{---} \circ \text{---} = \text{---} \circ \text{---} \quad (14.8)$$

[†] Igual que en la teoría cuántica de campos, los diagramas esqueleto son aquellos construidos con líneas gruesas y bloques; cada uno de estos diagramas es equivalente a un conjunto infinito definido de diagramas ordinarios de diversos órdenes.

La parte restante de Σ la designaremos por Σ_b . Por ejemplo, los diagramas siguientes de los órdenes primero y segundo pertenecen a la primera clase:

$$\text{Diagrama general: } -i\Sigma_a = \text{(a)} + \text{(b)} + \text{(c)} \quad (14.9)$$

y a la segunda clase:

$$\text{Diagrama general: } -i\Sigma_b = \text{(a)} + \text{(b)} + \text{(c)} + \text{(d)} + \text{(e)} \quad (14.10)$$

El lazo en línea gruesa del diagrama (14.8) corresponde a la densidad exacta $n(\mu)$ del sistema, igual que el lazo en línea fina en (13.13a) corresponde a la densidad del gas ideal $n^{(0)}(\mu)$. Por tanto, se deduce de la definición (14.8) que

$$-i\Sigma_a = -in(\mu) U(0). \quad (14.11)$$

Así pues,

$$\Sigma = n(\mu) U(0) + \Sigma_b, \quad (14.12)$$

y únicamente necesitan calcularse especialmente los diagramas en Σ_b .

La relación de dispersión de las cuasipartículas viene dada por (8.16). Expresando en esta ecuación G en función de Σ por (14.6) y tomando $G^{(0)}$ de (9.7), se obtiene la expresión:

$$\frac{1}{G^{(0)}(\varepsilon - \mu, \mathbf{p})} = \varepsilon(\mathbf{p}) - \frac{p^2}{2m} = \Sigma(\varepsilon - \mu, \mathbf{p}). \quad (14.13)$$

En el límite de la esfera de Fermi, en donde $p = p_F$, la energía de la cuasipartícula es igual a μ . De aquí vemos que

$$\mu - \Sigma(0, \mathbf{p}_F) = p_F^2/2m. \quad (14.14)$$

Por consiguiente, la relación de dispersión tiene la forma (para p próximo a p_F)

$$\epsilon(\mathbf{p}) - \mu = \frac{p_F}{m}(p - p_F) + \Sigma(\epsilon - \mu, \mathbf{p}_F) - \Sigma(0, \mathbf{p}_F). \quad (14.15)$$

Resaltamos que p_F es aquí el valor exacto del impulso límite para un sistema de partículas interactivas. Está relacionado con la densidad exacta $n(\mu)$ por $p_F^3/3\pi^3 = n$, y no a la densidad aproximada $n^{(0)}$, como en (13.5).

§ 15. Función de Green de dos partículas

Otros conceptos importantes de la técnica diagramática se obtienen considerando el producto T de cuatro operadores ψ de Heisenberg, promediado respecto al estado fundamental:[†]

$$K_{34,12} = \langle T \hat{\Psi}_3 \hat{\Psi}_4 \hat{\Psi}_1^+ \hat{\Psi}_2^+ \rangle. \quad (15.1)$$

Esta expresión se denomina *función de Green de dos partículas* [para distinguirla de la función de Green de una sola partícula (7.9)].

Para aplicar la teoría de perturbaciones y establecer la correspondiente técnica diagramática debemos otra vez cambiar a operadores ψ en la representación de la interacción. Lo mismo que con la función G , esto conduce a la aparición del factor \hat{S} en el producto T :

$$K_{34,12} = \frac{1}{\langle \hat{S} \rangle} \langle T \hat{\Psi}_{03} \hat{\Psi}_{04} \hat{\Psi}_{01}^+ \hat{\Psi}_{02}^+ \hat{S} \rangle. \quad (15.2)$$

En la aproximación de orden cero (es decir, cuando $\hat{S} = 1$) esta expresión se transforma en una suma de productos de dos contracciones expresables en forma de combinaciones adecuadas de funciones $G^{(0)}$:

$$K_{34,12}^{(0)} = G_{31}^{(0)} G_{42}^{(0)} - G_{32}^{(0)} G_{41}^{(0)}. \quad (15.3)$$

El subsiguiente estudio de las propiedades de la función de Green de dos partículas así definida se dará en la representación de los impulsos.

En el caso de un sistema homogéneo, $K_{34,12}$ depende de hecho únicamente de tres diferencias independientes de los argumentos, por ejemplo $X_3 - X_2$, $X_4 - X_2$, $X_1 - X_2$. En la representación de los impulsos, esta propiedad lleva a la consecuen-

[†] Estamos utilizando de nuevo la notación simplificada en la cual los subíndices 1, 2... designan las 4-coordenadas junto con el índice de spin: X_α , X_β, \dots ; cf. la segunda nota a pie de página a § 13. La notación completa se indica mediante

$$K_{34,12} \equiv K_{\gamma\delta,\alpha\beta}(X_3, X_4; X_1, X_2).$$

cia de que la componente de Fourier respecto a todas las variables X_1, \dots, X_4 contiene una función delta:

$$\begin{aligned} & \int K_{34,12} \exp \{i(P_3 X_3 + P_4 X_4 - P_1 X_1 - P_2 X_2)\} d^4 X_1 \dots d^4 X_4 \\ &= (2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_3 + P_4 - P_1 - P_2) K_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2). \end{aligned} \quad (15.4)$$

Este resultado se ve fácilmente observando la expresión

$$\begin{aligned} & P_3 X_3 + P_4 X_4 - P_1 X_1 - P_2 X_2 \\ &= P_3(X_3 - X_2) + P_4(X_4 - X_2) - P_1(X_1 - X_2) - X_2(P_1 + P_2 - P_3 - P_4), \end{aligned}$$

y pasando a una integración respecto a $X_3 - X_4$, $X_4 - X_2$, $X_1 - X_2$, X_2 . De paso puede observarse que la transformada inversa de Fourier es posible escribirla en la forma

$$\begin{aligned} K_{34,12} &= \int K_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_3 + P_4 - P_1) \times \\ &\times \exp \{-i[P_3(X_3 - X_2) + P_4(X_4 - X_2) - P_1(X_1 - X_2)]\} \frac{d^4 P_1 d^4 P_3 d^4 P_4}{(2\pi)^{12}}. \end{aligned} \quad (15.5)$$

La función $K_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2)$ definida de este modo se denominará función de Green de dos partículas en la representación de los impulsos: sus argumentos tienen entre sí la siguiente relación

$$P_1 + P_2 = P_3 + P_4.$$

En la aproximación de orden cero tenemos, de acuerdo con (15.3),

$$\begin{aligned} & K_{\gamma\delta, \alpha\beta}^{(0)}(P_3, P_4; P_1, P_2) \\ &= (2\pi)^4 [\delta^{(4)}(P_1 - P_3) G_{\gamma\alpha}^{(0)}(P_1) G_{\delta\beta}^{(0)}(P_2) - \delta^{(4)}(P_1 - P_4) G_{\gamma\beta}^{(0)}(P_2) G_{\delta\alpha}^{(0)}(P_1)], \end{aligned} \quad (15.6)$$

es decir, K se reduce a una suma de dos productos de funciones de Green de una sola partícula.

En aproximaciones más elevadas de la teoría de perturbaciones, aparecen términos que corresponden a correcciones de estas funciones de una sola partícula junto con términos que no forman productos de funciones de Green. Esta parte de la función de Green de dos partículas tiene un cierto interés independiente. Para deducirla, pongamos K en la forma

$$\begin{aligned} & K_{\alpha_3\alpha_4, \alpha_1\alpha_2}(P_3, P_4; P_1, P_2) \\ &= (2\pi)^4 [\delta^{(4)}(P_1 - P_3) G_{\alpha_3\alpha_1}(P_1) G_{\alpha_4\alpha_2}(P_2) - \\ &- \delta^{(4)}(P_1 - P_4) G_{\alpha_3\alpha_2}(P_2) G_{\alpha_4\alpha_1}(P_1)] + \\ &+ G_{\alpha_3\beta_3}(P_3) G_{\alpha_4\beta_4}(P_4) i\Gamma_{\beta_3\beta_4, \beta_1\beta_2}(P_3, P_4; P_1, P_2) G_{\beta_1\alpha_1}(P_1) G_{\beta_2\alpha_2}(P_2). \end{aligned} \quad (15.7)$$

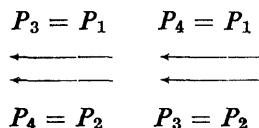
La función Γ así definida se denomina *función vértice*.

De acuerdo con la definición (15.1), una función de Green de dos partículas en la representación espacio-tiempo es antisimétrica respecto a intercambios de argumentos (junto con los subíndices de spin) en el primero o segundo par; 1 y 2, o 3 y 4. De aquí que tengamos la análoga propiedad de simetría para la función de Green y para la función vértice en la representación del impulso:

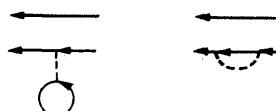
$$\begin{aligned}\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2) &= -\Gamma_{\delta\gamma,\alpha\beta}(P_4, P_3; P_1, P_2) \\ &= -\Gamma_{\gamma\delta,\beta\alpha}(P_3, P_4; P_2, P_1).\end{aligned}\quad (15.8)$$

La razón para separar los cuatro factores G en la definición de Γ [el último término de (15.7)] resulta clara si repasamos la naturaleza de los diagramas que aparecen cuando se desarrolla la expresión (15.2) correspondiente a la función de Green de dos partículas. El análisis que damos a continuación supone que entre las partículas existe una interacción por parejas.

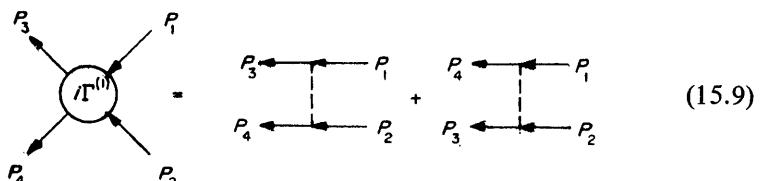
En la aproximación de orden cero, a la función K se asignan diagramas



que corresponden a los términos de (15.6). En la teoría de perturbaciones de primer orden, aparecen diagramas de los tipos[†]



que representan correcciones a cada uno de los factores de (15.6). También aparecen diagramas que no se separan en dos partes:



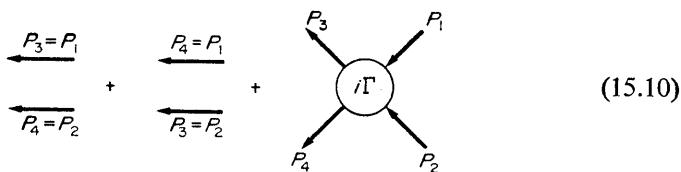
Las cuatro flechas P_1, \dots, P_4 corresponden a los cuatro factores G en el último término de (15.7) y la parte interna de los diagramas determina (en primer orden)

[†] Como en el caso de la función de Green de una partícula, el factor en la definición conduce a la anulación de los diagramas que contienen lazos cerrados separados de líneas continuas.

la función vértice, que es el círculo a la izquierda de la ecuación diagramática (15.9). Escribiendo estos diagramas en forma analítica se tiene

$$\Gamma_{\rho\delta,\alpha\beta}^{(1)}(P_3, P_4; P_1, P_2) = -\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}U(P_1 - P_3) + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}U(P_1 - P_4).$$

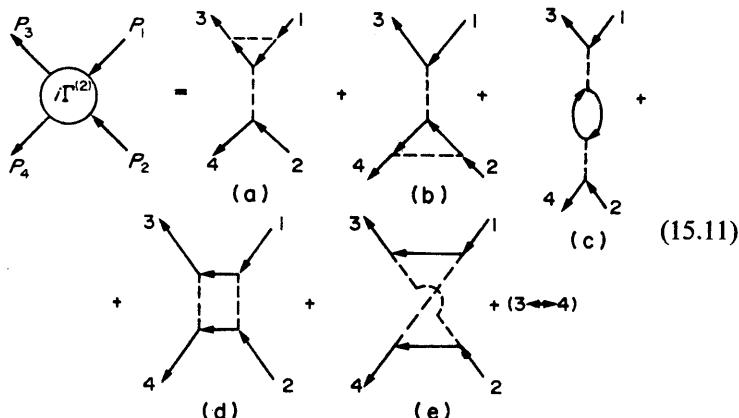
Los diagramas de órdenes superiores contienen correcciones de tres tipos: (1) correcciones adicionales a dos líneas continuas no conectadas, (2) correcciones a las líneas externas de los diagramas (15.9) del tipo de autoenergía, (3) correcciones que forman una figura que sustituye la línea a trazos de los diagramas (15.9); la suma de todas las figuras posibles de este tipo da la función vértice exacta $i\Gamma$. En la representación gráfica de la función de Green de dos partículas mediante una suma de diagramas esqueletos,



las líneas gruesas representan funciones G exactas y el círculo representa por convenio la función vértice.

El cálculo de la función vértice en los diversos órdenes de la teoría de perturbaciones debe hacerse mediante las reglas de la técnica diagramática formuladas en § 13 y han de considerarse diagramas con cuatro líneas externas (en lugar de aquellos con sólo dos que se utilizaron en el cálculo de G). La regla (3) que da el signo del diagrama completo ha de suplementarse con el siguiente punto; si se unen las líneas externas 1 y 4 y 2 y 3 mediante secuencias en líneas continuas (en lugar de 1 y 3 y 2 y 4), se invierte el signo del diagrama.

Como ejemplo, los siguientes diagramas son todos los que determinan la función vértice en la teoría de perturbaciones de segundo orden:



La función de autoenergía Σ y la función vértice Γ no son independientes; están relacionadas mediante una cierta ecuación integral denominada *ecuación de Dyson*.†

Para deducirla, utilizaremos la ecuación (9.5) que es válida (como se mencionó en § 9) aunque se tenga en cuenta la interacción entre las partículas. Sin embargo, existe una diferencia respecto a la deducción realizada en § 9, que consiste en que ahora el operador ψ satisface a la ecuación (7.8). Omitiendo en esta última el término que contiene el campo externo y sustituyendo a partir de él la derivada $\partial\hat{\Psi}/\partial t_1$ en (9.5) se obtiene

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\Delta_1}{2m} + \mu \right) G_{\alpha\beta}(X_1 - X_2) - \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(X_1 - X_2) \\ &= -i \int \langle T \hat{\Psi}_\gamma^+(X_3) U(X_1 - X_2) \hat{\Psi}_\gamma(X_3) d^4 X_3 \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \rangle \\ &= -i \int K_{\gamma\alpha, \gamma\beta}(X_3, X_1; X_3, X_2) U_{13} d^4 X_3. \end{aligned} \quad (15.12)$$

Esta ecuación resuelve en principio el problema, puesto que K se expresa mediante (15.7) en función de Γ . Sólo tenemos que pasar a la representación de los impulsos y, para ello, multipliquemos (15.12) por $\exp[iP(X_1 - X_2)]$ e integremos respecto a $d^4(X_1 - X_2)$, tomando $K_{31,32}$ en la forma (15.5) y U_{13} en la forma (13.9). Entonces la integración respecto a las cuatro coordenadas da funciones delta, que se eliminan con la subsiguiente integración respecto a los 4-impulsos. El resultado es

$$\begin{aligned} & [G^{(0)-1}(P) G(P) - 1] \delta_{\alpha\beta} \\ &= -i \int K_{\gamma\alpha, \gamma\beta}(P_3, P_4; P_3 + P_4 - P, P) U(P - P_4) \frac{d^4 P_3 d^4 P_4}{(2\pi)^8}, \end{aligned} \quad (15.13)$$

con $G^{(0)}(P)$ tomado de (9.7).

Ahora falta expresar K en función de Γ . Sustituyendo (15.7) en (15.13), obtenemos finalmente la ecuación de Dyson en la forma

$$\begin{aligned} & \delta_{\alpha\beta}[G^{(0)-1}(P) - G^{-1}(P)] = \delta_{\alpha\beta}\Sigma(P) \\ &= U(0) n(\mu) \delta_{\alpha\beta} + i \delta_{\alpha\beta} \int U(P - P_1) G(P_1) \frac{d^4 P_1}{(2\pi)^4} \\ &+ \int \Gamma_{\gamma\alpha, \gamma\beta}(P_3, P_4; P_3 + P_4 - P, P) G(P_3) G(P_4) G(P_3 + P_4 - P) \times \\ &\times U(P - P_4) \frac{d^4 P_3 d^4 P_4}{(2\pi)^8}. \end{aligned} \quad (15.14)$$

En esta fórmula $n(\mu)$ es la densidad exacta del sistema en función de su potencial químico; este factor procede de la integración de G mediante la fórmula (7.24),

† Es análoga a la ecuación de Dyson en electrodinámica cuántica (ver TCR, § 104).

junto con el hecho de que la función G surgió de una contracción en la que Ψ^+ está a la izquierda de Ψ . El primer término del segundo miembro de (15.14) es Σ_a (14.11).

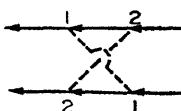
§ 16. Relación existente entre la función vértice y la amplitud de dispersión o scattering de las cuasipartículas

El formalismo matemático desarrollado en las secciones precedentes hace posible una justificación rigurosa y una mejor comprensión del significado de las relaciones fundamentales de la teoría de Landau del líquido de Fermi, que hemos introducido en el capítulo 1 de una forma parcialmente intuitiva. Este tema será el objetivo de §§ 16-20.†

Existe una estrecha relación entre la función vértice y la amplitud de dispersión o scattering mutua de las cuasipartículas. Para una mejor aclaración de esta relación, considerémosla primeramente en función del problema puramente cuántico de la dispersión de dos partículas en el vacío.

En mecánica cuántica, los diagramas con cuatro líneas externas (dos que entran y otras dos que salen) corresponden a una colisión entre dos partículas; en la forma analítica del diagrama, sus líneas externas corresponden a las amplitudes de la función de onda (onda plana) de las partículas libres (cf. TCR, § 103). Veamos cómo de hecho estos diagramas de diferentes órdenes dan términos sucesivos en el desarrollo ordinario (no relativista) de Born de la amplitud de dispersión.

En primer lugar, en un vacío muchos de los diagramas son nulos. Esto se entiende más fácilmente en la representación de las coordenadas, puesto que en el estado vacío todas las contracciones de la forma $\langle \Psi^+ \Psi \rangle$ son cero, ya que el operador de aniquilación está a la derecha y actúa primero sobre el estado vacío; sólo persisten contracciones de la forma $\langle \Psi \Psi^+ \rangle$. De aquí que todos los diagramas con lazos cerrados de líneas continuas sean cero, puesto que siempre contienen una contracción de la forma $\langle \Psi^+ \Psi \rangle$. Por la misma razón, todas las correcciones a la función de Green, es decir, a las líneas continuas internas de los diagramas son nulas.‡ Finalmente, los diagramas con líneas a trazos que se cortan son nulos; por ejemplo, en el diagrama



† El contenido de §§ 16-18 se debe a L. D. Landau (1958) y el de §§ 19 y 20 a L. D. Landau y L. P. Pitaevskii (1959).

‡ La anulación de todas las correcciones a la función de Green en el vacío expresa simplemente el hecho de que una sola partícula no puede interaccionar con nada. Podemos recordar ahora que la existencia de correcciones por el vacío a la función de Green de una partícula en la teoría relativista se debe a la presencia posible de pares de electrones virtuales o fotones en estados intermedios.

(en donde 1 y 2 designan los argumentos t_1 y t_2) la línea interna superior corresponde a la contracción $\langle \Psi^+ \Psi_1 \rangle = 0$ si $t_2 > t_1$ y la línea inferior a $\langle \Psi^+ \Psi_2 \rangle = 0$ si $t_2 < t_1$.

Así pues, en el caso de dos partículas en un vacío, permanecerán sólo los siguientes diagramas que forman una «serie en escalera»:

$$\begin{aligned}
 & P_3 \xleftarrow{\quad} \textcircled{i\Gamma} \xleftarrow{\quad} P_1 = \\
 & P_4 \xleftarrow{\quad} \xleftarrow{\quad} P_2 \\
 & = P_3 \xleftarrow{\quad} \xleftarrow{\quad} P_1 + \xleftarrow{\quad} \xleftarrow{\quad} + \xleftarrow{\quad} \xleftarrow{\quad} + \dots + (3 \xleftarrow{\quad} 4)
 \end{aligned} \tag{16.1}$$

Las líneas continuas internas corresponden aquí a las funciones de Green del vacío

$$G^{(\text{vac})}(\omega, \mathbf{p}) = \left[\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i0 \right]^{-1} \quad (16.2)$$

[fórmula (9.7) con $\mu = 0$]. Debe señalarse que el polo de esta función está siempre (μ está ausente del denominador) en un semiplano ω complejo particular (el inferior). La anulación de los diagramas relacionados anteriormente se produce, desde el punto de vista matemático, precisamente porque todos los polos de los integrandos están en un semiplano; resulta evidente la anulación de las integrales si se cierra el trayecto de integración por el otro semiplano.

La serie en escalera (16.1) puede sumarse mediante su reducción a una ecuación integral [cf. la suma de la serie semejante (17.3)]. Si se omiten en un principio los diagramas con líneas externas 3 y 4 intercambiadas, esta ecuación es equivalente a la ecuación de Schrödinger para dos partículas, ignorando su identidad, escrita en la representación de los impulsos; ver *MC* (130.9). De acuerdo con ello, se expresa la función vértice en función de la amplitud de dispersión o scattering f de las dos partículas por

$$\Gamma_{\nu\delta,\alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2) = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}(4\pi/m)f. \quad (16.3)$$

La adición de los diagramas con líneas externas 3 y 4 intercambiadas produce la antisimetrización de la amplitud, como es correcto en el caso de los fermiones. En la primera aproximación de la teoría de perturbaciones, sólo permanecen el primer diagrama (16.1) y el que tiene las líneas externas intercambiadas; en ellos no interviene $G^{(\text{vac})}$. La expresión correspondiente a la amplitud de dispersión es entonces la usual de la primera aproximación de Born. Los diagramas subsiguientes, después de la integración respecto a las frecuencias intermedias, nos dan las expresiones ya familiares para las correcciones a la amplitud en las siguientes aproximaciones de Born.

En un líquido de Fermi, la interacción de las partículas que están colisionando con las partículas del medio hace que sean sustituidas efectivamente por cuasipartículas. Por la definición de la función Γ se tienen en cuenta automáticamente todas las correcciones a las líneas internas del diagrama que resulta de esta interacción. Sin embargo, deberemos tener en cuenta otra concesión adicional para las correcciones a las líneas externas. En teoría cuántica de campos (en virtud de los requisitos generales de una matriz de scattering unitaria), se demuestra que estas correcciones producen la aparición de un factor \sqrt{Z} en la amplitud de dispersión por cada línea externa libre, siendo Z la constante de renormalización de la función de Green (ver TCR, § 107); en el caso de diagramas con cuatro líneas externas, esto significa la multiplicación por Z^2 . Aunque la prueba dada en TCR es también válida para cuasipartículas en un líquido de Fermi, explicaremos aquí el origen de este factor mediante razonamientos más sencillos (pero no rigurosos).

La función de Green de un líquido, cerca de su polo [el primer término de (10.2)] difiere de la correspondiente a un gas ideal sólo en el factor Z . Si se sustituyen Ψ y Ψ^+ por los operadores $\Psi_{qu} = \Psi/\sqrt{Z}$, $\Psi_{qu}^+ = \Psi^+/\sqrt{Z}$, la función de Green $G_{qu} = G/Z$ formada a partir de ellos tendrá el mismo aspecto que en el caso de un gas ideal, cerca del polo. En este sentido estos operadores pueden considerarse como operadores ψ de un gas ideal de cuasipartículas. La función de Green de dos partículas a partir de ellos es $K_{qu} = K/Z^2$ y, por tanto, según la definición (15.7), la parte del vértice $\Gamma_{qu} = \Gamma Z^2$, como se requería.

En la aplicación a las cuasipartículas, lo que tiene interés en el número de colisiones (por unidad de tiempo y de volumen del líquido) en lugar de la sección eficaz de la colisión. En el caso de colisiones con un cambio dado de los impulsos y componentes de spin de las partículas ($\mathbf{p}_1\alpha, \mathbf{p}_2\beta \rightarrow \mathbf{p}_3\gamma, \mathbf{p}_4\delta$), este número es

$$dW = 2\pi |Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2)|^2 \delta(\varepsilon_3 + \varepsilon_4 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times \\ \times n_{\mathbf{p}_1} n_{\mathbf{p}_2} (1 - n_{\mathbf{p}_3}) (1 - n_{\mathbf{p}_4}) d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p_3 / (2\pi)^9, \quad (16.4)$$

en donde $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$ y n_p es la función de distribución de las cuasipartículas. Los factores $n_{\mathbf{p}_1}$ y $n_{\mathbf{p}_2}$ expresan simplemente el hecho de que el número de colisiones de cuasipartículas con impulsos iniciales dados (y componentes de spin) es proporcional a los números de dichas cuasipartículas por unidad de volumen. Los factores $(1 - n_{\mathbf{p}_3})$ y $(1 - n_{\mathbf{p}_4})$ se deben al hecho de que, de acuerdo con el principio de Pauli, sólo puede producirse una colisión si los estados finales están sin ocupar.

§ 17. Función vértice para pequeñas transferencias de impulso

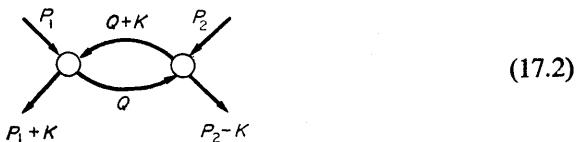
La función vértice con valores casi iguales de las parejas de variables P_1, P_3 y P_2, P_4 juega un papel muy importante en la teoría de los líquidos de Fermi (ve-

remos, en particular, que está estrechamente relacionada con la función de interacción de las cuasipartículas). Utilizando la relación $P_1 + P_2 = P_3 + P_4$, podemos hacer $P_3 = P_1 + K$, $P_4 = P_2 - K$ y escribir en notación simplificada

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1+K, P_2-K; P_1, P_2) = \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(K; P_1, P_2); \quad (17.1)$$

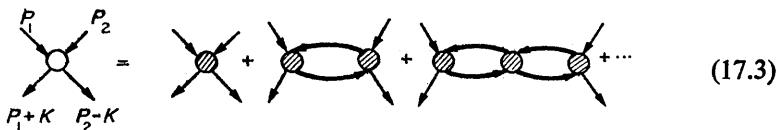
esta función se considerará a continuación para valores pequeños de K . En función de los procesos de dispersión o scattering de las cuasipartículas, esto significa que consideraremos colisiones con una transferencia pequeña de 4-impulso, que están próximas al «scattering hacia delante».

Cuando $K = 0$, como veremos, la función Γ tiene una singularidad; nos interesará la parte de la función que contiene la singularidad. Se comprende fácilmente el origen de esta singularidad analizando el diagrama esqueleto



que incluye el conjunto de diagramas de la función de Green de dos partículas que puedan cortarse entre los pares de líneas externas P_1 , P_3 y P_2 , P_4 en dos partes unidas mediante dos líneas continuas.[†] Las dos líneas de unión gruesa corresponden a las funciones de Green de una partícula exacta $G(Q)$ y $G(Q + K)$, con integración sobre el 4-impulso Q del diagrama. Cuando $K \rightarrow 0$, los argumentos de estas dos funciones se acercan cada vez más y, por tanto, ocurre lo mismo con sus polos. Entre estos polos puede quedar «pinzado» el contorno de integración (ver más adelante) que es el origen de la singularidad de la función Γ .

Para calcular la función exacta Γ , debemos sumar la totalidad de la serie de perturbación. Como nuestro objetivo consiste en separar la parte que tiene una singularidad cuando $K = 0$, debemos distinguir en primer lugar la contribución procedente de todos los diagramas que no pueda cortarse a través de pares de líneas continuas que tengan valores del 4-impulso casi iguales (diferiendo en K). Esta parte de la función Γ , que no tiene ninguna singularidad en $K = 0$, se designa por $\tilde{\Gamma}$; en ella podemos hacer $K = 0$, puesto que es una función sólo de las variables P_1 y P_2 : $\tilde{\Gamma}_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1, P_2)$. Los diagramas «peligrosos» pueden clasificarse por los números de pares de líneas con argumentos casi iguales que contienen. Así pues, la parte del vértice total Γ está representada por la serie en escalera infinita siguiente:

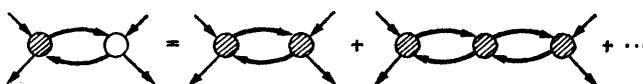


[†] Por ejemplo, en la teoría de perturbaciones de segundo orden (respecto a la interacción de pares), (17.2) contiene a los diagramas (15.11a, b, c) y (15.11e) con líneas externas 3 y 4 intercambiadas.

En esta expresión, el círculo blanco corresponde al $i\Gamma$ buscado y los círculos sombreados representan $i\tilde{\Gamma}$. Las líneas externas de estos diagramas no entran en la determinación de Γ , y únicamente sirven para indicar el número y valores de los 4-impulsos que entran y salen.

Todas las líneas internas de los diagramas (17.3) son gruesas, es decir corresponden a funciones G exactas. Aquí debe resaltarse que la posibilidad de representar Γ en la forma de estos diagramas esqueletos (y, por tanto, todas las conclusiones obtenidas a partir de ellos) no presuponen una interacción de pares entre partículas, puesto que no existen líneas explícitas a trazos, y la naturaleza de la interacción afecta realmente sólo a la estructura interna de los bloques representados por círculos, que carece de interés en conexión con este problema.[†]

El problema de sumar la serie (17.3) radica en la resolución de la ecuación integral; para deducirla «multipliquemos» la serie completa por un $\tilde{\Gamma}$ adicional:



La comparación con la serie original (17.3) da la ecuación

Esta ecuación diagramática da la ecuación integral buscada, cuando se escribe en forma analítica

$$\begin{aligned} \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(K; P_1, P_2) = & \tilde{\Gamma}_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1, P_2) - i \int \tilde{\Gamma}_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}(P_1, Q) G(Q+K) G(Q) \times \\ & \times \Gamma_{\kappa\delta, \zeta\beta}(K; Q, P_2) d^4Q/(2\pi)^4. \end{aligned} \quad (17.5)$$

De acuerdo con el estudio anterior, hemos hecho $K = 0$ en las funciones $\tilde{\Gamma}$, hemos utilizado la notación abreviada para Γ y $\tilde{\Gamma}$ previamente descrita y también hemos hecho $G_{\alpha\beta} = G\delta_{\alpha\beta}$.

Para analizar esta ecuación, consideraremos primero el producto $G(Q+K)G(Q)$ en su *kernel*. Como ya se ha mencionado, en el caso de K pequeño los polos de los dos factores están próximos entre sí. Cerca de los polos, las funciones G se repre-

[†] Sólo se suponen aquellas propiedades tan generales como la conservación del número de partículas. Esta puede apreciarse por la diferencia constante que existe entre el número de líneas que van hacia la derecha y hacia la izquierda en cada sección del diagrama [igual a cero en las secciones del tipo indicado en (17.3)].

sentan mediante los términos de los polos en (10.2). Designando los componentes de los 4-vectores K y Q por

$$K = (\omega, \mathbf{k}), \quad Q = (q_0, \mathbf{q}), \quad (17.6)$$

podemos escribir en esta región

$$G(Q) G(Q + K) \approx Z^2 [q_0 - v_F(q - p_F) + i\delta_1]^{-1} [q_0 + \omega - v_F(|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - p_F) + i\delta_2]^{-1}, \quad (17.7)$$

en donde δ_1 y δ_2 son incrementos infinitesimales cuyos signos cerca de los polos vienen dados por

$$\left. \begin{array}{l} \operatorname{sgn} \delta_1 = \operatorname{sgn}(q - p_F), \\ \operatorname{sgn} \delta_2 = \operatorname{sgn}(|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - p). \end{array} \right\} \quad (17.8)$$

Los signos de δ_1 y δ_2 determinan la posición de los polos en los semiplanos superior o inferior de la variable compleja q_0 . La singularidad del kernel de la ecuación integral y, por consiguiente, de la solución de la ecuación, surge del pinzamiento del contorno de integración respecto a q_0 (eje real) entre los polos, para lo cual el último debe estar en lados opuestos del contorno, es decir, en semiplanos opuestos.

Supongamos primeramente que $\mathbf{q} \cdot \mathbf{k} > 0$ es decir $\cos \theta > 0$, siendo θ el ángulo formado entre \mathbf{q} y \mathbf{k} . Entonces $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| > q$ y δ_1 y δ_2 tienen signos opuestos ($\delta_1 < 0$, $\delta_2 > 0$) si $q < p_F$, $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| > p_F$, lo cual, en vista de la pequeñez de k , es equivalente a las condiciones

$$p_F - k \cos \theta < q < p_F. \quad (17.9)$$

En la integración siguiente respecto a q_0 en (17.5), el contorno de integración puede sustituirse por una semicircunferencia infinita en cualquiera de los semiplanos, el inferior o el superior; la integral viene dada entonces por el residuo del integrando en el polo correspondiente. Debido a la estrechez de margen (17.9) cuando k es pequeño, podemos tomar $k = 0$ en los factores Γ y $\tilde{\Gamma}$ del integrando y análogamente $q_0 \approx 0$ para la posición de los polos cuando k y ω son pequeños.

En otras palabras, con respecto a su papel en el kernel de la ecuación integral (17.5), el producto de los factores de los polos (17.7) es equivalente a las funciones delta $A\delta(q_0)\delta(q - p_F)$ con un coeficiente A dado por

$$A = \int \frac{Z^2 dq_0 dq}{[q_0 - v_F(q - p_F) + i\delta_1][q_0 + \omega - v_F(|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - p_F) + i\delta_2]}.$$

Cuando q está fuera del margen (17.9), ambos polos están en el mismo semiplano de q_0 complejo; cuando el contorno de integración respecto a q_0 se completa en el otro semiplano, vemos que la integral es cero. En el margen (17.9), completando el contorno en un semiplano y calculando la integral a partir del residuo en el polo de dicho semiplano, se encuentra

$$A = \int \frac{2\pi i Z^2 dq}{\omega - v_F(|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - q) + i0},$$

en donde hemos hecho uso del hecho de que $\delta_1 < 0$ y $\delta_2 > 0$ en el intervalo (17.9). Puesto que, según (17.9), $q \approx p_F \gg k$, podemos hacer $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| - q \approx \mathbf{k} \cos \theta$ y luego, con los límites dados por (17.9),

$$A = 2\pi i Z^2 k \cos \theta / (\omega - k v_F \cos \theta).$$

Es fácil probar por el mismo método que se obtiene una expresión semejante para A (pero con el signo opuesto de $i0$) cuando $\cos \theta < 0$ (cuando la integración ha de realizarse en el intervalo $q > p_F$, $|\mathbf{q} + \mathbf{k}| < p_F$). Así pues, tenemos en el kernel de (17.5)

$$G(Q) G(Q + K) = \frac{2\pi i Z^2 \mathbf{l} \cdot \mathbf{k} \delta(q_0) \delta(q - p_F)}{\omega - v_F \mathbf{l} \cdot \mathbf{k} + i0 \operatorname{sgn} \omega} + \phi(Q), \quad (17.10)$$

en donde se ha escrito $\mathbf{l} \cdot \mathbf{k}$ en lugar de $k \cos \theta$ ($\mathbf{l} = \mathbf{q}/q$) y la función ϕ no tiene ninguna parte en función delta (cuando K es pequeño) y podemos, por consiguiente poner en ella $K = 0$.

Sustituyendo (17.10) en (17.5) obtenemos la ecuación integral básica en la forma

$$\begin{aligned} \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}(K; P_1, P_2) &= \tilde{\Gamma}_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_1, P_2) \\ &- i \int \tilde{\Gamma}_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}(P_1, Q) \phi(Q) \Gamma_{\kappa\delta, \zeta\beta}(K; Q, P_2) d^4Q / (2\pi)^4 \\ &+ \frac{Z^2 p_F^2}{(2\pi)^3} \int \tilde{\Gamma}_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}(P_1, Q_F) \Gamma_{\kappa\delta, \zeta\beta}(K; Q_F, P_2) \frac{\mathbf{l} \cdot \mathbf{k} d\omega_l}{\omega - v_F \mathbf{l} \cdot \mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (17.11)$$

En el último término hemos escrito $d^4Q = q^2 dq do_1 dq_0$ (en donde do_1 es el elemento de ángulo sólido en la dirección de \mathbf{l}) y hemos eliminado las funciones delta mediante integración respecto a $dq dq_0$. En este término el argumento Q en las funciones Γ y $\tilde{\Gamma}$ se toma en la superficie de Fermi: $Q_F = (0, p_F \mathbf{l})$.

El factor $\mathbf{l} \cdot \mathbf{k} / (\omega - v_F \mathbf{l} \cdot \mathbf{k})$ en el kernel de (17.11) tiene una propiedad específica: su límite cuando $\mathbf{k} \rightarrow 0$ y $\omega \rightarrow 0$ del límite de la razón ω/k . La solución de la ecuación debe, por tanto, tener la misma propiedad: el límite de la función $\Gamma(K; P_1, P_2)$ cuando $K \rightarrow 0$ depende del modo en que ω y \mathbf{k} tiendan a cero.

Designemos con $\Gamma^\omega(P_1, P_2)$ el límite

$$\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}^\omega(P_1, P_2) = \lim_{K \rightarrow 0} \Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}(K; P_1, P_2) \text{ para } k/\omega \rightarrow 0; \quad (17.12)$$

veremos en § 18 que la función de interacción de las cuasipartículas está relacionada con esta magnitud. Con este método de tomar el límite, el kernel del último término de la integral en (17.11) es cero y así Γ^ω satisface la ecuación

$$\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}^\omega(P_1, P_2) = \tilde{\Gamma}_{\gamma\delta,\alpha\beta}(P_1, P_2) - i \int \tilde{\Gamma}_{\gamma\zeta,\alpha\kappa}(P_1, Q) \phi(Q) \Gamma_{\kappa\delta,\zeta\beta}^\omega(Q, P_2) d^4Q/(2\pi)^4. \quad (17.13)$$

Debido a (15.8)

$$\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}^\omega(P_1, P_2) = \Gamma_{\delta\gamma,\beta\alpha}^\omega(P_2, P_1). \quad (17.14)$$

Podemos eliminar $\tilde{\Gamma}$ de las dos ecuaciones (17.11) y (17.13). El resultado es

$$\begin{aligned} \Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}(K; P_1, P_2) &= \Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}^\omega(P_1, P_2) \\ &+ \frac{Z^2 p_F^2}{(2\pi)^3} \int \Gamma_{\gamma\zeta,\alpha\kappa}^\omega(P_1, Q_F) \Gamma_{\kappa\delta,\zeta\beta}(K; Q_F, P_2) \frac{\mathbf{l} \cdot \mathbf{k} d\mathbf{o}_l}{\omega - v_F \mathbf{l} \cdot \mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (17.15)$$

puesto que, si escribimos formalmente (17.13) como $\tilde{\Gamma} = \hat{L}\Gamma^\omega$, (17.11) se reduce a

$$\hat{L}\Gamma = \tilde{\Gamma} + \frac{Z^2 p_F^2}{(2\pi)^3} \int \tilde{\Gamma} \frac{\mathbf{l} \cdot \mathbf{k} d\mathbf{o}_l}{\omega - v_F \mathbf{l} \cdot \mathbf{k}}.$$

Sustituyendo aquí $\tilde{\Gamma} = \hat{L}\Gamma^\omega$ y aplicando el operador \hat{L}^{-1} a ambos miembros de la ecuación, se obtiene (17.15).

Definamos ahora la función Γ^k por

$$\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}^k(P_1, P_2) = \lim_{K \rightarrow 0} \Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}(K; P_1, P_2) \quad \text{con } \omega/k \rightarrow 0. \quad (17.16)$$

Esta función (multiplicada por Z^2) es la amplitud de scattering hacia adelante (es decir la correspondiente a la transición $P_1, P_2 \rightarrow P_1, P_2$), que corresponde a procesos físicos reales sufridos por cuasipartículas en la superficie de Fermi: colisiones que hacen que la cuasipartícula que está en la superficie se vea acompañada de un cambio en el impulso sin variación de energía y, por consiguiente, el paso al límite de transferencia de impulso cero ($\mathbf{k} \rightarrow 0$) debe hacerse con una transferencia de energía exactamente cero ($\omega = 0$). La función Γ^ω definida anteriormente corresponde al límite no físico de «scattering» con una pequeña transferencia de energía y una transferencia de impulso exactamente nula ($\mathbf{k} = 0$).

Haciendo $\omega = 0$ en (17.15), tomando el límite $\mathbf{k} \rightarrow 0$ y multiplicando ambos miembros por Z^2 se tiene

$$Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^k(P_1, P_2) = Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^\omega(P_1, P_2) - \frac{p_F^2}{v_F(2\pi)^3} \int Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\alpha}^\omega(P_1, Q_F) Z^2 \Gamma_{\alpha\beta, \beta\beta}^k(Q_F, P_2) d\omega. \quad (17.17)$$

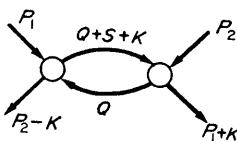
Así pues, existe una relación general entre las dos formas límites de la amplitud de scattering hacia adelante.

Las propiedades de antisimetría (15.8) para Γ dan alguna información acerca del comportamiento de Γ^k y Γ^ω cuando $P_1 \rightarrow P_2$. Haciendo $P_1 = P_2$ y $\alpha = \beta$ en esta ecuación, se tiene

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\alpha}(P_1 + K, P_1 - K; P_1, P_1) = 0; \quad (17.18)$$

ahora no existe ninguna suma respecto a α .† La transición a Γ^ω o Γ^k en esta ecuación ha de hacerse con precaución, puesto que en las últimas funciones hemos puesto primeramente $K = 0$, pero en (17.18) hemos puesto en primer lugar $P_1 = P_2$.

Supongamos que K y $P_1 - P_2 \equiv S = (s_0, \mathbf{s})$ sean pequeños simultáneamente. Entonces, igual que los diagramas (17.2), los diagramas



resultan peligrosos. Cuando K y $S \rightarrow 0$, la función $\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\alpha}$ dependerá, por tanto, de los dos argumentos «singulares»

$$x = \omega/k, \quad y = (s_0 + \omega)/|\mathbf{s} + \mathbf{k}|,$$

y (17.18) demuestra que esta función es cero cuando $x = y$. Consideraremos los valores de Γ en la superficie de Fermi; entonces $\omega = s_0 = 0$, y así $y = 0$. De aquí que en este límite, (17.18) es válida únicamente si también $x = 0$. Así pues, sobre la superficie de Fermi es válido para Γ^k :

$$\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\alpha}^k(P_1, P_1) = 0 \quad (17.19)$$

(N. D. Mermin 1967).

† Cuando sólo se tiene en cuenta la interacción de intercambio entre los spines de las cuasipartículas, las únicas $\Gamma_{\gamma\delta, \alpha\alpha}$ no nulas son las $\Gamma_{\alpha\alpha, \alpha\alpha}$. Esto expresa la constancia del vector spin en la dispersión y puede comprobarse directamente a partir de una expresión del tipo (2.4).

§ 18. Relación entre la función vértice y la función de interacción de las cuasipartículas

Del mismo modo que en el elemento de matriz (7.9) intervienen los estados intermedios con números de partículas $N \pm 1$, siendo este elemento el que determina la función de Green de una partícula, así los estados intermedios con N , $N \pm 1$ y $N \pm 2$ partículas intervienen en el elemento de matriz (15.1) de la función de Green de dos partículas.[†]

Debido a la presencia de estados intermedios con $N \pm 1$ partículas, la función de Green de dos partículas tiene polos que coinciden con los de la función G , es decir, con la energía de la cuasipartícula. No obstante, se muestran explícitamente los factores correspondientes en (15.7). De aquí que la función vértice Γ definida por esta fórmula únicamente tenga polos correspondientes a estados con N o $N \pm 2$ partículas. El momento angular de estos estados difiere en 0 o 1 del correspondiente al estado fundamental y, por ello, las excitaciones elementales correspondientes a estos polos tienen un spin entero (0 o 1) y como consecuencia obedecen a la estadística de Bose. Así pues, los polos de la función vértice determinan las ramas de Bose del espectro de energía de un líquido de Fermi.

Los polos que surgen de los estados intermedios sin variación en el número de partículas corresponden a excitaciones elementales que representan cuantos de sonido cero. En la técnica diagramática, los estados intermedios corresponden a secciones eficaces diferentes que dividen los diagramas en dos partes entre varias líneas externas. En el caso presente, los estados intermedios sin cambio en el número de partículas corresponden a secciones eficaces de los diagramas (17.3) en uno de los pares de líneas continuas que unen bloques I' adyacentes; se expresa la constancia del número de partículas en estos estados por los números iguales de líneas que pasan en cada sentido a través de la sección eficaz. La transferencia de 4-impulso a través de dicha sección eficaz es $(Q + K) - Q = K$; de acuerdo con ello, las excitaciones elementales sin cambio en el número de partículas corresponden a polos de la función vértice $\Gamma(K; P_1, P_2)$ respecto a la variable K .

Previamente hemos visto, en la deducción de (17.10), que uno de los dos impulsos \mathbf{q} y $\mathbf{q} + \mathbf{k}$ (que aparecen en los 4-vectores Q y $Q + K$) debe ser mayor que el impulso límite p_F y el otro debe ser menor. Por otra parte, en el caso de excitación desde el estado fundamental, sólo pueden estar fuera de la esfera de Fermi «partículas» mientras que dentro de ella estarán «huecos». En este sentido podemos decir que las excitaciones en el punto cero de un líquido de Fermi pueden considerarse como estados ligados de partícula-hueco.[‡]

Las excitaciones correspondientes a estados intermedios con $N \pm 2$ partículas [y a polos de la función $\Gamma(K; P_1, P_2)$ respecto a la variable $P_1 + P_2$] pueden con-

[†] Los estados con N partículas proceden de una secuencia de operadores en el producto T como, por ejemplo, $\hat{\Psi}_3 \hat{\Psi}_4 \hat{\Psi}_1^+ \hat{\Psi}_2^+$. Estados con $N + 2$ partículas corresponden a secuencias como la $\hat{\Psi}_3 \hat{\Psi}_1^+ \hat{\Psi}_4 \hat{\Psi}_2^+$.

[‡] En esta formulación, el problema es muy semejante al de determinar los niveles de los estados ligados electrón-positrón en electrodinámica cuántica (ver TCR, § 122). En particular, las ecuaciones (17.4) y (17.5) son análogas a la ecuación de Bethe-Salpeter, TCR (122.10), (122.11).

siderarse como estados ligados de dos partículas o dos huecos. Sin embargo, la presencia de dichos estados conducirá (como se verá en el capítulo V) a la superfluidez del líquido de Fermi y esto exige a su vez un cambio considerable del formalismo matemático completo de las técnicas diagramáticas.

Así pues, para determinar la rama de Bose del espectro de energía de un líquido de Fermi no superfluido, debemos examinar los polos de la función vértice $\Gamma(K; P_1, P_2)$ respecto a la variable $K = (\omega, \mathbf{k})$. Para cada valor de \mathbf{k} , una energía particular $\omega(\mathbf{k})$ corresponde al polo y la relación de dispersión queda determinada, por tanto, en el caso de estas excitaciones. Cuando se trata de estados débilmente excitados, ω y \mathbf{k} son pequeños, de modo que podemos utilizar las ecuaciones deducidas para la función $\Gamma(K; P_1, P_2)$ en el margen de valores pequeños de K .

Cerca de un polo de Γ , el primer miembro y la integral del segundo miembro de (17.15) resultan arbitrariamente grandes; el término $\Gamma^\omega(P_1, P_2)$ permanece finito y, por tanto, puede omitirse. Además la variable P_2 y los subíndices β y δ no se ven afectados por las operaciones realizadas sobre Γ en (17.15) y así actúan como parámetros sin importancia en esta ecuación. Finalmente, debemos considerar la función Γ en la superficie de la esfera de Fermi, es decir, haremos $P_1 = (0; p_F \mathbf{n})$ siendo \mathbf{n} un vector unidad variable. De todos estos hechos se concluye que la determinación de las excitaciones acústicas en un líquido de Fermi se reduce al problema de hallar los valores propios de la ecuación integral

$$\chi_{\gamma\alpha}(\mathbf{n}) = \frac{Z^2 p_F^2}{(2\pi)^3} \int \Gamma_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}^\omega(\mathbf{n}, \mathbf{l}) \chi_{\kappa\zeta}(\mathbf{l}) \frac{\mathbf{l} \cdot \mathbf{k} d\sigma_l}{\omega - v_F \mathbf{l} \cdot \mathbf{k}}, \quad (18.1)$$

siendo $\chi_{\gamma\alpha}(\mathbf{n})$ una función auxiliar.

La ecuación puede transformarse sustituyendo χ por otra función

$$v_{\gamma\alpha}(\mathbf{n}) = \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}}{\omega - v_F \mathbf{n} \cdot \mathbf{k}} \chi_{\gamma\alpha}(\mathbf{n}). \quad (18.2)$$

La ecuación (18.1) se reduce entonces a

$$(\omega - v_F \mathbf{n} \cdot \mathbf{k}) v_{\gamma\alpha}(\mathbf{n}) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} \frac{p_F^2 Z^2}{(2\pi)^3} \int \Gamma_{\gamma\zeta, \alpha\kappa}^\omega(\mathbf{n}, \mathbf{n}') v_{\kappa\zeta}(\mathbf{n}') d\sigma', \quad (18.3)$$

con \mathbf{n}' en lugar de \mathbf{l} .

Esta ecuación tiene exactamente la misma forma que la ecuación de transporte (4.10) para las vibraciones de un líquido de Fermi. Comparando ambas ecuaciones se tiene la siguiente correlación entre la función de interacción de la cuasipartícula y la función Γ^ω :

$$f_{\gamma\delta, \alpha\beta}(p_F \mathbf{n}, p_F \mathbf{n}') = Z^2 \Gamma_{\gamma\delta, \alpha\beta}^\omega(\mathbf{n}, \mathbf{n}'). \quad (18.4)$$

Esta expresión muestra la relación existente entre la función f y las propiedades de la dispersión de las cuasipartículas.[†]

La ecuación (18.4) relaciona f con la amplitud de scattering no física. Utilizaremos ahora (17.17) para obtener una relación explícita entre f y la amplitud de scattering «física» hacia adelante para las cuasipartículas en la superficie de Fermi, que designaremos por

$$A_{\gamma\delta,\alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = Z^2 I_{\gamma\delta,\alpha\beta}^k(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2). \quad (18.5)$$

La relación (17.17) en la superficie de Fermi es

$$\begin{aligned} A_{\gamma\delta,\alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) \\ = f_{\gamma\delta,\alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) - \frac{p_F^2}{2\pi^2 v_F} \int f_{\gamma\zeta,\alpha\kappa}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}') A_{\kappa\delta,\zeta\beta}(\mathbf{n}', \mathbf{n}_2) \frac{d\sigma'}{4\pi}. \end{aligned} \quad (18.6)$$

La dependencia con el spin de las funciones A y f puede expresarse mediante las matrices de Pauli σ . En el caso general, estas funciones pueden contener cualquier combinación escalar de los cuatro vectores $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \sigma_1, \sigma_2$. Si existe una interacción de intercambio entre las partículas, los únicos productos escalares permisibles son $\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2$ y $\sigma_1 \cdot \sigma_2$. Entonces pueden escribirse las funciones A y f [igual que se hizo con f en (2.4)] en la forma

$$\left. \begin{aligned} \frac{p_F^2}{\pi^2 v_F} f_{\gamma\delta,\alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) &= F(\vartheta) \delta_{\gamma\delta} \delta_{\alpha\beta} + G(\vartheta) \sigma_{\gamma\alpha} \cdot \sigma_{\delta\beta}, \\ \frac{p_F^2}{\pi^2 v_F} A_{\gamma\delta,\alpha\beta}(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) &= B(\vartheta) \delta_{\gamma\delta} \delta_{\alpha\beta} + C(\vartheta) \sigma_{\gamma\alpha} \cdot \sigma_{\delta\beta}, \end{aligned} \right\} \quad (18.7)$$

en donde los coeficientes F, G, B, C son funciones únicamente del ángulo ϑ formado entre \mathbf{n}_1 y \mathbf{n}_2 . Todos ellos pueden desarrollarse en serie de polinomios de Legendre:

$$B(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) B_l P_l(\cos \vartheta), \dots. \quad (18.8)$$

Sustituyendo (18.7) y (18.8) en (18.6) y calculando la integral con el teorema de adición correspondiente a los polinomios de Legendre, se tiene

$$B_l = F_l(1 - B_l), \quad C_l = G_l(1 - C_l). \quad (18.9)$$

[†] La prueba general anterior se debe a L. D. Landau (1958). En el caso de un gas de Fermi ligeramente no ideal, la deducción de la ecuación de transporte mediante suma de diagramas específicos del tipo (17.3) fue dada anteriormente por A. B. Migdal y V. M. Galitskiï (1958). En el caso de un gas, las funciones G (en la aproximación de orden cero) contienen sólo términos con polos y por ello no se plantea la exclusión de términos sin polos.

Estas fórmulas establecen una relación algebraica sencilla entre los coeficientes de desarrollo de f y A .

Las condiciones de estabilidad (2.19) y (2.20) dan desigualdades semejantes para los coeficientes B_l y C_l :

$$B_l < 1, \quad C_l < 1. \quad (18.10)$$

Además estos coeficientes satisfacen una relación que se deduce de (17.19): $B(0) + C(0) = 0$, o sea

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(B_l + C_l) = 0. \quad (18.11)$$

Las ecuaciones (18.9) y (18.11) conjuntamente con las condiciones (18.10) son suficientes para demostrar un teorema interesante: en todo líquido estable de Fermi, existe al menos una rama (ordinaria o de spin) de sonido cero con simetría axial.[†]

§ 19. Identidades para las derivadas de la función de Green

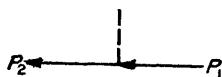
En el formalismo matemático de las funciones de Green, juegan un papel importante ciertas relaciones idénticas entre las derivadas de estas funciones y la amplitud de scattering de las cuasipartículas. Estas relaciones se deducen todas de manera semejante calculando la variación que en las funciones de Green produce algún «campo externo» ficticio para el que ya se conoce el resultado de su acción sobre el sistema.

Calculemos en primer lugar, la variación δG de la función de Green causada por un «campo externo» arbitrario, cuyo término correspondiente en el hamiltoniano es

$$\delta \hat{V}^{(1)} = \int \hat{\Psi}_{\alpha}^{+}(t, \mathbf{r}) \delta \hat{U} \hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}) d^3x, \quad (19.1)$$

en donde $\delta \hat{U}$ es un cierto operador que actúa sobre funciones de \mathbf{r} (y posiblemente depende del tiempo t).

Cuando está presente el campo externo, la función de Green depende de los dos 4-impulsos P_1 y P_2 . En la técnica diagramática, dicho campo está representado por una nueva característica gráfica, una línea externa a trazos:

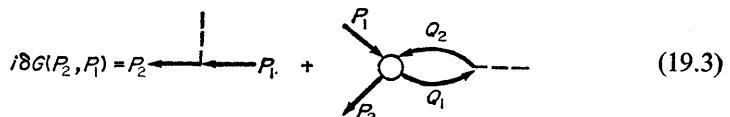


[†] Ver N. D. Mermin, *Physical Review* **159**, 161, 1967.

y esta línea está asociada con un factor

$$-i\delta U(P_2, P_1) = -i \int e^{iP_2 X} \delta \hat{U} e^{-iP_1 X} d^4 X. \quad (19.2)$$

En el primer orden respecto al campo externo, la corrección a la función de Green exacta está representada por una suma de dos diagramas esqueletos:



en donde todas las líneas continuas son gruesas (funciones exactas G) y el círculo es una función vértice exacta ($i\Gamma$). En forma analítica, esta ecuación es

$$\begin{aligned} i\delta G_{\beta\alpha}(P_2, P_1) &= G_{\beta\nu}(P_2) \delta U(P_2, P_1) G_{\gamma\alpha}(P_1) - \\ &- iG_{\beta\nu}(P_2) G_{\nu\alpha}(P_1) \int \Gamma_{\gamma\delta, \varepsilon\zeta}(P_2, Q_1; P_1, Q_2) \times \\ &\times \delta U(Q_2, Q_1) G_{\zeta\kappa}(Q_2) G_{\kappa\delta}(Q_1) d^4 Q_1 / (2\pi)^4, \end{aligned} \quad (19.4)$$

con $Q_2 + P_1 = P_2 + Q_1$.

Las dos primeras identidades a considerar se deben a la conservación del número de partículas del sistema. En el hamiltoniano del sistema, se expresa esta propiedad mediante la aparición de los operadores ψ en parejas: un $\hat{\Psi}^+(X)$ y un $\hat{\Psi}(X)$ por cada argumento X .

Apliquemos una transformación *gauge* a los operadores ψ :

$$\hat{\Psi}_\alpha(X) = \hat{\Psi}'_\alpha(X) e^{-i\chi(X)}, \quad \hat{\Psi}_\alpha^+ = \hat{\Psi}'_\alpha^+ e^{i\chi(X)}, \quad (19.5)$$

siendo $\chi(X)$ una función real.[†] A partir de la propiedad ya mencionada del hamiltoniano, si $\hat{\Psi}$ satisface la «ecuación de Schrödinger» (7.8), $\hat{\Psi}'$ satisface una ecuación análoga con los cambios

$$\Delta \rightarrow (\nabla - i\nabla\chi)^2, \quad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} - i \frac{\partial\chi}{\partial t}.$$

En el caso de un infinitesimal $\chi = \delta\chi$, este cambio en la ecuación es equivalente a sumar al hamiltoniano un «campo externo»

$$\delta\hat{U} = -\frac{\partial\delta\chi}{\partial t} + \frac{i}{2m} (\Delta\delta\chi + 2\nabla\delta\chi \cdot \nabla).$$

[†] Esto es análogo a la transformación «gauge» en electrodinámica cuántica, cf. MC (111.2)-(111.9).

En particular, si

$$\delta\chi(X) = \text{re } \chi_0 e^{-iKX}, \quad K = (\omega, \mathbf{k}),$$

en donde de hecho puede omitirse el símbolo re, puesto que las operaciones siguientes son lineales, tenemos

$$\delta U(P_2, P_1) = i(2\pi)^4 \chi_0 \delta^{(4)}(P_2 - P_1 - K) \left\{ \omega - \frac{1}{2m} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2) \right\}. \quad (19.6)$$

Por otra parte, la función de Green construida a partir de los operadores ψ

$$\hat{\Psi}'_\alpha = \hat{\Psi}_\alpha(1 + i\delta\chi), \quad \hat{\Psi}'_\alpha^+ = \hat{\Psi}_\alpha^+(1 - i\delta\chi)$$

difiere de la construida a partir de $\hat{\Psi}$ y $\hat{\Psi}^+$ por

$$\delta G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = iG_{\alpha\beta}(X_1 - X_2) [\delta\chi(X_1) - \delta\chi(X_2)]$$

o, en componentes de Fourier,

$$\begin{aligned} \delta G_{\alpha\beta}(P_2, P_1) &= \int \delta G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) e^{i(P_2 X_1 - P_1 X_2)} d^4 X_1 d^4 X_2 \\ &= i[G_{\alpha\beta}(P_1) - G_{\alpha\beta}(P_2)] \delta\chi(P_2 - P_1), \end{aligned} \quad (19.7)$$

en donde

$$\delta\chi(P) = \int \delta\chi(X) e^{iPX} d^4 X = (2\pi)^4 \chi_0 \delta^{(4)}(P - K).$$

Así pues, la misma variación $\delta G_{\alpha\beta}$ se ha expresado en dos formas (19.7) y (19.4), en donde dU ha de sustituirse a partir de (19.6). Igualando estas dos expresiones, tenemos, después de poner $G_{\alpha\beta} = G\delta_{\alpha\beta}$ y volver a denominar algunas de las variables,

$$\begin{aligned} \delta_{\alpha\beta}[G(P+K) - G(P)] &= G(P+K) G(P) \left\{ \left[-\omega + \frac{\mathbf{k} \cdot (2\mathbf{p} + \mathbf{k})}{2m} \right] \delta_{\alpha\beta} + \right. \\ &\quad \left. + i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}(K; P, Q) G(Q) G(Q - K) \left[\omega - \frac{\mathbf{k} \cdot (2\mathbf{q} - \mathbf{k})}{2m} \right] \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} \right\}. \end{aligned}$$

Se obtienen las identidades buscadas tomando el límite de esta ecuación cuando $\omega \rightarrow 0$, $\mathbf{k} \rightarrow 0$; entonces

$$G(P+K) - G(P) \rightarrow \omega \frac{\partial G}{\partial p_0} + \mathbf{k} \cdot \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}}, \quad (19.8)$$

en donde $P = (p_0, \mathbf{p})$. Tomando el límite con la condición $k/\omega \rightarrow 0$, se obtiene la primera identidad:

$$\delta_{\alpha\beta} \frac{\partial G(P)}{\partial p_0} = -\{G^2(P)\}_\omega \left[\delta_{\alpha\beta} - i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^\omega(P, Q) \{G^2(Q)\}_\omega \frac{d^4Q}{(2\pi)^4} \right], \quad (19.9)$$

con la notación

$$\{G^2(P)\}_\omega = \lim_{\omega, \mathbf{k} \rightarrow 0} G(P) G(P + K), \quad k/\omega \rightarrow 0. \quad (19.10)$$

Análogamente tomando el límite con la condición $\omega/k \rightarrow 0$ se obtiene una segunda identidad:

$$\delta_{\alpha\beta} \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}} = \{G^2(P)\}_k \left[\frac{\mathbf{p}}{m} \delta_{\alpha\beta} - i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^k(P, Q) \frac{1}{m} \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4Q}{(2\pi)^4} \right] \quad (19.11)$$

con la notación correspondiente $\{G^2(P)\}_k$.

A continuación consideremos la variación de la función de Green cuando se aplica al sistema un campo constante

$$\delta U = \delta U(\mathbf{r}) = U_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (19.12)$$

Cuando $\mathbf{k} \rightarrow 0$, este campo varía lentamente en el espacio y, por ello, su influencia sobre el sistema puede tratarse macroscópicamente. De acuerdo con la condición termodinámica de equilibrio en un campo externo, debe cumplirse $\mu + \delta U = \text{constante}$ (ver Parte 1, § 25); cuando $\mathbf{k} \rightarrow 0$ esto significa que el potencial químico μ varía en la pequeña cantidad $-U_0$. La variación correspondiente de la función de Green es

$$\delta G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -U_0 \delta_{\alpha\beta} \partial G(X_1 - X_2) / \partial \mu,$$

y su componente de Fourier, definida como en (19.7), es

$$\delta G_{\alpha\beta}(P_2, P_1) = -(2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_2 - P_1) U_0 \partial G(P_1) / \partial \mu.$$

También puede calcularse la misma variación de la función de Green mediante la ecuación (19.4), esta vez con

$$\delta U(P_2, P_1) = (2\pi)^4 U_0 \delta^{(4)}(P_2 - P_1 - K) \quad (K = 0, \mathbf{k}).$$

El paso al límite $\mathbf{k} \rightarrow 0$ en este caso (campo constante, $\omega \equiv 0$) corresponde al caso $\omega/k \rightarrow 0$. Esto nos da la identidad

$$\delta_{\alpha\beta} \frac{\partial G(P)}{\partial \mu} = -\{G^2(P)\}_k \left[\delta_{\alpha\beta} - i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^k(P, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} \right]. \quad (19.13)$$

Finalmente, se obtiene una identidad más a partir de la invariancia galileana del sistema. Para deducirla, consideremos el líquido en un sistema de coordenadas que se mueve con una velocidad pequeña $\delta\mathbf{w}(t) = \mathbf{w}_0 e^{-i\omega t}$ que varía lentamente con el tiempo. El cambio a estas coordenadas es equivalente a la imposición de un campo externo cuyo operador es [†]

$$\delta\hat{U} = -\delta\mathbf{w} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \delta\mathbf{w} \cdot \nabla \quad (19.14)$$

o, en la representación de los impulsos,

$$\delta U(P_2, P_1) = -\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{w}_0 (2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_2 - P_1 - K), \quad K = (\omega, 0).$$

Esta expresión ha de sustituirse en (19.4) y luego ha de tomarse el límite $\omega \rightarrow 0$. Cuando $\omega \rightarrow 0$, tenemos una transformación de Galileo desde un sistema inercial de referencia a otro que se mueve con velocidad constante $\delta\mathbf{w}$. Si en el líquido existe una excitación elemental con energía $\varepsilon(\mathbf{p})$, su energía en el sistema de referencia que se está moviendo respecto al líquido con velocidad $\delta\mathbf{w}$ es $\varepsilon - \mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{w}$. [‡] De aquí que, en el nuevo sistema de referencia, deba aparecer la frecuencia p_0 en la función $G(P)$ como $p_0 + \mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{w}$ (de modo que el polo de la función se desplace en $-\mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{w}$). Entonces

$$\delta G = \mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{w} \frac{\partial G}{\partial p_0},$$

y llegamos a la identidad

$$\delta_{\alpha\beta} \mathbf{p} \frac{\partial G(P)}{\partial p_0} = -\{G^2(P)\}_{\omega} \left\{ \delta_{\alpha\beta} \mathbf{p} - i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^{\omega}(P, Q) \mathbf{q} \{G^2(Q)\}_{\omega} \frac{d^4 Q}{(2\pi)^4} \right\}. \quad (19.15)$$

Necesitaremos utilizar estas identidades, en particular, para valores de la variable libre $P = (p_0, \mathbf{p})$ sobre la superficie de Fermi: $P_F = (0, \mathbf{p}_F)$. Transfiriendo el factor $G^2(P)$ desde el segundo miembro al primero, sustituimos las derivadas de

[†] En la lagrangiana clásica de una partícula libre, $L = \frac{1}{2} m v^2$, el cambio a coordenadas móviles se efectúa sustituyendo $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v} + \delta\mathbf{w}$ y resulta un incremento $\delta L = m \mathbf{v} \cdot \delta\mathbf{w}$ que es pequeño si lo es $\delta\mathbf{w}$. De acuerdo con ello [cf. *Mecánica* (40.7)] el incremento de la función de Hamilton es $\delta H = -\mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{w}$ y en mecánica cuántica éste corresponde al operador (19.14).

[‡] Ver la discusión más detallada que se da en § 23.

$G(P)$ por las de $G^{-1}(P)$; carece de importancia la forma de tomar el límite $K \rightarrow 0$ en $G(P)G(P + K)$.

Cerca de la superficie de Fermi, la función de Green está determinada por el término del polo, de modo que

$$G^{-1}(P) = \frac{1}{Z} [p_0 - v_F(p - p_F)].$$

De aquí, que en la propia superficie

$$\frac{\partial G^{-1}}{\partial p_0} = \frac{1}{Z}, \quad \frac{\partial G^{-1}}{\partial \mu} = \frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu}.$$

En consecuencia, las identidades (19.9) y (19.13), por ejemplo, en la superficie de Fermi adquieren la forma

$$i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^{\omega}(P_F, Q) \{G^2(Q)\}_{\omega} \frac{d^4Q}{(2\pi)^4} = \left(1 - \frac{1}{Z}\right) \delta_{\alpha\beta}, \quad (19.16)$$

$$i \int \Gamma_{\beta\delta, \alpha\delta}^k(P_F, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4Q}{(2\pi)^4} = \left(1 - \frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu}\right) \delta_{\alpha\beta}. \quad (19.17)$$

§ 20. Deducción de la relación existente entre el impulso límite y la densidad

Las relaciones deducidas en las secciones precedentes proporcionan una prueba consistente de la proposición fundamental de la teoría de Landau del líquido de Fermi: la relación existente entre el impulso límite p_F y la densidad N/V del líquido viene dada por la misma fórmula (1.1) que en el caso de un gas ideal. La idea de esta prueba o demostración consiste en calcular independientemente las variaciones de N y p_F debidas a un cambio infinitesimal del potencial químico μ y luego compararlas.

De acuerdo con (7.24), el número total de partículas en un volumen dado V , en función del potencial químico, viene dado por la integral

$$N = -2iV \lim_{t \rightarrow -0} \int G(P) e^{-ip_0 t} \frac{d^4P}{(2\pi)^4}, \quad P = (p_0, \mathbf{p}). \quad (20.1)$$

De aquí que la derivada

$$\frac{1}{V} \frac{dN}{d\mu} = -2i \int \frac{\partial G(P)}{\partial \mu} \frac{d^4P}{(2\pi)^4}. \quad (20.2)$$

Como esta integral converge para valores grandes de p_0 ($\partial G/\partial\mu \propto 1/p_0^2$ cuando $|p_0| \rightarrow \infty$), puede omitirse en el integrando el factor $e^{-ip_0 t}$. Despues de sustituir $\partial G/\partial\mu$ por la identidad (19.13) sumada respecto a $\alpha = \beta$, se tiene

$$\frac{1}{V} \frac{dN}{d\mu} = -2i \int \{G^2(P)\}_k \frac{d^4P}{(2\pi)^4} + \int \{G^2(P)\}_k \Gamma^k(P, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4P d^4Q}{(2\pi)^8},$$

en donde hemos sustituido $\Gamma = \Gamma_{\alpha\gamma, \alpha\gamma}$ para mayor brevedad. El objeto del cálculo ahora es expresar el segundo miembro de esta ecuación en función de una integral exclusivamente sobre la superficie de Fermi.

En primer lugar, sustituymos Γ^k en la segunda integral de (17.17), sustituymendo S_F en lugar de Q_F :

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \frac{dN}{d\mu} &= 2i \int \{G^2(P)\}_k \frac{d^4P}{(2\pi)^4} + \int \{G^2(P)\}_k \Gamma^\omega(P, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4P d^4Q}{(2\pi)^8} - \\ &- \frac{p_F^2 Z^2}{v_F (2\pi)^3} \int \{G^2(P)\}_k \Gamma_{\alpha\epsilon, \alpha\epsilon}^\omega(P, S_F) \Gamma_{\alpha\gamma, \gamma\gamma}^k(S_F, Q) \{G^2(Q)\}_k \frac{d^4P d^4Q do_S}{(2\pi)^8}. \end{aligned} \quad (20.3)$$

Comencemos por transformar el último término. En el integrando, sólo los dos últimos factores dependen de Q ; la integral de los mismos respecto a d^4Q viene dada (en la superficie de Fermi, $S = S_F$) por (19.17) y, por consiguiente, este término se reduce a

$$i \frac{p_F^2 Z^2}{v_F (2\pi)^3} \int \{G^2(P)\}_k \Gamma^\omega(P, S_F) \frac{d^4P do_S}{(2\pi)^4} \left(1 - \frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu} \right).$$

A continuación observemos que en la integración respecto a d^4P los valores límites de $G(P)G(P + K)$ han de tomarse en la forma (17.10); de aquí que $\{G^2(P)\}_\omega = \phi(P)$ y

$$\{G^2(P)\}_k = \{G^2(P)\}_\omega - \frac{2\pi i Z^2}{v_F} \delta(p_0) \delta(p - p_F). \quad (20.4)$$

Esto nos da

$$i \frac{p_F^2 Z^2}{v_F (2\pi)^3} \left(1 - \frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu} \right) \left\{ \int \{G^2(P)\}_\omega \Gamma^\omega(P, S_F) \frac{d^4P do_S}{(2\pi)^4} - 8\pi i \bar{F} \right\},$$

en donde, de acuerdo con (18.4), hemos utilizado la función de interacción de las cuasipartículas y hemos expresado $f_{\alpha\epsilon, \alpha\epsilon}$ en función de $F(\theta)$ mediante (2.6) y (2.7); la barra situada sobre F indica la integración respecto a $do/4\pi$. La integral restante

respecto a d^4P viene dada por (19.16) y la integración respecto a dp_0 da un factor adicional de 4π . Así pues, el tercer término de (20.3) es igual a

$$-\frac{p_F^2 Z^2}{v_F \pi^2} \left(\frac{v_F}{Z} \frac{dp_F}{d\mu} - 1 \right) \left\{ 1 - \frac{1}{Z} + \bar{F} \right\}. \quad (20.5)$$

El segundo término de (20.3) se transforma análogamente: las magnitudes $\{G^2(P)\}_k$ y $\{G^2(Q)\}_k$ se expresan en función de $\{G^2(P)\}_\omega$ y $\{G^2(Q)\}_\omega$ mediante (20.4) y luego se utilizan las identidades (19.9) y (19.16). Entonces resulta que este término es igual a

$$-2i \int \frac{\partial G}{\partial p_0} \frac{d^4P}{(2\pi)^4} - 2i \int \{G^2(P)\}_\omega \frac{d^4P}{(2\pi)^4} + \frac{p_F^2 Z^2}{v_F \pi^2} \left\{ 2 \left(\frac{1}{Z} - 1 \right) - \bar{F} \right\}. \quad (20.6)$$

La primera integral da cero al integrar respecto a p_0 , puesto que $G \rightarrow 0$ cuando $p_0 \rightarrow \pm \infty$.

Finalmente, el primer término de (20.3), con la sustitución de (20.4), se reduce a

$$2i \int \{G^2(P)\}_\omega \frac{d^4P}{(2\pi)^4} + \frac{p_F^2 Z^2}{v_F \pi^2}. \quad (20.7)$$

Sumando las contribuciones (20.5)-(20.7) se tiene

$$\frac{1}{V} \frac{dN}{d\mu} = \frac{p_F^2}{\pi^2} \frac{dp_F}{d\mu} + \frac{p_F^2 Z}{\pi^2 v_F} \left\{ 1 - \frac{dp_F}{d\mu} v_F (1 + \bar{F}) \right\}. \quad (20.8)$$

Por otra parte, haciendo

$$\delta n = (\partial n' / \partial p_F) \delta p_F = \delta(p' - p_F) \delta p_F$$

la derivada

$$\frac{d\mu}{dp_F} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_V \left(\frac{\partial N}{\partial p_F} \right)_V = \frac{V p_F^2}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\partial \mu}{\partial N}$$

de (2.14), fácilmente se encuentra

$$d\mu/dp_F = v_F(1 + \bar{F}). \quad (20.9)$$

Debe resaltarse que, en la deducción de (2.14), no se ha supuesto ninguna dependencia específica de p_F con N/V y, por consiguiente, podemos utilizar esta relación

para hallar dicha dependencia; como es natural, puede obtenerse también la ecuación (20.9) con la ayuda de las mismas relaciones que se utilizaron en el caso de las funciones vértice para deducir (20.8).†

A partir de esta ecuación vemos que la magnitud entre corchetes en (20.8) es cero y, por ello,

$$\frac{d}{d\mu} \left(\frac{N}{V} \right) = \frac{p_F^2}{2\pi} \frac{dp_F}{d\mu^2} = \frac{d}{d\mu} \left[\frac{8\pi p_F^3}{3(2\pi)^3} \right]. \quad (20.10)$$

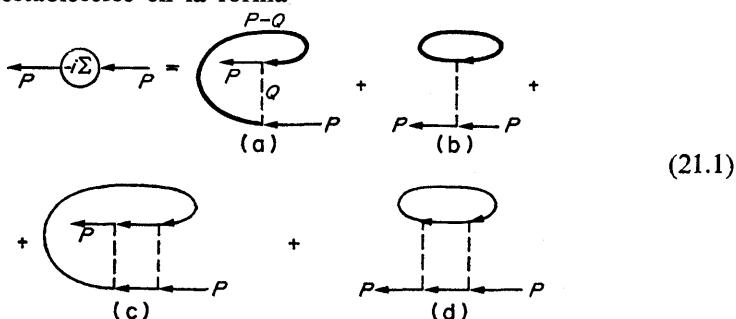
Cuando $N/V \rightarrow 0$ tenemos un gas y en este límite la dependencia de p_F con N/V debe, por consiguiente, ser la misma que en el caso del gas. Esto determina la constante en la integración de (20.10) y así tenemos finalmente la relación (1.1) buscada:

$$N/V = 8\pi p_F^3 / 3(2\pi)^3.$$

§ 21. Función de Green de un gas de Fermi casi ideal

Para ilustrar la aplicación de la técnica diagramática, calcularemos en esta sección la función de Green de un gas de Fermi casi ideal en el modelo estudiado en § 6 mediante la teoría de perturbaciones ordinaria (V. M. Galitskiĭ 1958). El gas, conviene recordarlo, posee repulsión entre las partículas y el esquema descrito en § 6 nos permitió aplicar la teoría de perturbaciones a esta interacción con tal que en el resultado final intervenga sólo la amplitud de scattering.

Como se vio en § 14, la determinación de la función de Green se reduce al cálculo de la función de autoenergía $\Sigma_{ab}(P)$. En la teoría de perturbaciones de primero y segundo orden, viene dada por el conjunto de diagramas (14.9) y (14.10). Estos diagramas pueden establecerse en la forma



Los diagramas (21.1a, b) incluyen los de primer orden (14.10a) y (14.9a) y los de

† Puede deducirse la fórmula (2.11) para la masa efectiva a partir de la relación (17.17) y las identidades (19.11) y (19.15).

segundo orden (14.10b, c) y (14.9b, c); el último difiere del anterior sólo en correcciones a la línea interna continua. Estas líneas se muestran en trazo grueso en (21.1a, b) y, por consiguiente, no deben estar correlacionadas con las funciones de Green del gas ideal $G^{(0)}$, sino con las funciones G corregidas por lo menos hasta los términos de primer orden. Los diagramas (21.1c, d) son los diagramas de segundo orden (14.10d, e). Todos los diagramas se han sometido a una deformación con objeto de aclarar su estructura; son los primeros términos de una serie de diagramas en «escalera» con cuatro líneas externas, en cada uno de los cuales se ha «cortocircuitado» una pareja de líneas externas de dos modos diferentes.

Calculemos primeramente el diagrama (21.1a). Su expresión analítica es

$$\left. \begin{aligned} [-i\Sigma(P)]_a &= \int U(Q) G(P-Q) d^4Q/(2\pi)^4, \\ Q = (q_0, \mathbf{q}), \quad P = (\omega, \mathbf{p}); \end{aligned} \right\} \quad (21.2)$$

se ha omitido el factor común $\delta_{\alpha\beta}$. Integremos en primer lugar respecto a q_0 . Puesto que el factor $U(Q) \equiv U(\mathbf{q})$ no depende de q_0 y $G \propto 1/q_0$, cuando $|q_0| \rightarrow \infty$, ha de describirse con más precisión el modo de integración. Para ello, debemos volver al origen del diagrama (21.1a) y observar que la línea continua corresponde a la contracción de un par de operadores ψ que proceden de un operador \hat{V} . Esto significa que $\hat{\Psi}$ y $\hat{\Psi}^+$ se toman en el mismo instante y $\hat{\Psi}^+$ está a la izquierda de $\hat{\Psi}$ en la contracción. Quiere esto decir que en la representación de las coordenadas la función G que aparece se toma para $t = t_1 - t_2 \rightarrow -0$. En la representación de los impulsos, esto significa que hay que incluir un factor $\exp(-iq_0t)$ en el integrando de (21.2) y tomar el límite cuando $t \rightarrow -0$. Utilizando a continuación (7.20) tenemos

$$[-i\Sigma]_a = i \int U(\mathbf{q}) N(\mathbf{p} - \mathbf{q}) d^3q/(2\pi)^3, \quad (21.3)$$

en donde $N(\mathbf{p})$ es la función de distribución de partículas.

La componente de Fourier $U(\mathbf{q})$ depende marcadamente de \mathbf{q} sólo cuando $q \gtrsim 1/r_0$, en donde r_0 es el alcance del campo $U(r)$; estos valores son ciertamente grandes (en el caso de un gas enrarecido) en comparación con p_F . Si consideramos únicamente valores de $|p - p_F| \ll 1/r_0$, entonces para estos valores de \mathbf{q} tenemos $N(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \approx 0$. De aquí que $U(\mathbf{q})$ en (21.3) pueda sustituirse por $U(0)$ y extraerse fuera de la integral.[†] La integral resultante es la mitad de la densidad del gas $n(\mu)$ (debido al valor especificado del componente de spin):

$$[\Sigma]_a = -\frac{1}{2} n(\mu) U(0).$$

[†] Se ve fácilmente que el error resultante ha de ser de un orden de magnitud relativo $\sim (p_F r_0)^2$ y, por tanto, no tiene ninguna influencia incluso sobre los términos del orden siguiente en $p_F r_0$.

El diagrama (21.1b), con la línea continua cerrada, da $[\Sigma]_b = n(\mu)U(0)$. Así pues, la contribución a Σ de los dos diagramas es

$$[\Sigma]_{a,b} = \frac{1}{2}n(\mu)U(0) = (2\pi/m)n(\mu)a, \quad (21.4)$$

siendo a la longitud de scattering definida por (6.2).

La expresión (21.4) incluye en particular la totalidad del primer efecto. En esta aproximación, ha de entenderse $n(\mu)$ como la densidad del gas ideal $n^{(0)}(\mu)$, de modo que

$$\Sigma^{(1)} \equiv [\Sigma]_{a,b}^{(1)} = (2\pi/m)n^{(0)}(\mu)a. \quad (21.5)$$

Para el cálculo siguiente definiremos una función auxiliar F dada por los diagramas escalera

$$(21.6)$$

(como es usual, $P_1 + P_2 = P_3 + P_4$). En forma analítica,

$$iF_{\gamma\delta,\alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2) = i\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}(F^{(1)} + F^{(2)}), \quad (21.7)$$

en donde

$$iF^{(1)} = -iU(P_3 - P_1), \quad (21.8)$$

$$iF^{(2)} = \int G^{(0)}(P') U(P_1 - P') G^{(0)}(P_1 + P_2 - P') U(P' - P_3) d^4P'/(2\pi)^4. \quad (21.9)$$

Desarrollando ambos diagramas (21.1c), (21.1d) y expresándolos en función de $F^{(2)}$, se obtiene

$$\begin{aligned} [-i\Sigma(P)]_{c,d} &= -\int G^{(0)}(Q) F^{(2)}(P, Q; Q, P) d^4Q/(2\pi)^4 \\ &\quad + 2 \int G^{(0)}(Q) F^{(2)}(P, Q; P, Q) d^4Q/(2\pi)^4; \end{aligned} \quad (21.10)$$

las mismas integrales sustituyendo $F^{(1)}$ en lugar de $F^{(2)}$ dan (21.5). La diferencia de signo entre las dos integrales se debe a la presencia del lazo cerrado en el diagrama (21.1d); los factores delta del primer diagrama dan $\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} = \delta_{\alpha\beta}$ y los del segundo diagrama $\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\gamma} = 2\delta_{\alpha\beta}$.

Calculemos ahora $F^{(2)}$. Puesto que $U(Q)$ es independiente de q_0 , la integración respecto a p'_0 se reduce a

$$\int_{-\infty}^{\infty} G^{(0)}(P') G^{(0)}(P_1 + P_2 - P') dp'_0/2\pi.$$

Sustituyendo aquí $G^{(0)}$ de (9.9) y utilizando la convergencia de la integral para $|p'_0| \rightarrow \infty$, cerramos el contorno de integración mediante una semicircunferencia infinita en un semiplano de la variable compleja p'_0 ; la integral es cero a no ser que los polos de las dos funciones $G^{(0)}$ caigan en semiplanos diferentes, es decir,

$$\operatorname{sgn}(p' - p_F) = \operatorname{sgn}(|\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'| - p_F). \quad (21.11)$$

El resultado es

$$\begin{aligned} F^{(2)}(\mathbf{P}_3, \mathbf{P}_4; \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2) \\ = - \int \frac{U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}') U(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_3) \operatorname{sgn}(p' - p_F)}{\omega_1 + \omega_2 + 2\mu - \frac{1}{2m} [\mathbf{p}'^2 + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}')^2] + i0 \cdot \operatorname{sgn}(p' - p_F)} \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3}, \end{aligned} \quad (21.12)$$

en donde $\omega_1 \equiv p_{10}$, $\omega_2 \equiv p_{20}$. Con objeto de satisfacer la condición (21.11) automáticamente, debemos sustituir en el numerador del integrando

$$\operatorname{sgn}(p' - p_F) \rightarrow 1 - \theta(\mathbf{p}') - \theta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'),$$

siendo $\theta(p)$ la función escalón (1.10).

Hemos visto en § 16 que una secuencia de diagramas escalera determina (en el vacío) la amplitud de scattering mutuo de dos partículas. De aquí que la expresión (21.12) contenga la corrección a los términos de primer orden de la amplitud de scattering. Puede tenerse en cuenta esta corrección sustituyendo en $F^{(1)}$ (21.8)

$$U(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1) \rightarrow -(4\pi/m) \operatorname{re} f(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_1).$$

en donde f es la amplitud de scattering† en el vacío, correcta hasta el segundo orden, y al mismo tiempo sustrayendo de la expresión $F^{(2)}$ (21.12) la parte real de su valor en el vacío, es decir para $p_F = 0, \mu = 0$ y los valores $\omega_1 = p_1^2/2m, \omega_2 = p_2^2/2m$ correspondientes a las energías de dos partículas reales en colisión (las líneas externas «físicas»).

† No ha de confundirse con la función de interacción de las cuasipartículas.

cas» del diagrama). Podemos sustituir entonces $-re f$ por el valor correspondiente a la energía cero, es decir, la longitud de scattering a .[†] Así tenemos, pues,

$$\begin{aligned} & F^{(2)}(P_3, P_4; P_1, P_2) \\ &= -\left(\frac{4\pi a}{m}\right)^2 \int \left\{ \frac{1 - \theta(p') - \theta(p_1 + p_2 - p')}{\omega_1 + \omega_2 + 2\mu - \frac{1}{2m}[p'^2 + (p_1 + p_2 - p')^2] + i0 \operatorname{sgn}(p' - p_F)} \right. \\ &\quad \left. - P \frac{2m}{p_1^2 + p_2^2 - p'^2 - (p_1 + p_2 - p')^2} \right\} \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (21.13)$$

El símbolo P del segundo término significa que la integral ha de tomarse como un valor principal; éste es el resultado de separar la parte real de la integral mediante la regla (8.11).

Como la expresión (21.13) es simétrica en P_1 y P_2 , las dos integrales de (21.10) son iguales y

$$[-i\Sigma(P)]_{c,d} = \int G^{(0)}(Q) F^{(2)}(P, Q; P, Q) d^4 Q / (2\pi)^4.$$

Cuando se sustituye el primer término desde (21.13), la integral respecto a q_0 es no nula si

$$\operatorname{sgn}(p' - p_F) = -\operatorname{sgn}(q - p_F), \quad (21.14)$$

de modo que los dos polos del integrando estén de nuevo en diferentes semiplanos de q_0 . Cuando el segundo término se sustituye a partir de (21.13), sólo depende de q_0 el factor $G_0(Q)$; la integración respecto a q_0 se lleva a cabo mediante la fórmula (7.23) y da $N^{(0)}(q)$, que es la función de distribución de partículas de un gas ideal es decir, la función escalón $\theta(q)$. Cuando se reúnen las contribuciones de todos los diagramas (21.1a), (21.1d), el resultado es

$$\Sigma(\omega, p) = (2\pi/m)n(\mu)a + \Sigma^{(2)}(\omega, p), \quad (21.15)$$

[†] Esta sustitución no pudo hacerse en (21.12) puesto que hubiese originado la divergencia de la integral para p' grande. Después de la sustracción mencionada, la integral converge (para $p' \sim p_F$) incluso con esta sustitución que es, por consiguiente, factible. Se realiza la sustracción de la parte real únicamente de la integral (y de acuerdo con ello se cambia U por $re f$) con objeto de evitar una dificultad concerniente a la parte imaginaria de la amplitud de dispersión o scattering. La razón es que, en el caso de impulsos pequeños, $re f$ se desarrolla en potencias pares del impulso y $im f$ en potencias impares (ver MC, § 132). De aquí que la inclusión de la dependencia de f con el impulso conduciría a correcciones de orden relativo $(p_F a)^2$, que son despreciables. La sustitución $U \rightarrow -4\pi f/m$ significará, no obstante, tener en cuenta la parte imaginaria de f , que lleva a correcciones del orden relativo $p_F a$.

en donde

$$\begin{aligned} & \Sigma^{(2)}(\omega, \mathbf{p}) \\ &= \left(\frac{4\pi a}{m}\right)^2 \int \left\{ \frac{[1 - \theta(\mathbf{p}') - \theta(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')] [\theta(\mathbf{q}) - \theta(\mathbf{p}')] }{\omega + \mu + \frac{1}{2m} [q^2 - p'^2 - (\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')^2] + i0 \cdot \text{sgn}(p' - p_F)} \right. \\ & \quad \left. - P \frac{2m\theta(\mathbf{q})}{p^2 + q^2 - p'^2 + (\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')^2} \right\} \frac{d^3 q d^3 p'}{(2\pi)^6}; \end{aligned} \quad (21.16)$$

el factor $\theta(\mathbf{q}) - \theta(\mathbf{p}')$ del numerador del primer término del integrando sustituye a $- \text{sgn}(q - p_F)$ con la condición (21.14).

En primer lugar observemos que Σ tiene una parte imaginaria. Se separa de (21.16) mediante la regla (8.11) y es

$$\begin{aligned} \text{im } \Sigma(\omega, \mathbf{p}) &= - \left(\frac{4\pi a}{m}\right)^2 \pi \int \{ \theta(\mathbf{q}) [1 - \theta(\mathbf{p}')] [1 - \theta(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')] \\ & \quad - [1 - \theta(\mathbf{q})] \theta(\mathbf{p}') \theta(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')] \} \delta \left[\omega + \mu + \frac{1}{2m} (q^2 - p'^2 - (\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}')^2) \right] \frac{d^3 q d^3 p'}{(2\pi)^6}; \end{aligned} \quad (21.17)$$

la expresión entre corchetes se transforma teniendo en cuenta que $\theta^2(\mathbf{p}) \equiv \theta(\mathbf{p})$.

Se calcula el espectro de energía de las cuasipartículas, de acuerdo con (14.13), en la forma

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} + \frac{2\pi}{m} n(\mu) a + \Sigma^{(2)} \left(\frac{p^2}{2m} - \mu, \mathbf{p} \right); \quad (21.18)$$

en $\Sigma^{(2)}$ podemos poner $\varepsilon \approx p^2/2m$ con la exactitud necesaria. El hecho de que Σ sea compleja significa que las excitaciones están amortiguadas ($\text{im } \varepsilon \neq 0$).

La presencia de este amortiguamiento expresa la inestabilidad de las cuasipartículas debido a la posibilidad de su desintegración real. Una cuasipartícula puede perder parte de su energía y dar origen así a un par de cuasipartículas (partícula y hueco). Consideremos, por ejemplo, el primer término entre corchetes del integrando de (21.17). A partir de las propiedades de la función escalón resulta que este término es no nulo si

$$p' > p_F, \quad |\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{p}'| > p_F, \quad q < p_F.$$

Estas desigualdades corresponden a procesos en los que una cuasipartícula con impulso inicial \mathbf{p} ($p > p_F$) entra en un estado \mathbf{p}' ($p > p' > p_F$) y el impulso $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$

se transmite a una partícula dentro de la esfera de Fermi (impulso $q < p_F$), que se excitan a un estado con impulso $\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{p}'$ fuera de la esfera de Fermi; dicha transición es equivalente a la aparición de dos nuevas excitaciones elementales con impulsos $-\mathbf{q}$ (hueco) y $\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{p}'$. La ley de conservación de la energía en este proceso se expresa por la función delta en (21.17), en la que $\omega + \mu$ actúa como la energía inicial de la cuasipartícula $\epsilon(\mathbf{p})$:

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon(\mathbf{p}') + [\epsilon(\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{p}') - \epsilon(\mathbf{q})];$$

aquí es suficiente poner $\epsilon(\mathbf{p}) = p^2/2m$ en la primera aproximación. De acuerdo con el significado mencionado, la energía $\epsilon(\mathbf{p})$ determinada por esta ecuación corresponde de hecho a una cuasipartícula fuera de la esfera de Fermi ($\epsilon > \mu$).

Análogamente, el segundo término entre corchetes en (21.17) es el resultado de procesos en los que se genera un par mediante un hueco. Este término da el amortiguamiento de excitaciones elementales con $\epsilon < \mu$. En el lenguaje de la técnica diagramática, está indicada la posibilidad de creación de un par mediante una cuasipartícula por la posibilidad de dividir el diagrama de la función G en dos partes cortando a través de tres líneas continuas, una de las cuales esté en sentido opuesto a las otras dos. En los diagramas (21.1c) y (21.1d) dichos cortes han de hacerse entre las dos líneas a trazos.

El caso de un gas ligeramente no ideal es especial (en comparación con el caso general de cualquier líquido de Fermi) porque el espectro de las cuasipartículas en él tiene significado para todos los valores de los impulsos y no sólo cerca de la superficie de Fermi: la desintegración de las cuasipartículas ($\text{im } \epsilon$) es relativamente pequeño, debido a que es relativamente pequeño el «parámetro de comportamiento gaseoso» ap_F . Sin embargo, ahora daremos únicamente el resultado final de los cálculos en el caso de las dos situaciones límites.

Cerca de la superficie de Fermi ($|p - p_F| \ll p_F$), encontramos

$$\text{re } \epsilon = \mu + (p - p_F)p_F/m^*,$$

con μ deducido de (6.14) y m^* de (6.17). En el caso de la desintegración de las cuasipartículas tenemos

$$\text{im } \epsilon = -\frac{1}{\pi m} (p_F a)^2 (p - p_F)^2 \text{sgn}(p - p_F). \quad (21.19)$$

La proporcionalidad entre esta expresión y $(p - p_F)^2$ tiene un origen obvio: un factor $p - p_F$ es la anchura de la región en el espacio de los impulsos (una corteza delgada) que contiene el impulso de la cuasipartícula después de haber creado un par y el otro factor $p - p_F$ es la anchura de la capa en la que se crea el par. Debe señalarse que estas consideraciones se aplican a cualquier líquido de Fermi (lo cual

conviene destacar), de modo que siempre tenemos $\text{im } \varepsilon \propto (p - p_F)^2$ cerca de la superficie de Fermi.[†]

En el caso de impulsos grandes $p \gg p_F$ (pero todavía $pa \ll 1$), resulta

$$\varepsilon = \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{2p_F^2}{3\pi m} p_F a \right) - i \frac{p_F p}{3\pi m} (p_F a)^2. \quad (21.20)$$

En ambos casos el cociente $\text{im } \varepsilon / \text{re } \varepsilon$ es pequeño. El valor máximo de este cociente se alcanza cuando $p \sim p_F$, pero incluso entonces se tiene $\sim (p_F a)^2 \ll 1$.

Finalmente, el valor de la constante de renormalización para la función de Green de un gas ligeramente no ideal se calcula del modo siguiente:

$$\frac{1}{Z} = 1 - \left[\frac{\partial \Sigma(\omega, \mathbf{p})}{\partial \omega} \right]_{\omega=0, \mathbf{p}=p_F}$$

siendo

$$Z = 1 - \frac{8 \log 2}{\pi^2} (p_F a)^2. \quad (21.21)$$

[†] A temperaturas no nulas, el promedio de esta magnitud respecto a la distribución térmica hace que la desintegración sea proporcional a T^2 , como se vio en § 1.

CAPÍTULO III

SUPERFLUIDEZ

§ 22. Excitaciones elementales en un líquido de Bose cuántico

Consideremos a continuación líquidos cuánticos con un espectro de energía de un tipo completamente distinto, que puede denominarse *espectro de Bose*.†

Este espectro tiene la propiedad de que las excitaciones elementales (que están ausentes en el estado fundamental del líquido) pueden aparecer y desaparecer aisladamente. Pero el momento angular o cinético de cualquier sistema mecánico cuántico (en este caso el líquido) sólo puede cambiar en un número entero. De aquí que las excitaciones elementales que aparecen aisladamente deben tener momentos angulares enteros y, por consiguiente, obedecen a la estadística de Bose. Cualquier líquido cuántico compuesto por partículas con spin entero (como el isótopo He⁴ líquido) deben ciertamente tener un espectro de este tipo.

Para comparación, conviene recordar que en un líquido de Fermi, descrito en función del espectro de excitaciones elementales, que están ausentes en el estado fundamental (ver el final de § 1), estas excitaciones sólo pueden aparecer y desaparecer por parejas. Esta es la razón por la cual las excitaciones elementales de este tipo de espectro pueden tener un spin semientero.

En un líquido cuántico de Bose las excitaciones elementales con impulsos p pequeños (longitud de onda larga en comparación con la distancia entre átomos) corresponden a ondas sonoras hidrodinámicas ordinarias, es decir, a fonones. Esto significa que la energía de dichas cuasipartículas es una función lineal de su impulso:

$$\varepsilon = up, \quad (22.1)$$

en donde u es la velocidad del sonido en el líquido. Esta última viene dada por la forma usual $u^2 = \partial P / \partial \rho$ y no es necesario especificar si la derivada se toma a tem-

† La teoría de estos líquidos cuánticos fue elaborada por L. D. Landau en los años 1940-1941, inmediatamente después del descubrimiento por P. L. Kapitza de la superfluidez del helio líquido. Estos descubrimientos formaron la base de la totalidad de la física moderna de los líquidos cuánticos.

peratura constante T o a entropía constante S , puesto que $S \rightarrow 0$ cuando $T \rightarrow 0$.[‡]

El número de excitaciones elementales en un líquido de Bose tiende a cero cuando $T \rightarrow 0$ y, a bajas temperaturas, cuando su densidad es suficientemente pequeña, las cuasipartículas pueden considerarse como no interactivas entre sí, es decir, como constituyendo un gas de Bose ideal. De aquí que la distribución de equilibrio estadístico de las excitaciones elementales de un líquido de Bose esté dada por la fórmula de la distribución de Bose (con potencial químico cero; cf. la última nota a pie de página en § 1)

$$n(\mathbf{p}) = [e^{\epsilon(\mathbf{p})/T} - 1]^{-1}. \quad (22.2)$$

Con esta distribución, y conociendo la función $\epsilon(p)$ para valores pequeños de p , podemos calcular las magnitudes termodinámicas para el líquido de temperaturas tan próximas al cero absoluto que prácticamente todas las excitaciones elementales presentes en el líquido tengan unas energías bajas, es decir, que sean fonones. Las fórmulas correspondientes pueden escribirse de modo inmediato a continuación mediante el empleo de las expresiones de las magnitudes termodinámicas de un sólido a temperaturas bajas (ver Parte 1, § 64). La única diferencia consiste en que, en lugar de las tres direcciones posibles de polarización del sonido en un sólido (una longitudinal y dos transversales), en un líquido sólo existe una (longitudinal) y de este modo todas las expresiones correspondientes a magnitudes termodinámicas hay que dividirlas por 3. Por ejemplo, la energía libre del líquido es

$$F = F_0 - V \cdot \pi^2 T^4 / 90(\hbar u)^3, \quad (22.3)$$

siendo F_0 la energía libre en el cero absoluto. La energía del líquido es

$$E = E_0 + V \cdot \pi^2 T^4 / 30(\hbar u)^3, \quad (22.4)$$

y el calor específico

$$C = V \cdot 2\pi^2 T^3 / 15(\hbar u)^3, \quad (22.5)$$

proporcional al cubo de la temperatura.

La relación (22.1) que nos da la dispersión de los fonones es únicamente válida si es grande la longitud de onda \hbar/p de las cuasipartículas en comparación con las distancias interatómicas. Cuando el impulso aumenta, la curva de $\epsilon(p)$ como es natural se desvía respecto a la forma lineal; su forma real depende de la ley de interacción particular de las moléculas del líquido y, por consiguiente, no puede determinarse de una forma general.

[‡] Se ha definido el concepto de fonón en la Parte 1, §§ 71 y 72, en el caso de las excitaciones elementales en los sólidos. Debe resaltarse que el impulso de una excitación elemental en un sistema microscópicamente homogéneo (un líquido) es el impulso real y no el cuasiimpulso como en el campo periódico de la red cristalina de un sólido.

En el helio líquido, la relación de dispersión de las excitaciones elementales tiene la forma indicada en la figura 2: después de un incremento lineal inicial, la función $\epsilon(p)$ alcanza un máximo, luego decrece y pasa a través de un mínimo para un cierto valor del impulso p_0 .[†] En el equilibrio térmico, la mayoría de las excitaciones elementales del líquido tienen energías cerca de los mínimos de $\epsilon(p)$, es decir, en la región de ϵ pequeña (cerca de $\epsilon = 0$) y en la región de $\epsilon(p_0)$. Por consiguiente, estas regiones son de una importancia particular. Cerca de $p = p_0$, la función $\epsilon(p)$ puede desarrollarse en potencias de $p - p_0$. No existe término lineal y tenemos hasta los términos de segundo orden

$$\epsilon = \Delta + (p - p_0)^2/2m^*, \quad (22.6)$$

en donde $\Delta = \epsilon(p_0)$ y m^* son constantes. Las cuasipartículas de este tipo se denominan *rotones*. Sin embargo, conviene resaltar que tanto los fonones como los rotones son cuasipartículas que corresponden sólo a diferentes partes de la misma curva y existe una transición continua de unas a otras.

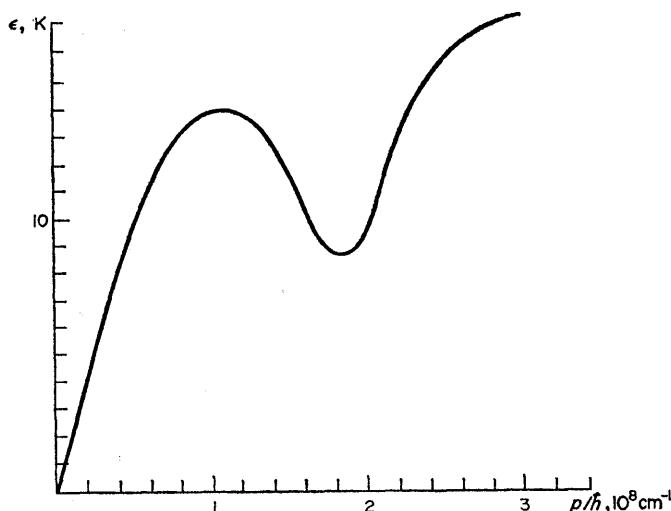


FIG. 2.

[†] Esta forma del espectro fue sugerida por primera vez por L. D. Landau (1947) a partir de un análisis de los resultados experimentales en los que se tuvieron en cuenta las magnitudes termodinámicas correspondientes al helio líquido; posteriormente fue confirmada mediante experimentos de dispersión de neutrones.

R. P. Feynman (1954) ha dado una teoría cualitativa de dicho espectro; ver la nota que sigue a (87.5).

Los valores empíricos de los parámetros del espectro de energía correspondientes al helio líquido (extrapolados a presión nula y densidad $\rho = 0,145 \text{ g/cm}^3$) son†

$$\left. \begin{aligned} u &= 2.4 \times 10^4 \text{ cm/s}, & \Delta &= 8.7 \text{ K}, \\ p_0/\hbar &= 1.9 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}, & m^* &= 0.16m (\text{He}^4). \end{aligned} \right\} \quad (22.7)$$

Puesto que la energía del rotón siempre incluye la cantidad Δ , que es grande en comparación con T a temperaturas suficientemente bajas para que haya de considerarse un «gas de rotones», este gas puede describirse mediante la distribución de Boltzmann en lugar de la distribución de Bose. De acuerdo con ello, para calcular la parte correspondiente a los rotones en las magnitudes termodinámicas del helio líquido podemos empezar con la fórmula que nos da la energía libre de un gas de Boltzmann:

$$F = -NT \log \frac{eV}{N} \int e^{-\epsilon/T} d\tau, \quad d\tau = d^3p/(2\pi\hbar)^3;$$

ver Parte 1, § 41. En esta fórmula, N ha de considerarse como el número de rotones en el líquido, que está determinado a su vez por la condición de equilibrio termodinámico, es decir por la condición de mínimo de energía libre. Igualando $\partial F/\partial N$ a cero, se tiene para el número de rotones

$$N_r = V \int e^{-\epsilon/T} d\tau, \quad (22.8)$$

que, como es natural, corresponde a la distribución de Boltzmann con potencial químico cero. El valor correspondiente de la energía libre es

$$F_r = -VT \int e^{-\epsilon/T} d\tau.$$

En estas fórmulas ha de sustituirse la expresión (22.6). Como $p_0^2 \gg m^*T$, al integrar respecto a p podemos sacar el factor p^2 fuera de la integral y sustituirlo por p_0^2 con suficiente exactitud. Al integrar la función exponencial podemos ampliar el intervalo de integración desde $-\infty$ hasta ∞ . El resultado es

$$N_r = \frac{2(m^*T)^{1/2} p_0^2 V}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3} e^{-\Delta/T}, \quad F_r = -TN_r. \quad (22.9)$$

De aquí que la contribución de los rotones a la entropía y al calor específico sea

$$S_r = N_r \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{T} \right), \quad C_r = N_r \left(\frac{3}{4} + \frac{\Delta}{T} + \frac{\Delta^2}{T^2} \right). \quad (22.10)$$

† El potencial químico del helio líquido a $T = 0$ es $\mu = -7,16^\circ\text{K}$.

Vemos que la dependencia con la temperatura de la parte debida a los rotones de las magnitudes termodinámicas es esencialmente exponencial. A temperaturas suficientemente bajas (por debajo de 0,8 °K aproximadamente en el caso del helio líquido), la parte debida a los rotones es, por consiguiente, menor que la atribuida a los fonones, mientras que a temperaturas altas se invierten las posiciones y es mayor la contribución de los rotones que la de los fonones.

§ 23. Superfluidez

Un líquido cuántico con un espectro de energía del tipo descrito anteriormente posee una notable propiedad conocida como *superfluidez*; es la propiedad de fluir a través de capilares estrechos o rendijas sin presentar viscosidad. Consideremos en primer lugar un líquido en el cero absoluto, a cuya temperatura el líquido está en su estado fundamental.

Consideremos un líquido que fluye a lo largo de un capilar con una velocidad constante v . Debido al rozamiento con las paredes del tubo y al rozamiento o fricción dentro del mismo líquido, la presencia de la viscosidad produciría el efecto de disipar la energía cinética del líquido y de este modo el flujo iría haciéndose cada vez más lento.

Será más conveniente estudiar el flujo en un sistema coordenado que se mueva con el líquido. En dicho sistema el helio líquido está en reposo y las paredes del capilar se mueven con velocidad $-v$. Si existe viscosidad, el líquido en reposo debe empezar a moverse también. Es físicamente evidente que el arrastre del líquido por las paredes del tubo no puede iniciar el movimiento global del líquido. El movimiento debe surgir de una excitación gradual de los movimientos internos, esto es, mediante la aparición de excitaciones elementales en el líquido.

Supongamos que en el líquido aparece una sola excitación elemental con impulso p y energía $\epsilon(p)$. Entonces la energía E_0 del líquido (en el sistema coordinado en el que inicialmente estaba en reposo) es igual a la energía ϵ de la excitación y su impulso P_0 es igual a p . Volvamos al sistema coordinado en el que está en reposo el capilar. De acuerdo con las fórmulas familiares de la mecánica para la transformación de la energía y del impulso, obtenemos para la energía E y el impulso P del líquido en este sistema

$$E = E_0 + \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} M v^2, \quad \mathbf{P} = [\mathbf{P}_0 + M\mathbf{v}], \quad (23.1)$$

siendo M la masa del líquido. Sustituyendo E_0 y \mathbf{P}_0 por ϵ y \mathbf{p} , tenemos

$$E = \epsilon + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} M v^2. \quad (23.2)$$

El término $\frac{1}{2}Mv^2$ es la energía cinética original del líquido que fluye; la expresión $\epsilon + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$ es la variación de energía debida a la aparición de la excitación. Esta

variación debe ser negativa, puesto que debe disminuir la energía del líquido móvil: $\varepsilon + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} < 0$.

En el caso de un valor dado de p , la cantidad que hay en el primer miembro de esta desigualdad es un mínimo cuando \mathbf{p} y \mathbf{v} son antiparalelos; así pues, debemos siempre considerar que $\varepsilon - pv < 0$, o sea,

$$v > \varepsilon/p. \quad (23.3)$$

Esta desigualdad debe satisfacerse para ciertos valores por lo menos del impulso p de la excitación elemental. De aquí que la condición final para que sea posible la presencia de excitaciones en el líquido cuando se mueve a lo largo del capilar, se obtiene hallando el mínimo de ε/p . Geométricamente el cociente ε/p es la pendiente de la recta dibujada desde el origen (en el plano $p\varepsilon$) hasta un punto determinado de la curva $\varepsilon(p)$. Su valor mínimo viene dado claramente por el punto en que la línea trazada desde el origen resulta tangente a la curva. Si este mínimo no es cero, entonces no pueden aparecer en el líquido excitaciones si las velocidades de flujo están por debajo de un cierto valor determinado. Esto significa que el líquido fluirá sin disminuir su velocidad, es decir, que el líquido presenta el fenómeno de superfluidez.

La condición que acabamos de deducir para la presencia de la superfluidez es equivalente esencialmente al requisito de que la curva $\varepsilon(p)$ no toque al eje de abscisas en el origen (ignorando la improbable posibilidad de que toque a este eje en algún otro punto). Así pues, cualquier espectro, en el que sean fonones las excitaciones suficientemente pequeñas, originará la superfluidez.

Consideremos a continuación el mismo líquido a una temperatura distinta del cero absoluto (pero próxima a él). En este caso el líquido contiene excitaciones y no está en su estado fundamental.

Los razonamientos dados anteriormente siguen siendo válidos, puesto que en ellos no se hizo uso directo del hecho de que el líquido estaba originalmente en el estado fundamental. Cuando se satisface la condición anterior, el movimiento del líquido respecto a las paredes del tubo siguen todavía sin poder originar la aparición de nuevas excitaciones elementales en él. Sin embargo, es necesario aclarar el efecto de las excitaciones ya presentes en el líquido.

Para esto, imaginemos que el «gas de cuasipartículas» se mueve como un todo respecto al líquido con una velocidad de traslación \mathbf{v} . Se obtiene la función de distribución correspondiente al gas que se mueve como un todo a partir de la función de distribución $n(\varepsilon)$ para el gas en reposo, sustituyendo la energía de una partícula ε por $\varepsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$, siendo \mathbf{p} el impulso de la partícula. En el caso de un gas ordinario esto es una consecuencia directa del principio de relatividad de Galileo, y se demuestra mediante un simple cambio de coordenadas, pero en el caso presente no pueden aplicarse directamente estos argumentos, puesto que el gas de cuasipartículas se está moviendo, no en el vacío sino «a través del líquido». Sin embargo, el enunciado sigue siendo válido como puede verse mediante el razonamiento siguiente.

Supongamos que el gas de excitaciones se está moviendo respecto al gas con velocidad \mathbf{v} . Tomemos un sistema coordenado con el gas globalmente en reposo y por tanto, con el líquido moviéndose con velocidad $-\mathbf{v}$ (sistema K). De acuerdo con la fórmula de transformación (23.1), la energía E del líquido en el sistema K está relacionada con la energía en el sistema K_0 , en donde el líquido está en reposo, por

$$E = E_0 - \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} M v^2.$$

Supongamos que en el líquido surge una excitación elemental de energía $\epsilon(p)$ en K_0 . Entonces la energía adicional del líquido en K es $\epsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$ y esto demuestra el enunciado.[†]

Así pues, el impulso total de gas de cuasipartículas por unidad de volumen es

$$\mathbf{P} = \int \mathbf{p} n(\epsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}) d\tau.$$

Admitamos que la velocidad \mathbf{v} es pequeña y desarrollemos el integrando en potencias de $\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$. El término de orden cero se anula al integrar respecto a las direcciones del vector \mathbf{p} , quedando

$$\mathbf{P} = - \int \mathbf{p} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}) \frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon} d\tau,$$

o sea, al promediar respecto a las direcciones de \mathbf{p} ,

$$\mathbf{P} = \frac{1}{3} \mathbf{v} \int \left(-\frac{dn}{d\epsilon} \right) p^2 d\tau. \quad (23.4)$$

En primer lugar se ve que el movimiento del gas de cuasipartículas está acompañado de una transferencia de masa: la masa efectiva por unidad de volumen del gas está determinada por el coeficiente de proporcionalidad entre el impulso \mathbf{P} y la velocidad \mathbf{v} en (23.4). Por otra parte, en el flujo de un líquido a lo largo (por ejemplo) de un capilar, no existe nada que impida que las cuasipartículas choquen con las paredes del tubo e intercambien impulso con ellas. En consecuencia, el gas de excitaciones verá disminuir su velocidad como cualquier gas ordinario que fluye por un capilar.

Así pues, tenemos el siguiente resultado fundamental. A temperaturas no nulas, parte de la masa del líquido se comportará como un líquido viscoso normal que se «pega» cuando se mueve a lo largo de las paredes del recipiente; la parte restante de la masa se comportará como un superfluido sin viscosidad. Aquí adquiere mucha

[†] En el caso de las cuasipartículas en un líquido de Bose, $n(\epsilon)$ es la distribución (22.2). Debe señalarse que la condición de superfluidez $v < \epsilon/p$ es necesaria para que $n(\epsilon - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v})$ sea positiva y finita en todas las energías.

importancia el que no exista rozamiento entre las dos partes de la masa del líquido cuando pasan «una a través de la otra», es decir que no exista transferencia de impulso de una parte a la otra. En efecto, la existencia de dicho movimiento de una parte de la masa del líquido respecto a la otra se ha deducido considerando el equilibrio estadístico de un gas de excitaciones en movimiento uniforme. Pero si puede presentarse cualquier movimiento relativo en un estado de equilibrio térmico, éste no viene acompañado de rozamiento.

Debe resaltarse que la consideración del líquido como una «mezcla» de «partes» normal y superfluidas es simplemente una forma de hablar que resulta conveniente para la descripción del fenómeno en un líquido cuántico. Como cualquier descripción de los efectos cuánticos en términos clásicos, ésta no es totalmente adecuada. No significa en absoluto que pueda separarse el líquido realmente en dos partes. En realidad debemos decir que en un líquido de Bose cuántico pueden existir simultáneamente dos movimientos, cada uno de los cuales tiene una «masa efectiva» correspondiente tal que la suma de estas dos masas es igual a la masa total real del líquido. Uno de estos movimientos es «normal», es decir, tiene las mismas propiedades que las de un líquido viscoso ordinario; la otra es «superfluida». Los dos movimientos se producen sin ninguna transferencia de impulso del uno al otro.

Así pues, en el sentido termodinámico la densidad de un líquido de Bose puede escribirse como una suma $\varrho = \varrho_n + \varrho_s$ de partes normal y superfluidas, correspondiendo a cada una de ellas una velocidad hidrodinámica v_n o v_s . Una propiedad importante del movimiento superfluido es que se trata de un flujo potencial:

$$\text{rot } v_s = 0. \quad (23.5)$$

Esta propiedad es la expresión macroscópica del hecho de que las excitaciones elementales con longitudes de onda largas (es decir, con impulsos pequeños) son cuantos de sonido (fonones). De aquí que la hidrodinámica macroscópica del movimiento superfluido no debe permitir otras vibraciones que las acústicas,[†] como se asegura por la condición (23.5); se considerará en §26[‡] la prueba de esta condición.

Cuando $T = 0$, la parte normal de la densidad es $\varrho_n = 0$; el líquido sólo puede tener movimiento superfluido. En el caso de temperaturas no nulas, ϱ_n viene dado por (23.4):

$$\varrho_n = \frac{1}{3} \int \left(-\frac{dn}{de} \right) p^2 d\tau. \quad (23.6)$$

[†] El líquido se supone infinito. Cuando existe una superficie libre, son también posibles ondas de capilaridad superficiales y esto conduce a una dependencia definida con la temperatura de la tensión superficial; ver problema 1.

[‡] En MF, capítulo XVI, se da una detallada descripción de la hidrodinámica de un superfluído.

Para calcular la contribución de los fonones a ϱ_n , haremos en (23.6) $\varepsilon = up$:

$$(\varrho_n)_{ph} = -\frac{1}{3u} \int_0^\infty \frac{dn}{dp} p^2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

y se obtiene al integrar por partes,

$$(\varrho_n)_{ph} = \frac{4}{3u} \int_0^\infty np \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{4}{3u^2} \int \varepsilon n d\tau.$$

El resto de la integral coincide con la energía del gas de fonones por unidad de volumen; tomado su valor de (22.4) tenemos finalmente

$$\begin{aligned} (\varrho_n)_{ph} &= 4E_{ph}/3u^2V \\ &= 2\pi^2 T^4 / 45\hbar^3 u^5. \end{aligned} \quad (23.7)$$

Para calcular la contribución de los rotones a ϱ_n obsérvese que, como los rotones pueden describirse mediante una distribución de Boltzmann, para ellos $dn/d\varepsilon = -n/T$ y según (23.6)

$$(\varrho_n)_r = \frac{1}{3T} \int p^2 n d\tau = \frac{\bar{p^2}}{3T} \frac{N_r}{V}.$$

Como $\bar{p^2} = p_0^2$ con suficiente exactitud, se tiene, tomando N_r de (22.9),

$$(\varrho_n)_r = \frac{p_0^2 N_r}{3TV} = \frac{2(m^*)^{1/2} p_0^4}{3(2\pi)^{3/2} T^{1/2} \hbar^3} e^{-\Delta/T}. \quad (23.8)$$

A temperaturas muy bajas, la contribución de los fonones a ϱ_n es grande en comparación con la contribución de los rotones. Resultan comparables a 0,6 °K aproximadamente y a temperaturas superiores predomina la contribución de los rotones.

Cuando aumenta la temperatura, se transforma en normal una fracción creciente de la masa del fluido. En el punto en que $\varrho_n = \varrho$ la propiedad de la superfluídez desaparece completamente. Este punto se denomina *punto λ* del líquido y es un punto de transición de fase de segundo orden.† Las fórmulas cuantitativas (23.7) y (23.8) son inaplicables, como es natural, cerca del punto λ , en donde resulta grande la concentración de cuasipartículas, de modo que incluso el propio concepto de cuasipartícula resulta casi carente de significado.

† El helio líquido se denomina *helio II* a temperaturas por debajo de este punto. Los puntos λ forman una curva en el diagrama de fases en el plano *PT*. Esta curva corta a la curva de equilibrio líquido-vapor a 2,19 °K.

También podemos considerar el comportamiento de los átomos de sustancias disueltas en helio líquido; se supone que la concentración de la impureza es tan baja que sus átomos puede considerarse que no interaccionan entre sí (L. D. Landau e I. Ya. Pomeranchuk 1948).

La presencia de un átomo extraño en el líquido da origen a una nueva rama del espectro de energía correspondiente al movimiento de este átomo a través del líquido; naturalmente, debido a la intensa interacción entre el átomo de impureza y los átomos del líquido, este movimiento es realmente un efecto colectivo en el que también toman parte los átomos del líquido. A este movimiento puede adscribirse un impulso conservado \mathbf{p} resultante. Así pues, aparecen cuasipartículas de un nuevo tipo en el líquido, cuyo número es igual al número de átomos de impureza y cuya energía $\varepsilon_{\text{imp}}(p)$ es una función definida del impulso. En el equilibrio térmico, la energía de estas cuasipartículas está concentrada cerca del mínimo más bajo de la función $\varepsilon_{\text{imp}}(p)$. En la práctica sólo nos suele interesar la impureza del isótopo He^3 y los resultados empíricos muestran que este mínimo está en $p = 0$; cerca de este punto la energía de la cuasipartícula es

$$\varepsilon_{\text{imp}}(p) = p^2/2m_{\text{imp}}^*, \quad (23.9)$$

con la masa efectiva m_{imp}^* igual a 2,8 veces la masa del átomo de He^3 .

Las cuasipartículas de las impurezas interactúan con los fonones y rotones cuando colisionan con ellos y, por consiguiente, pertenecen a la parte normal del líquido. Debido a su baja concentración, su distribución térmica es del tipo de Boltzmann y su contribución a ϱ_n , determinada a partir de (23.6), es

$$(\varrho_n)_{\text{imp}} = \frac{N_{\text{imp}}}{V} \frac{\overline{p^2}}{3T} = \frac{N_{\text{imp}}}{V} m_{\text{imp}}^*, \quad (23.10)$$

en donde N_{imp}/V es el número de átomos de impureza por unidad de volumen.

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Hallar la dependencia límite con la temperatura del coeficiente de tensión superficial α del helio líquido cerca del cero absoluto (K. R. Atkins 1953).

SOLUCIÓN. El coeficiente α es la energía libre por unidad de área de la superficie del líquido; ver Parte 1 (154.6). Se calcula como en la Parte 1 (64.1) en donde las frecuencias ω_a están relacionadas ahora con las vibraciones superficiales. En el caso bidimensional, el paso de suma a integración (respecto a los vectores de onda de las vibraciones) se efectúa incluyendo un factor $d^2k/(2\pi)^2$ o $2\pi k dk/(2\pi)^2$. La integración por partes da

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha_0 + T \int \log(1 - e^{-\hbar\omega/T}) k dk / 2\pi \\ &= \alpha_0 - \frac{\hbar}{4\pi} \int \frac{k^2 d\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1}, \end{aligned}$$

siendo α_0 la tensión superficial a $T = 0$. A temperaturas suficientemente bajas, sólo son importantes las vibraciones con frecuencias bajas (es decir, longitudes de onda largas). Dichas vibraciones son

ondas hidrodinámicas de capilaridad, para las cuales $\omega^2 = \alpha k^3/\rho \approx \alpha_0 k^3/\rho$ (siendo ρ la densidad del líquido). De aquí que

$$\alpha = \alpha_0 - \frac{\hbar}{4\pi} \left(\frac{\rho}{\alpha_0} \right)^{2/3} \int_0^\infty \frac{\omega^{4/3} d\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1};$$

puesto que la integral converge rápidamente, puede sustituirse el límite superior por infinito. El cálculo de la integral (ver la nota en Parte 1, § 58) da

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha_0 - \frac{T^{7/3} \rho^{2/3}}{4\pi\hbar^{1/3} \alpha_0^{2/3}} \Gamma(7/3) \zeta(7/3) \\ &= \alpha_0 - 0.13 T^{7/3} \rho^{2/3} / \hbar^{4/3} \alpha_0^{2/3}. \end{aligned}$$

Ésta se aplica al He^4 líquido a temperaturas tan bajas que puede considerarse como superfluida la totalidad de la masa del líquido.[†]

PROBLEMA 2. Hallar la relación de dispersión $\varepsilon_{\text{imp}}(\mathbf{p})$ para partículas de impureza en un superfluido si se conoce su forma $\varepsilon_{\text{imp}}^{(0)}(p)$ en un líquido en reposo (J. Bardeen, G. Baym y D. Pines 1967).

SOLUCIÓN. Después de la adición el líquido en reposo ($T = 0$) de un átomo de impureza con masa m e impulso \mathbf{p}_0 , la energía e impulso del líquido, en el sistema coordenado en que estaba originalmente en reposo, son respectivamente $E_0 = \varepsilon_{\text{imp}}^{(0)}(p_0)$, $\mathbf{P}_0 = \mathbf{p}_0$. En coordenadas tales que el líquido se esté moviendo con velocidad \mathbf{v}^2 tenemos según (23.1)

$$E = \varepsilon_{\text{imp}}^{(0)}(p_0) + \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2}(M+m)v^2, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_0 + (M+m)\mathbf{v}.$$

De aquí resulta que las variaciones de la energía e impulso del líquido móvil cuando se añade un átomo de impureza al mismo son

$$\varepsilon_{\text{imp}} = \varepsilon_{\text{imp}}^{(0)}(p_0) + \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2}mv^2, \quad \mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + m\mathbf{v}.$$

Expresando ε_{imp} en función de \mathbf{p} , se tiene

$$\varepsilon_{\text{imp}}(\mathbf{p}) = \varepsilon_{\text{imp}}^{(0)}(\mathbf{p} - m\mathbf{v}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{2}mv^2.$$

En el caso de \mathbf{v} pequeña, y hasta términos del primer orden, con un espectro de la forma (23.9), resulta

$$\varepsilon_{\text{imp}}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_{\text{imp}}^*} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} \left(1 - \frac{m}{m_{\text{imp}}^*} \right).$$

§ 24. Fonones en un líquido

Cuando pasamos de la descripción clásica de las ondas sonoras al concepto cuántico de los fonones, se sustituyen las magnitudes hidrodinámicas (densidad,

[†] En un líquido de Fermi (He^3 líquido) no existen ondas de capilaridad del tipo considerado (como las ondas de volumen del sonido ordinario), puesto que la viscosidad aumenta sin límite cuando $T \rightarrow 0$.

velocidad del líquido, etc.) por operadores que puedan expresarse en función de los operadores de aniquilación y creación de fonones \hat{c}_k, \hat{c}_k^+ . Deduciremos a continuación estas expresiones.

En primer lugar, recordemos que en la descripción clásica de una onda sonora la densidad del líquido sufre pequeñas oscilaciones cuyas frecuencias y vectores de onda están relacionados por $\omega = uk$. La velocidad \mathbf{v} del líquido es una cantidad del mismo orden de magnitud que la parte variable $\varrho' = \varrho - \varrho_0$ de la densidad (en donde ϱ_0 es el valor de equilibrio de la densidad). El movimiento del líquido en la onda corresponde a un flujo potencial, es decir, puede describirse mediante un potencial de velocidad escalar que determina la velocidad de acuerdo con la expresión

$$\mathbf{v} = \nabla\phi. \quad (24.1)$$

La velocidad y la densidad están relacionadas entre sí por la ecuación de continuidad $\partial\varrho'/\partial t = -\operatorname{div}(\varrho\mathbf{v}) \approx -\varrho_0 \operatorname{div} \mathbf{v}$, o

$$\partial\varrho'/\partial t = -\varrho_0 \Delta \phi. \quad (24.2)$$

La energía del líquido en la onda sonora viene dada por la integral

$$E = \int \left(\frac{1}{2} \varrho_0 \mathbf{v}^2 + u^2 \varrho'^2 / 2\varrho_0 \right) d^3x. \quad (24.3)$$

El primer término del integrando es la densidad de energía cinética mientras que el segundo es la densidad de energía interna; ambas dependen del cuadrado de las pequeñas cantidades \mathbf{v} y ϱ' .

El procedimiento de cuantización siguiente podría llevarse a efecto de un modo totalmente igual al que se utiliza en el caso de los fonones en los cristales sólidos (ver Parte 1, § 72). Sin embargo, emprenderemos una ruta ligeramente diferente, que ilustra algunos puntos muy instructivos de la metodología a seguir. Consideremos en primer lugar los operadores de la velocidad y densidad del líquido en función de variables microscópicas, las coordenadas de las partículas.

En la teoría clásica, la densidad ϱ y la densidad de flujo másico \mathbf{j} del líquido pueden escribirse como sumas

$$\varrho(\mathbf{r}) = \sum_a m_a \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}), \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_a \mathbf{p}_a \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}),$$

extendidas a todas las partículas, siendo \mathbf{r}_a y \mathbf{p}_a los vectores de posición y los impulsos de las partículas. Las integrales de estas funciones sobre un volumen cualquiera dan la masa total y el impulso total del líquido en dicho volumen. Cuando pasamos

a la teoría cuántica, se sustituyen estas funciones por los operadores correspondientes. El operador densidad tiene la misma forma:

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_a m_a \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}); \quad (24.4)$$

el operador densidad de corriente es

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_a \{ \hat{\mathbf{p}}_a \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}}_a \}, \quad (24.5)$$

siendo $\hat{\mathbf{p}}_a = -i\hbar\nabla_a$ el operador impulso de la partícula.[†]

Obtengamos la regla de conmutación para los operadores $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})$ y $\hat{\rho}(\mathbf{r}')$ tomados en los puntos \mathbf{r} y \mathbf{r}' : por brevedad, consideraremos sólo un término de las sumas (24.4) y (24.5), puesto que los operadores correspondientes a diferentes partículas comutan. En el desarrollo del conmutador, los operadores de la forma $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})\nabla_1\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}')$ se transforman del modo siguiente:

$$\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})\nabla_1\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})(\nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) + \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}')\nabla_1,$$

en el primer sumando, $\nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ designa simplemente el gradiente de la función delta; debido a la presencia del factor $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})$, podemos sustituir $\nabla_1\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}')$ por $\nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ en dicho término. El resultado es

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\hat{\rho}(\mathbf{r}') - \hat{\rho}(\mathbf{r}')\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = -i\hbar\hat{\rho}(\nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')). \quad (24.6)$$

A continuación, en lugar de $\hat{\mathbf{j}}$ utilicemos el operador de la velocidad del líquido $\hat{\mathbf{v}}$, definido por

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{1}{2} (\hat{\rho}\hat{\mathbf{v}} + \hat{\mathbf{v}}\hat{\rho}).$$

La regla de conmutación para los operadores $\hat{\rho}$ y $\hat{\mathbf{v}}$ queda determinada por el requisito de que se obtenga la expresión (24.6) para el conmutador de $\hat{\rho}$ y $\hat{\mathbf{j}}$. Se comprueba fácilmente que para conseguir este resultado debemos poner

$$\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r})\hat{\rho}(\mathbf{r}') - \hat{\rho}(\mathbf{r}')\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = -i\hbar(\nabla\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')),$$

[†] Por sencillez supongamos que el sistema se compone de una sola partícula. Promediando el operador $\hat{\rho}(\mathbf{r}) = m\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r})$ sobre el estado con función de onda $\psi(\mathbf{r}_1)$ se tiene $\int \psi^*(\mathbf{r}_1)\hat{\rho}\psi(\mathbf{r}_1)d^3x_1 = m |\psi(\mathbf{r})|^2$ como debería ser. Análogamente, promediando el operador $\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})$ se tiene la expresión correcta para la densidad de corriente

$$(\hbar/2i)\{\psi^*(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r})\nabla\psi^*(\mathbf{r})\}.$$

utilizando la evidente comutatividad de los operadores $\hat{\varrho}(\mathbf{r})$ y $\hat{\varrho}'(\mathbf{r}')$. Finalmente poniendo $\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = \nabla\hat{\phi}(\mathbf{r})$, se tiene la regla de conmutación para los operadores de densidad y del potencial de la velocidad:

$$\hat{\phi}(\mathbf{r})\hat{\varrho}'(\mathbf{r}') - \hat{\varrho}'(\mathbf{r}')\hat{\phi}(\mathbf{r}) = -i\hbar\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'); \quad (24.7)$$

como es natural ahora debemos sustituir $\hat{\varrho}$ por el operador $\hat{\varrho}' = \hat{\varrho} - \varrho_0$ de la parte variable de la densidad. La regla (24.7) es análoga a la de los operadores de las coordenadas e impulsos de las partículas; en este sentido, ϱ' y ϕ actúan aquí como «coordenadas» e «impulsos» generalizados canónicamente conjugados.

Habiendo utilizado las expresiones (24.4) y (24.5) para establecer la regla (24.7), podemos ahora escribir los operadores $\hat{\phi}$ y $\hat{\varrho}'$ en la representación de la segunda cuantización (es decir, expresarlos en función de los operadores de aniquilación y creación de fonones), con el requisito de que satisfagan la regla (24.7). Para ello, escribamos

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} (A_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + A_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}})$$

con coeficientes $A_{\mathbf{k}}$ todavía sin determinar; la suma se extiende a todos los valores del vector de onda que son posibles en el caso de un líquido con un volumen grande pero finito V .† Los operadores $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ y $\hat{c}_{\mathbf{k}}^+$ satisfacen las reglas de conmutación de Bose

$$\hat{c}_{\mathbf{k}}\hat{c}_{\mathbf{k}'}^+ - \hat{c}_{\mathbf{k}'}^+\hat{c}_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{kk}'} \quad (24.8)$$

Para posterior referencia, los elementos no nulos de la matriz de estos operadores son

$$\langle n_{\mathbf{k}} - 1 | \hat{c}_{\mathbf{k}} | n_{\mathbf{k}} \rangle = \langle n_{\mathbf{k}} | \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ | n_{\mathbf{k}} - 1 \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}}}, \quad (24.9)$$

siendo $n_{\mathbf{k}}$ los números de ocupación de los estados de fonones.

Sin embargo, posteriormente se necesitará no el operador de Schrödinger $\hat{\phi}(\mathbf{r})$ sino el operador de Heisenberg $\hat{\phi}(t, \mathbf{r})$. Éste se obtiene a partir de $\hat{\phi}(\mathbf{r})$ incluyendo simplemente los factores $\exp(\pm i\omega t)$ con frecuencias $\omega = uk$ en cada término de la suma

$$\hat{\phi}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} (A_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - k\omega t)} + A_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - k\omega t)});$$

† A diferencia de los operadores ψ de las partículas, el operador de la magnitud real ϕ es hermítico y contiene tanto operadores de creación como operadores de destrucción de fonones. Esta propiedad (como la propiedad correspondiente de los operadores de campo en la electrodinámica cuántica) se debe a la no conservación del número de «partículas» en el campo de fonones.

cf. el comentario de interés en este punto dado al principio del § 9 sobre los operadores ψ . El operador densidad $\hat{\varrho}'(t, \mathbf{r})$ debe estar relacionado con $\hat{\phi}(t, \mathbf{r})$ por (24.2) y, por consiguiente, viene dado por una suma semejante con factores $iA_k\varrho_0k/u$ en lugar de A_k . Los factores A_k deben determinarse entonces de modo que satisfagan la regla de conmutación (24.7). Esto nos da las siguientes expresiones finales:

$$\left. \begin{aligned} \hat{\phi}(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar u}{2V\varrho_0 k} \right)^{1/2} (\hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - ukt)} + \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - ukt)}), \\ \hat{\varrho}'(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} i \left(\frac{\varrho_0 \hbar k}{2V u} \right)^{1/2} (\hat{c}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - ukt)} - \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - ukt)}). \end{aligned} \right\} \quad (24.10)$$

En efecto, al sustituir estas expresiones a la izquierda de (24.7) y al utilizar (24.8), se obtiene la función delta requerida:

$$\begin{aligned} &-i\hbar \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ - \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}}) e^{i(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'))} \\ &= -\frac{i\hbar}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'))} \rightarrow -\frac{i\hbar}{V} \int e^{i(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'))} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} = -i\hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned}$$

También es fácil ver que el hamiltoniano del líquido, obtenido al sustituir $\hat{\mathbf{v}} = \nabla \hat{\phi}$ y $\hat{\varrho}'$ en lugar de \mathbf{v} y ϱ' en la integral (24.3), tiene la forma

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} u\hbar k (\hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}),$$

como es lógico; sus valores propios son $\sum u\hbar k (n_k + \frac{1}{2})$, de acuerdo con el concepto de fonones que tienen las energías $\varepsilon = u\hbar k$.

La expresión (24.3) correspondiente a la energía de un líquido en una onda sonora se compone de los primeros términos (después del orden cero) de un desarrollo de la expresión exacta

$$E = \int [\frac{1}{2} \varrho \mathbf{v}^2 + \varrho e(\varrho)] d^3 x,$$

en donde $e(\varrho)$ es la energía interna del líquido por unidad de masa. Esta integral, si sustituimos \mathbf{v} y ϱ por los operadores $\hat{\mathbf{v}} = \nabla \hat{\phi}$ y $\hat{\varrho} = \varrho_0 + \hat{\varrho}'$, con $\hat{\phi}$ y $\hat{\varrho}'$ tomados de (24.14), actúa como el hamiltoniano exacto del líquido:

$$\hat{H} = \int [\frac{1}{2} \hat{\mathbf{v}} \cdot \varrho \hat{\mathbf{v}} + \hat{\varrho} e(\hat{\varrho})] d^3 x; \quad (24.11)$$

el operador de energía cinética se escribe en la forma simetrizada $\frac{1}{2} \hat{\mathbf{v}} \cdot \varrho \hat{\mathbf{v}}$, de modo que ha de ser hermítico. Aquí resulta importante el que ϱ y ϕ sean «coordenadas e impulsos generalizados» canónicamente conjugados, en función de los cuales debe

expresarse el hamiltoniano. Esto puede verse si se tiene en cuenta que es exacta la regla de conmutación (24.7) satisfecha por los operadores (24.10); en su deducción no se ha utilizado el hecho de que las oscilaciones fuesen pequeñas.

Los términos de grado superior (tercero, etc.) del desarrollo de este hamiltoniano representan la anarmonicidad de las vibraciones sonoras, es decir, en función de la descripción de fonones, describen la interacción de los fonones. Tienen elementos de matriz no nulos en el caso de transiciones con modificación simultánea de los números de ocupación de varios fonones y actúan así como una perturbación que origina diversos procesos de dispersión o scattering y desintegración. Los elementos matriciales de los operadores c_k y c_k^+ tienen como es natural la forma previa (24.9) puesto que la representación utilizada (como siempre en la teoría de perturbaciones) es aquélla en la que el hamiltoniano sin perturbar es diagonal. Los términos de tercer y cuarto órdenes son

$$\hat{H}^{(3)} = \int \left[\frac{1}{2} \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\varrho}' \hat{\mathbf{v}} + \left(\frac{d}{d\varrho_0} \frac{u^2}{\varrho_0} \right) \frac{\hat{\varrho}'^3}{6} \right] d^3x, \quad (24.12)$$

$$\hat{H}^{(4)} = \frac{1}{24} \left(\frac{d^2}{d\varrho_0^2} \frac{u^2}{\varrho_0} \right) \int \hat{\varrho}'^4 d^3x. \quad (24.13)$$

§ 25. Gas de Bose casi ideal degenerado

Las propiedades fundamentales del espectro de energía tipo Bose resultan claras a partir del modelo de un gas de Bose ligeramente no ideal a una temperatura casi cero. En la presente sección se considerará este modelo del mismo modo que se consideró en § 6 en el caso de un gas de Fermi.[†] También se aplica aquí la totalidad de la discusión realizada en § 6 relacionada con las características generales de los modelos de un gas casi ideal degenerado. En particular, la condición de ser sólo ligeramente no ideal [de modo que el parámetro gaseoso $a(N/V)^{1/3} \ll 1$, siendo a la longitud de scattering] puede ponerse de nuevo en la forma de la condición (6.1) es decir el impulso de la partícula es pequeño: $pa/\hbar \ll 1$.[‡]

El hamiltoniano del sistema de bosones (supuestos sin spin) que interaccionan en parejas difiere de (6.6) sólo por la ausencia de los subíndices de spin:

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \sum \langle \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2 | U | \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \rangle \hat{a}_{\mathbf{p}'_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}'_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}, \quad (25.1)$$

[†] El método dado a continuación se debe a N. N. Bogolyubov (1947). Su aplicación al gas de Bose fue la primera deducción microscópica consistente del espectro de energía de los «líquidos cuánticos».

[‡] Veremos a continuación que en un gas degenerado de Bose, la mayoría de las partículas (fuera del «condensado») tienen impulsos $p \sim \hbar \sqrt{a N / V}$, para los que esta desigualdad ciertamente se satisface.

con la suma extendida a todos los impulsos que aparecen como subíndices. Los operadores de aniquilación y creación de partículas obedecen ahora las reglas de conmutación

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ - \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} = 1.$$

Como en § 6, hagamos de nuevo la hipótesis de que son pequeños los impulsos y sustituymos todos los elementos de matriz en (25.1) por sus valores en el caso de impulsos cero; entonces

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{U_0}{2V} \sum \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}. \quad (25.2)$$

El punto de partida para la aplicación de la teoría de perturbaciones a este hamiltoniano es el hecho siguiente. En el estado fundamental de un gas ideal de Bose, todas las partículas están en el condensado, es decir, en el estado de energía cero; los números de ocupación son $N_{\mathbf{p}=0} \equiv N_0 = N$, $N_{\mathbf{p}} = 0$ para $\mathbf{p} \neq 0$ (ver Parte 1, § 62). En un gas casi ideal, en el estado fundamental y en los estados débilmente excitados, los números $N_{\mathbf{p}}$ no son cero, pero son muy pequeños en comparación con los números macroscópicamente grandes N_0 . El hecho de que la cantidad $\hat{a}_0^+ \hat{a}_0 = N_0 \approx N$ sea muy grande en comparación con la unidad significa que la expresión

$$\hat{a}_0 \hat{a}_0^+ - \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 = 1$$

es pequeña comparada con los propios \hat{a}_0 y \hat{a}_0^+ , que pueden considerarse por tanto como números ordinarios (iguales a $\sqrt{N_0}$), despreciándose su no conmutatividad.

La aplicación de la teoría de perturbaciones ahora significa formalmente el desarrollo de la suma cuádruple en (25.2) en potencias de las pequeñas cantidades $\hat{a}_{\mathbf{p}}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ (\mathbf{p} \neq 0)$. El término de orden cero del desarrollo es

$$\hat{a}_0^+ \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 \hat{a}_0 = a_0^4. \quad (25.3)$$

Los términos de primer orden son nulos (puesto que no pueden satisfacer la ley de conservación del impulso). Los términos de segundo orden son

$$a_0^2 \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ + 4 \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}). \quad (25.4)$$

Tomando únicamente los términos de segundo orden, podemos reemplazar $a_0^2 = N_0$ en (25.4) por el número total de partículas N . En (25.3) debe utilizarse la relación más exacta

$$a_0^2 + \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} = N$$

La suma de (25.3) y (25.4) es entonces

$$N^2 + N \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ + 2\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}),$$

y al sustituir en (25.2) se obtiene la siguiente expresión para el hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{N^2}{2V} U_0 + \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{N}{2V} U_0 \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ + 2\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}). \quad (25.5)$$

El primer término de esta expresión da, en primera aproximación, la energía E_0 del estado fundamental del gas y su derivada respecto a N el potencial químico μ a $T = 0$:

$$E_0 = N^2 U_0 / 2V, \quad \mu = N U_0 / V. \quad (25.6)$$

Los términos restantes en (25.5) dan la corrección a E_0 y el espectro de los estados débilmente excitados del gas.

La integral U_0 en (25.5) ha de expresarse todavía en función de una magnitud física real, la longitud de scattering a . En los términos de segundo orden esto puede hacerse directamente a partir de la fórmula (6.2): $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$. Sin embargo, en el primer término se necesita la fórmula más exacta (6.5), la cual tiene en cuenta la segunda aproximación de Born a la amplitud de scattering. Aquí estamos considerando la colisión de dos partículas en el condensado y de acuerdo con ello en la suma de (6.5) debemos poner $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $\mathbf{p}'_1 = -\mathbf{p}'_2 \equiv \mathbf{p}$, de modo que

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \left(1 + \frac{4\pi\hbar^2 a}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{1}{p^2} \right).$$

Al sustituir en (25.5) tenemos para el hamiltoniano

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} \frac{N^2}{V} \left(1 + \frac{4\pi\hbar^2 a}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \frac{1}{p^2} \right) \\ &+ \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{-\mathbf{p}} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}}^+ + 2\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}) + \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (25.7)$$

Para determinar los niveles de energía, debemos poner el hamiltoniano en su forma diagonal; esto puede hacerse mediante una transformación lineal adecuada de los operadores $\hat{a}_{\mathbf{p}}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$. Con los nuevos operadores $b_{\mathbf{p}}$ y $b_{\mathbf{p}}^+$ definidos por

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}} b_{-\mathbf{p}}^+, \quad \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ = u_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^+ + v_{\mathbf{p}} b_{-\mathbf{p}},$$

y la exigencia de que satisfagan las mismas relaciones de conmutación

$$\hat{b}_p \hat{b}_{p'} - \hat{b}_{p'} \hat{b}_p = 0, \quad \hat{b}_p \hat{b}_{p'}^+ - \hat{b}_{p'}^+ \hat{b}_p = \delta_{pp'}$$

que los \hat{a}_p y \hat{a}_p^+ (se ve fácilmente que para ello debe cumplirse que $u_p^2 - v_p^2 = 1$), podemos escribir la transformación lineal como

$$\hat{a}_p = \frac{\hat{b}_p + L_p \hat{b}_{-p}^+}{\sqrt{(1 - L_p^2)}}, \quad \hat{a}_p^+ = \frac{\hat{b}_p^+ + L_p \hat{b}_{-p}}{\sqrt{(1 - L_p^2)}}. \quad (25.8)$$

La magnitud L_p debe definirse de modo que elimine del hamiltoniano los términos no diagonales $\hat{b}_p \hat{b}_{-p}$ and $\hat{b}_p^+ \hat{b}_{-p}^+$. cálculo simple de

$$L_p = \frac{1}{mu^2} \left\{ \varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - mu^2 \right\}, \quad (25.9)$$

con la notación

$$\varepsilon(p) = [u^2 p^2 + (p^2/2m)^2]^{1/2}, \quad (25.10)$$

$$u = (4\pi\hbar^2 a N / m^2 V)^{1/2}. \quad (25.11)$$

El hamiltoniano es entonces

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{p \neq 0} \varepsilon(p) \hat{b}_p^+ \hat{b}_p, \quad (25.12)$$

en donde

$$E_0 = \frac{1}{2} Nmu^2 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \left\{ \varepsilon(p) - \frac{p^2}{2m} - mu^2 + \frac{m^3 u^4}{p^2} \right\}. \quad (25.13)$$

La forma del hamiltoniano y las relaciones de conmutación de Bose para los operadores \hat{b}_p , \hat{b}_p^+ nos permite obtener la conclusión de que b_p^+ y b_p son operadores de creación y aniquilación para cuasipartículas con energía $\varepsilon(p)$ que obedecen a la estadística de Bose. Los valores propios del operador diagonal $\hat{b}_p^+ \hat{b}_p$ representan los números n_p de cuasipartículas con impulso p y la fórmula (25.10) da la dependencia existente entre su energía y el impulso. (Se designan de nuevo los números de ocupación de las cuasipartículas mediante n_p para evitar confusiones con los números de ocupación N_p de las partículas reales del gas.) Esto determina por completo el espectro de energía de los estados débilmente excitados del gas en cuestión.

La magnitud E_0 es la energía del estado fundamental del gas. Sustituyendo la

suma respecto a valores discretos de \mathbf{p} (en el volumen V) por la integración respecto a $Vd^3p/(2\pi\hbar)^3$ y completando los cálculos se obtiene la expresión

$$E_0 = \frac{2\pi\hbar^2aN^2}{mV} \left[1 + \frac{128}{15} \sqrt{\frac{a^3N}{\pi V}} \right] \quad (25.14)$$

(T. D. Lee y C. N. Yang 1957). El potencial químico del gas (a $T = 0$) es en correspondencia

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} = \frac{4\pi\hbar^2aN}{mV} \left[1 + \frac{32}{3} \sqrt{\frac{a^3N}{\pi V}} \right]. \quad (25.15)$$

Estas fórmulas dan los dos primeros términos de un desarrollo en potencias de $(a^3N/V)^{1/2}$. Sin embargo, ni siquiera el término siguiente puede obtenerse por el método anterior. Debe contener el volumen en la forma V^{-2} y una magnitud de este orden depende tanto de triples colisiones como de colisiones por pares.

En el caso de impulsos grandes ($p \gg mu$) la energía de la cuasipartícula (25.10) tiende a $p^2/2m$, es decir a la energía cinética de una partícula individual de gas.

En el caso de impulsos pequeños ($p \ll mu$) tenemos $\varepsilon \approx up$. Es fácil ver que el coeficiente u coincide con la velocidad del sonido en el gas, de modo que esta expresión corresponde a fonones de acuerdo con los teoremas generales de § 22. A $T = 0$, la energía libre es igual a E_0 ; tomando el término principal del desarrollo de esta última, encontramos la presión

$$P = -\partial E/\partial V = 2\pi\hbar^2aN^2/mV^2.$$

La velocidad del sonido es $u = \sqrt{\partial P/\partial \varrho}$ en donde $\varrho = mN/V$ es la densidad del gas; es la misma velocidad que (25.11).

En el modelo de gas de Bose que estamos considerando, la longitud de scattering debe ser necesariamente positiva (en el caso de una interacción repulsiva entre partículas). Esto puede verse formalmente teniendo en cuenta que si $a < 0$ debería aparecer en las fórmulas anteriores términos imaginarios. El significado termodinámico de la condición $a > 0$ es que resulta necesaria para satisfacer la desigualdad $(\partial P/\partial V)_T < 0$ en este modelo de un gas de Bose.

La distribución estadística de las excitaciones elementales (los valores medios n_p de sus números de ocupación) a una temperatura no nula viene dada simplemente por la fórmula de la distribución de Bose (22.2). La distribución de los impulsos N_p de las partículas de gases reales puede calcularse promediando el operador $\hat{a}_p^+ \hat{a}_p^-$. Utilizando (25.8) y el hecho de que los productos $\hat{b}_{-p} \hat{b}_p$ y $\hat{b}_p^+ \hat{b}_{-p}^+$ tienen elementos de matriz diagonales cero, se obtiene

$$\bar{N}_p = [\bar{n}_p + L_p^2(\bar{n}_p + 1)]/(1 - L_p^2). \quad (25.16)$$

Esta expresión resulta naturalmente válida sólo si $p \neq 0$. El número de partículas con impulso cero es

$$\bar{N}_0 = N - \sum_{p \neq 0} \bar{N}_p = N - \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int \bar{N}_p d^3 p. \quad (25.17)$$

En particular en el cero absoluto todos los $n_p = 0$ y con (25.9) obtenemos a partir de (25.16) la función de distribución en la forma†

$$N_p = \frac{m^2 u^4}{2\varepsilon(p)\{\varepsilon(p) + p^2/2m + mu^2\}}; \quad (25.18)$$

cuando $T = 0$, los valores medios de N_p son los mismos que los valores exactos y, por consiguiente, se omite la barra sobre la letra. La falta de idealidad del gas de Bose produce naturalmente la presencia de partículas con impulso no nulo incluso en el cero absoluto; la integración en (25.17) con N_p de (25.18) es elemental y da

$$N_0 = N \left[1 - \frac{8}{3} \sqrt{\frac{Na^3}{\pi V}} \right]. \quad (25.19)$$

Finalmente hagamos un comentario sobre el espectro deducido aquí. Para p pequeño, la derivada $d^2\varepsilon/dp^2 > 0$, es decir la curva de $\varepsilon(p)$ gira hacia arriba a partir de la tangente inicial $\varepsilon = up$. En este caso (ver § 34) existe una inestabilidad del espectro debido a la posibilidad de desintegración espontánea de las cuasipartículas (fonones). Sin embargo, la anchura del nivel correspondiente es pequeña (proporcional a p^5 cuando p es pequeño) y no influye en las expresiones deducidas mediante las aproximaciones consideradas anteriormente.

§ 26. Función de onda del condensado

Como ya se mencionó en § 23, la aparición o desaparición de la superfluidez en el helio líquido tiene lugar mediante una transición de fase de segundo orden. En una transición de esta clase interviene siempre alguna variación cualitativa de las propiedades del cuerpo. En el punto λ del helio líquido este cambio puede describirse macroscópicamente como la aparición o desaparición del componente superfluido del líquido. Desde el punto de vista microscópico más profundo es debido a ciertas propiedades de la distribución de los impulsos de las partículas del líquido (reales): en un superfluido una fracción finita de las partículas (es decir, un número macroscópicamente grande de ellas) tiene un impulso exactamente cero;

† El número máximo de partículas con un valor del impulso dado ($\sim p^2 N_p$) se presenta para $p/\hbar \sim \sqrt{aN/V}$, en donde la variación tiene lugar desde una expresión límite para $\varepsilon(p)$ a la otra. Esto ya se ha mencionado en la segunda nota a § 25.

estas partículas forman el *condensado de Bose-Einstein*, o simplemente el condensado en el espacio de los impulsos. En un gas de Bose ideal a $T = 0$, todas sus partículas están en el condensado (ver Parte 1, § 62); en un gas casi ideal, casi todas las partículas están en el condensado. En el caso general de un líquido de Bose con una interacción fuerte entre las partículas, la fracción de partículas que están en el condensado a $T = 0$ no es próxima a la unidad.

Mostraremos ahora cómo se formula la propiedad de la condensación de Bose-Einstein en función de operadores ψ . En el caso de un gas de Bose ideal (un sistema de bosones no interactivos), el operador ψ de Heisenberg se escribe explícitamente en la forma†

$$\Psi(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t \right\}. \quad (26.1)$$

Como se explicó en § 25, podemos ignorar la no commutatividad de los operadores \hat{a}_0 y \hat{a}_0^+ , considerándolos como magnitudes clásicas. En otras palabras, parte del operador ψ (26.1) es un número ordinario, que llamamos Ξ :

$$\hat{\Xi} = \hat{a}_0 / \sqrt{V}. \quad (26.2)$$

Para formular esta propiedad de los operadores ψ en el caso general de un líquido de Bose arbitrario, obsérvese que, como el condensado contiene un número de partículas macroscópicamente grande, el modificar este número en una unidad no influye esencialmente sobre el estado del sistema; podemos decir que el resultado de añadir (o eliminar) una partícula del condensado consiste en convertir un estado de un sistema de N partículas en el «mismo» estado de un sistema de $N \pm 1$ partículas.‡ En particular, el estado fundamental sigue siendo el mismo. Designemos con Ξ y Ξ^+ la parte de los operadores ψ que cambia el número de partículas del condensado en una unidad; entonces, por definición,

$$\begin{aligned} \hat{\Xi} |m, N+1\rangle &= \Xi |m, N\rangle, \\ \hat{\Xi}^+ |m, N\rangle &= \Xi^* |m, N+1\rangle, \end{aligned}$$

en donde los símbolos $|m, N\rangle$ y $|m, N+1\rangle$ designan a dos estados «semejantes» que difieren únicamente en el número de partículas del sistema y Ξ es un número

† Cf. (9.3). Admitimos que las partículas del gas carecen de spin y, por ello, se omite el subíndice del spin. En (26.1) hemos utilizado también el hecho de que en el caso de un gas de Bose ideal a $T = 0$, el potencial químico es $\mu = 0$ y así se suprime el término $-\mu t/\hbar$ en los exponentes.

‡ La adición o eliminación de la partícula ha de considerarse que se verifica con lentitud infinita. Esto evita la excitación del sistema por el campo variable.

complejo. Estas afirmaciones son rigurosamente válidas en el límite $N \rightarrow \infty$. De aquí que la definición de Ξ deba escribirse en la forma

$$\left. \begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N | \hat{\Xi} | m, N+1 \rangle &= \Xi, \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N+1 | \hat{\Xi}^+ | m, N \rangle &= \Xi^*; \end{aligned} \right\} \quad (26.3)$$

el límite ha de tomarse para un valor dado finito de la densidad del líquido N/V .

Si los operadores ψ se escriben como

$$\hat{\Psi} = \hat{\Xi} + \hat{\Psi}', \quad \hat{\Psi}^+ = \hat{\Xi}^+ + \hat{\Psi}'^+, \quad (26.4)$$

su parte restante («por encima del condensador») convierte el estado $|m, N\rangle$ en estados ortogonales a él, es decir, los elementos de matriz†

$$\left. \begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N | \hat{\Psi}' | m, N+1 \rangle &= 0, \\ \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N+1 | \hat{\Psi}'^+ | m, N \rangle &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (26.5)$$

En el límite $N \rightarrow \infty$, la diferencia entre los estados $|m, N\rangle$ y $|m, N+1\rangle$ desaparece totalmente y en este sentido Ξ resulta el valor medio del operador Ψ para dicho estado. Debe resaltarse que el hecho de que el valor límite sea finito es una característica de los sistemas que contienen un condensado.

Las ecuaciones (26.3) completan las propiedades de «operador» de $\hat{\Xi}$ y $\hat{\Xi}^+$, y pueden considerarse que conmutan con $\hat{\Psi}'$ y $\hat{\Psi}'^+$. En particular, los operadores $\hat{\Xi}$ y $\hat{\Xi}^+$ se sustituirán por Ξ y Ξ^* (es decir, se comportarán como magnitudes clásicas) en cualquier proceso de promediar respecto al estado fundamental. Debemos resaltar una vez más que (pues el número de partículas en el condensado es macroscópico) esta aproximación equivale a despreciar únicamente magnitudes cuyo orden de magnitud relativa sea $1/N$.‡

Si la dependencia temporal de las funciones de onda está determinada por el hamiltoniano $\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}$, entonces Ξ es independiente del tiempo: el elemento de matriz $\langle m, N | \Xi | m, N+1 \rangle$ es proporcional a

$$\exp \left\{ -\frac{it}{\hbar} [E(N+1) - E(N) - (N+1)\mu + N\mu] \right\},$$

y el exponente tiende a cero, puesto que (hasta un orden $\sim 1/N$) $E(N+1) - E(N) = \mu$.

† Para evitar malas interpretaciones debe mencionarse de nuevo que estas ecuaciones se refieren únicamente a las transiciones entre estados «semejantes».

‡ En particular, con esta exactitud debemos considerar iguales los elementos de matriz de los operadores $\hat{\Psi}'$ para las transiciones entre estados que difieren en el mismo número (pequeño) de partículas del sistema.

En un líquido homogéneo en reposo, Ξ es también independiente de las coordenadas y es simplemente (con la selección apropiada de la fase de la magnitud compleja)

$$\Xi = \sqrt{n_0}, \quad (26.6)$$

en donde n_0 es el número de partículas del condensado por unidad de volumen del líquido: $\hat{\Xi}^+ \hat{\Xi}$ es el operador de la densidad numérica de partículas en el condensado y el valor medio de este operador es precisamente n_0 .

La existencia del condensado produce una diferencia cualitativa en las propiedades de la matriz densidad correspondiente a las partículas de un líquido de Bose en comparación con la matriz densidad de un líquido ordinario. En un estado arbitrario de un líquido de Bose homogéneo, la matriz densidad viene dada por

$$N\varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle m, N | \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) | m, N \rangle, \quad (26.7)$$

y esta función depende únicamente de la diferencia $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$; cf. (7.13). Sustituyendo aquí los operadores ψ en la forma (26.4) y utilizando las propiedades (26.3) y (26.5), se tiene

$$N\varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = n_0 + N\varrho'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (26.8)$$

La matriz densidad ϱ' «encima del condensado» tiende a cero cuando $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$; la matriz densidad ϱ tiende al límite finito n_0/N . Esto expresa la existencia de un «orden de largo alcance» en un superfluído, que no está presente en los líquidos ordinarios; en éstos siempre tenemos $\varrho \rightarrow 0$ cuando $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$. Esta propiedad de simetría es la que distingue las fases superfluida y no superfluida (V. L. Ginzburg y L. D. Landau 1950).

La componente de Fourier de la matriz densidad determina la distribución del impulso de las partículas del líquido mediante

$$N(\mathbf{p}) = N \int \varrho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3x; \quad (26.9)$$

cf. (7.20). Sustituyendo ϱ de (26.8) obtenemos

$$N(\mathbf{p}) = (2\pi)^3 n_0 \delta(\mathbf{p}) + N \int \varrho'(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3x. \quad (26.10)$$

El término de la función delta corresponde a la probabilidad finita de que la partícula tenga exactamente un impulso cero.

Si en el líquido tiene lugar movimiento superfluído o si éste se produce en condiciones externas no uniformes y no estacionarias (que, sin embargo, varían apreciablemente sólo en distancias que son grandes en comparación con las distancias interatómicas) se produce de nuevo la condensación de Bose-Einstein, pero ahora

no se puede asegurar que se verificará en el estado con $p = 0$. La magnitud \mathcal{E} definida de nuevo mediante (26.3) será ahora una función de las coordenadas y del tiempo, que representa la función de onda de las partículas en el estado condensado. Se normaliza mediante la condición $|\mathcal{E}|^2 = n_0$ y, por consiguiente, puede expresarse como

$$\mathcal{E}(t, \mathbf{r}) = \sqrt{n_0(t, \mathbf{r})} e^{-i\phi(t, \mathbf{r})}. \quad (26.11)$$

Como en el estado condensado existe un número macroscópicamente grande de partículas, la función de onda de este estado se transforma en una magnitud macroscópica clásica.[†] Así pues, existe una nueva característica de los estados macroscópicos de un fluido, entre los que debemos incluir los estados de equilibrio termodinámico.

La densidad de corriente calculada a partir de la función de onda (26.11) es

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{\text{cond}} &= \frac{i\hbar}{2m} (\mathcal{E} \nabla \mathcal{E}^* - \mathcal{E}^* \nabla \mathcal{E}) \\ &= \frac{\hbar}{m} n_0 \nabla \Phi, \end{aligned}$$

siendo m la masa de una partícula del líquido. Esta densidad tiene el mismo significado que la densidad de corriente macroscópica de las partículas del condensado y puede igualarse a $n_0 \mathbf{v}_s$, siendo \mathbf{v}_s la velocidad macroscópica de dicho movimiento. Comparando ambas expresiones se tiene

$$\mathbf{v}_s = (\hbar/m) \nabla \Phi. \quad (26.12)$$

Como el movimiento puede producirse en un estado de equilibrio termodinámico (caracterizado por la magnitud \mathcal{E}), resulta no disipativo y, por tanto (26.12) determina la velocidad del movimiento superfluído. Así pues, llegamos a la propiedad de dicho movimiento ya mencionada en § 23: es un flujo potencial. El potencial de la velocidad ϕ es igual (aparte de un factor constante) a la fase de la función de onda del condensado

$$\phi = (\hbar/m) \Phi. \quad (26.13)$$

Sin embargo, para evitar malas interpretaciones debemos aclarar que, aunque la velocidad del condensado es la misma que la velocidad del componente superfluído (y aunque los componentes condensado y superfluído aparecen simultáneamente en el punto λ), no son en absoluto iguales las densidades $m n_0$ del condensado

[†] Lo mismo que la intensidad del campo de una onda electromagnética se transforma en una magnitud clásica en el caso de números de ocupación de los fotones grandes en cada estado (ver TCR, § 5).

y ϱ_s del superfluido. La identidad de estas dos cantidades sería imposible de justificar y resulta también evidente su falta de corrección a partir del hecho de que en el cero absoluto es superfluida la masa total del líquido, mientras que no todas las partículas están en el condensado †.

§ 27. Relación entre la densidad del condensado y la temperatura

La densidad numérica de partículas en el condensado es máxima a $T = 0$ y disminuye al elevarse la temperatura. La forma límite de esta dependencia de la densidad con la temperatura cuando $T \rightarrow 0$ puede hallarse considerando las fluctuaciones de una magnitud macroscópica, la función de onda del condensado Ξ (R. A. Ferrell, N. Menyhárd, H. Schmidt, F. Schwabl y P. Szépfalusy 1968).

En primer lugar, recordemos que Ξ es una magnitud clásica que corresponde al operador $\hat{\Psi}$ en el formalismo cuántico. De aquí que, en principio, deberíamos utilizar este operador. Sin embargo, cerca del cero absoluto, las oscilaciones de larga longitud de onda constituyen la parte principal del espectro de las fluctuaciones de una magnitud macroscópica. Estas oscilaciones del líquido son ondas sonoras descritas por las ecuaciones macroscópicas de la hidrodinámica y, por consiguiente, resulta posible construir un operador correspondiente a Ξ mediante la cuantización independiente de Ξ .

En el caso presente, para $\Xi = \sqrt{n_0} \exp i\Phi$, en el límite de longitudes de onda largas, la fase Φ fluctúa de modo muy intenso y está relacionada directamente con el potencial de velocidades del fluido a través de (26.13). Conviene recordar que ϕ y Φ se definen sólo a falta de constantes aditivas. Por consiguiente, la magnitud únicamente definida $\sqrt{n_0}$ puede expresarse en función de las derivadas de Φ y, por ello, las componentes de Fourier de sus fluctuaciones contendrán potencias extras del vector de ondas k , es decir, serán pequeñas cuando k sea pequeño.

La relación de la fase Φ al potencial ϕ permite que Φ esté directamente relacionada con las magnitudes que caracterizan la distribución de fonones del líquido. Con este objeto, consideraremos que ϕ y, por consiguiente Φ , son operadores de segunda cuantización, expresando ϕ en función de los operadores de creación y aniquilación mediante (24.10):

$$\Phi = \sum_p \left(\frac{mu}{2Vnp} \right)^{1/2} (\hat{c}_p e^{ip \cdot r/\hbar} + \hat{c}_p^+ e^{-ip \cdot r/\hbar}); \quad (27.1)$$

la densidad del líquido no perturbado se escribe como $\varrho = nm$, siendo n la densidad numérica de partículas y habiéndose omitido el subíndice 0. De acuerdo con la dis-

† En la práctica, la densidad del condensado en el helio líquido parece ser únicamente una fracción pequeña de la densidad total del líquido.

cusión anterior, esto significa que el operador de la magnitud macroscópica \mathcal{E} , es decir la parte de onda larga del operador $\hat{\Psi}$, puede expresarse como

$$\hat{\Psi} = \sqrt{n_0} \exp i\hat{\Phi}, \quad (27.2)$$

siendo n_0 la densidad de partículas del condensado.

Aplicemos en primer lugar esta fórmula para calcular la distribución de los impulsos de las partículas «encima del condensado» en un líquido de Bose (en el caso de impulsos pequeños). En la matriz densidad de una sola partícula $\varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, para distancias grandes $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, podemos utilizar la expresión de onda larga (27.2) para el operador ψ :

$$N\varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) \rangle \approx n_0 \langle e^{-i\hat{\Phi}^+(\mathbf{r}_2)} e^{i\hat{\Phi}(\mathbf{r}_1)} \rangle, \quad (27.3)$$

en donde se toma el valor medio respecto al estado del líquido a una temperatura determinada. Como las fluctuaciones son pequeñas, esta expresión ha de desarrollarse en potencias de $\hat{\Phi}$, reteniendo los primeros términos que no se anulan (los cuadráticos). Como $\hat{\Phi}^+ = \hat{\Phi}$, obtenemos

$$N\varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = n_0 - n_0 \langle \hat{\Phi}^2(\mathbf{r}) \rangle + n_0 \langle \hat{\Phi}(\mathbf{r}_2) \hat{\Phi}(\mathbf{r}_1) \rangle. \quad (27.4)$$

El tercer término tiende a cero cuando $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| \rightarrow \infty$ y da la contribución correspondiente a la parte superior del condensado de la matriz densidad; el segundo término es independiente de \mathbf{r} en un líquido homogéneo y da una corrección a la densidad del condensado que se calculará más adelante mediante un método ligeramente diferente. Utilizando (27.1), podemos escribir la parte superior del condensado como

$$\begin{aligned} N\varrho'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{n_0 m u}{2Vn} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{p} \{ \langle \hat{c}_{\mathbf{p}}^+ \hat{c}_{\mathbf{p}} \rangle e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar} + \langle \hat{c}_{\mathbf{p}} \hat{c}_{\mathbf{p}}^+ \rangle e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar} \} \\ &= \frac{n_0 m u}{Vn} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{p} \left(n_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \right) e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\hbar}, \end{aligned}$$

en donde

$$n_{\mathbf{p}} = [e^{p u / T} - 1]^{-1}.$$

Pasando de la suma a la integración, tenemos

$$N\varrho'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{n_0 m u}{n} \int \frac{n_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2}}{p} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (27.5)$$

Esta expresión se aplica únicamente, como es natural, a la contribución procedente de valores de p pequeños (\hbar/p grande en comparación con las distancias in-

teratómicas). El integrando de (27.5) da inmediatamente la distribución de impulsos de partículas

$$N(\mathbf{p}) = \frac{n_0 m u}{n p} \left(n_p + \frac{1}{2} \right). \quad (27.6)$$

Cuando $T = 0$, esta expresión se reduce a

$$N(\mathbf{p}) = n_0 m u / 2 n p \quad (27.7)$$

(J. Gavoret y P. Nozières 1964); cuando $T \neq 0$ y $u p \ll T$,

$$N(\mathbf{p}) = n_0 m T / n p^2 \quad (27.8)$$

(P. C. Hohenberg y P. C. Martin 1965).

Podemos a continuación determinar la relación existente entre la temperatura y la densidad del condensado. Por definición

$$n_0(T) = n - \int N(\mathbf{p}) d^3 p / (2\pi\hbar)^3. \quad (27.9)$$

Si sustituimos aquí directamente (27.6), la integral diverge debido a las vibraciones del punto cero. Esto está relacionado con la invalidez de (27.6) para p grande y significa únicamente que no podemos calcular de este modo el valor de la densidad del condensado a $T = 0$, que debe considerarse aquí como una cantidad dada. Para hallar la dependencia con la temperatura requerida, debemos restar de $n_0(T)$ su valor a $T = 0$; la integral es entonces convergente. El resultado es

$$\begin{aligned} \frac{n_0(T) - n_0(0)}{n_0(0)} &= - \frac{mu}{n} \int \frac{n_p}{p} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \\ &= - \frac{mT^2}{2\pi^2 n u \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x dx}{e^x - 1} = - \frac{mT^2}{12 n u \hbar^3}. \end{aligned} \quad (27.10)$$

En el cálculo hemos despreciado la dependencia de la densidad total del líquido con la temperatura; esto es legítimo, puesto que la dilatación térmica del líquido (debida a las excitaciones de los fonones) es proporcional a una potencia más elevada de la temperatura, a saber: T^4 (cf. Parte 1, § 67).†

Finalmente debemos señalar algunos puntos sobre el tema metodológicamente importante del líquido de Bose bidimensional. En este caso, la parte de la integral que depende de la temperatura (27.9) diverge logarítmicamente para \mathbf{p} pequeño, que es donde la fórmula para $N(\mathbf{p})$ debería haber sido correcta. Esto significa que

† Las fórmulas obtenidas, que son válidas para cualquier líquido de Bose, están naturalmente de acuerdo con las de § 25 para un gas de Bose ligeramente no ideal. En la comparación debe señalarse que para dicho gas $n_0 \approx n$ y la condición para que p sea pequeño es $p \ll mu \sim \hbar(an)^{1/2}$.

en el caso bidimensional la hipótesis básica es incorrecta, es decir, la que afirma que existe un condensado a temperaturas no nulas. En el caso bidimensional el condensado sólo puede existir a $T = 0$.[†] El caso aquí es análogo al de los cristales bidimensionales (ver Parte 1, § 137). De modo semejante a como en estos últimos las fluctuaciones de los desplazamientos atómicos «suavizan» la red, de la misma manera las fluctuaciones de fase eliminan el condensado. La analogía formal entre los dos tipos de sistema radica en que en ambos casos la energía depende de magnitudes que sólo pueden aparecer en ella en forma de derivadas. En el primer caso se encuentran los vectores de desplazamiento atómico, los cuales no pueden aparecer por sí mismos en la energía, debido a que esta última es invariante frente a los desplazamientos globales del sistema. En el segundo caso es la fase de la función de onda del condensado la que no puede aparecer en la energía porque no está únicamente determinada. La razón última de la divergencia de las fluctuaciones es la dependencia exclusiva de la energía con estas magnitudes.

A continuación, hemos visto en la Parte 1, § 138, que la divergencia débil (logarítmica) de las fluctuaciones produce en un cristal bidimensional una disminución lenta (función potencial) de la función de correlación del sistema. Análogamente en un sistema bidimensional de Bose la matriz densidad (27.3) disminuye cuando $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$ de acuerdo con una ley potencial y no tiende a un límite constante como ocurre en presencia de un condensado.[‡] Por consiguiente, dicho sistema difiere cualitativamente de un líquido ordinario y así, también en el caso bidimensional, puede existir una transición de fase de segunda clase entre el líquido ordinario con una disminución exponencial de $\varrho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ y un líquido con una disminución que sigue una ley potencial.

§ 28. Comportamiento de la densidad superfluida cerca del punto λ

Como ya se mencionó en § 23, al aumentar la temperatura, la fracción ϱ_s/ϱ de la densidad del superfluido disminuye en un líquido de Bose, llegando a ser cero en el punto λ del líquido, que es un punto de transición de fase de segundo orden. La temperatura T_λ de este punto es una función de la presión P ; la ecuación $T = T_\lambda(P)$ define la curva de los puntos λ en el diagrama de fases en el plano PT .

En la teoría general de las transiciones de fase de segundo orden, se describe la variación del estado del cuerpo mediante el comportamiento del parámetro de orden, el cual caracteriza sus propiedades de simetría. En el caso de una transición λ de un líquido de Bose, la función de onda del condensado actúa como dicho parámetro y describe, como se explicó en § 26 el «orden de largo alcance» del líquido. El hecho de que \mathcal{E} sea compleja significa que el parámetro de orden tiene dos componentes y el hamiltoniano efectivo del sistema (ver Parte 1, § 147) depende única-

[†] Estos puntos se relacionan también con el gas de Bose ideal bidimensional.

[‡] Ver J. W. Kane y L. Kadanoff, *Physical Review* 155, 80, 1967.

mente de $|\mathcal{E}|^2$, es decir, es invariante frente a la transformación $\mathcal{E} \rightarrow \varrho^{ta}\mathcal{E}$ para cualquier valor de α real.

Los resultados empíricos relativos a la transición λ en el helio líquido parecen indicar que no existe ninguna región en la que sea válida la teoría de Landau de las transiciones de fase: La condición citada de la Parte 1 (146.15) no se ve satisfecha en ningún punto de la proximidad del punto λ (es decir, en ningún punto de la región $|T - T_\lambda| \ll T_\lambda$). De aquí que, para describir las propiedades de esta transición, debemos utilizar la teoría de las fluctuaciones de las transiciones de fase de segundo orden, que hace posible establecer la relación entre la temperatura y diversas magnitudes.

La relación entre el parámetro de orden (y , por tanto, la densidad del condensado n_0) y la temperatura cuando $T \rightarrow T_\lambda$ viene dada por el índice crítico β (ver Parte 1, § 148):

$$|\mathcal{E}| = \sqrt{n_0} \propto (T_\lambda - T)^\beta. \quad (28.1)$$

Sin embargo, una cuestión más interesante es la del comportamiento de la densidad del superfluído ϱ_s . Para calcularla, consideremos un líquido en el que varíe lentamente en el espacio la fase Φ de la función de onda del condensado. Esto significa que en el líquido existe un movimiento superfluído macroscópico con la velocidad (26.12) y de acuerdo con ello una energía cinética (por unidad de volumen del líquido)

$$\frac{1}{2} \varrho_s v_s^2 = \varrho_s (\hbar^2 / 2m^2) (\nabla \Phi)^2. \quad (28.2)$$

También puede aplicarse esta expresión a las fluctuaciones de longitud de onda larga del parámetro de orden. De acuerdo con la hipótesis de la invariancia de escala, el único parámetro de longitud que determina la descripción o el esquema de las fluctuaciones cerca del punto de transición es el radio de correlación r_c de las fluctuaciones. Éste determina, por consiguiente, el orden de magnitud de las distancias en las que la variación debida a las fluctuaciones de la fase Φ es del orden de la unidad; de aquí que la media de los cuadrados de la velocidad de fluctuación varíe con la temperatura según la expresión

$$\overline{v_s^2} \propto 1/r_c^2 \propto (T_\lambda - T)^{2\nu}, \quad (28.3)$$

siendo ν el índice crítico del radio de correlación. Por otra parte, como son las fluctuaciones de longitud de onda larga las que gobiernan la singularidad de las magnitudes termodinámicas en el punto de transición, podemos admitir de modo natural que cerca de este punto la energía cinética asociada con las fluctuaciones (28.2) varía con la temperatura del mismo modo que la parte singular del potencial

termodinámico del líquido, es decir en la forma $(T_\lambda - T)^{2-\alpha}$ (en donde α es el índice crítico del calor específico C_p). Así pues, tenemos

$$\varrho_s \bar{v}_s^2 \propto \varrho_s (T_\lambda - T)^{2\nu} \propto (T_\lambda - T)^{2-\alpha},$$

de aquí que $\varrho_s \propto (T_\lambda - T)^{2-\alpha-2\nu}$. Finalmente, con la relación $3\nu = 2 - \alpha$ (que se deduce de la hipótesis de la invariancia de la homogeneidad; ver Parte 1, § 149), tenemos

$$\varrho_s \propto (T_\lambda - T)^{(2-\alpha)/3}. \quad (28.4)$$

Esta expresión establece la relación existente entre la dependencia de ϱ_s y del calor específico con la temperatura cerca del punto λ (B. D. Josephson 1966).†

§ 29. Filamentos de vórtices cuantizados

Un líquido ordinario encerrado en un recipiente cilíndrico que rota alrededor de su eje se ve transportado por el rozamiento con las paredes del mismo y finalmente empieza a rotar como un todo junto con el recipiente. En un superfluído, sólo el componente normal se ve obligado a rotar; el componente superfluído permanece en reposo de acuerdo con el hecho de que este componente no puede rotar como un todo, puesto que esto haría que el movimiento superfluído dejase de ser de flujo potencial.‡

Sin embargo, en el caso en que las velocidades de rotación sean suficientemente grandes, dicho estado resulta desfavorable desde el punto de vista termodinámico. La condición de equilibrio termodinámico es que sea un mínimo la magnitud

$$E_{\text{rot}} = E - \mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (29.1)$$

Ésta es la energía en un sistema coordenado en rotación en el que E y M son la energía y el momento angular del sistema en un sistema coordinado fijo (ver Parte 1, § 26). El término $-\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\Omega}$ de (29.1) hace que (para $\boldsymbol{\Omega}$ suficientemente grande) sea termodinámicamente más favorable el estado con $\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\Omega} > 0$ que el de $\mathbf{M} = 0$.

Así pues, cuando aumenta la velocidad de rotación del recipiente, puede finalmente presentarse un movimiento superfluído. Se elimina la aparente contradicción entre esta afirmación y la condición para que el movimiento superfluído sea un flujo potencial admitiendo que este flujo se pierde sólo en ciertas líneas de singula-

† Los índices α y ζ para el helio líquido son muy pequeños y así tenemos con gran exactitud $\beta \approx 1/3$ y $\rho_s \propto n_0 \propto (T_\lambda - T)^{2/3}$.

‡ Cuando el líquido gira como un todo, la velocidad $\mathbf{v} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}$, siendo $\boldsymbol{\Omega}$ la velocidad angular y teniendo el vector de posición \mathbf{r} su origen en un punto cualquiera del eje. Entonces $\text{rot } \mathbf{v} = 2\boldsymbol{\Omega} \neq 0$.

ridad del líquido, conocidas como *filamentos de vórtices* o *líneas de vórtices*.[§] El líquido realiza un movimiento alrededor de estas líneas que puede denominarse *rotación potencial*, puesto que $\text{rot } \mathbf{v}_s = 0$ a través de todo el volumen exterior a estas líneas.

Los filamentos de vórtices en un líquido tienen un espesor de dimensiones atómicas y macroscópicamente deben considerarse como de espesor infinitesimal.^{||} Su existencia no contradice la expresión (26.12) para la velocidad, puesto que esta última supone que \mathbf{v}_s varía en el espacio con suficiente lentitud, mientras que en la realidad varía con una rapidez arbitrariamente grande cerca de un filamento de vórtices; ver (29.3) a continuación. Tampoco contradice a la prueba dada en § 23 de que el movimiento superfluido es un flujo potencial, en la que se hacía uso de las propiedades del espectro de energía de un líquido de Bose, puesto que un vórtice está asociado con una energía particular macroscópicamente grande [ver (29.8) más abajo] y el estado de un líquido que contiene un filamento no puede considerarse como débilmente excitado.

Consideremos en primer lugar los filamentos de vórtices desde un punto de vista puramente cinemático, como líneas de singularidad en la distribución de velocidades para el flujo potencial del líquido. Cada filamento de vórtices tiene un valor particular ($2\pi x$, por ejemplo) de la circulación de la velocidad a lo largo de un contorno cerrado que rodea el filamento:

$$\oint \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} = 2\pi x. \quad (29.2)$$

Este valor es independiente de la selección del contorno de integración: si C_1 y C_2 son dos contornos que encierran al filamento de vórtices, la diferencia entre las circulaciones a lo largo de los mismos es, según el teorema de Stokes, igual al flujo del vector $\text{rot } \mathbf{v}_s$ a través de la superficie que se apoya en C_1 y C_2 ; puesto que esta superficie no corta el filamento de vórtices, $\text{rot } \mathbf{v}_s = 0$ en todos los puntos de la misma y la integral es cero. De aquí se deduce que un filamento de vórtices no puede tener final: o bien es cerrado o termina en los límites o fronteras del líquido (o bien, en el caso de un líquido infinito, tiene ambos extremos en el infinito), puesto que la existencia de un extremo libre de un filamento de vórtices implicaría la existencia de una superficie que se apoyara en el contorno C , pero que no se encontraría en ningún punto con el filamento y, por ello, la integral del primer miembro de (29.2) sería nula.

La condición (29.2) nos permite determinar la distribución de velocidades en un líquido que se mueve rodeando un filamento de vórtices. En el caso más sencillo de un filamento rectilíneo en un líquido infinito, las líneas de corriente son circun-

[§] Esta hipótesis fue propuesta por L. Onsager (1949) y desarrollada posteriormente por R. P. Feynman (1955).

^{||} Sin embargo, esta afirmación no es aplicable a la proximidad inmediata del punto λ ; allí el grosor del filamento de vórtices es del orden del radio de correlación de las fluctuaciones.

ferencias en planos perpendiculares al filamento, con centros situados sobre el propio filamento. La circulación a lo largo de una curva de este tipo es $2\pi r v_s$, de modo que

$$v_s = \kappa/r, \quad (29.3)$$

siendo r la distancia al filamento. Podemos observar que en la rotación potencial la velocidad disminuye cuando nos alejamos del eje de rotación (el filamento de vórtices) en contraste con la rotación de un cuerpo rígido, en donde la velocidad aumenta en proporción directa con r .

En el caso de un filamento de vórtices de forma cualquiera, la distribución de velocidades viene dada por

$$\mathbf{v}_s = \frac{1}{2} \kappa \int d\mathbf{l} \times \mathbf{R}/R^3, \quad (29.4)$$

en donde la integración se realiza a lo largo del filamento y \mathbf{R} es el radio vector desde $d\mathbf{l}$ hasta el punto en donde se observa la velocidad.[†] A distancias del filamento que son pequeñas en comparación con su radio de curvatura, la fórmula (29.4) se reduce como es natural aproximadamente a (29.3).

Como ya se ha mencionado, las fórmulas (29.2)-(29.4) se obtienen como resultado simplemente del hecho de que el movimiento del líquido es un flujo potencial. Se muestra la naturaleza cuántica de los filamentos de vórtices en un superfluído por la circunstancia de que la constante κ sólo puede tener valores de una cierta serie discreta de los mismos. Utilizando (26.12) para la velocidad v_s expresada en función de la fase Φ de la función de onda del condensado, hallamos como expresión de su circulación

$$\oint \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} = (\hbar/m) \Delta\Phi, \quad (29.5)$$

en donde $\Delta\Phi$ es la variación de la fase al atravesar el contorno. Como la función de onda es uniforme, su variación de fase al retornar al punto original debe ser un múltiplo entero de 2π y así

$$\kappa = n\hbar/m, \quad (29.6)$$

[†] Esta expresión puede escribirse inmediatamente por analogía con la familiar fórmula de Biot y Savart correspondiente a las líneas del campo magnético. Es evidente la equivalencia formal de los dos problemas si comparamos la circulación de la velocidad (29.2) con la circulación del campo magnético \mathbf{H} a lo largo de la línea J :

$$\oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = 4\pi J/c.$$

Se obtiene un problema a partir del otro sustituyendo H por v_s y J/c por $\frac{1}{2}\kappa$.

siendo n un número entero. Veremos más adelante que de hecho sólo son termodinámicamente estables los filamentos de vórtices con la circulación más baja posible ($n = 1$). Por consiguiente pondremos

$$\kappa = \hbar/m. \quad (29.7)$$

Determinemos a continuación la velocidad crítica de rotación del recipiente cilíndrico a la que aparece por primera vez un filamento de vórtices. Es evidente por simetría, que este filamento surgirá a lo largo del eje del recipiente. La variación de la energía del líquido debida a la aparición del filamento de vórtices es

$$\Delta E = \int \frac{1}{2} \varrho_s v_s^2 dV = \frac{1}{2} \varrho_s L \int v_s^2 \cdot 2\pi r dr = L \varrho_s \pi \kappa^2 \int dr/r,$$

siendo L la longitud del recipiente. La integración respecto a r ha de realizarse entre el radio R del recipiente y cierto valor $r \sim a$ del orden de las distancias atómicas, a partir de las cuales deja de poseer significado el tratamiento macroscópico; como la integral es divergente logarítmicamente, su valor no depende apenas de la selección precisa de a . Así pues

$$\Delta E = L \pi \varrho_s (\hbar^2/m^2) \log(R/a); \quad (29.8)$$

se dice que esta expresión tiene una exactitud logarítmica, es decir, no sólo es grande el cociente R/a , sino también su logaritmo.† El momento angular del líquido en rotación es

$$M = \int \varrho_s v_s r dV = \varrho_s \kappa \int dV = L \pi R^2 (\hbar/m) \varrho_s. \quad (29.9)$$

La aparición del filamento de vórtices es termodinámicamente favorable si $\Delta E_{\text{rot}} = \Delta E - M\Omega < 0$, esto es, si

$$\Omega > \Omega_{\text{cr}} = (\hbar/mR^2) \log(R/a). \quad (29.10)$$

Los razonamientos anteriores indican también la razón por la cual los filamentos de vórtices con $n > 1$ en (29.6) son termodinámicamente inestables: cuando $n = 1$ se sustituye por un valor $n > 1$, la energía ΔE se incrementa en un factor de n^2 , y M en un factor de n , que debe hacer aumentar ΔE_{rot} .

Cuando la velocidad de rotación del recipiente cilíndrico aumenta por encima del valor crítico (29.10), aparecen nuevos filamentos de vórtices y cuando $\Omega \gg \Omega_{\text{cr}}$

† El movimiento alrededor del filamento de vórtices está acompañado en general por un cambio en la densidad del líquido. Se justifica el que hayamos ignorado este cambio en los cálculos realizados por el hecho de que la principal contribución a la energía (29.8) procede (debido a la divergencia de la integral) de distancias grandes r , en las que es pequeño el cambio de la densidad. Por la misma razón podemos despreciar la contribución a ΔE procedente de la variación de la energía interna del líquido.

su número es muy grande. Su distribución sobre la sección recta del recipiente tiende a ser uniforme y en el límite simulan la rotación de la parte superfluida del líquido como un sólido rígido.[†] El número de filamentos de vórtices para un valor dado (grande) de Ω se determina fácilmente por la condición de que la circulación de la velocidad a lo largo de un contorno que encierre un gran número de filamentos debería tener un valor correspondiente a la rotación del líquido como un todo. Si dicho contorno encierra un área unidad del plano perpendicular al eje de rotación, entonces

$$\oint \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} = v \cdot 2\pi\hbar = 2\pi v\hbar/m,$$

en donde v es la densidad de distribución de los filamentos de vórtices sobre la sección recta del recipiente. Por otra parte, cuando el líquido gira como un todo, $\text{rot } \mathbf{v}_s = 2\Omega$, y esta circulación es 2Ω . Igualando ambas expresiones se tiene

$$v = m\Omega/\pi\hbar. \quad (29.11)$$

La aparición de filamentos de vórtices elimina en cierta medida la propiedad de la superfluidez. Las excitaciones elementales que forman la componente normal del líquido se ven entonces dispersadas por los filamentos, transfiriendo a estos (y, por ello, a la componente superfluida del líquido) una parte de su impulso. Esto implica en consecuencia la presencia de rozamiento o fricción entre los dos componentes del líquido.

Los filamentos de vórtices se mueven en general en el espacio con el flujo del líquido. Cuando $T = 0$ y el líquido es enteramente superfluido, cada elemento $d\mathbf{l}$ del filamento se mueve con la velocidad \mathbf{v}_s del líquido en la posición de este elemento. A temperaturas no nulas, la fuerza de rozamiento sobre el filamento hace que posea una velocidad relativa respecto al componente superfluido.

Los filamentos de vórtices formados por rotación son rectos. El flujo a través de capilares, rendijas, etc., puede estar acompañado por la formación de filamentos cerrados o *anillos de vórtices*. Estos anillos eliminan la superfluidez del flujo a velocidades por encima de un valor crítico determinado. Los valores reales de estas *velocidades críticas* dependen de las condiciones específicas del flujo; son bastante inferiores al valor mencionado anteriormente en el que se viola la condición (23.3).

A diferencia de los filamentos de vórtices rectos, que pueden permanecer estacionarios en un líquido que está en reposo (lejos de ellos), los anillos de vórtices se mueven respecto al líquido. La velocidad de desplazamiento de cada elemento de línea es el valor de \mathbf{v}_s que resulta [de acuerdo con (29.4)] en su posición de la

[†] Esto se ve fácilmente observando que, puesto que el número de filamentos crece en proporción a Ω [ver (29.11) a continuación], el segundo término de $\Delta E_{\text{rot}} = \Delta E - M\Omega$ aumenta según Ω^2 , pero el primer término aumenta según Ω y, por tanto, puede despreciarse cuando $\Omega \gg \Omega_{cr}$. Entonces el hacer mínimo a ΔE_{rot} es equivalente a hacer máximo a M , lo cual ocurre cuando el líquido está en rotación como un cuerpo rígido.

acción de todo el resto del filamento; en el caso de filamentos curvos, ésta no es cero, en general. En consecuencia, los anillos de vórtices tienen como un todo, no sólo energías definidas, sino también impulsos definidos, y en este sentido son un tipo especial de excitaciones elementales.

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Hallar la velocidad y el impulso de un anillo circular de vórtices.

SOLUCIÓN. Cada elemento del anillo se mueve con la velocidad v_s en un punto determinado y a partir de la simetría del anillo circular esta velocidad es la misma en todo punto del mismo. Por consiguiente, es suficiente determinar la velocidad v_s en un punto cualquiera P del anillo debida al resto del mismo. Los elementos $d\mathbf{l}$ del anillo y los radios vectores \mathbf{R} desde $d\mathbf{l}$ al punto P están en el plano del anillo; de aquí que la velocidad en el punto P , dada por (29.4), sea perpendicular al plano del anillo; como resultado de este hecho, el anillo se mueve sin cambio de forma ni tamaño.

Definamos la posición del elemento $d\mathbf{l}$ mediante el ángulo θ (fig. 3). Entonces

$$d\mathbf{l} = R_0 d\theta, \quad R = 2R_0 \sin \frac{1}{2}\theta, \quad |d\mathbf{l} \times \mathbf{R}| = R \sin \frac{1}{2}\theta \cdot d\mathbf{l},$$

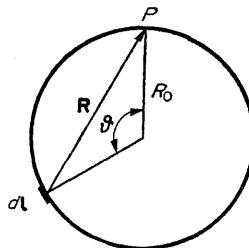


FIG. 3.

en donde R_0 es el radio del anillo y hallamos a partir de (29.4) para la velocidad v del anillo

$$v = \frac{\pi}{8R_0} \cdot 2 \int_0^{\pi} \frac{d\theta}{\sin \frac{1}{2}\theta}.$$

Sin embargo, esta integral es logarítmicamente divergente en el límite inferior y debe cortarse para un valor $\theta \sim a/R_0$ correspondiente a distancias atómicas ($\sim a$) del elemento $d\mathbf{l}$ al punto P . La integral está determinada, con exactitud logarítmica, en el margen de valores $a/R_0 \ll \theta \ll \pi$ y vale

$$\int_{-a/R_0}^{-1} \frac{2 d\theta}{\theta} = 2 \log \frac{R_0}{a},$$

de modo que

$$\begin{aligned} v &= (\kappa/2R_0) \log (R_0/a) \\ &= (\hbar/2mR_0) \log (R_0/a). \end{aligned} \quad (1)$$

Con la misma exactitud logarítmica, la energía del anillo de vórtices es

$$\varepsilon = 2\pi^2 R_0 \varrho_s (\hbar^2/m^2) \log (R_0/a), \quad (2)$$

que coincide con (29.8) sustituyendo R y L por R_0 y $2\pi R_0$. La energía ε está relacionada con la velocidad v por $d\varepsilon/dp = v$, siendo p el impulso del anillo. De aquí que

$$\begin{aligned} dp &= d\varepsilon/v \\ &= 4\pi^2 \varrho_s (\hbar/m) R_0 dR_0 \end{aligned}$$

(en el caso de exactitud logarítmica, el logaritmo de gran valor ha de considerarse como constante en la diferenciación) y así

$$p = 2\pi^2 \varrho_s (\hbar/m) R_0^2. \quad (3)$$

Las fórmulas (2) y (3) determinan la función $\varepsilon(p)$ para los anillos de vórtices en forma paramétrica (con R_0 como parámetro).

Debe señalarse que, debido a la naturaleza logarítmica de la integración que conduce a la fórmula (1), esta fórmula (con algunos cambios en la notación) permanece siendo también válida para la velocidad v con la que se mueve un elemento cualquiera dado en un anillo de vórtices curvado de forma cualquiera:

$$\mathbf{v} = (\kappa/2R_0) \mathbf{b} \log (\lambda/a). \quad (4)$$

En esta expresión \mathbf{b} es un vector unidad perpendicular al plano tangente en el punto dado sobre el filamento (el vector binormal), R_0 es el radio de curvatura en dicho punto y λ es la distancia característica sobre la cual varía el radio de curvatura del filamento.

PROBLEMA 2. Hallar la relación de dispersión en el caso de vibraciones pequeñas de un filamento de vórtices recto (W. Thomson 1880).

SOLUCIÓN. Tomemos como eje z la línea del filamento y sea $\mathbf{r} = (x, y)$ un vector que dé el desplazamiento de los puntos del filamento cuando éste vibra; \mathbf{r} es una función de z y del tiempo t de la forma $\exp[i(kz - \omega t)]$. La velocidad de los puntos situados sobre el filamento viene dada por la fórmula (4), tomando ahora λ igual a la longitud de onda de las vibraciones ($\lambda \sim 1/k$):

$$\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt = -i\omega \mathbf{r} = \frac{1}{2} \kappa \log \frac{1}{ak} \frac{\mathbf{b}}{R_0}.$$

El vector binormal $\mathbf{b} = \mathbf{t} \times \mathbf{n}$, siendo \mathbf{t} y \mathbf{n} vectores unitarios a lo largo de la tangente y de la normal principal a la curva. De acuerdo con una fórmula bien conocida de la geometría diferencial, $d^2\mathbf{r}/dl^2 = -\mathbf{n}/R_0$, en donde l es la longitud medida a lo largo de la curva. En el caso de vibraciones pequeñas, el filamento está sólo ligeramente curvado y, por consiguiente, podemos considerar $1 \approx z$ y $\mathbf{t} = \mathbf{t}_z$ (vector unitario a lo largo del eje z); entonces

$$\mathbf{b}/R_0 \approx \mathbf{t}_z \times d^2\mathbf{r}/dz^2 = -k^2 \mathbf{t}_z \times \mathbf{r}.$$

La ecuación del movimiento del filamento resulta entonces

$$-i\omega \mathbf{r} = -\frac{1}{2}\times k^2 \mathbf{t}_z \times \mathbf{r} \log(1/ak).$$

Al desarrollar esta expresión se obtienen dos ecuaciones homogéneas lineales para x e y ; igualando el determinante a cero, se tiene la relación buscada entre ω y k :

$$\omega = \frac{1}{2} \times k^2 \log(1/ak).$$

§ 30. Un filamento de vórtices en un gas de Bose casi ideal

Como ya se ha mencionado, el espesor de un filamento de vórtices en un líquido es comparable con las distancias atómicas. Sin embargo, se tiene una excepción a este respecto en el caso de un gas de Bose casi ideal. En este caso el «núcleo» del filamento de vórtices, en donde se ven alteradas de modo significativo las propiedades del medio, tiene un espesor macroscópico (como veremos a continuación) y su estructura puede describirse macroscópicamente (V. L. Ginzburg y L. P. Pitaevskii 1958, L. P. Pitaevskii 1961 y E. P. Gross 1961).

Consideremos un gas ligeramente no ideal en el cero absoluto. En dicho gas casi todas las partículas están en el estado condensado. En función de los operadores ψ esto significa que la parte «superior del condensado» del operador (Ψ) es pequeña en comparación con su valor medio, es decir, en comparación con la función de onda del condensado Ξ . Si despreciamos completamente esta pequeña parte, Ξ satisfará la misma «ecuación de Schrödinger» (7.8) que el operador completo Ψ . Si sólo se tienen en cuenta las interacciones por pares, esta ecuación es (en el caso de partículas sin spin)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Xi(t, \mathbf{r}) = -\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu\right) \Xi(t, \mathbf{r}) + \Xi(t, \mathbf{r}) \int |\Xi(t, \mathbf{r}')|^2 U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3x'. \quad (30.1)$$

Considerando que la función $\Xi(t, \mathbf{r})$ varía sólo ligeramente en distancias atómicas, podemos sustituirla por $\Xi(t, \mathbf{r})$ y sacarla fuera de la integral, que entonces se transforma en $\int U(r) d^3x \equiv U_0$. Sustituyendo también $\mu = nU_0$ (ver (25.6); n es el valor sin perturbar de la densidad numérica de partículas en el gas) tendremos

$$i\hbar \partial \Xi / \partial t = -(\hbar^2/2m) \Delta \Xi + U_0 \{ \Xi | \Xi |^2 - n \Xi \}. \quad (30.2)$$

En un estado estacionario, Ξ es independiente del tiempo. Un filamento de vórtices recto corresponde a una solución que posee la forma

$$\Xi = \sqrt{n} e^{i\phi} f(r/r_0), \quad r_0 = \hbar / \sqrt{2m U_0 n}, \quad (30.3)$$

en donde r y ϕ son las distancias al eje del filamento y el ángulo polar alrededor del eje. La fase de esta función corresponde al valor (29.7) de la circulación. El módulo al cuadrado $|\mathcal{E}|^2$ es la densidad numérica de partículas en el condensado; en la aproximación considerada, coincide con la densidad total del gas. Cuando $r \rightarrow \infty$, esta densidad debe tender al valor n fijo y, por tanto, f debe tender a la unidad.

Con la variable adimensional $\xi = r/r_0$, se encuentra la siguiente ecuación para la función $f(\xi)$

$$\frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{df}{d\xi} \right) - \frac{f}{\xi^2} + f - f^3 = 0. \quad (30.4)$$

La figura 4 muestra la solución obtenida mediante integración numérica de (30.4). Cuando $\xi \rightarrow 0$, tiende a cero como ξ ; cuando $\xi \rightarrow \infty$, tiende a la unidad como $1 - \frac{1}{2}\xi^2$.

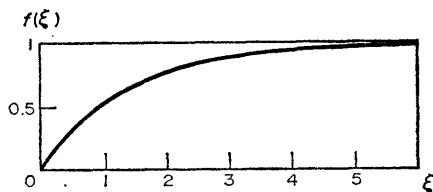


FIG. 4.

El parámetro r_0 determina el orden de magnitud del radio del «núcleo» del filamento. Utilizando la longitud de dispersión o scattering a en lugar de U_0 , con $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$ (6.2), se halla

$$r_0 \sim n^{-1/3} \eta^{-1/2} \gg n^{-1/3},$$

en donde $\eta = an^{1/3}$ es el parámetro gaseoso. De hecho este radio es, por consiguiente, grande en comparación con las distancias interatómicas si el parámetro de estado gaseoso es suficientemente pequeño.

PROBLEMA

Hallar el espectro de las excitaciones elementales en un gas de Bose casi ideal, considerándolo como la relación de dispersión para las pequeñas oscilaciones de la función de onda del condensado.

SOLUCIÓN. Consideremos oscilaciones pequeñas de \mathcal{E} alrededor de un valor medio constante \sqrt{n} :

$$\mathcal{E} = \sqrt{n} + Ae^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + B^*e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)},$$

en donde A y B^* son amplitudes complejas pequeñas. Sustituyendo esta expresión en la ecuación (30.2), linealizando y separando términos con factores exponenciales diferentes, se tiene un sistema de dos ecuaciones:

$$\begin{aligned}\hbar\omega A &= (p^2/2m) A + nU_0(A+B), \\ -\hbar\omega B &= (p^2/2m) B + nU_0(A+B),\end{aligned}$$

con $p = \hbar k$. De aquí que, igualando a cero el determinante, tengamos

$$(\hbar\omega)^2 = (p^2/2m)^2 + (p^2/m) nU_0,$$

de acuerdo con (25.10).

§ 31. Funciones de Green en un líquido de Bose†

El formalismo matemático de las funciones de Green en un líquido de Bose es muy semejante en su estructura al utilizado en un sistema de Fermi. Sin reiterar todos los razonamientos, daremos ahora en primer lugar las definiciones y fórmulas básicas, resaltando la diferencia debida a la diferente estadística de las partículas o bien a la presencia del condensado.‡ Como en las secciones precedentes de este capítulo, se supone que las partículas del líquido carecen de spin.

Al determinar la función de Green para un líquido de Bose, debemos separar la parte del condensado de los operadores ψ de Heisenberg, poniéndolos en la forma (26.4). Se halla la función de Green mediante los operadores de la parte superior del condensado de acuerdo con la fórmula

$$G(X_1, X_2) = -i\langle T\hat{\Psi}'(X_1)\hat{\Psi}'^+(X_2)\rangle, \quad (31.1)$$

en donde los corchetes angulares $\langle \dots \rangle$ designan de nuevo la acción de promediar respecto al estado fundamental del sistema y T designa el producto cronológico. Sin embargo, en contraste con el caso de los fermiones, el intercambio de los operadores ψ para ponerlos en el orden necesario no necesita estar acompañado de un cambio de signo del producto, de modo que, a diferencia de (7.10),

$$iG(X_1, X_2) = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}'(X_1)\hat{\Psi}'^+(X_2)\rangle, & t_1 > t_2, \\ \langle \hat{\Psi}'^+(X_2)\hat{\Psi}'(X_1)\rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (31.2)$$

Un valor medio semejante a (31.1) pero con los operadores completos ψ en lugar de utilizar sólo los correspondientes a la parte superior del condensado nos daría

$$-i\langle T\hat{\Psi}(X_1)\hat{\Psi}^+(X_2)\rangle = -in_0 + G(X_1, X_2), \quad (31.3)$$

† En §§ 31-33 y 35, las unidades utilizadas hacen $\hbar = 1$.

‡ S. T. Belyaev (1958) fue el primero que utilizó la técnica matemática de las funciones de Green en su aplicación a los sistemas de Bose con condensado.

siendo n_0 la densidad numérica de partículas del condensado.† En un líquido homogéneo, la función G depende naturalmente sólo de la diferencia $X = X_1 - X_2$.

La matriz de densidad correspondiente a la parte superior del condensado ϱ' se expresa mediante la función de Green por

$$N\varrho'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = iG(t_1, \mathbf{r}_1; t_1+0, \mathbf{r}_2) = iG(t = -0, \mathbf{r}); \quad (31.4)$$

se observará que el signo es opuesto al de (7.18). En particular, para $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ obtenemos a partir de esta expresión la densidad numérica de partículas de la parte que estamos considerando

$$\frac{N}{V} - n_0 = iG(t = -0, \mathbf{r} = 0); \quad (31.5)$$

cf. (7.19).

El paso a la representación de los impulsos se hace mediante las mismas fórmulas (7.21), (7.22). La normalización de $G(\omega, \mathbf{p})$ se expresa mediante

$$\frac{N}{V} = n_0 + i \lim_{t \rightarrow -0} \int G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega d^3 p}{(2\pi)^4}; \quad (31.6)$$

cf. (7.24).

Para la función de Green de un sistema de Bose en la representación de los impulsos podemos deducir una expresión semejante a la obtenida en § 8 para el caso de un sistema de Fermi. Cálculos totalmente análogos conducen primeramente a la fórmula

$$G(\omega, \mathbf{p}) = (2\pi)^3 \sum_m \left\{ \frac{A_m \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega + E_0(N) - E_m(N+1) + \mu + i0} - \frac{B_m \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega - E_0(N) + E_m(N-1) + \mu - i0} \right\}, \quad (31.7)$$

en donde

$$A_m = |\langle 0 | \hat{\psi}'(0) | m \rangle|^2, \quad B_m = |\langle m | \hat{\psi}'(0) | 0 \rangle|^2,$$

siendo $\hat{\psi}'(\mathbf{r})$ el operador de Schrödinger correspondiente a la parte superior del condensado.† Para llevar este desarrollo a su forma final, observemos que las ener-

† Igual que en el caso de los sistemas de Fermi, consideraremos estados de un sistema de Bose para un valor determinado del potencial químico μ (en lugar del número N). De acuerdo con ello, la diferencia $\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}$ (7.1) actúa como el hamiltoniano del sistema. La parte del condensado del operador ψ es entonces independiente del tiempo.

‡ La fórmula (31.7) corresponde a (8.7). Ahora está ausente el factor $\frac{1}{2}$ debido a que las partículas carecen de spin. Debe señalarse que el signo del segundo término en (31.7) es el opuesto al de (8.7).

gías de excitación $\varepsilon_m(N)$ de un sistema de Bose se determinan como las diferencias (siempre positivas) existentes entre las energías de los estados excitados del sistema y la energía de su estado fundamental para un número de partículas N constante. Como $E_0(N) + \mu \approx E_0(N+1)$, se halla, por tanto, que

$$\begin{aligned} E_m(N+1) - E_0(N) - \mu &\approx E_m(N+1) - E_0(N+1) = \varepsilon_m(N+1) > 0, \\ E_m(N-1) - E_0(N) + \mu &\approx E_m(N-1) - E_0(N-1) = \varepsilon_m(N-1) > 0. \end{aligned}$$

Pero la adición o supresión de una partícula cambia las propiedades del sistema únicamente en los términos de orden relativo $\sim 1/N$; en el caso de un sistema macroscópico estos términos son despreciables y, por ello, las energías de excitación $\varepsilon_m(N \pm 1)$ han de considerarse como coincidentes entre sí y con $\varepsilon_m(N)$. Así pues, tenemos finalmente

$$G(\omega, \mathbf{p}) = (2\pi)^3 \sum_m \left\{ \frac{A_m \delta_m(\mathbf{p} - \mathbf{P}_m)}{\omega - \varepsilon_m + i0} - \frac{B_m \delta_m(\mathbf{p} + \mathbf{P}_m)}{\omega + \varepsilon_m - i0} \right\}. \quad (31.8)$$

Mediante el mismo método que utilizamos en la deducción de (8.14), se encuentra fácilmente a partir de esta expresión que en el caso de sistemas de Bose la parte imaginaria de la función de Green es siempre negativa:

$$\text{im } G(\omega, \mathbf{p}) < 0. \quad (31.9)$$

La forma asintótica de la función de Green para $\omega \rightarrow \infty$ permanece igual que en el caso de los sistemas de Fermi:

$$G(\omega, \mathbf{p}) \rightarrow 1/\omega \text{ cuando } |\omega| \rightarrow \infty; \quad (31.10)$$

cf. (8.15). Al deducir este resultado debemos utilizar la regla de conmutación

$$\hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_2) - \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

en donde ahora se sustituye el anticonmutador de los operadores $\hat{\Psi}$ y $\hat{\Psi}^+$ por el correspondiente conmutador.‡

A continuación, argumentos semejantes a los empleados en § 8 conducen al resultado fundamental de que los polos de la función de Green determinan el espectro de las excitaciones elementales

$$G^{-1}(\varepsilon, \mathbf{p}) = 0, \quad (31.11)$$

‡ El hecho de que la parte del condensado de los operadores ψ se separe en la definición de G carece de importancia aquí: el término del condensado — $i n_0$ en (31.3) corresponde en la representación de los impulsos a la función delta $\delta(\omega)\delta(\mathbf{p})$, lo cual no influye en (31.10).

y sólo han de tomarse las raíces positivas de esta ecuación; en contraste con (8.16) ahora es innecesario restar μ de ε .

Cerca de su polo la función de Green tiene la forma

$$G(\omega, \mathbf{p}) \approx Z_{\pm}/[\omega \mp \varepsilon(\mathbf{p})], \quad Z_+ > 0, \quad Z_- < 0; \quad (31.12)$$

el signo del residuo en el polo es el mismo que el de ω , como se deduce del hecho de que los coeficientes A_m y B_m en (31.8) son positivos. El valor del residuo no está sometido a ninguna condición como la (10.4), por ejemplo, que condicionaba los sistemas de Fermi. Utilizando la expresión (31.12), podemos comprobar fácilmente (como en § 8) que la desigualdad (31.9) hace automáticamente que sean positivos los coeficientes de amortiguamiento de las cuasipartículas, es decir, da el signo necesario $-im\varepsilon > 0$, cuando los valores de ε se mueven dentro del dominio complejo.

El paso posible de partículas que están en la parte superior del condensado hacia el interior del mismo y viceversa lleva al resultado de que en el formalismo matemático de las funciones de Green correspondientes a sistemas de Bose, igual que en la función (31.1), aparecen automáticamente las siguientes funciones, como veremos en § 33:

$$iF(X_1, X_2) = \langle N-2 | T \hat{\Psi}'(X_1) \hat{\Psi}'(X_2) | N \rangle, \quad (31.13)$$

$$\begin{aligned} iF^+(X_1, X_2) &= \langle N | T \hat{\Psi}'^+(X_1) \hat{\Psi}'^+(X_2) | N-2 \rangle \\ &= \langle N+2 | T \hat{\Psi}'^+(X_1) \hat{\Psi}'^+(X_2) | N \rangle, \end{aligned} \quad (31.14)$$

en donde el elemento de matriz se toma para transiciones con variación en el número total de partículas del sistema y $|N\rangle$ designa el estado fundamental del sistema con N partículas; la última ecuación de (31.14) es válida hasta cantidades del orden $\sim 1/N$ (cf. la cuarta nota a pie de página en § 26). Las funciones F y F^+ así definidas se denominan *funciones de Green anómalas*. Demostraremos que en un líquido homogéneo en reposo son iguales.

Igual que la función G , las funciones F y F^+ en el caso de un líquido homogéneo dependen únicamente de la diferencia $X = X_1 - X_2$.[†] Puesto que al intercambiar X_1 y X_2 sólo se varía el orden de los operadores en el producto, que está regido en cualquier caso por el operador cronológico, tenemos

$$F(X) = F(-X). \quad (31.15)$$

[†] El hecho de que la función F sea independiente de la suma de tiempos $t_1 + t_2$ se debe a la inclusión del término $-\mu\hat{N}$ en la definición del hamiltoniano $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$. Esto excluye de la diferencia de valores propios de la energía de los sistemas con números diferentes de partículas el término

$$E(N+2) - E(N) \approx 2\partial E/\partial N = 2\mu,$$

y en correspondencia excluye también el factor $\exp[-i\mu(t_1 + t_2)]$ de los elementos de matriz del operador $\hat{\Psi}'_1 \hat{\Psi}'_2$.

De aquí se deduce, como es natural, que en la representación de los impulsos también F es una función par de su argumento:

$$F(\mathbf{P}) = F(-\mathbf{P}). \quad (31.16)$$

A continuación, se obtiene una relación entre F y F^+ a partir de la siguiente propiedad del operador de Heisenberg ψ de un líquido en reposo:[†]

$$\hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}) = \tilde{\Psi}(-t, -\mathbf{r}). \quad (31.17)$$

Tomando, por ejemplo, $t_2 > t_1$, se tiene así

$$\begin{aligned} iF^+(X_1, X_2) &= \langle N+2 | \hat{\Psi}'^+(X_2) \hat{\Psi}'^+(X_1) | N \rangle \\ &= \langle N | \tilde{\Psi}'^+(X_1) \tilde{\Psi}'^+(X_2) | N+2 \rangle \\ &= \langle N | \hat{\Psi}'(-X_1) \hat{\Psi}'(-X_2) | N+2 \rangle \\ &= iF(-X_1, -X_2), \end{aligned}$$

o sea $F^+(X) = F(-X)$. Utilizando (31.15) obtenemos entonces la relación buscada

$$F^+(X) = F(X). \quad (31.18)$$

Expresando $F(X)$ en función de los elementos de matriz de los operadores ψ podemos deducir para $F(\omega, \mathbf{p})$ un desarrollo análogo a (31.13) y determinar así los polos de la función, pero no nos entretendremos ahora en esta discusión, mencionando simplemente que los polos de $F(\omega, \mathbf{p})$ coinciden con los de $G(\omega, \mathbf{p})$.

[†] Puede demostrarse esta propiedad del modo siguiente. Todos los elementos de matriz no nulos de los operadores a_p y a_p^\dagger pueden definirse como cantidades reales; ver MC, (64.7), (64.8). En este sentido los operadores son reales, es decir $a_p^\dagger = \tilde{a}_p^* = \tilde{a}_p$ (\tilde{a} designa el operador traspuesto; cf. MC, § 3). El operador ψ de Schrödinger

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \sum_{\mathbf{p}} \delta_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}$$

tiene, por consiguiente, la propiedad $\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \tilde{\psi}(-\mathbf{r})$. De aquí resulta a su vez la ecuación (31.17) para el operador de Heisenberg

$$\hat{\Psi}(t, \mathbf{r}) = \exp(i\hat{H}t) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \exp(-i\hat{H}t),$$

como se ve fácilmente observando que (en el caso de un sistema sin interacciones de spin) es real el hamiltoniano \hat{H} (de modo que $\hat{H}^+ = \hat{H}$) y es invariable a la inversión. Sin embargo, debemos resaltar que si el hamiltoniano es real, no puede existir movimiento superfluído macroscópico en el líquido. En el caso de un sistema de Bose con condensado, el hamiltoniano depende de un parámetro macroscópico, la función de onda del condensado \mathcal{E} . En un líquido móvil este parámetro es complejo y, por consiguiente, el hamiltoniano también es complejo (pero, naturalmente, hermítico).

Para concluir esta sección, calculemos la función de Green $G^{(0)}$ de un gas de Bose ideal. En primer lugar, puesto que en el estado fundamental de dicho gas todas las partículas están en el condensado, el operador de aniquilación de partículas que están encima del condensado $\hat{\Psi}'$ da cero al actuar sobre la función de onda del estado fundamental. De aquí que la función $G^{(0)}(t, \mathbf{r})$ es únicamente no nula para $t = t_1 - t_2 > 0$ (cuando, de acuerdo con (31.2), actúa primero el operador de crecida $\hat{\Psi}'^+$).

Aunque el potencial químico $\mu = 0$ en el caso de un gas ideal, no utilizaremos este hecho ahora, considerando a μ como un parámetro libre no especificado de antemano; dicho procedimiento es necesario con vistas a la aplicación subsiguiente de $G^{(0)}$ a la técnica diagramática en el caso de un líquido arbitrario, en donde μ actúa como un parámetro. De acuerdo con ello, se escribe el operador $\hat{\Psi}^{(0)\prime}(t, \mathbf{r})$ como

$$\hat{\Psi}^{(0)\prime}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{p}} \exp \left[i \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{p^2}{2m} t + \mu t \right) \right], \quad (31.19)$$

que difiere de (26.1) en el término $i\mu t$ en los exponentes. Cuando se sustituye esta expresión en la definición de $G^{(0)}$, de acuerdo con (31.2), se observa que al promediar (o sea al tomar el elemento diagonal de la matriz) podemos obtener un resultado no nulo únicamente a partir de los productos $\hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$ y $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}}$. Pero, puesto que en el estado fundamental del gas son cero los números de ocupación de todos los estados de las partículas con $\mathbf{p} \neq 0$, se tiene

$$\langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \rangle = 0, \quad \langle \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \rangle = 1.$$

Pasando a continuación en la forma usual de la suma respecto a \mathbf{p} a la integración, se encuentra

$$G^{(0)}(t, \mathbf{r}) = \begin{cases} -i \int \exp \left[-i \frac{p^2}{2m} + i\mu t + i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \right] \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} & \text{para } t > 0, \\ 0 & \text{para } t < 0. \end{cases} \quad (31.20)$$

De aquí que la función de Green en la representación de los impulsos sea

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = -i \int_0^\infty \exp \left(-i \frac{p^2}{2m} t + i\mu t + i\omega t \right) dt.$$

Se efectúa la integración mediante la fórmula

$$\int_0^\infty e^{i\alpha t} dt = \frac{i}{\alpha + i0}, \quad (31.21)$$

que se deduce incluyendo en el integrando un factor $e^{-\lambda t}$ con $\lambda > 0$ y luego tomando el límite cuando $\lambda \rightarrow 0$. Finalmente tenemos

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = \left[\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu + i0 \right]^{-1}. \quad (31.22)$$

En el caso de un gas ideal la función $F^{(0)}(X) = 0$, como es evidente a partir de la definición (31.13) en la que ambos operadores aniquilan las partículas que hay encima del condensado. Por consiguiente, también en la representación del impulso

$$F^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = 0. \quad (31.23)$$

Esta ecuación expresa el hecho de que las partículas aparecen sobre el condensado (a $T = 0$) sólo como resultado de la interacción.

PROBLEMA

Hallar la función de Green de un campo de fonones, definida como

$$D(X_1, X_2) \equiv D(X_1 - X_2) = -i\langle \mathbf{T} \hat{\rho}'(X_1) \hat{\rho}'(X_2) \rangle, \quad (1)$$

en donde los corchetes angulares designan el proceso de promediar respecto al estado fundamental del campo y $\hat{\rho}'$ es el operador densidad de (24.10); el producto cronológico se desarrolla mediante la regla (31.2).

SOLUCIÓN. Al sustituir (24.10) en la definición (1) se observa que como en el estado fundamental son nulos todos los números de ocupación de los estados de fonones, únicamente son distintos de cero los valores medios $\langle \hat{c}_k \hat{c}_k^\dagger \rangle = 1$. Entonces, pasando de la suma respecto a \mathbf{k} a la integración, se obtiene

$$D(t, \mathbf{r}) = \int \frac{\varrho k}{2iu} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \mp ukt)} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}$$

en donde los signos menos y más en el exponente se refieren a $t > 0$ y $t < 0$, respectivamente; en la integral correspondiente a $t < 0$ hemos cambiado la variable de integración, $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$. El integrando (sin el factor $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$) es la componente de Fourier de la función $D(t, \mathbf{r})$ respecto a las coordenadas. Desarrollando también respecto al tiempo, se encuentra la función de Green en la representación de los impulsos

$$D(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\varrho k}{2iu} \left\{ \int_0^\infty e^{i(\omega - uk)t} dt + \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega + uk)t} dt \right\}.$$

La integración se lleva a cabo mediante (31.21),

$$D(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\varrho k}{2u} \left[\frac{1}{\omega - uk + i0} - \frac{1}{\omega + uk - i0} \right] = \frac{\varrho k^2}{\omega^2 - u^2 k^2 + i0}.$$

§ 32. Técnica diagramática para un líquido de Bose

La técnica diagramática para el cálculo de la función de Green de un sistema de Bose puede plantearse de modo semejante a como se hizo en el caso de los sistemas de Fermi en §§ 12 y 13. Formularemos de nuevo las reglas de esta técnica para sistemas con una interacción por pares de partículas, descrita por el operador

$$\hat{V}(t) = \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^+(t, \mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(t, \mathbf{r}_1) d^3x_1 d^3x_2. \quad (32.1)$$

La característica distintiva principal de los líquidos de Bose con condensado es que todos los operadores ψ de Heisenberg deben escribirse en la forma $\hat{\psi} = \hat{\psi}' + \Xi$ en donde $\hat{\psi}'$ es la parte correspondiente superior del condensado y Ξ la función de onda del condensado, que en el caso de un líquido en reposo es simplemente el número real $\sqrt{n_0}$.† Después de esta sustitución, el operador (32.1) se descompone en una serie de términos que contienen desde cuatro hasta cero operadores $\hat{\psi}'$ (junto con el número adicional correspondiente de factores $\sqrt{n_0}$).

Todo el estudio realizado en § 12 relativo al cambio de la representación de la interacción sigue siendo válido y el desarrollo subsiguiente de las expresiones obtenidas se lleva a cabo mediante el teorema de Wick, excepto en que ahora el intercambio de operadores ψ en el producto que hay que promediar no exige un cambio de signo. Sin embargo, la diferencia en la forma de los términos en los que se descompone el operador conduce a nuevos elementos de los diagramas de Feynman. Éstos se describirán en su forma final en la representación de los impulsos.

En cada vértice del diagrama tenemos de nuevo tres líneas que se encuentran: una línea a trazos asociada al factor $-iU(Q)$ con el cuadri-impulso $Q = (q_0, \mathbf{q})$ y dos líneas de partículas, una que entra y la otra que sale. Ahora debemos distinguir entre partículas del condensado y de la parte superior del mismo. Las líneas continuas corresponderán ahora a las partículas de encima del condensado y una de estas líneas (con el 4-impulso $P = (\omega, \mathbf{p})$) está de nuevo asociada con un factor $iG^{(0)}(P)$. Las líneas de partículas del condensado se dibujarán como líneas onduladas; éstas tienen asignado un 4-impulso $P = 0$ y un factor asociado $\sqrt{n_0^+}$.‡ Así pues, pueden aparecer cuatro tipos de vértices:



Los vértices con una o dos líneas onduladas se dice que están *incompletos*. En cada vértice debe cumplirse la «conservación del 4-impulso»; en los vértices (b) y (c),

† Debemos resaltar que, puesto que esta magnitud surge de la separación en partes del operador ψ exacto (de Heisenberg), n_0 es el valor exacto de la densidad del condensado en el líquido (a $T = 0$).

‡ Más precisamente, ha de asociarse un factor Ξ con una línea ondulada que llega a un vértice y un factor Ξ^* con una que emerge; puesto que Ξ es real estos factores son realmente iguales.

por tanto, el 4-impulso de la línea a trazos es igual al de la línea continua y es cero en el vértice (d). Las líneas onduladas son siempre líneas externas del diagrama es decir, se unen a él por un solo extremo, quedando libre el otro extremo.

Todos los diagramas que aparecen en la definición de la función de Green $G(P)$ tienen dos líneas externas continuas con 4-impulsos P (entrante y saliente) y también puede tener un cierto número (par) de líneas externas onduladas; los números totales de líneas externas entrantes y salientes son iguales en todos los diagramas (esto expresa la conservación del número total de partículas, condensado y encima del condensado, del sistema). Igual que en el caso de un sistema de Fermi, y por la misma razón (ver § 13), sólo son admisibles aquellos diagramas que no se separan en dos (o más) partes desconectadas. Sin embargo, a diferencia de los sistemas de Fermi, los diagramas en iG tienen todos el mismo signo, es decir, se elimina la regla 3 de § 13.

Cada línea a trazos del diagrama tiene un vértice completo o incompleto en sus dos extremos. Sin embargo, estos vértices no pueden ser los dos del tipo (32.2d): no poseyendo ningún extremo continuo, dicha figura no puede adherirse a un diagrama de una función de Green. Tampoco pueden ser vértices de los tipos (32.2d y c) o (32.2d y b): cuando existen tres líneas externas onduladas, la conservación del 4-impulso en los vértices significaría que el 4-impulso de la cuarta línea externa sería también cero en dicha figura, y habría una figura con cuatro líneas externas de condensado (onduladas).

Sin embargo, un número considerable de diagramas de cada orden de la teoría de perturbaciones, construidos con las reglas anteriores, son idénticamente nulos. Esto se debe a la ausencia de partículas de la parte superior del condensado en el estado fundamental de un gas ideal de Bose, como resulta particularmente claro si volvemos atrás siguiendo los diagramas hasta su origen en la representación de las coordenadas: todas las contracciones de la forma $\langle \hat{\Psi}'^+ \hat{\Psi}' \rangle$, en las que el operador de aniquilación de partículas por encima del condensado está a la derecha y actúa en primer lugar sobre el estado fundamental, son cero; esto deja sólo contracciones de la forma $\langle \hat{\Psi}' \hat{\Psi}'^+ \rangle$.†

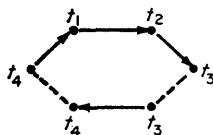
Los diagramas con una línea continua cerrada son cero: dicho tipo de línea surge de una contracción $\langle \hat{\Psi}'^+(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}'(t, \mathbf{r}) \rangle$, que es la densidad de partículas por encima del condensado. Los diagramas que contienen una línea continua cerrada mediante una línea a trazos



son cero: dicho tipo de línea surge de una contracción $\langle \hat{\Psi}'^+(t, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}'(t, \mathbf{r}_1) \rangle$ de dos operadores ψ dentro del mismo operador de interacción $\hat{V}(t)$, en el que $\hat{\Psi}'^+$ está a la izquierda de $\hat{\Psi}'$.

† Por una razón semejante, algunos diagramas fueron nulos en el caso de difusión de dos partículas en el vacío; cf. § 16.

Finalmente, son nulos todos los diagramas en los que se forma un circuito cerrado mediante cualquier secuencia de líneas continuas y a trazos estando todas las líneas continuas en el mismo sentido. Dicho diagrama puede representarse de la forma siguiente, habiéndose indicado los argumentos de tiempo de los operadores ψ en los puntos extremos de las líneas:



Los argumentos de los extremos de cada línea a trazos son iguales.[‡] Los de las funciones $G^{(0)}$ correspondientes a las líneas continuas son iguales a las diferencias $t_2 - t_1$, $t_3 - t_2$, $t_4 - t_3$, $t_1 - t_4$; en cada circuito cerrado su suma es cero, de modo que por lo menos uno de ellos es negativo y resulta nula la función correspondiente $G^{(0)}$.

Las reglas anteriores relacionan también los diagramas que determinan la función de Green anómala, siendo la única diferencia el que ambas líneas externas deben ser salientes (para F) o entrantes (para F^+). De acuerdo con ello, en estos diagramas los números de líneas onduladas que entran o salen dejan de ser iguales, pero el número de total de líneas salientes sigue siendo igual al número total de líneas entrantes. El 4-impulso P se asigna a una de las líneas continuas externas y $-P$ a la otra, siendo P el argumento de la función buscada $F(P)$ o $F^+(P)$;[§] la suma de los 4-impulsos de estas dos líneas debe ser nulo por la «ley de conservación de los 4-impulsos» aplicada a la totalidad del diagrama.

Las funciones de Green calculadas mediante la técnica diagramática contienen dos parámetros: el potencial químico μ y la densidad del condensado n_0 ; estos parámetros también han de estar relacionados con la densidad del líquido $n = N/V$. La fórmula (31.6) nos da una relación entre estas tres magnitudes, que se deduce inmediatamente a partir de la definición de la función de Green. Como segunda relación utilizaremos la ecuación (33.11) deducida más adelante, que expresa μ explícitamente en función de los conceptos de la técnica diagramática.

§ 33. Funciones de autoenergía

Examinemos más detenidamente la estructura de los diagramas en el caso de las funciones de Green, utilizando el concepto de la *función de autoenergía* del mismo

[‡] En la representación espacio-tiempo de los diagramas un factor $iU(X_1 - X_2)$ que contiene la función delta $\delta(t_1 - t_2)$ corresponde a una línea a trazos entre los puntos 1 y 2.

[§] Como F es una función par de su argumento, carece de importancia aquí la selección del signo para P .

modo que se hizo en § 14 en el caso de los sistemas de Fermi: considerando el conjunto de todos los diagramas (con dos líneas externas continuas) que no pueden cortarse en dos partes mediante la división de sólo una línea continua. Sin embargo, en contraste con § 14, existen ahora varias posibilidades con respecto al sentido de las líneas externas del diagrama: igual que existen diagramas con una línea que entra y otra que sale, pueden existir otros con dos líneas salientes o dos entrantes. De acuerdo con ello, existen partes de autoenergía de tres clases:

$$\begin{array}{c} -i\Sigma_{11} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ P \qquad \qquad \qquad P \end{array} \quad \begin{array}{c} -i\Sigma_{20} \\ \text{---} \rightarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ -P \qquad \qquad \qquad P \end{array} \quad \begin{array}{c} -i\Sigma_{02} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \rightarrow \text{---} \\ P \qquad \qquad \qquad -P \end{array} \quad (33.1)$$

(en esta notación los dos subíndices en Σ designan respectivamente los números de líneas externas continuas que entran y salen). Lo mismo que las líneas externas continuas, los diagramas de autoenergía tienen también en general extremos libres ondulados (condensado). Éstos están incluidos en la definición de la función de la autoenergía, que se representa aquí mediante un círculo. Veremos posteriormente que de hecho las funciones $\Sigma_{02}(P)$ y $\Sigma_{20}(P)$ son iguales:

$$\Sigma_{02}(P) = \Sigma_{20}(P). \quad (33.2)$$

En este punto podemos señalar también que, puesto que P y $-P$ aparecen simétricamente en la definición de estas funciones, son funciones pares:

$$\Sigma_{02}(P) = \Sigma_{02}(-P). \quad (33.3)$$

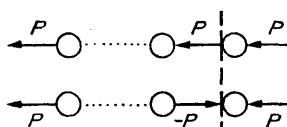
Como ilustración, los diagramas siguientes son todos los que no son nulos de las funciones Σ_{11} y Σ_{02} en los dos primeros órdenes de la teoría de perturbaciones:

$$\begin{array}{c} \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ P \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \end{array} \quad (33.4)$$

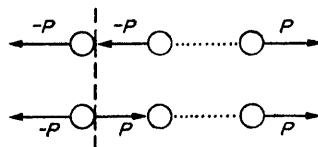
$$\begin{array}{c} \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ -P \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \\ \text{---} \leftarrow \text{---} \circ \text{---} \leftarrow \text{---} \end{array} \quad (33.5)$$

Establezcamos a continuación las ecuaciones que dan las funciones exactas G y F en función de las funciones de autoenergía.

Según la teoría de perturbaciones, la diferencia $G(P) - G^{(0)}(P)$ se expresa mediante una suma de un número infinito de diagramas en cadena



que se componen de diversos círculos unidos de todas las maneras posibles hacia adelante y hacia atrás mediante flechas (respecto a las dos más extremas). Análogamente, la función exacta F (la función $F^{(0)} \equiv 0$) se representa mediante una suma de diagramas en cadena en donde las dos flechas más exteriores tienen sentidos opuestos:



Si se separa de cada cadena el miembro extremo (círculo y flecha), como está indicado mediante la línea vertical a trazos, el conjunto de diagramas restantes con las flechas más exteriores en el mismo sentido coincidirá con la función exacta G y el conjunto de aquellos con las flechas más exteriores en sentidos opuestos coincidirán con la F exacta.

Introduciremos la notación gráfica para estas funciones, de flechas gruesas en uno o ambos sentidos

$$\begin{array}{c} \xleftarrow[P]{\quad} \\ iG(P) \end{array} \quad \begin{array}{c} \xleftarrow[P]{\quad} \xrightarrow[-P]{\quad} \\ iF(P) \end{array} \quad \begin{array}{c} \xleftarrow[P]{\quad} \xleftarrow[-P]{\quad} \\ iF^+(P) \end{array} \quad (33.6)$$

Entonces los enunciados siguientes pueden escribirse como ecuaciones gráficas compuestas de diagramas esqueletos:

$$\begin{array}{c} \xleftarrow[P]{\quad} = \xleftarrow[P]{\quad} + \xleftarrow[P]{\quad} \circlearrowleft \xleftarrow[P]{\quad} + \xleftarrow[P]{\quad} \circlearrowleft \xleftarrow[P]{\quad} \\ \xleftarrow[-P]{\quad} = \xleftarrow[-P]{\quad} \circlearrowright \xleftarrow[-P]{\quad} + \xleftarrow[-P]{\quad} \circlearrowright \xleftarrow[P]{\quad} \end{array} \quad \left. \right\} \quad (33.7)$$

Cf. la ecuación análoga (14.4). En forma analítica, estas ecuaciones dan†

$$\begin{aligned} G(P) &= [1 + \Sigma_{11}(P)G(P) + \Sigma_{20}(P)F(P)]G^{(0)}(P), \\ F(P) &= G^{(0)}(-P)[\Sigma_{11}(-P)F(P) + \Sigma_{02}(P)G(P)]. \end{aligned} \quad (33.8)$$

Resolviendo estas ecuaciones para G y F y sustituyendo (31.22) para $G^{(0)}$, obtenemos las fórmulas requeridas

$$G(P) = \frac{1}{D} \left[\omega + \frac{P^2}{2m} - \mu + \Sigma_{11}(-P) \right], \quad F(P) = -\frac{1}{D} \Sigma_{02}(P), \quad (33.9)$$

† Podía haberse escrito un sistema de ecuaciones semejante para G y F^+ , que difiriera de (33.8) únicamente por el intercambio de Σ_{02} y Σ_{20} . Como $F = F^+$, esto prueba (33.2).

en donde

$$D = [\Sigma_{02}(P)]^2 - \left[\Sigma_{11}(P) - \omega - i0 + \frac{p^2}{2m} - \mu \right] \left[\Sigma_{11}(-P) + \omega - i0 + \frac{p^2}{2m} - \mu \right] \quad (33.10)$$

Debe resaltarse que estas relaciones no dependen de la estructura interna de las funciones de autoenergía y, por consiguiente, no están conectadas con la hipótesis de las interacciones por pares de partículas; por tanto, son válidas para cualquier líquido de Bose.

La energía de las excitaciones elementales del líquido están determinadas, como una función del impulso \mathbf{p} , por los polos de F y G que son funciones de la variable ω . En el caso de \mathbf{p} pequeño, estas excitaciones son fonones y su energía tiende a cero con \mathbf{p} . De aquí que la función (33.10) debe anularse cuando $\mathbf{p} = 0$ y $\omega = 0$. A partir de ello se encuentra la ecuación

$$[\Sigma_{11}(0) - \mu]^2 = \Sigma_{02}^2(0).$$

Como ecuación de segundo grado en μ tiene dos raíces, de las cuales debemos escoger

$$\mu = \Sigma_{11}(0) - \Sigma_{02}(0). \quad (33.11)$$

En efecto, en el límite de onda larga, el operador ψ viene dado por (27.2) y la parte del mismo correspondiente a la parte de encima del condensado es $\hat{\Psi}' = \hat{\Psi} - \sqrt{n_0} \approx i\sqrt{n_0}\hat{\phi}$, de modo que $\hat{\Psi}'^+ = -\hat{\Psi}'$ y $F \approx -G$; esta última ecuación se satisface con la selección (33.11), cuando los numeradores de (33.9) (en el límite $P \rightarrow 0$) difieren sólo en el signo. La ecuación (33.11) es la segunda relación (ver el final de § 32) que, junto con (31.6), nos permite expresar los parámetros μ y n_0 en función de la densidad n del líquido.

El desarrollo subsiguiente de (33.10) en series de ω y \mathbf{p} determina la forma de la función de Green para valores pequeños de los argumentos. Ahora debemos tener en cuenta que las funciones escalares Σ_{11} y Σ_{02} se desarrollan en potencias de \mathbf{p}^2 y el desarrollo de Σ_{02} , que es función par de todos sus argumentos, contiene también sólo potencias pares de ω . Escribiendo (33.10) en la forma

$$D = \left\{ \omega + i0 + \frac{1}{2} [\Sigma_{11}(P) - \Sigma_{11}(-P)] \right\}^2 - \left\{ \frac{p^2}{2m} - \mu + \frac{1}{2} [\Sigma_{11}(P) + \Sigma_{11}(-P)] \right\}^2 + \Sigma_{02}^2(P),$$

obtenemos como conclusión inmediata que los primeros términos no nulos del desarrollo tienen la forma $D = \text{constante} \times (\omega^2 - u^2 p^2 + i0)$, en donde u es una constante.

tante, que evidentemente es la velocidad del sonido en el líquido. Observando además que, según (33.11), los numeradores de (33.9) para $\omega \rightarrow 0$ y $\mathbf{p} \rightarrow 0$ difieren sólo en el signo, se encuentra

$$G = -F = \frac{\text{constant}}{\omega^2 - u^2 p^2 + i0}.$$

Se determina la regla del contorno comparando con (31.8).

El valor de la constante del numerador puede determinarse calculando a partir de esta función de Green la distribución de los impulsos de las partículas $N(\mathbf{p})$ (en el caso de \mathbf{p} pequeño) y comparándola con la distribución conocida (27.7). La integral

$$N(\mathbf{p}) = i \lim_{t \rightarrow -0} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega, \mathbf{p}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$$

[cf. (7.23)] se calcula cerrando el contorno de integración mediante una semicircunferencia infinita en el semiplano superior (cf. la nota al final de § 7) y de acuerdo con esto se determina mediante el residuo en el polo $\omega = -up + i0$. El resultado es $N(\mathbf{p}) = \text{constante}/2up$ y se halla la constante por comparación con (27.7), que resulta ser $n_0 mu^2/n$. Así pues, tenemos finalmente la expresión siguiente para las funciones de Green con ω y \mathbf{p} pequeños:

$$G = -F = n_0 mu^2/n(\omega^2 - u^2 p^2 + i0). \quad (33.12)$$

Esta función coincide (aparte de un coeficiente de normalización) con la función de Green del campo de fonones (ver § 31, problema) — resultado que es totalmente razonable, puesto que para ω y \mathbf{p} pequeños las excitaciones elementales en un líquido de Bose son fonones.

Finalmente, mostraremos la aplicación de las fórmulas anteriores al modelo (§ 25) de un gas de Bose casi ideal con interacción por pares entre partículas. En la teoría de perturbaciones de primer orden, Σ_{11} y Σ_{02} están determinadas por los dos primeros diagramas (33.5). Desarrollándolas en forma analítica, se tiene

$$\Sigma_{11} = n_0[U_0 + U(\mathbf{p})], \quad \Sigma_{02} = n_0U(\mathbf{p}).$$

Con la misma exactitud, la densidad del condensado n_0 puede reemplazarse por la densidad total del gas n . Como se mencionó en § 25, los impulsos de las partículas del gas en este modelo pueden considerarse como pequeños y de acuerdo con ello pueden sustituirse los componentes de Fourier $U(\mathbf{p})$ por su valor U_0 a $\mathbf{p} = 0$. Entonces

$$\Sigma_{11} = 2nU_0, \quad \Sigma_{02} = nU_0. \quad (33.13)$$

La sustitución de estas expresiones en (33.11) da $\mu = nU_0$, de acuerdo con (25.6). La sustitución en (33.9) y (33.10) conduce a las fórmulas siguientes para las funciones de Green:

$$\left. \begin{aligned} G(\omega, \mathbf{p}) &= \frac{\omega + p^2/2m + nU_0}{\omega^2 - \varepsilon^2(p) + i0}, \\ F(\omega, \mathbf{p}) &= \frac{-nU_0}{\omega^2 - \varepsilon^2(p) + i0}, \end{aligned} \right\} \quad (33.14)$$

en donde

$$\varepsilon(p) = \left[\left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 + \frac{p^2}{m} nU_0 \right]^{1/2}.$$

A partir de la forma de los denominadores de estas funciones resulta claro que $\varepsilon(p)$ es la energía de las excitaciones elementales, de acuerdo con el resultado (25.10), (25.11) obtenido previamente por un método diferente.

§ 34. Desintegración de las cuasipartículas

El periodo de vida finito (desintegración) de una cuasipartícula en un líquido cuántico puede ser debido a colisiones con otras cuasipartículas o a desintegración espontánea en dos o más cuasipartículas nuevas. Cuando la temperatura $T \rightarrow 0$, desaparece la primera causa de desintegración, puesto que la probabilidad de colisión tiende a cero con la densidad numérica de las cuasipartículas y entonces su pérdida se debe sólo a la desintegración de las cuasipartículas.

Consideremos la desintegración de una cuasipartícula (con impulso \mathbf{p}) en dos. Si \mathbf{q} es el impulso de una de las cuasipartículas resultantes, el de la otra es $\mathbf{p} - \mathbf{q}$ y la ley de conservación de la energía nos da la condición

$$\varepsilon(p) = \varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|). \quad (34.1)$$

Puede ocurrir que en algún margen de valores de p esta ecuación no se vea satisfecha por ningún valor de \mathbf{q} ; entonces las cuasipartículas no sufren ningún proceso de pérdida en absoluto (si también es imposible, como es natural, la desintegración en un número mayor de cuasipartículas). Cuando p varía, empieza el proceso en el valor $p = p_c$ (umbral de desintegración) para el cual tiene solución por primera vez la ecuación (34.1).

En primer lugar, debe señalarse que en el punto $p = p_c$ el segundo miembro de (34.1) tiene un extremal como función de \mathbf{q} . Supongamos que el valor extremal de la

suma $\varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|)$ para un valor p dado sea $E(p)$; tomaremos el caso particular en el que se trata de un mínimo. Entonces, en la ecuación

$$\varepsilon(p) - E(p) = \varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) - E(p),$$

el segundo miembro es no negativo. Por consiguiente, la ecuación ciertamente no tiene raíces para valores de p tales que $\varepsilon(p) - E(p) < 0$; sólo aparecerá una raíz en el punto $p = p_c$, para el cual $\varepsilon(p_c) = E(p_c)$.

Poniendo la ecuación (34.1) en la forma simétrica

$$\varepsilon(p) = \varepsilon(q_1) + \varepsilon(q_2), \quad \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{p},$$

se encuentra que la condición para un extremal de su segundo miembro puede escribirse $\partial\varepsilon/\partial\mathbf{q}_1 = \partial\varepsilon/\partial\mathbf{q}_2$, o sea

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2, \tag{34.2}$$

es decir, las dos cuasipartículas formadas en el punto umbral tienen velocidades iguales. Aquí podemos distinguir varios casos (L. P. Pitaevskii 1959).

(a) La velocidad de la cuasipartícula en el líquido de Bose es cero para el impulso $p = p_0$ correspondiente al mínimo de los rotones sobre la curva en la figura 2 (§ 22). De aquí que, si $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2 = 0$, la cuasipartícula se desintegra en el umbral en dos rotones con impulsos p_0 y energías Δ . De acuerdo con esto, la energía de la cuasipartícula que se desintegra es $\varepsilon(p_c) = 2\Delta$ y su impulso p_c está relacionado con p_0 mediante la condición $\mathbf{p}_c = \mathbf{p}_{01} + \mathbf{p}_{02}$, es decir, $2p_0 \cos \theta = p_c$, siendo 2θ el ángulo que forman entre sí las direcciones de los dos rotones. De aquí se deduce que debemos tener siempre

$$p_c < 2p_0. \tag{34.3}$$

(b) Si las velocidades son $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2 \neq 0$ y son finitos los impulsos correspondientes \mathbf{q}_1 y \mathbf{q}_2 , la desintegración en el umbral origina dos cuasipartículas con impulsos colineales (paralelos o antiparalelos).†

(c) Si las velocidades \mathbf{v}_1 y \mathbf{v}_2 no son nulas pero uno de los impulsos (el \mathbf{q}_1 , por ejemplo) tiende a cero cerca del umbral, la cuasipartícula correspondiente es un fonón y la velocidad $v_1 = u$. Tenemos entonces un umbral, más allá del cual es posible la creación de un fonón por la cuasipartícula. En el propio umbral, la energía del fonón es cero y la velocidad de la cuasipartícula llega a ser igual a la del sonido (igual a $v_1 = v_2 = u$).

† Debido a la isotropía del líquido, las direcciones del impulso \mathbf{p} y de la velocidad $\mathbf{v} = \partial\varepsilon/\partial\mathbf{p}$ de las cuasipartículas son colineales, pero pueden tener sentidos iguales u opuestos.

(d) Existe un caso especial, en el que existe una desintegración de un fonón en dos, estando el umbral en el comienzo del espectro, $p = 0$. Sin embargo, dicha desintegración es posible sólo para un signo de la curvatura de la parte inicial (de los fonones) del espectro: debemos tener $d^2\epsilon(p)/dp^2 > 0$, es decir, la curva de $\epsilon(p)$ debe girar hacia arriba a partir de la tangente inicial $\epsilon = up$. Esto puede verse fácilmente representando esta parte del espectro como

$$\epsilon(p) \approx up + \alpha p^3, \quad (34.4)$$

que incluye tanto el término lineal como el siguiente término en el desarrollo de potencias del impulso pequeño‡. La ecuación de la conservación de la energía da entonces

$$u(p - q - |\mathbf{p} - \mathbf{q}|) = -\alpha(p^3 - q^3 - |\mathbf{p} - \mathbf{q}|^3).$$

Cerca del umbral, el fonón se emite con un ángulo θ pequeño respecto a la dirección del impulso de la cuasipartícula inicial p ; en el primer miembro tenemos

$$p - q - |\mathbf{p} - \mathbf{q}| \approx -\frac{pq}{p - q} (1 - \cos \theta), \quad (34.5)$$

y en el segundo miembro es suficiente poner $|\mathbf{p} - \mathbf{q}| \approx p - q$. Entonces

$$1 - \cos \theta = 3\alpha(p - q)^2. \quad (34.6)$$

De aquí se deduce que necesariamente $\alpha > 0$.

Veremos posteriormente (§ 35) que en los casos (a) y (b) la función $\epsilon(p)$ no puede continuarse más allá del umbral, que es así el final del espectro. En los casos (c) y (d) la desintegración de una cuasipartícula con emisión de un fonón de longitud de onda larga produce un ligero decaimiento que puede determinarse mediante la teoría de perturbaciones†

Calculemos el decaimiento de un fonón debido a su desintegración en dos fonones [caso (d)]. Los elementos de matriz para este proceso proceden de los términos de tercer orden en el hamiltoniano, dado por (24.12). En el caso de una transición

‡ La relación de dispersión en el caso de vibraciones acústicas da la frecuencia al cuadrado ω^2 en función del vector de onda. De acuerdo con ello, la energía del fonón al cuadrado $\epsilon^2(p)$ tiene un desarrollo regular en potencias del impulso \mathbf{p} ; el desarrollo empieza con un término en \mathbf{p}^2 y continúa con potencias de \mathbf{p}^2 debido a la isotropía del líquido. Por tanto, el propio desarrollo de $\epsilon(p)$ contiene potencias impares de \mathbf{p} .

† Cual de estos casos puede presentarse realmente en la práctica depende de la forma específica del espectro de la cuasipartícula $\epsilon(p)$. Los resultados empíricos para el He⁴ líquido indican la presencia (a presiones por debajo de 15 atm) de una corta sección inicial del espectro de los fotones en la que existe una inestabilidad del tipo (d). El espectro del helio líquido termina en un punto del tipo (a).

del estado inicial (*i*) con un fonón **p** al estado final (*f*) con fonones **q**₁ y **q**₂, el elemento de matriz del operador de perturbación es

$$V_{fi} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \frac{3!(2\pi\hbar)^3}{2(2V)^{3/2}} \left(\frac{u}{\varrho} pq_1 q_2 \right)^{1/2} \left\{ 1 + \frac{\varrho^2}{3u^2} \frac{d}{d\varrho} \frac{u^2}{\varrho} \right\}; \quad (34.7)$$

el subíndice 0 de la densidad sin perturbar ϱ_0 se ha omitido. El factor $(pq_1 q_2)^{1/2}$ debe hacerse notar; su pequeñez (en esta desintegración de un fonón de longitud de onda grande) asegura la aplicabilidad de la teoría de perturbaciones.[‡]

La probabilidad de desintegración diferencial por unidad de tiempo viene dado por

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \frac{V^2 d^3 q_1 d^3 q_2}{(2\pi\hbar)^6};$$

ver *MC*, (43.1). Cuando se sustituye (34.7), aparece una función delta al cuadrado, que ha de interpretarse como[§]

$$[\delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)]^2 = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2). \quad (34.8)$$

La función delta restante se elimina integrando respecto a $d^3 q_2$; haciendo también $E_i = up$, $E_f = u(q_1 + q_2)$, obtenemos

$$w = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\varrho^2}{3u^2} \frac{d}{d\varrho} \frac{u^2}{\varrho} \right\}^2 \frac{9\pi}{4\hbar p} \int p q_1 (p - q_1) \delta(p - q_1 - |\mathbf{p} - \mathbf{q}_1|) \frac{d^3 q_1}{(2\pi\hbar)^3};$$

con integración independiente respecto a $d^3 q_1$ y $d^3 q_2$, el resultado debe dividirse por dos, debido a la identidad entre ambos fonones. Finalmente, expresando el argumento de la función delta en la forma (34.5) y llevando a cabo la integración respecto a $d^3 q_1 = 2\pi q_1^2 dq_1 d \cos \theta$ (en el intervalo $q_1 \leq p$), encontramos la probabilidad de desintegración total

$$w = \frac{3p^5}{320\pi\varrho\hbar^4} \left\{ 1 + \frac{\varrho^2}{3u^2} \frac{d}{d\varrho} \frac{u^2}{\varrho} \right\}^2. \quad (34.9)$$

[‡] Para calcular el elemento de matriz (34.7) debemos tener en cuenta que cada uno de los operadores de fonones $\hat{e}_{\mathbf{p}}$ y $\hat{e}_{\mathbf{p}}^+$ puede obtenerse de cualquiera de los tres factores $\hat{\varrho}'$ y $\hat{\mathbf{v}}$; esta es la razón del factor $3!$. La función delta en (34.7) surge de la integración del factor $\exp[i(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{r}/\hbar]$. Finalmente se ha tenido en cuenta el hecho de que son casi iguales las direcciones de **p**, **q**₁ y **q**₂.

[§] La función $\delta(\mathbf{k})$ procede de la integral $\int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 k / (2\pi)^3$. Si la otra integral semejante se calcula para $\mathbf{k} = 0$ (porque ya existe una función delta) y la integración se realiza sobre un volumen finito V , se obtiene $V/(2\pi)^3$, como se expresa mediante la fórmula (34.8).

El coeficiente de decaimiento del fonón $\gamma \equiv -\text{im } \varepsilon = \frac{1}{2}\hbar w$. En particular, en el caso de un gas casi ideal, de acuerdo con (25.11) $u^2/\rho \approx 4\pi\hbar^2 a/m^3$ es independiente de la densidad. En este caso

$$\gamma = 3p^5/640\pi\hbar^3\rho \quad (34.10)$$

(S. T. Belyaev 1958).

En el caso de emisión de fonones por una cuasipartícula cerca de un umbral del tipo (c), se establece la forma del operador de perturbación considerando la variación de la energía de la cuasipartícula de la onda sonora. Esta variación se compone de dos partes:

$$\delta\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \rho' + \mathbf{v} \cdot \mathbf{p}.$$

El primer término se debe a la variación de la densidad del líquido, respecto a la cual la energía de la cuasipartícula depende de forma paramétrica. El segundo término, en el que \mathbf{v} es la velocidad del líquido en la onda sonora, es la variación de energía de la cuasipartícula debido al movimiento macroscópico del líquido; puesto que la longitud de onda del fonón emitido (cerca del umbral) es grande en comparación con la longitud de onda de la cuasipartícula, podemos suponer que esta última está en un flujo uniforme de fluido y la variación de su energía está entonces determinada, como se vio al principio de § 23. Se halla el operador de perturbación a partir de $\delta\varepsilon$ sustituyendo $\mathbf{v} = \nabla\phi$ y ρ' por los operadores de la segunda cuantización (24.10) y \mathbf{p} por el operador impulso de la cuasipartícula $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$:

$$\hat{\mathcal{V}} = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho} \hat{\rho}' + \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{v}});$$

en el segundo término, el producto se ha simetrizado con objeto de ponerlo en forma hermética. Se calcula entonces la probabilidad de emisión de los fonones como se indicó previamente en el caso de la desintegración de fonones (ver problema).

PROBLEMA

Determinar la probabilidad de emisión de fonones por una cuasipartícula cuyo impulso p está próximo al valor umbral p_c en el cual la velocidad de la cuasipartícula alcanza a la del sonido.

SOLUCIÓN. El elemento de matriz del operador (34.11) se toma para la creación de un fonón (con impulso \mathbf{q}) y la transición simultánea de la cuasipartícula entre estados (ondas planas) con

impulsos \mathbf{p} y \mathbf{p}' . Cerca del umbral, el impulso de fonón $q \ll p_c$ y la dirección de \mathbf{q} es casi igual que la de \mathbf{p} .[†] Se encuentra entonces

$$V_{fi} = -i(2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \frac{A}{V^{3/2}} \left(\frac{qu}{2\varrho} \right)^{1/2},$$

en donde

$$A = p_c + \left[\frac{\varrho}{u} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \varrho} \right]_{\mathbf{p} = \mathbf{p}_c}.$$

Por tanto, la probabilidad diferencial de emisión de los fonones es

$$dw = \frac{\pi qu}{\hbar Q} A^2 \delta[\varepsilon(p) - \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) - uq] \frac{d^3 q}{(2\pi\hbar)^3};$$

la función delta del impulso se elimina por integración respecto a $d^3 p'$. Escribiendo el argumento de la función delta en la forma aproximada — $uq(1 - \cos \theta)$ e integrando respecto a $d^3 q$, se obtiene

$$w = 2A^2(p - p_c)^3 / 3\pi\varrho\hbar^4.$$

§ 35. Propiedades del espectro cerca de su punto final

En esta sección consideraremos las propiedades del espectro de un líquido de Bose cerca de los umbrales de desintegración de las excitaciones elementales en dos cuasipartículas, ninguna de las cuales es un fonón [casos (a) y (b) en § 34].[‡] En contraste con las desintegraciones en que se crean fonones, estos casos no permiten la aplicación de la teoría de perturbaciones y, con objeto de llevar a cabo su estudio, es necesario aclarar la naturaleza de las singularidades de las funciones de Green del líquido en los puntos umbrales. Por otra parte, puesto que sólo estamos interesados en estas singularidades, podemos esquematizar ampliamente y simplificar así los cálculos. En particular no necesitamos distinguir entre las funciones F y G (puesto que sus propiedades analíticas son las mismas) y podemos proceder como si sólo existiese un tipo de funciones de Green; teniendo en cuenta que la

[†] Estamos considerando el caso particular en el que el fonón se emite en ese sentido (y no en el opuesto). Para que esto sea así, $\varepsilon(p)$ cerca del umbral debe tener la forma

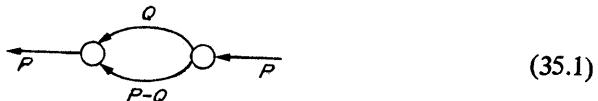
$$\varepsilon(p) \approx \varepsilon(p_c) + (p - p_c)u + \alpha(p - p_c)^2,$$

con un signo más en el término lineal. A partir de la ley de la conservación de la energía, se ve fácilmente que la emisión de fonones es entonces posible si $\alpha > 0$, lo que ocurre cuando $p > p_c$; el impulso del fonón emitido toma valores comprendidos en el intervalo $0 \leq q \leq 2(p - p_c)$.

[‡] Los resultados de esta sección se deben a L. P. Pitaevskii (1959).

diferencia entre F y G produciría simplemente algunos términos con análogas propiedades analíticas en las ecuaciones, esto no influiría en los resultados.

El hecho de que la singularidad de importancia en la función de Green está relacionada con la desintegración de una cuasipartícula en otras dos, desde el punto de vista de la técnica diagramática significa que surge a partir de diagramas del tipo



que pueden cortarse a través de dos líneas continuas, es decir, que contienen estados intermedios de dos partículas. En estos diagramas, existe una integración respecto al 4-impulso intermedio $Q = (q_0, \mathbf{q})$ y juega un papel decisivo (en lo que se refiere a la presencia de la singularidad) el margen de valores de Q y $P - Q$ con los que se forman los productos de la desintegración de la cuasipartícula cerca del umbral. La proposición básica de la teoría que daremos a continuación es que este intervalo de valores del 4-impulso no es especial en cuanto se refiere a la función de Green $G(Q)$ que tiene allí la forma polar usual

$$G(Q) \equiv G(q_0, \mathbf{q}) \propto [q_0 - \varepsilon(\mathbf{q}) + i0]^{-1}, \quad (35.2)$$

en donde la función $\varepsilon(\mathbf{q})$ es la energía de las cuasipartículas formadas y no tiene singularidad. La única característica físicamente distintiva de este intervalo es que dentro de él, la cuasipartícula puede «pegarse» a otra cuasipartícula, pero este proceso es imposible a la temperatura cero, debido a la ausencia de excitaciones reales. La única región especial a efectos de la función de Green es el margen de valores de P [líneas externas en los diagramas (35.1)] cerca del umbral de desintegración de la cuasipartícula original.

Las dos líneas que se unen en el diagrama (35.1) corresponden a los factores $G(Q)G(P - Q)$, y en ellas existe una integración respecto a Q . Ahora, puesto que sólo es importante un pequeño intervalo de valores de Q , los restantes factores del diagrama pueden considerarse como constantes en la integración e igualar sus valores al del umbral $Q = Q_c$. † Así pues, el diagrama incluye un factor expresado por la integral

$$\Pi(P) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4Q}{[q_0 - \varepsilon(\mathbf{q}) + i0][\omega - q_0 - \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) + i0]},$$

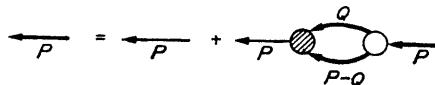
† Este punto no es necesario precisarlo más. Como los factores $G(Q)G(P - Q)$ son independientes del ángulo ϕ que define la posición del plano (\mathbf{p}, \mathbf{q}) , resulta que la integración respecto a ϕ equivale a promediar el resto del integrando respecto a ϕ y luego d^4Q puede escribirse en la forma $2\pi q^2 dq_0 dq d\theta \cos \theta$. En esta integración respecto a d^4Q , sólo tiene importancia un pequeño margen de valores. Esta nota se aplica también a las etapas correspondientes de los cálculos que siguen.

en donde $P = (\omega, \mathbf{p})$. La integración respecto a q_0 se lleva a cabo cerrando el contorno de integración con una semicircunferencia infinita en un semiplano de la variable compleja q_0 resultando

$$\Pi(P) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{\omega - \varepsilon(q) - \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) + i0}. \quad (35.3)$$

Volveremos posteriormente al estudio de esta integral; primeramente debemos expresar en función de la misma la función exacta requerida $G(P)$, sumando a tal fin todos los diagramas de la forma (35.1).

En el caso de la función $G(P)$ podemos escribir una ecuación diagramática de Dyson:



$$(35.4)$$

Las líneas gruesas representan ahora la función exacta iG y las líneas finas la parte «no singular» de esta función, determinada por el conjunto de diagramas que no pueden dividirse a través de dos líneas. El segundo término del segundo miembro de (35.4) representa el conjunto de diagramas de la forma (35.1). El círculo blanco representa la función vértice de «tres puntos» exacta, que designaremos por $\Gamma(Q, P - Q, P)$; el círculo sombreado es su parte no singular, que excluye aquellos diagramas que pueden dividirse a través de dos líneas continuas.[†] Como se aplicó previamente, la integración respecto a $d^4 Q$ conduce a la presencia del factor $\Pi(P)$ y los restantes factores del diagrama se sustituyen por sus valores en $Q = Q_c$. Así pues, la ecuación (35.4) significa que

$$G(P) = a(P) + b(P) G(P) \Gamma_c(P) \Pi(P), \quad (35.5)$$

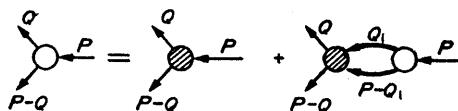
en donde $\Gamma_c(P) = \Gamma(Q_c, P - Q_c, P)$ y $a(P)$, $b(P)$ son ciertas funciones regulares cerca del umbral $P = P_c$.

En (35.5) existen dos funciones singulares G y Γ_c y para expresarlas en función de Π se necesita, por tanto, una ecuación adicional. Ésta se halla observando que la función vértice exacta Γ se representa mediante una serie en «escalera»:



[†] El caso aquí es análogo a la ecuación de Dyson en electrodinámica cuántica (ver TCR, § 104): como allí, se obtiene el conjunto completo de diagramas requerido aplicando correcciones a una sola de las funciones vértice.

análoga a (17.3) para una función vértice de cuatro puntos. La suma de dicha serie da la ecuación



[cf. (17.4)]; en forma analítica, con $Q \approx Q_c$, da

$$\Gamma_c(P) = c(P) + d(P) \Pi(P) \Gamma_c(P),$$

en donde $c(P)$ y $d(P)$ son funciones regulares. Eliminando a continuación Γ_c entre las dos ecuaciones obtenidas, se encuentra la expresión buscada para la función de Green expresada como función de Π :

$$G^{-1}(P) = \frac{A(P) \Pi(P)}{1 + B(P) \Pi(P)} + C(P), \quad (35.6)$$

en donde A , B y C son funciones que son asimismo regulares.

Los cálculos siguientes son diferentes para los diversos tipos de desintegración de las cuasipartículas.

(a) *Umbral para la desintegración en dos rotones.*

En este caso, la energía $\varepsilon(q)$ de las partículas formadas cerca del umbral viene dada por (22.6) y la integral (35.3) se reduce a

$$\Pi(\omega, q) = \int \left\{ \omega - 2A - \frac{1}{2m^*} [(q - p_0)^2 + (|\mathbf{p} - \mathbf{q}| - p_0)^2] \right\}^{-1} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}. \quad (35.7)$$

Para la integración utilizaremos nuevas variables q'_z , q'_θ , de acuerdo con las definiciones

$$\begin{aligned} q_x &= (p_0 \sin\theta + q'_\theta) \cos\phi, \\ q_y &= (p_0 \sin\theta + q'_\theta) \sin\phi, \\ q_z &= p_0 \cos\theta + q'_z, \end{aligned}$$

estando el eje z dirigido a lo largo de la dirección de \mathbf{p} y estando definido el ángulo θ por la ecuación $2p_0 \cos\theta = p$. Cerca del umbral, q'_z y q'_θ son pequeñas y tenemos con la exactitud necesaria

$$\begin{aligned} q &\approx p_0 + q'_\theta \sin\theta + q'_z \cos\theta, \\ |\mathbf{p} - \mathbf{q}| &\approx p_0 + q'_\theta \sin\theta - q'_z \cos\theta, \\ d^3 q &\approx p_0 \sin\theta dq'_\theta dq'_z d\phi. \end{aligned}$$

La expresión entre corchetes de (35.7) se reduce a

$$\left\{ \omega - 2\Delta - \frac{1}{m^*} (q'_e \sin^2 \theta + q'_z \cos^2 \theta) \right\}$$

y después de otro cambio de variables

$$q'_e \sin \theta = \sqrt{m^*} \varrho \cos \psi, \quad q'_z \cos \theta = \sqrt{m^*} \varrho \sin \psi$$

se encuentra, integrando respecto a ψ ,

$$\Pi(\omega, \mathbf{p}) = - \frac{m^* p_0}{2\pi \cos \theta} \int \frac{\varrho d\varrho}{-\omega + 2\Delta + \varrho^2}.$$

La divergencia de esta integral para valores grandes de ϱ se debe únicamente a las aproximaciones realizadas y carece de importancia; si se corta la integral a cierto valor $\varrho^2 \gg |2\Delta - \varepsilon|$ se tiene una contribución solamente a la parte regular de Π . La parte singular de esta función, que es la que nos preocupa, procede del intervalo próximo al límite inferior de la integración y resulta ser

$$\Pi \propto \log \frac{1}{2\Delta - \omega}. \quad (35.8)$$

En el caso de valores pequeños de $2\Delta - \omega$ este logaritmo es grande; sustituyendo (35.8) en (35.6) y desarrollando en potencias inversas del logaritmo, se obtiene

$$G^{-1}(\omega, \mathbf{p}) = b + c \left(\log \frac{a}{2\Delta - \omega} \right)^{-1},$$

en donde a , b y c son otras funciones regulares de ω y \mathbf{p} . En el umbral ($p = p_c$), la energía de las cuasipartículas que se están desintegrando está determinada por los ceros de G^{-1} ; esto significa que $G^{-1}(2\Delta, p_c) = 0$ y para ello debe cumplirse que $b(2\Delta, p_c) = 0$. La función regular $b(\omega, \mathbf{p})$ se desarrolla en potencias enteras de las diferencias $p - p_c$ y $\omega - 2\Delta$; sustituyendo también las funciones regulares $a(\omega, \mathbf{p})$ y $c(\omega, \mathbf{p})$ por sus valores en el umbral, llegamos a la expresión siguiente para la función de Green en la región cercana al umbral:

$$G^{-1}(\omega, \mathbf{p}) = \beta \left[p - p_c + \alpha \left(\log \frac{a}{2\Delta - \omega} \right)^{-1} \right], \quad (35.9)$$

en donde α , β y γ son constantes.

Igualando a cero esta expresión, se encuentra el espectro $\varepsilon(p)$ cerca del umbral. Si el margen en el que es imposible la desintegración corresponde a $p < p_c$, $\varepsilon < 2\Delta$, las constantes α y β deben ser positivas y la ecuación $G^{-1} = 0$ tiene la solución sin decaimiento:

$$\varepsilon = 2\Delta - \alpha \exp\left(-\frac{\alpha}{p_c - p}\right). \quad (35.10)$$

Vemos que el espectro alcanza el umbral con una tangente horizontal de orden infinito. Sin embargo, en el intervalo $p > p_c$, la ecuación $G^{-1} = 0$ no tiene soluciones reales o complejas, con $\varepsilon \approx 2\Delta$ para $p \approx p_c$. En este sentido el espectro no continúa más allá del umbral, sino que termina allí.[†]

(b) *Umbral en el caso de desintegración en dos cuasipartículas con impulsos paralelos.*

Como en el umbral, para $p = p_c$, la expresión $\varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} + \mathbf{q}|)$ debe tener un mínimo como función de \mathbf{q} , su forma cerca del umbral es

$$\varepsilon(q) + \varepsilon(|\mathbf{p} - \mathbf{q}|) = \varepsilon_c + v_c(p - p_c) + \alpha(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)^2 + \beta[(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \cdot \mathbf{p}_c]^2, \quad (35.11)$$

en donde α y β son constantes, v_c es la velocidad de cada una de las cuasipartículas formadas por desintegración en el umbral y \mathbf{q}_0 es el impulso de una de ellas. Sustituyendo (35.11) en (35.3) y utilizando nuevas variables de integración definidas por

$$\rho = \mathbf{q} - \mathbf{q}_0, \quad \rho \cdot \mathbf{p}_c = \varrho p_c \cos \psi,$$

obtenemos

$$\Pi(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{\varrho^2 d\varrho d \cos \psi}{\varepsilon - \varepsilon_c - v_c(p - p_c) - \alpha \varrho^2 - \beta \varrho^2 p_c^2 \cos^2 \psi}.$$

Esta integral tiene una singularidad en forma de raíz cuadrada en el umbral:

$$\Pi \propto [v_c(p - p_c) - (\varepsilon - \varepsilon_c)]^{1/2}. \quad (35.12)$$

Sustituyendo esta expresión en (35.6), se encuentra la función de Green cerca del umbral:

$$G^{-1}(\omega, \mathbf{p}) = A(\omega, \mathbf{p}) + B(\omega, \mathbf{p})[v_c(p - p_c) - (\omega - \varepsilon_c)]^{1/2}.$$

[†] Como ya se ha mencionado en la tercera nota a § 34, el espectro del helio líquido termina de hecho en un punto de este tipo; la curva de la figura 2 se approxima a la línea recta $\varepsilon = 2\Delta$, con una tangente horizontal.

Como $G^{-1}(\varepsilon_c, \mathbf{p}_c) = 0$ y A y B son funciones regulares, podemos desarrollar el segundo miembro en potencias de $p - p_c$ y $\omega - \varepsilon_c$ y obtener finalmente

$$G^{-1} \propto [v_c(p-p_c) - (\omega - \varepsilon_c)]^{1/2} + [a(p-p_c) + b(\omega - \varepsilon_c)], \quad (35.13)$$

siendo a y b constantes.

La forma del espectro queda determinada por la ecuación $G^{-1}(\varepsilon, \mathbf{p}) = 0$. Busquemos su solución en la forma $\varepsilon - \varepsilon_c = v_c(p - p_c) + \text{constante} \times (p - p_c)^2$; si ésta existe para $p < p_c$, debemos tener $a + bv_c > 0$, y entonces

$$\varepsilon = \varepsilon_c + v_c(p-p_c) - (a+bv_c)^2(p-p_c)^2. \quad (35.14)$$

Con la misma condición en $p > p_c$, la ecuación $G^{-1} = 0$ no tiene ninguna solución con $\varepsilon \approx \varepsilon_c$ para $p \approx p_c$. Así pues, en este caso también el espectro termina en el umbral.

CAPÍTULO IV

FUNCIONES DE GREEN A TEMPERATURAS NO NULAS

§ 36. Funciones de Green a temperaturas distintas de cero[†]

La definición de la función de Green de un sistema macroscópico a temperaturas no nulas difiere de la realizada a temperatura cero sólo en que se sustituye la acción de promediar respecto al estado fundamental de un sistema cerrado por el promedio sobre una distribución de Gibbs: el símbolo $\langle \dots \rangle$ designa ahora

$$\langle \dots \rangle = \sum_n w_n \langle n | \dots | n \rangle, \quad w_n = \exp\left(\frac{\Omega - E'_n}{T}\right), \quad (36.1)$$

en donde la suma se extiende a todos los estados del sistema (que se distinguen entre sí, tanto por su energía E_n como por el número de partículas N_n), $E'_n = E_n - \mu N_n$ y $\langle n | \dots | n \rangle$ es el elemento de matriz diagonal respecto al estado n . Los valores medios así definidos son funciones de las variables termodinámicas T, μ y V .

En el estudio de las propiedades analíticas de las funciones de Green a temperaturas no cero (L. D. Landau 1958) es conveniente utilizar lo que se denominan funciones de Green retardada y avanzada, cuyas propiedades analíticas son más sencillas.[‡] Consideraremos el caso particular de los sistemas de Fermi.

La función de Green retardada se define por

$$iG_{\alpha\beta}^R(X_1, X_2) = \begin{cases} \langle \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) + \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \rangle, & t_1 > t_2, \\ 0, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (36.2)$$

En el caso de un sistema no ferromagnético microscópicamente homogéneo, en ausencia de un campo externo, esta función (como la ordinaria $G_{\alpha\beta}$) se reduce a una función escalar que depende sólo de la diferencia $X = X_1 - X_2$:

$$G_{\alpha\beta}^R(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta} G^R(X), \quad G^R = \frac{1}{2} G_{\alpha\alpha}^R. \quad (36.3)$$

[†] En §§ 36-38 las unidades son tales que $\hbar = 1$.

[‡] Es costumbre designar estas funciones mediante los índices R y A , respectivamente.

El paso a la representación de los impulsos se hace del modo usual. Pero, puesto que $G^R(t, \mathbf{r}) = 0$ para $t < 0$, en la definición

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \int_0^\infty \int \int e^{i(\omega t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} G^R(t, \mathbf{r}) dt d^3x \quad (36.4)$$

se toma la integración respecto a t realmente sólo desde 0 hasta ∞ . El desplazamiento de la variable ω hacia el interior del semiplano superior mejora la convergencia de dicha integral. De aquí que la integral (36.4) defina una función analítica sin singularidades en el semiplano superior de ω .[†] En el semiplano inferior, que es donde se define G^R mediante continuación analítica, ésta tiene polos (ver más adelante).

Podemos obtener para G^R un desarrollo semejante a (8.7) para G a $T = 0$. Desarrollando el elemento de matriz $\langle n | \dots | n \rangle$ del producto de operadores ψ por la regla de multiplicación de matrices y espresando los elementos de matriz en la forma (8.4) se tiene

$$\begin{aligned} iG^R(t, \mathbf{r}) = & \frac{1}{2} \sum_{n, m} w_n \{ e^{-i(\omega_{mn}t - \mathbf{k}_{mn} \cdot \mathbf{r})} \langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle \langle m | \hat{\psi}_\alpha^+(0) | n \rangle \\ & + e^{i(\omega_{mn}t - \mathbf{k}_{mn} \cdot \mathbf{r})} \langle n | \hat{\psi}_\alpha^+(0) | m \rangle \langle m | \hat{\psi}_\alpha(0) | n \rangle \}, \end{aligned}$$

en donde $\omega_{mn} = E'_m - E'_n$, $\mathbf{k}_{mn} = \mathbf{P}_m - \mathbf{P}_n$. La suma respecto a n y m tiene significados ligeramente diferentes para los dos términos entre corchetes: en el primer término, los números de partículas en los estados n y m están relacionados por $N_m = N_n + 1$, y en el segundo término por $N_m = N_n - 1$. Con objeto de eliminar esta diferencia, intercambiemos los subíndices m y n en la segunda suma. Observando también que

$$\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle \langle m | \hat{\psi}_\alpha^+(0) | n \rangle = |\langle n | \hat{\psi}_\alpha(0) | m \rangle|^2 \equiv A_{mn},$$

podemos escribir la expresión completa como

$$iG^R(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{m, n} w_n e^{-i(\omega_{mn}t - \mathbf{k}_{mn} \cdot \mathbf{r})} A_{mn} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}), \quad t > 0. \quad (36.5)$$

Finalmente, al calcular la integral (36.4) sustituimos ω (como en § 8) por $\omega + i0$ con lo que se obtiene finalmente

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} (2\pi)^3 \sum_{m, n} w_n \frac{A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}). \quad (36.6)$$

[†] Comparar con el estudio análogo realizado para la función $\alpha(\omega)$ en la parte 1, § 123. Como es natural la correspondencia entre las propiedades analíticas de las funciones G^R y α no son casuales. Según parte 1 (126.8), α se expresa de modo análogo en función de un conmutador determinado de operadores.

Debe señalarse que todos los polos de esta expresión caen (de acuerdo con el estudio anterior) por debajo del eje real, en el semiplano inferior de ω .

La última propiedad es suficiente para establecer una cierta relación entre las partes real e imaginaria de la función, denominada *relación de Kramers-Kronig o relación de dispersión*:

$$\operatorname{re} G^R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{im} G^R(u, \mathbf{p})}{u - \omega} du; \quad (36.7)$$

compárese con la relación semejante para $\alpha(\omega)$ en la Parte 1, § 123. También puede comprobarse la validez de la misma directamente, separando las partes real e imaginaria de (36.6) mediante el empleo de (8.11). También puede señalarse que esta última fórmula permite volver a escribir a (36.7) como

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varrho(u, \mathbf{p})}{u - \omega - i0} du, \quad (36.8)$$

en donde

$$\varrho(u, \mathbf{p}) = -\frac{1}{2} (2\pi)^3 \sum_{m, n} w_n A_{mn} \delta(u - \omega_{mn}) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn}) (1 + e^{-\omega_{mn}/T}).$$

En el caso en que ω sea real, $\varrho = \operatorname{im} G^R$.

La representación (36.8) adquiere un significado más profundo si tomamos el «límite macroscópico» $V \rightarrow \infty$ (para un cociente dado N/V). En este límite, los polos ω_{mn} se reúnen y $\varrho(u)$ resulta no nulo para todo u , dejando de ser una suma de funciones delta en puntos discretos. Entonces la fórmula (36.8) determina $G^R(\omega)$ directamente en el semiplano superior de ω y sobre el eje real. Para determinar $G^R(\omega)$ en el semiplano inferior de ω es necesario hacer una continuación analítica de la integral y esto exige que el contorno de la integración se deforme de tal modo que pase siempre por debajo del punto $u = \omega$. Aquí $G^R(\omega)$ puede tener singularidades en el semiplano inferior (a una distancia finita del eje real) y el contorno de integración se «contrae» entonces entre el polo $u = \omega$ y la singularidad del numerador.

La función de Green avanzada se define de modo semejante por

$$iG_{\alpha\beta}^A(X_1, X_2) = \begin{cases} 0, & t_1 > t_2, \\ -\langle \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) + \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \quad (36.9)$$

La función $G^A(\omega, \mathbf{p})$ en la representación de los impulsos es una función analítica de la variable ω , sin singularidades en el semiplano inferior. Su desarrollo difiere

de (36.6) por un cambio de signo de $i0$ en los denominadores. Esto significa que en el eje real $G^A(\omega) = G^{R*}(\omega)$ y en todo el plano ω

$$G^A(\omega^*) = G^{R*}(\omega). \quad (36.10)$$

Cuando $\omega \rightarrow \infty$, G^R y G^A tienden a cero del mismo modo que G :

$$G^R, G^A \rightarrow 1/\omega \quad \text{cuando } |\omega| \rightarrow \infty. \quad (36.11)$$

Se determina el coeficiente unidad de esta expresión asintótica [ver la deducción de (8.15)] mediante la discontinuidad de la función en $t_2 = t_1$, que es independiente de la temperatura y es el mismo para las tres funciones G^R , G^A , G como resulta evidente a partir de sus definiciones.

Para establecer la relación existente entre las funciones G^R y G^A así definidas y la función de Green ordinaria

$$iG_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \langle T \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(X_2) \rangle, \quad (36.12)$$

obtengamos para la última una expresión análoga a (36.5). Cálculos totalmente análogos a los vistos anteriormente dan el resultado†

$$\begin{aligned} G(\omega, \mathbf{p}) = & -\frac{1}{2} (2\pi)^3 \sum_{m, n} w_n A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn}) \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{\omega_{mn} - \omega} (1 + e^{-\omega_{mn}/T}) + i\pi \delta(\omega - \omega_{mn}) (1 - e^{-\omega_{mn}/T}) \right\}. \end{aligned} \quad (36.13)$$

La comparación entre (36.13) y (36.6) muestra que

$$\begin{cases} G^R(\omega, \mathbf{p}) \\ G^A(\omega, \mathbf{p}) \end{cases} = \operatorname{re} G(\omega, \mathbf{p}) \pm i \coth(\omega/2T) \operatorname{im} G(\omega, \mathbf{p}). \quad (36.14)$$

La misma expresión (36.13) demuestra también que

$$\operatorname{sgn} \operatorname{im} G(\omega, \mathbf{p}) = -\operatorname{sgn} \omega. \quad (36.15)$$

Debe señalarse que G , a diferencia de G^R y G^A , no es una función analítica de ω . Cuando $T \rightarrow 0$, $\operatorname{cotgh}(\omega/2T) \rightarrow \operatorname{signo} \omega$, se deduce de (36.14) que sobre el eje real

$$G = \begin{cases} G^R, & \omega > 0, \\ G^A, & \omega < 0. \end{cases} \quad (36.16)$$

† Al pasar a la representación de los impulsos, la integral respecto a t se divide en dos partes, desde $-\infty$ hasta 0 y desde 0 hasta ∞ ; en una de éstas se intercambian los subíndices de suma m y n .

Así pues, la función $G(\omega)$ para $T = 0$ es igual, en las dos mitades del eje real de ω , a los límites (cuando $| \operatorname{im} \omega | \rightarrow 0$) de dos funciones analíticas diferentes: $G^R(\omega)$ en la mitad derecha y $G^A(\omega)$ en la mitad izquierda.

Es fácil escribir a continuación las expresiones para G^R y G^A de un gas ideal de Fermi. Sólo es necesario observar que satisfacen la misma ecuación (9.6), cuya deducción sólo hizo uso del valor de la discontinuidad de la función en $t_1 = t_2$. El procedimiento para rodear el polo se conoce a partir del hecho de que debemos pasar por debajo del eje real para $G^{(0)R}$ y por encima para $G^{(0)A}$. De aquí que

$$G^{(0)R, A}(\omega, \mathbf{p}) = \left[\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \pm i0 \right]^{-1}, \quad (36.17)$$

que es válida tanto a temperatura cero como no nula. En el caso de la función $G^{(0)}$, se tiene de acuerdo con (36.14)

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = P \frac{1}{\omega - p^2/2m + \mu} - i\pi \operatorname{tgh} \frac{\omega}{2T} \cdot \delta \left(\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \right). \quad (36.18)$$

Cuando $T \rightarrow 0$, volvemos a la fórmula (9.7) que difiere de (36.17) en que se sustituye $\pm i0$ por $i0$. signo ω .

Las fórmulas correspondientes para un sistema de Bose son las siguientes. Se definen las funciones de Green retardada y avanzada por

$$\begin{aligned} iG^R(X_1, X_2) &= \begin{cases} \langle \hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}^+(X_2) - \hat{\Psi}^+(X_2) \hat{\Psi}(X_1) \rangle, & t_1 > t_2, \\ 0, & t_1 < t_2; \end{cases} \\ iG^A(X_1, X_2) &= \begin{cases} 0, & t_1 > t_2, \\ -\langle \hat{\Psi}(X_1) \hat{\Psi}^+(X_2) - \hat{\Psi}^+(X_2) \hat{\Psi}(X_1) \rangle, & t_1 < t_2. \end{cases} \end{aligned} \quad (36.19)$$

En el caso de temperaturas por encima del punto λ , en estas definiciones intervienen operadores ψ completos; por debajo del punto λ , relacionan los operadores correspondientes a la parte de encima del condensado. En lugar de (36.6) tenemos ahora

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = (2\pi)^3 \sum_{m, n} w_n \frac{A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0} (1 - e^{-\omega_{mn}/T}). \quad (36.20)$$

Esta función está relacionada con G por

$$G^R(\omega, \mathbf{p}) = \operatorname{re} G(\omega, \mathbf{p}) + i \operatorname{tgh} (\omega/2T) \cdot \operatorname{im} G(\omega, \mathbf{p}). \quad (36.21)$$

Sobre el eje real

$$\operatorname{im} G(\omega, \mathbf{p}) < 0; \quad (36.22)$$

Se define G , de acuerdo con (31.1), realizando un promedio sobre la distribución de Gibbs en lugar de promediar respecto al estado fundamental. En el caso de un gas de Bose ideal, la función G^R viene dada por la misma fórmula (36.17) y G vale

$$G^{(0)}(\omega, \mathbf{p}) = P \frac{1}{\omega - p^2/2m + \mu} - i\pi \coth \frac{\omega}{2T} \delta \left(\omega - \frac{p^2}{2m} + \mu \right). \quad (36.23)$$

El significado físico de las funciones de Green a temperaturas no nulas es esencialmente el mismo que a $T = 0$. Las fórmulas que relacionan G con la distribución de los impulsos de las partículas (7.23) y con la matriz de densidad (7.18), (31.4) siguen siendo válidas, como es lógico.

Las proposiciones básicas que afirman la coincidencia de los polos de la función de Green con la energía de las excitaciones elementales también sigue siendo válida (pero, puesto que la propia G no es analítica, ahora resulta más conveniente referirse a los polos de la función analítica G^R en el semiplano inferior de ω o a los de G^A en el semiplano superior). Esta aseveración se deduce de nuevo (como en § 8) del desarrollo (36.6). Aunque ahora las frecuencias de transición ω_{mn} entre dos estados cualesquiera del sistema están contenidas en diferentes términos de este desarrollo, todavía quedan (después de pasar al límite macroscópico) polos que corresponden solamente a transiciones desde el estado fundamental a estados con una sola excitación elemental. Las transiciones entre dos estados excitados no producen ningún polo en la función de Green macroscópica de una partícula, por la misma razón que no aparece ningún polo como resultado de las transiciones desde el estado fundamental hasta estados con más de una cuasipartícula (ver § 8): la diferencia de energía de estos estados no está únicamente definida por la diferencia de sus impulsos.

Debemos también hacer hincapié de que a temperaturas no nulas el período de vida de las cuasipartículas se ve regido no sólo por su inestabilidad intrínseca sino también por sus colisiones mutuas. Para que continúe teniendo significado el concepto de cuasipartículas, debe ser débil el decaimiento producido por ambas causas.

§ 37. Funciones de Green de la temperatura

Para construir técnicas diagramáticas con objeto de calcular la función de Green a temperaturas no nulas, resulta necesario pasar de la representación de Heisenberg de los operadores ψ a la representación de la interacción, como en § 12. Esto conduciría de nuevo a una expresión que difiere de (12.12) sólo en que el promedio no se realiza sobre el estado fundamental. Existe, sin embargo una diferencia fundamental: la operación de promediar los operadores \hat{S}^{-1} ya no puede seguir separándose de la de los demás factores como se hizo al pasar de (12.12) a (12.14). La razón es que ningún estado, aparte del estado fundamental, se convierte en sí mismo mediante el operador \hat{S}^{-1} , sino que se convierte en cierta superposición de estados

excitados que poseen la misma energía (que incluye el resultado de todos los procesos de decaimiento mutuos posibles de las cuasipartículas). Esto origina una complicación considerable de las técnicas diagramáticas y aparecen nuevos términos a partir de las contracciones en las que intervienen también operadores ψ procedentes de S^{-1} .

Sin embargo, podemos alterar la definición de la función de Green de tal modo que no aparezcan estas complicaciones. El formalismo matemático basado en esta definición, desarrollado por T. Matsubara (1955), resulta especialmente adecuado para el cálculo de las magnitudes termodinámicas de un sistema macroscópico.

Definimos los *operadores* ψ de Matsubara mediante las expresiones†

$$\left. \begin{aligned} \hat{\Psi}_\alpha^M(\tau, \mathbf{r}) &= e^{\tau \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) e^{-\tau \hat{H}'}, \\ \hat{\Psi}_\alpha^M(\tau, \mathbf{r}) &= e^{\tau \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}) e^{-\tau \hat{H}'}, \end{aligned} \right\} \quad (37.1)$$

en donde τ es una variable real auxiliar; estos operadores difieren formalmente respecto a los operadores de Heisenberg en que la variable real t en estos últimos se sustituye por la variable imaginaria $-i\tau$.‡ Un cambio semejante ($\hat{\Psi} \rightarrow \hat{\Psi}^M$, $\hat{\Psi}^+ \rightarrow \hat{\Psi}^M, i\partial/\partial t \rightarrow -\partial/\partial\tau$), por ejemplo en (7.8), da las ecuaciones que satisfacen los operadores (37.1). Con éstos se define una nueva función de Green \mathcal{G} análogamente a como se definió la función de Green ordinaria G mediante los operadores ψ de Heisenberg:

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) = -\langle T_\tau \hat{\Psi}_\alpha^M(\tau_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_\beta^M(\tau_2, \mathbf{r}_2) \rangle, \quad (37.2)$$

en donde T_τ es el «operador cronológico- τ », que sitúa los operadores de derecha a izquierda en orden de τ creciente (con cambio de signo cuando se intercambian los operadores en el caso de sistemas de Fermi); los corchetes $\langle \dots \rangle$ designan la operación de promediar respecto a la distribución de Gibbs. Este promedio puede escribirse explícitamente si se expresa la definición (37.2) como

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta} = -\text{tr} \{ \hat{w} T_\tau \hat{\Psi}_\alpha^M(\tau_1, \mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_\beta^M(\tau_2, \mathbf{r}_2) \}, \quad \hat{w} = \exp \left(\frac{\Omega - \hat{H}'}{T} \right), \quad (37.3)$$

en donde tr indica la suma de todos los elementos diagonales de la matriz. Esta función recibe el nombre de *función de Green de la temperatura*, en contraste con la función de Green «ordinaria» G , denominada en este contexto *función de Green temporal*.

† En esta sección escribiremos simultáneamente las fórmulas para los sistemas de Fermi y los de Bose (por encima del punto λ). En donde aparezcan signos alternativos, los signos superiores corresponden a sistemas de Fermi y los inferiores a sistemas de Bose. En el caso de los sistemas de Bose han de omitirse los índices de spin.

‡ Debe resaltarse que, debido a este cambio, el operador $\hat{\Psi}^M$ no es el mismo que $\hat{\Psi}^+$.

Igual que $G_{\alpha\beta}$, es el caso de un sistema no ferromagnético en ausencia de un campo magnético externo $\mathcal{Q}_{\alpha\beta}$ se reduce a un escalar: $\mathcal{Q}_{\alpha\beta} = \mathcal{Q} \delta_{\alpha\beta}$. Para un sistema espacialmente homogéneo, su dependencia con \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 se reduce de nuevo a una dependencia respecto a $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Se ve también fácilmente que, por su definición (37.3), \mathcal{Q} depende sólo de la diferencia $\tau = \tau_1 - \tau_2$. Por ejemplo, sea $\tau_1 < \tau_2$; entonces†

$$\mathcal{Q} = \pm \frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{tr} \left\{ e^{-\hat{H}'/T} e^{\tau_2 \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_2) e^{-(\tau_2 + \tau_1) \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1) e^{-\tau_1 \hat{H}'} \right\},$$

o, si se realiza un intercambio cíclico de factores en la traza,

$$\mathcal{Q} = \pm \frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{tr} \left\{ e^{-(1/T+\tau) \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}_2) e^{\tau \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}_1) \right\}, \quad \tau < 0, \quad (37.4)$$

que hace evidente la veracidad de nuestra afirmación.

La variable τ en la práctica únicamente toma valores en el intervalo finito

$$-1/T \leq \tau \leq 1/T. \quad (37.5)$$

Los valores de $\mathcal{Q}(\tau)$ para $\tau < 0$ y $\tau > 0$ están relacionados de una manera simple. Cuando $\tau = \tau_1 - \tau_2 > 0$, se encuentra, de modo análogo a la deducción de (37.4),

$$\begin{aligned} \mathcal{Q} &= -\frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{tr} \left\{ e^{-(1/T-\tau) \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1) e^{-\tau \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}_2) \right\} \\ &= -\frac{1}{(2)} e^{\Omega/T} \text{tr} \left\{ e^{-\tau \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha^+(\mathbf{r}_2) e^{-(1/T-\tau) \hat{H}'} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}_1) \right\}, \quad \tau > 0, \end{aligned}$$

y comparando con (37.4) se tiene

$$\mathcal{Q}(\tau) = \mp \mathcal{Q}(\tau + 1/T), \quad \tau < 0; \quad (37.6)$$

según (37.5) el argumento de la función del segundo miembro es positivo cuando $\tau < 0$.

Desarrollemos a continuación $\mathcal{Q}(\tau, \mathbf{r})$ como una integral de Fourier respecto a las coordenadas y como una serie de Fourier en τ [en el intervalo (37.5)]:‡

$$\mathcal{Q}(\tau, \mathbf{r}) = T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \zeta_s \tau)} \mathcal{Q}(\zeta_s, \mathbf{p}) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}; \quad (37.7)$$

† El factor 2 entre paréntesis se aplica a los sistemas de Fermi; ha de sustituirse por 1 en el caso de sistemas de Bose.

‡ Este procedimiento se debe a A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov e I. E. Dzyaloshinskii (1959) y E. S. Fradkin (1959).

en el caso de sistemas de Fermi

$$\zeta_s = (2s+1)\pi T, \quad (37.8a)$$

y en el caso de sistemas de Bose

$$\zeta_s = 2s\pi T, \quad (37.8b)$$

$s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; la condición (37.6) se satisface entonces automáticamente. La transformación inversa a (37.7) es

$$G(\zeta_s, \mathbf{p}) = \int_0^{1/T} \int e^{-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \zeta_s \tau)} G(\tau, \mathbf{r}) d^3x d\tau; \quad (37.9)$$

la integral extendida al intervalo $-1/T \leq \tau \leq 1/T$ se convierte en otra desde 0 a $1/T$ utilizando (37.6) y (37.8).

Cálculos semejantes a los realizados en § 36 nos permiten expresar $G(\zeta_s, \mathbf{p})$ en función de los elementos de matriz de los operadores ψ de Schrödinger, con el resultado

$$G(\zeta_s, \mathbf{p}) = \frac{(2\pi)^3}{(2)} \sum_{m,n} w_{mn} \frac{A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{mn})}{i\zeta_s - \omega_{mn}} (1 \pm e^{-\omega_{mn}/T}). \quad (37.10)$$

De aquí vemos, en primer lugar, que

$$G(-\zeta_s, \mathbf{p}) = G^*(\zeta_s, \mathbf{p}). \quad (37.11)$$

A continuación comparando (37.10) con los desarrollos (36.6) y (36.20) para G^R , se encuentra que

$$G(\zeta_s, \mathbf{p}) = G^R(i\zeta_s, \mathbf{p}), \quad \zeta_s > 0. \quad (37.12)$$

La condición $\zeta_s > 0$ se debe al hecho de que las expresiones (36.6) y (36.20) son inmediatamente válidas únicamente en el semiplano superior de ω , como se explicó en § 36. Análogamente, resulta que $G(\zeta_s, \mathbf{p}) = G^A(i\zeta_s, \mathbf{p})$, $\zeta_s < 0$. Así pues, la función de Green de la temperatura en sus componentes de Fourier es la misma que la función de Green retardada o avanzada en puntos discretos del eje imaginario ω . En particular este resultado conduce de una vez a una expresión para la función de Green de la temperatura de un gas ideal: sustituyendo ω por $i\zeta_s$ se tiene a partir de (36.17)

$$G^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{p}) = \left[i\zeta_s - \frac{p^2}{2m} + \mu \right]^{-1}. \quad (37.13)$$

En la sección siguiente se describirá la técnica diagramática para calcular la función $G(\zeta_s, \mathbf{p})$. Para determinar $G^R(\omega, \mathbf{p})$ (y, por consiguiente, en particular para

determinar el espectro de energía del sistema), debemos construir una función analítica igual a $\mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p})$ en los puntos $\omega = i\zeta_s$, y que no posea ninguna singularidad en el semiplano superior de ω . Este procedimiento es único si añadimos el requisito de que $G^R(\omega, \mathbf{p}) \rightarrow 0$ cuando $|\omega| \rightarrow \infty$; ver (36.11). Sin embargo, pueden aparecer algunas dificultades en casos específicos como en el de una continuación analítica. No obstante, resulta innecesario para el cálculo de las magnitudes termodinámicas.

Por ejemplo, para calcular el potencial Ω podemos partir de la expresión correspondiente a la matriz densidad promediada sobre la distribución de Gibbs,

$$N_{\varrho_{\alpha\beta}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_1 + 0, \mathbf{r}_2), \quad (37.14)$$

que es evidente a partir de la definición (37.2); cf. (7.17). Poniendo $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$ y sumando cuando $\alpha = \beta$ se tiene para la densidad del sistema

$$\frac{N}{V} = \pm T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \left[\int \mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) e^{-i\zeta_s \tau} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \right]_{\tau \rightarrow -0}. \quad (37.15)$$

Esta expresión determina N en función de μ , T y V y $\Omega(\mu, T, V)$ se calcula entonces integrando la ecuación $N = -\partial\Omega/\partial\mu$.

§ 38. Técnica diagramática para las funciones de Green de la temperatura

La técnica diagramática para el cálculo de la función de Green de la temperatura \mathcal{G} se establece de modo semejante a como se hizo en §§ 12 y 13 para la función del tiempo G . El hecho de que la definición de los operadores ψ de Matsubara (37.1) difiera de la correspondiente a los operadores de Heisenberg únicamente en la sustitución formal de it por τ nos permite hacer un empleo considerable de la analogía directa.

En primer lugar definamos los operadores de Matsubara en la representación de la interacción; difieren de (37.1) en que el hamiltoniano exacto \hat{H}' se sustituye por el hamiltoniano de partícula libre \hat{H}'_0 :

$$\hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau, \mathbf{r}) = \exp(\tau \hat{H}'_0) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{r}) \exp(-\tau \hat{H}'_0). \quad (38.1)$$

La relación entre los operadores $\hat{\Psi}_{0\alpha}^M$ y $\hat{\Psi}_\alpha^M$ viene dada por la matriz S de Matsubara, construida de modo semejante a (12.8):

$$\hat{\sigma}(\tau_2, \tau_1) = T_\tau \exp \left\{ - \int_{\tau_1}^{\tau_2} \hat{V}_0(\tau) d\tau \right\}, \quad (38.2)$$

en donde

$$\hat{V}_0(\tau) = \exp(\tau \hat{H}'_0) \hat{V} \exp(-\tau \hat{H}'_0) \quad (38.3)$$

es el operador de interacción en esta representación. Pero, mientras que en § 12 se estableció la relación entre Ψ y Ψ_0 con la condición inicial de que la interacción se «conectaba» en $t = -\infty$, ahora la condición «inicial» debe ser que $\hat{\Psi}^M$ y $\hat{\Psi}_0^M$ sean iguales en $\tau = 0$. De acuerdo con ello, tenemos en lugar de (12.11)

$$\hat{\Psi}_{\alpha}^M(\tau) = \hat{\sigma}^{-1}(\tau, 0) \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau) \hat{\sigma}(\tau, 0). \quad (38.4)$$

Sustituyamos esta expresión en la definición (37.3) de la función de Green; tomando el caso particular $\tau_1 > \tau_2$, se tiene

$$\mathcal{Q}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = -\text{tr} \left\{ \hat{w} \hat{\sigma}^{-1}(\tau_1, 0) \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1) \hat{\sigma}(\tau_1, 0) \hat{\sigma}^{-1}(\tau_2, 0) \hat{\Psi}_{0\beta}^M(\tau_2) \hat{\sigma}(\tau_2, 0) \right\};$$

se omiten por brevedad los argumentos \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 . Observando que, cuando $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3$,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}(\tau_1, \tau_3) &= \hat{\sigma}(\tau_1, \tau_2) \hat{\sigma}(\tau_2, \tau_3), \\ \hat{\sigma}(\tau_2, \tau_1) \hat{\sigma}^{-1}(\tau_3, \tau_1) &= \hat{\sigma}(\tau_2, \tau_3), \end{aligned}$$

obtenemos

$$\mathcal{Q}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = -\text{tr} \left\{ \hat{w} \hat{\sigma}^{-1} \left(\frac{1}{T}, 0 \right) \left[\hat{\sigma} \left(\frac{1}{T}, \tau_1 \right) \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1) \hat{\sigma}(\tau_1, \tau_2) \hat{\Psi}_{0\beta}^M(\tau_2) \hat{\sigma}(\tau_2, 0) \right] \right\}.$$

Los factores del corchete están ya en el orden de τ crecientes de derecha a izquierda. Por consiguiente, podemos escribir

$$\mathcal{Q}_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = -\text{tr} \left\{ \hat{w} \hat{\sigma}^{-1} [T_{\tau} \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^M(\tau_2) \hat{\sigma}] \right\}, \quad (38.5)$$

en donde

$$\hat{\sigma} \equiv \hat{\sigma}(1/T, 0).$$

Se comprueba fácilmente que en esta forma la expresión sigue siendo válida también para $\tau_1 < \tau_2$.

En contraste con (12.13), la ecuación (38.5) contiene un factor extra (de Gibbs) y la acción de promediar se realiza sobre estados de un sistema de partículas interactivas. Demostraremos que estas dos diferencias se compensan y existe una analogía completa con (12.14). Para ello, utilizaremos la fórmula

$$e^{-\tau \hat{H}'} = e^{-\tau \hat{H}'_0} \hat{\sigma}(\tau, 0), \quad (38.6)$$

que se obtiene al sustituir (38.1) en (38.4) y comparando la expresión resultante con la definición de $\hat{\Psi}^M$ (37.1). Mediante (38.6) podemos sustituir en (38.5)

$$e^{-\tau \hat{H}'/T} \hat{\sigma}^{-1}(1/T, 0) = e^{-\hat{H}'_0/T}.$$

Se extrae fuera de la traza el factor $e^{\Omega/T}$, se le traslada del numerador al denominador y se le pone en la forma

$$e^{-\Omega/T} = \text{tr } e^{-\hat{H}'/T} = \text{tr } e^{-\hat{H}_0/T} \hat{\sigma}(1/T, 0).$$

Finalmente, multiplicando el numerador y denominador por $\exp(\Omega_0/T)$, siendo Ω_0 el potencial termodinámico de un gas ideal para los mismos valores de μ , T y V , se tiene

$$Q_{\alpha\beta}(\tau_1, \tau_2) = -\frac{1}{\langle \hat{\sigma} \rangle_0} \langle T_\tau \hat{\Psi}_{0\alpha}^M(\tau_1) \hat{\Psi}_{0\beta}^M(\tau_2) \hat{\sigma} \rangle_0, \quad (38.7)$$

en donde se promedia respecto a los estados de un sistema de partículas no interactivas:

$$\langle \dots \rangle_0 = \text{tr} \{ \hat{w}_0 \dots \}.$$

Existe una evidente analogía con (12.14).

Para pasar a los diagramas de la teoría de perturbaciones, como en § 13, desarollamos (38.7) en potencias del operador de interacción $\hat{V}_0(\tau)$. En el caso de un sistema con interacción por pares entre partículas, este operador difiere de (13.2) únicamente en que se han sustituido los operadores de Heisenberg $\hat{\Psi}_0$, $\hat{\Psi}_0^+$ por los operadores de Matsubara $\hat{\Psi}^M$, $\hat{\Psi}^M$. Los valores medios de los productos de operadores ψ se desarrollan de nuevo mediante el teorema de Wick (es decir, considerando todas las maneras posibles de contraer pares de operadores); la validez de este teorema en el límite macroscópico se demuestra en este caso mediante los mismos razonamientos que en § 13.

Las reglas de las técnicas diagramáticas así obtenidas son totalmente análogas a las reglas deducidas en § 13 para $T = 0$. La forma gráfica de los diagramas es exactamente igual. Sólo existe una ligera variación de las reglas para la lectura analítica de los diagramas.

En la representación de las coordenadas, cada línea continua desde el punto 2 al punto 1 está asociada con un factor $-Q_{\alpha\beta}^{(0)}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2)$ (con un signo menos). Cada línea a trazos que une los puntos 1 y 2 corresponde a un factor $-U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \delta(\tau_1 - \tau_2)$. Para todas las variables τ y \mathbf{r} de los puntos internos del diagrama existe una integración por d^3x en todo el espacio y por $d\tau$ desde 0 hasta $1/T$.

Al pasar a la representación de los impulsos, debemos desarrollar todas las funciones $Q^{(0)}$ en la forma (37.7). Después de la integración respecto a todas las variables internas \mathbf{r} , aparece una función delta en cada vértice del diagrama, expresando la ley de conservación de los impulsos ($\sum \mathbf{p} = 0$). En cada vértice existe también una integral de la forma

$$T \int_0^{1/T} \exp\{-i\tau(\zeta_{s_1} + \zeta_{s_2} + \zeta_{s_3})\} d\tau.$$

Esta integral es cero [según (37.8)] a no ser que $\sum \zeta_s = 0$ y en este caso es igual a la unidad. Así pues, también se satisface en cada vértice la ley de conservación de las frecuencias discretas. Cada línea continua está ahora asociada a un factor $-\mathcal{Q}_{\alpha\beta}^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{p})$; una línea continua cerrada tiene de nuevo un factor $n^{(0)}(\mu, T)$, que es la densidad del gas ideal para unos μ y T dados. Para cada línea a trazos existe un factor $-U(\mathbf{q})$. Aparece también la integración y suma respecto a todos los impulsos y frecuencias que permanecen indeterminados por la aplicación de las leyes de conservación en todos los vértices, en la forma

$$T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \dots$$

El coeficiente del diagrama completo en $-\mathcal{Q}_{\alpha\beta}$ es $(-1)^L$ en el caso de sistemas de Fermi, siendo L el número de secuencias cerradas de líneas continuas en el diagrama. En el caso de sistemas de Bose, el coeficiente es la unidad.

También en todas estas técnicas, como es natural y como cuando $T = 0$, podemos hacer una suma parcial y definir varios «bloques» en el diagrama. En particular, podemos determinar la parte del vértice, que se expresa en función de la función de Green de dos partículas. Esta parte de vértice se relaciona con \mathcal{Q} mediante una ecuación de Dyson análoga a (15.14). No escribiremos con detalle las correspondientes fórmulas, cuya deducción es totalmente semejante a la realizada con las técnicas diagramáticas para $T = 0$.

Cuando hacemos la transición al caso $T = 0$, las sumas sobre s de los diagramas de Matsubara se transforman en integrales sobre ζ y las técnicas de Matsubara recuerdan mucho a las normales descritas en el capítulo II. Sin embargo, existe la diferencia de que para ζ real las funciones de Matsubara son las mismas que los valores de G^R y G^A sobre las mitades correspondientes de los ejes imaginarios; ver (37.11), (37.12). Al pasar a las técnicas ordinarias para $T = 0$, debemos girar también el contorno de integración hasta que se transforme en el eje real ω .

CAPÍTULO V

SUPERCONDUCTIVIDAD

§ 39. Gas de Fermi superfluido. El espectro de energía

La totalidad de la teoría de Landau expuesta en el capítulo I se aplica solamente a una clase de líquidos de Fermi —aquellos cuyo espectro de energía es de un tipo tal que no origina superfluidez. Este tipo de espectro no es el único posible para un líquido cuántico de Fermi y a continuación pasaremos a considerar sistemas de Fermi con espectros de diversas clases. El origen de dichos espectros y sus propiedades básicas pueden apreciarse más claramente a partir de un modelo simple que permite un análisis teórico completo: un gas de Fermi casi ideal degenerado con atracción entre las partículas.[†]

Ya se ha estudiado un gas de Fermi ligeramente no ideal con atracción entre las partículas en § 6. A primera vista, los cálculos que se dieron allí eran igualmente válidos, tanto si había repulsión como atracción, es decir, tanto si la longitud de dispersión o scattering a era positiva como negativa. Sin embargo, de hecho, en el caso de atracción ($a < 0$) el estado fundamental del sistema así hallado es inestable respecto a un cierto reordenamiento que altera su carácter y hace descender su energía.

La naturaleza física de esta inestabilidad consiste en una tendencia de las partículas a «aparearse» mediante la formación de estados ligados de pares de partículas que están cerca de la superficie de Fermi en el espacio p y que poseen impulsos iguales y opuestos y spines antiparalelos —lo que se denomina *efecto Cooper* (L. N. Cooper 1957). Es interesante señalar que este efecto se produce en un gas de Fermi por muy débil que sea la atracción entre las partículas.

Debido a este efecto, el conjunto de operadores $\hat{a}_{pa}, \hat{a}_{pa}^+$ que se utilizó en el problema de un gas de Fermi con repulsión, y que corresponde a los estados libres de las partículas individuales del gas, ya no puede servirnos ahora de aproximación

[†] Este problema es la base de la teoría de la superconductividad debida a J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer (1957). El método de resolución que damos se debe a N. N. Bogolyubov (1958).

inicial correcta en la teoría de perturbaciones.[‡] En lugar de ello, debemos utilizar desde el principio nuevos operadores, que deba tener la forma de combinaciones lineales

$$\left. \begin{aligned} \hat{b}_{\mathbf{p}-} &= u_p \hat{a}_{\mathbf{p}-} + v_p \hat{a}_{-\mathbf{p},+}^+, \\ \hat{b}_{\mathbf{p}+} &= u_p \hat{a}_{\mathbf{p}+} - v_p \hat{a}_{-\mathbf{p},-}^+ \end{aligned} \right\} \quad (39.1)$$

de los operadores de partículas con impulsos y spines opuestos; los subíndices $+$ y $-$ se refieren a los dos valores del componente de spin. Debido a la isotropía del gas, los coeficientes u_p y v_p sólo pueden depender del valor absoluto del impulso \mathbf{p} . Con objeto de que estos nuevos operadores se correspondan con la creación y aniquilación de cuasipartículas, deben obedecer a reglas de conmutación de Fermi semejantes a aquellas que poseían los operadores antiguos

$$\hat{b}_{\mathbf{p}\alpha} \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^+ + \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha} = 1, \quad (39.2)$$

y anticomutan todos los demás pares de operadores (con el subíndice se señalan los dos valores del componente de spin). Para que esto sea así, los coeficientes de transformación deben ser tales que

$$u_p^2 + v_p^2 = 1; \quad (39.3)$$

mediante una selección adecuada del factor de fase puede conseguirse que u_p y v_p sean reales. La transformación inversa a (39.1) es

$$\left. \begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{p}+} &= u_p \hat{b}_{\mathbf{p}+} + v_p \hat{b}_{-\mathbf{p},-}^+, \\ \hat{a}_{\mathbf{p}-} &= u_p \hat{b}_{\mathbf{p}-} - v_p \hat{b}_{-\mathbf{p},+}^+ \end{aligned} \right\} \quad (39.4)$$

Por las mismas razones (el papel predominante de la interacción entre pares de partículas con impulsos y spines opuestos), retendremos en la segunda suma del hamiltoniano (6.7) sólo términos en los que $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 \equiv \mathbf{p}$, $\mathbf{p}'_1 = -\mathbf{p}'_2 \equiv \mathbf{p}'$:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha} - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}'}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}',-}^+ - \hat{a}_{-\mathbf{p},-} \hat{a}_{\mathbf{p},+}, \quad (39.5)$$

de nuevo con la «constante de acople» $g = 4\pi\hbar^2|a|/m$ (la longitud de scattering o dispersión $a < 0$).

En los cálculos siguientes será de nuevo conveniente utilizar el procedimiento acostumbrado para evitar que sea necesario tener en cuenta explícitamente la cons-

[‡] La presencia de la singularidad en $\theta = \pi$ de la expresión dada por la teoría de perturbaciones para la función de interacción de partículas (6.16) da ya una indicación de la inaplicabilidad de dicha teoría (en la forma utilizada en § 6) a los pares de partículas con componentes de spin $\pm \frac{1}{2}$ e impulsos $\mathbf{p}_2 \approx -\mathbf{p}_1$; esta singularidad sólo existe con spines antiparalelos, lo que corresponde al valor propio — 3 del operador $\sigma_1 \cdot \sigma_2$.

tancia del número de partículas del sistema: como nuevo hamiltoniano utilizaremos la diferencia $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$, en donde

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}$$

es el operador número de partículas; el potencial químico está entonces determinado, en principio, por la condición de que el valor medio N sea igual al número dado de partículas del sistema.

Utilizaremos también la notación

$$\eta_p = p^2/2m - \mu. \quad (39.6)$$

Como $\mu \approx p_F^2/2m$, tenemos cerca de la superficie de Fermi

$$\eta_F = v_F(p - p_F), \quad (39.7)$$

en donde $v_F = p_F/m$. Restando $\mu\hat{N}$ de (39.5), podemos escribir así el hamiltoniano inicial como

$$\hat{H}' = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \eta_p \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}\alpha} - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}'}^+ \hat{a}_{-\mathbf{p}'}^+ - \hat{a}_{-\mathbf{p}}^- \hat{a}_{\mathbf{p}}^-. \quad (39.8)$$

Ahora haremos la transformación (39.4). Utilizando las relaciones (39.2) y (39.3) y la posibilidad de sustituir el subíndice de suma \mathbf{p} por $-\mathbf{p}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \eta_p v_p^2 + \sum_{\mathbf{p}} \eta_p (u_p^2 - v_p^2) (\hat{b}_{\mathbf{p}+}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}+}^- + \hat{b}_{\mathbf{p}-}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}-}^-) \\ &\quad + 2 \sum_{\mathbf{p}} \eta_p u_p v_p (\hat{b}_{\mathbf{p}+}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p}-}^- + \hat{b}_{-\mathbf{p}, -}^- \hat{b}_{\mathbf{p}+}) - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \hat{B}_{\mathbf{p}'}^+ \hat{B}_{\mathbf{p}}^-, \end{aligned} \quad (39.9)$$

$$\hat{B}_{\mathbf{p}} = u_p^2 \hat{b}_{-\mathbf{p}, -}^- \hat{b}_{\mathbf{p}+}^- - v_p^2 \hat{b}_{\mathbf{p}+}^+ \hat{b}_{-\mathbf{p}, -}^- + v_p u_p (\hat{b}_{-\mathbf{p}, -}^- \hat{b}_{-\mathbf{p}, -}^+ - \hat{b}_{\mathbf{p}+}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}+}).$$

Se escogen ahora los coeficientes u_p y v_p mediante la condición de que la energía E del sistema sea un mínimo para una entropía dada. La entropía viene dada por la expresión probabilística

$$S = - \sum_{\mathbf{p}, \alpha} [n_{\mathbf{p}\alpha} \log n_{\mathbf{p}\alpha} + (1 - n_{\mathbf{p}\alpha}) \log (1 - n_{\mathbf{p}\alpha})].$$

La condición establecida es, por tanto, equivalente a hacer mínima la energía para unos números de ocupación de cuasipartículas dados $n_{\mathbf{p}\alpha}$.

En el hamiltoniano (39.9) los elementos diagonales de la matriz son cero excepto aquellos términos que contienen los productos

$$\hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^- = n_{\mathbf{p}\alpha}, \quad \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^- \hat{b}_{\mathbf{p}\alpha}^+ = 1 - n_{\mathbf{p}\alpha}.$$

De aquí que

$$E = 2 \sum_{\mathbf{p}} \eta_p v_p^2 + \sum_{\mathbf{p}} \eta_p (u_p^2 - v_p^2) (n_{\mathbf{p}+} + n_{\mathbf{p}-}) - \frac{g}{V} \left[\sum_{\mathbf{p}} u_p v_p (1 - n_{\mathbf{p}+} - n_{\mathbf{p}-}) \right]^2. \quad (39.10)$$

Variando esta expresión respecto a los parámetros u_p y utilizando la relación (39.3) se obtiene como condición para su mínimo

$$\frac{\delta E}{\delta u_p} = -\frac{2}{v_p} (1 - n_{\mathbf{p}+} - n_{\mathbf{p}-}) \left[2\eta_p u_p v_p - \frac{g}{V} (u_p^2 - v_p^2) \sum_{\mathbf{p}'} u_{\mathbf{p}'} v_{\mathbf{p}'} (1 - n_{\mathbf{p}'+} - n_{\mathbf{p}'-}) \right] = 0.$$

Y, por tanto,

$$2\eta_p u_p v_p = \Delta (u_p^2 - v_p^2), \quad (39.11)$$

en donde Δ designa la suma

$$\Delta = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{p}} u_p v_p (1 - n_{\mathbf{p}+} - n_{\mathbf{p}-}). \quad (39.12)$$

A partir de (39.11) y (39.3) podemos expresar u_p y v_p en función de η_p y Δ :

$$\frac{u_p^2}{v_p^2} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\eta_p}{\sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}} \right). \quad (39.13)$$

Sustituyendo estos valores en (39.12), obtenemos una ecuación para Δ :

$$\frac{g}{2V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1 - n_{\mathbf{p}+} - n_{\mathbf{p}-}}{\sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}} = 1.$$

En el equilibrio, los números de ocupación de cuasipartículas son independientes de la dirección del spin y vienen dados por la fórmula de distribución de Fermi (con potencial químico cero; ver la última nota a pie de página de § 1):

$$n_{\mathbf{p}+} = n_{\mathbf{p}-} \equiv n_{\mathbf{p}} = [e^{e/T} + 1]^{-1}. \quad (39.14)$$

Pasando también de adición a integración en el espacio \mathbf{p} , podemos escribir esta ecuación en la forma

$$\frac{1}{2} g \int \frac{1 - 2n_{\mathbf{p}}}{\sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = 1. \quad (39.15)$$

Analicemos a continuación las relaciones obtenidas anteriormente. Veremos que Δ juega un papel básico en la teoría de los espectros del tipo que estamos considerando. Calcularemos primero su valor Δ_0 para $T = 0$.

Cuando $T = 0$ no existen cuasipartículas, de modo que $n_p = 0$ y la ecuación (39.15) se transforma en

$$\frac{g}{2(2\pi\hbar)^3} \int \frac{4\pi p^2 dp}{\sqrt{(\Delta_0^2 + \eta_p^2)}} = 1. \quad (39.16)$$

Puede observarse inmediatamente que esta ecuación no podría tener ciertamente ninguna solución para Δ_0 si $g < 0$, es decir en el caso de repulsión, puesto que entonces ambos miembros tendrían signos opuestos.

La contribución principal a la integral de (39.16) procede del intervalo de impulsos en donde $\Delta_0 \ll v_F |p_F - p| \ll v_F p_F \sim \mu$ y la integral es logarítmica: el resultado confirma el pequeño valor relativo de Δ_0 respecto a μ . Cortando la integral logarítmica para cierto valor de $\eta = \tilde{\varepsilon} \sim \mu$, tenemos †

$$\int \frac{p^2 dp}{[\Delta_0^2 + v_F^2(p_F - p)^2]^{1/2}} \approx \frac{p_F^2}{v_F} \int \frac{d\eta}{(\Delta_0^2 + \eta^2)^{1/2}} \approx \frac{2p_F^2}{v_F} \cdot \log \frac{\tilde{\varepsilon}}{\Delta_0}.$$

De aquí que

$$(gmp_F/2\pi^2\hbar^3) \log(\tilde{\varepsilon}/\Delta_0) = 1, \quad (39.17)$$

o sea,

$$\Delta_0 = \tilde{\varepsilon} \exp(-2\pi^2\hbar^3/gmp_F) = \tilde{\varepsilon} \exp(-\pi\hbar/2p_F |\alpha|). \quad (39.18)$$

Esta expresión puede escribirse también en la forma

$$\Delta_0 = \tilde{\varepsilon} \exp(-2/gv_F), \quad (39.19)$$

en donde $v_F = mp_F/\pi^2\hbar^3$ es la densidad de energía del número de estados de una partícula sobre la superficie de Fermi ($v_F d\varepsilon$ es el número de estados en el intervalo $d\varepsilon$).

La característica más importante es la forma del espectro de energía del sistema, es decir, la energía de las excitaciones elementales $\epsilon_{p+} - \epsilon_{p-} \equiv \epsilon(p)$. Podemos hallarla a partir de la variación de energía del sistema completo cuando varían los números de ocupación de las cuasipartículas, es decir, variando E en (39.10) respecto a n_{pa} . Como los valores de u_p y v_p ya se han tomado a partir de la condición

† Cuando $p \gg p_F$, $\eta_p \propto p^2$ y la integral (39.16) tal y como está escrita diverge proporcionalmente a p . Sin embargo, esta divergencia en realidad es espúrea y se elimina renormalizando la relación entre la constante g (es decir, la longitud de dispersión a) y el potencial de interacción, como en §§ 6 y 25. El cálculo, aunque complicado, de este punto nos permite determinar también el factor de proporcionalidad entre el parámetro de corte ϵ y el potencial químico μ : $\tilde{\epsilon}(2/e)^{1/3}\mu = 0,49 \mu$ (L. P. Gor'kov y T. K. Melik-Barkhudarov, *Soviet Physics JETP* 13, 1018, 1961).

de que sean cero las derivadas de E respecto a ellos, puede obtenerse la variación de E respecto a n_{pa} con u_p y v_p constantes. Entonces

$$\varepsilon = (\delta E / \delta n_{px})_{u_p, v_p}.$$

El cálculo de la derivada, utilizando (39.11)-(39.13), conduce al resultado simple

$$\varepsilon(p) = \sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}. \quad (39.20)$$

Vemos que la energía de las cuasipartículas no puede ser menor que el valor Δ , que se alcanza cuando $p = p_F$. En otras palabras, los estados excitados del sistema están separados del estado fundamental por un intervalo de energía prohibida. Las cuasipartículas, que tienen un spin semientero, deben aparecer a pares. En este sentido podemos decir que el intervalo vacío vale 2Δ . Puesto que $p_F |a| \hbar \ll 1$, Δ_0 es pequeño exponencialmente respecto a μ . Además, la expresión (39.18) no puede desarrollarse en potencias del parámetro pequeño, que es la constante de acople g ; esta última se encuentra en el denominador del exponente y así $g = 0$ es una singularidad esencial de $\Delta_0(g)$.

El espectro (39.20) satisface la condición de superfluidez establecida en § 23: el valor mínimo de ε/p es no nulo. Así pues, un gas de Fermi con atracción entre las partículas debe tener las propiedades de un superfluido.[†]

La figura 5 compara las relaciones de dispersión de las cuasipartículas en un

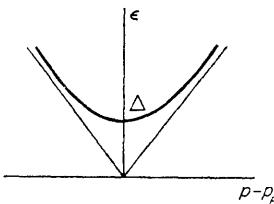


FIG. 5.

sistema de Fermi superfluido (curva superior) y en otro sistema normal. En este último, la relación de dispersión está representada por las dos líneas rectas $\varepsilon = v_F |p - p_F|$, de acuerdo con el análisis realizado al final de § 1.

[†] Obsérvese, sin embargo, que la condición de Landau tiene diferentes significados en los casos de los espectros de Bose y de Fermi. Cuando se trata del espectro de Bose, la violación de la condición conduciría a un incremento ilimitado de las excitaciones y no podría existir un movimiento en el equilibrio de la parte normal relativo a la parte superfluida. (Esto puede verse por el hecho de que la función de distribución de Bose es negativa; ver la primera nota a § 23). El crecimiento ilimitado de las excitaciones de Fermi lo impide el principio de Pauli y la presencia de la rama de Fermi que no satisface la condición de Landau no implica necesariamente la ausencia de superfluidez, sino sólo que la parte normal está presente a $T = 0$. La condición necesaria que es aplicable en ambos casos es la existencia de una función de onda compleja del condensado; ver §§ 26, 41 y 44.

El valor del intervalo vacío de energía Δ depende de la temperatura, es decir, la forma del propio espectro depende de la distribución estadística de las cuasipartículas —situación análoga a la de un líquido normal de Fermi. Como los números de ocupación de las cuasipartículas aumentan (tendiendo a la unidad) al crecer la temperatura, es evidente a partir de (39.15) que Δ disminuye, y resulta cero a cierta temperatura finita T_c , a la cual el sistema pasa del estado superfluido al estado normal. Este punto es una transición de fase de segunda clase, como la transición λ en un superfluido de Bose.

La presencia del intervalo vacío de energía en el espectro de un gas de Fermi degenerado es una manifestación del efecto de «apareamiento» mencionado al principio de esta sección. La cantidad 2Δ puede considerarse como la energía de enlace del par de Cooper, que sería la necesaria para producir su ruptura.

El hamiltoniano (39.5) tiene en cuenta (como ya se señaló en § 6) sólo la interacción entre pares de partículas en el estado singlete: es cero el momento angular orbital del movimiento relativo de las partículas y sus spines son antiparalelos. Los pares, que tienen un spin total cero, se comportan como objetos de Bose y pueden acumularse en números cualesquiera en el nivel (de su movimiento como un todo) de mínima energía, a saber, aquel en el cual el impulso total es nulo. En este análisis intuitivo, el fenómeno es totalmente análogo a la acumulación de partículas en un estado con energía cero de un gas de Bose (condensación de Bose-Einstein); en este caso el condensado es el conjunto de partículas emparejadas.

Como es natural, no debe tomarse demasiado literalmente el concepto de pares ligados. Resultaría más preciso hablar de una correlación entre los estados de un par de partículas en el espacio p , lo que conduce a una probabilidad finita de que las partículas posean un impulso total cero. El reparto δp de los valores del impulso en el margen de correlaciones corresponde a una energía del orden de Δ , es decir, $\delta p \sim \Delta/v_F$. La longitud correspondiente $\xi \sim \hbar/\delta p \sim \hbar v_F/\Delta$ determina el orden de magnitud de las distancias entre partículas con impulsos correlacionados. Cuando $T = 0$ esta longitud, denominada *longitud de coherencia*, vale

$$\begin{aligned}\xi_0 &\sim \hbar v_F / \Delta_0 \\ &\sim (\hbar/p_F) \exp(\pi\hbar/2p_F |a|).\end{aligned}\quad (39.21)$$

Como, en un gas de Fermi degenerado, \hbar/p_F tiene el mismo orden de magnitud que las distancias interatómicas, vemos que ξ_0 es muy grande en comparación con ellas. Esto muestra de modo particularmente claro la convencionalidad del concepto de pares ligados.

El origen del efecto Cooper está conectado estrechamente a la existencia de la superficie de Fermi que limita (en el espacio p) una región finita de estados ocupados a $T = 0$; un punto importante es que la densidad de energía del número de estados en esta superficie es no nula. La relación es evidente en la fórmula (39.19) para el intervalo vacío de energía Δ_0 , que resulta ser cero cuando $v_F \rightarrow 0$.

§ 40. Gas de Fermi superfluido. Propiedades termodinámicas

Empezaremos el estudio de las propiedades termodinámicas de un gas de Fermi superfluido calculando la dependencia con la temperatura del intervalo vacío de energía. Volviendo a escribir (39.15) como

$$-1 + \frac{1}{2} g \int \frac{d^3 p}{\epsilon(2\pi\hbar)^3} = g \int \frac{n_p d^3 p}{\epsilon(2\pi\hbar)^3},$$

donde hay que señalar que la integral del primer miembro difiere de la correspondiente a $T = 0$ sólo en que se sustituye Δ_0 por Δ . De aquí que utilizando (39.17), vemos que el primer miembro es $(gp_F m/2\pi^2\hbar^3) \log(\Delta_0/\Delta)$. En el segundo miembro sustituimos n_p deducido de (39.14) y pasemos a integrar respecto a $dp = d\eta/v_F$:

$$\log \frac{\Delta_0}{\Delta} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{\epsilon(e^{\epsilon/T} + 1)} \equiv 2I(\Delta/T), \quad (40.1)$$

en donde

$$I(u) = \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{(x^2 + u^2)[\exp \sqrt{(x^2 + u^2)} + 1]}};$$

teniendo en cuenta la rápida convergencia de la integral, pueden ampliarse los límites de integración a $\pm \infty$.

A temperaturas bajas ($T \ll \Delta_0$) la integral se calcula fácilmente† resultando

$$\Delta = \Delta_0 [1 - \sqrt{(2\pi T/\Delta_0)} e^{-\Delta_0/T}]. \quad (40.2)$$

† En el caso de u grande, el primer término del desarrollo de $I(u)$ en potencias de $1/u$ es

$$\begin{aligned} I(u) &\approx \int_0^{\infty} \frac{dx}{u} \exp \left[-u \left(1 + \frac{x^2}{2u^2} \right) \right] \\ &= (\pi/2u)^{1/2} e^{-u}. \end{aligned}$$

Cerca del punto de transición, Δ es pequeño y los términos principales del desarrollo de la integral $I(\Delta/T)$ [‡] dan

$$\log(\Delta_0/\Delta) = \log(\pi T/\gamma\Delta) + 7\zeta(3)\Delta^2/8\pi^2T^2. \quad (40.3)$$

Por tanto, en primer lugar vemos que Δ es cero a una temperatura

$$T_c = \gamma\Delta_0/\pi = 0.57\Delta_0 \quad (40.4)$$

que es pequeña en comparación con la temperatura de degeneración $T_0 \sim \mu$. Así, en el primer orden de $T_c - T$, obtenemos

$$\Delta = T_c \left[\frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \right]^{1/2} = 3.06T_c \sqrt{\left(1 - \frac{T}{T_c} \right)}. \quad (40.5)$$

[‡] Para desarrollar la integral $I(u)$ cuando $u \rightarrow 0$, restemos y sumemos a ella la integral

$$I_1 = \frac{1}{2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{\sqrt{x^2+u^2}} - \frac{1}{x} \operatorname{tgh} \frac{1}{2}x \right) dx.$$

Entonces $I = I_1 + I_2$, siendo

$$I_2 = \frac{1}{2} \int_0^\infty \left(\frac{1}{x} \operatorname{tgh} \frac{1}{2}x - \frac{1}{\sqrt{x^2+u^2}} \operatorname{tgh} \frac{1}{2}\sqrt{x^2+u^2} \right) dx.$$

En I_1 el primer término del integrando se integra por procedimientos elementales y el segundo se integra por partes, lo que da

$$2I_1 = -\log \frac{1}{2}u + \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{\log x}{\cosh^2 \frac{1}{2}x} dx.$$

La integral es igual a $2\log(\pi/2\gamma)$, siendo $\log \gamma = C = 0.577$ la constante de Euler; así pues, $2I_1 = -\log(\pi/\gamma u)$.

La integral I_2 es cero cuando $u = 0$. El primer término de su desarrollo en potencias de u^2 es

$$I_2 = -\frac{1}{4}u^2 \int_0^\infty \frac{dx}{x} \left(\frac{1}{x} \operatorname{tgh} \frac{1}{2}x \right).$$

Sustituyendo el desarrollo

$$\operatorname{tgh} \frac{1}{2}x = 4x \sum_{n=0}^{\infty} [\pi^2(2n+1)^2 + x^2]^{-1},$$

deducido como en la segunda nota a § 42, se tiene

$$2I_2 = 4u^2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\infty \frac{dx}{[(2n+1)^2\pi^2 + x^2]^2} = \frac{u^2}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)^{-3} = u^2 \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2}.$$

Falta calcular las magnitudes termodinámicas correspondientes al gas. Consideremos en primer lugar la región de bajas temperaturas.

Para hallar el calor específico en esta región, es más sencillo partir de la fórmula

$$\delta E = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon (\delta n_{\mathbf{p}+} + \delta n_{\mathbf{p}-}) = 2 \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon \delta n_{\mathbf{p}}$$

que nos da la variación de la energía total cuando varían los números de ocupación de las cuasipartículas. Dividiendo por δT y pasando de la suma a la integración, obtenemos el calor específico

$$C = V \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon \frac{\partial n}{\partial T} d\eta.$$

Cuando $T \ll \Delta$, la función de distribución de cuasipartículas $n \approx e^{-\varepsilon/T}$ y la energía de la cuasipartícula $\varepsilon \approx \Delta_0 + \eta^2/2\Delta_0$; una sencilla integración da

$$C = V \frac{\sqrt{2} m p_F \Delta_0^{5/2}}{\pi^{3/2} \hbar^3 T^{3/2}} e^{-\Delta_0/T}. \quad (40.6)$$

Así pues, cuando $T \rightarrow 0$, el calor específico decrece exponencialmente —consecuencia directa de la presencia del espacio vacío de energía en el espectro.

En los cálculos siguientes es conveniente partir del potencial termodinámico Ω , puesto que todo el análisis se realiza para un potencial químico dado del sistema y no para un número fijo de partículas del mismo.[†] Utilicemos la fórmula

$$(\partial \Omega / \partial \lambda)_{T, V, \mu} = \langle \partial \hat{H} / \partial \lambda \rangle, \quad (40.7)$$

en donde λ es un parámetro cualquiera que caracteriza el sistema [cf. Parte 1, (11.4), (15.11)]; en este caso tomamos como parámetro la constante de acople g , que aparece en el segundo término del hamiltoniano (39.8). El valor medio de este término viene dado por el último término de (39.10), que según (39.12) es $-V\Delta^2 g \circ c g$.

De aquí que

$$\partial \Omega / \partial g = -V\Delta^2/g^2.$$

Cuando $g \rightarrow 0$, el intervalo vacío de energía Δ tiende a cero. Por tanto, integrando esta ecuación a g desde 0 hasta g , se halla la diferencia entre el potencial termodi-

[†] El potencial químico del propio gas no ha de confundirse con el potencial químico nulo del gas de cuasipartículas.

nómico U en el estado superfluido y el valor que tendría en el estado normal ($\Delta = 0$) a la misma temperatura:[‡]

$$\Omega_s - \Omega_n = -V \int_0^g \frac{\Delta^2}{g^2} dg. \quad (40.8)$$

De acuerdo con el teorema general de los incrementos pequeños [Parte 1, (24.16)], la corrección (40.8), cuando se expresa en función de las variables apropiadas, es la misma para todos los potenciales termodinámicos.

En el cero absoluto $\Delta = \Delta_0$ y según (39.18)

$$d\Delta_0/dg = 2\pi^2\hbar^3 \Delta_0/mp_F g^2.$$

Pasando en (40.8) de la integración respecto a dg a la integración sobre $d\Delta_0$, se halla la expresión siguiente para la diferencia que existe entre las energías de los estados fundamentales de los sistemas superfluido y normal:

$$E_s - E_n = -V \frac{mp_F}{4\pi^2\hbar^3} \Delta_0^2. \quad (40.9)$$

El signo negativo indica que, como se mencionó al principio de la sección, el estado fundamental «normal» es inestable cuando existe atracción entre las partículas del gas. La diferencia (40.9) por partícula es $\sim \Delta^2/\mu$.

Consideremos ahora el caso opuesto, $T \rightarrow T_c$. Derivando (40.3) respecto a g se tiene

$$\frac{7\zeta(3)}{4\pi^2 T^2} \Delta d\Delta = \frac{d\Delta_0}{\Delta_0} = \frac{2\pi^2\hbar^3}{mp_F} \frac{dg}{g^2}.$$

Despejando de aquí dg/g^2 se sustituye en (40.8), considerándola como la diferencia de energías libres:

$$F_s - F_n = -V \frac{7\zeta(3)mp_F}{8\pi^4\hbar^3 T^2} \int_0^\Delta \Delta^3 d\Delta$$

[‡] Es necesario hacer aquí un comentario en conexión con la aproximación que estamos utilizando continuamente. Cuando $g = 0$, no queda ninguna interacción entre partículas en el hamiltoniano (39.8) y se puede suponer que entonces tenemos un gas de Fermi ideal y no un gas no ideal «normal». Sin embargo, en realidad ya se han hecho algunas aproximaciones en el hamiltoniano (39.8) después de las cuales ya no se puede hablar del cálculo del valor absoluto de la energía. Se han omitido términos de interacción (que no son importantes al hallar la forma del espectro y la diferencia $\Omega_s - \Omega_n$) cuya contribución a la energía es grande en comparación con la cantidad (40.8) exponencialmente pequeña; esta contribución es proporcional a Ng y viene dada por (6.13).

y finalmente se obtiene, utilizando (40.5),

$$F_s - F_n = -V \frac{2mp_F T_c^2}{7\zeta(3)\hbar^3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2. \quad (40.10)$$

La diferencia de entropías es, por consiguiente,

$$S_s - S_n = -V \frac{4mp_F T_c}{7\zeta(3)\hbar^3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right).$$

Cuando $T \rightarrow T_c$, la diferencia de calores específicos tiende a un límite finito,

$$C_s - C_n = V \frac{4mp_F T_c}{7\zeta(3)\hbar^3}, \quad (40.11)$$

es decir, existe una discontinuidad en el punto de transición, con $C_s > C_n$. El calor específico del estado normal viene dado en primera aproximación por la fórmula del gas ideal [ver Parte 1, (58.6)]; expresado en función de p_F es $C_n = Vmp_F T / 3\hbar^3$. El cociente de calores específicos en el punto de transición es, por consiguiente,

$$\frac{C_s(T_c)}{C_n(T_c)} = \frac{12}{7\zeta(3)} + 1 = 2.43. \quad (40.12)$$

Por lo que se refiere a su superfluidez, el gas está caracterizado por la división de su densidad ϱ en partes normal y superfluida. De acuerdo con (23.6) la parte normal de la densidad es

$$\begin{aligned} \varrho_n &= -\frac{8\pi}{3(2\pi\hbar)^3} p^4 \frac{dn}{d\varepsilon} dp \\ &\approx -\frac{p_F^4}{3\pi^2\hbar^3 v_F} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dn}{d\varepsilon} d\eta. \end{aligned}$$

La densidad total del gas está relacionada con p_F por

$$\varrho = mN/V = 8\pi p_F^3 m / 3(2\pi\hbar)^3.$$

Por tanto,

$$\frac{\varrho_n}{\varrho} = -2 \int_0^{\infty} \frac{dn}{d\varepsilon} d\eta. \quad (40.13)$$

No es necesario calcular de un modo especial esta integral, puesto que puede reducirse a la función conocida $\Delta(T)$. Derivando (40.1) respecto a T y comparando la integral resultante con (40.13), vemos que

$$\frac{\varrho}{\varrho_n} = 1 - \frac{\Delta}{T\Delta'} . \quad (40.14)$$

Sustituyendo ahora las expresiones límites (40.2) y (40.5), obtenemos

$$T \rightarrow 0: \quad \frac{\varrho_n}{\varrho} = \left(\frac{2\pi\Delta_0}{T} \right)^{1/2} e^{-\Delta_0/T}, \quad (40.15)$$

$$T \rightarrow T_c: \quad \frac{\varrho_s}{\varrho} = 2 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right). \quad (40.16)$$

Finalmente, es necesario hacer dos comentarios relativos al margen de temperaturas en que son válidas las fórmulas anteriores.

Cuando el sistema se aproxima al punto de transición T_c , empiezan a tener importancia los procesos de interacción entre partículas (que no hemos tenido en cuenta en la teoría anterior); en este caso resultan responsables de la aparición de singularidades de las magnitudes termodinámicas que son características de transiciones de fase de segundo orden. A una distancia suficientemente cercana de uno de estos puntos, las fórmulas deducidas anteriormente deben dejar de ser válidas. Sin embargo, debido a la presencia de un parámetro pequeño (la constante de acoplamiento g) en el modelo considerado, esto ocurre únicamente en el caso de valores extremadamente pequeños de $T_c - T$; estudiaremos con más detalle este punto en § 45.

Como en el líquido superfluido de Bose, el sonido puede propagarse en el gas de Fermi que estamos considerando (a diferencia de lo que ocurría con el sistema con repulsión; cf. § 4), con una velocidad $u \sim p_F/m$ determinada de la manera usual mediante la compresibilidad del medio. Esto significa que el espectro de dicho gas contiene una rama de fonones (Bose), de modo semejante al espectro de excitaciones tipo Fermi del que estamos tratando. El calor específico debido a los fonones es proporcional a T^3 con un coeficiente pequeño, pero cuando $T \rightarrow 0$ debe predominar finalmente sobre el calor específico con decrecimiento exponencial (40.6).

§ 41. Funciones de Green en un gas superfluido

Planteemos ahora el formalismo matemático de las funciones de Green para su aplicación a los sistemas de Fermi superfluidos.†

† La técnica descrita en esta sección se debe a L. P. Gor'kov (1958).

Hemos visto en § 26 que, en función de los operadores ψ , la condensación de Bose-Einstein en un sistema de Bose se expresa mediante la existencia de valores límites no nulos (cuando el número de partículas $N \rightarrow \infty$) de los elementos de matriz entre estados que sólo difieren en que N varía en una unidad. El significado físico de esta afirmación es que la eliminación o adición de una partícula del condensado no altera el estado de un sistema macroscópico.

En el caso de un sistema de Fermi superfluido, debe ser cierto también lo mismo por lo que se refiere al condensado de pares de Cooper: no puede alterarse el estado del sistema cuando cambia en una unidad el número de pares en el condensado. Esto se expresa matemáticamente mediante la presencia de valores límites no nulos ($N \rightarrow \infty$) de los elementos de matriz correspondientes al producto $\hat{\Psi}_\beta(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1)$, operador de aniquilación de dos partículas, y de su conjugado hermítico, el operador de creación de pares $\hat{\Psi}_\alpha^+(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2)$. Estos elementos de matriz relacionan los estados «iguales» del sistema, que difieren sólo en la eliminación o adición de un par de partículas:

$$\begin{aligned} & \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N | \hat{\Psi}_\beta(X_2) \hat{\Psi}_\alpha(X_1) | m, N+2 \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m, N+2 | \hat{\Psi}_\alpha^+(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) | m, N \rangle^* \neq 0. \end{aligned} \quad (41.1)$$

De ahora en adelante omitiremos el símbolo que indica el paso al límite y también por brevedad el subíndice m de la diagonal de la matriz que etiqueta los estados «iguales» con números de partículas diferentes.

Igual que con los sistemas de Bose (§ 31), el formalismo matemático de las funciones de Green en el caso de sistemas de Fermi superfluidos comprende varias funciones diferentes. Junto con las funciones de Green ordinarias

$$iG_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \langle N | T \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) | N \rangle \quad (41.2)$$

necesitamos también funciones «anómalas» definidas por

$$\begin{aligned} iF_{\alpha\beta}(X_1, X_2) &= \langle N | T \hat{\Psi}_\alpha(X_1) \hat{\Psi}_\beta(X_2) | N+2 \rangle, \\ iF_{\alpha\beta}^+(X_1, X_2) &= \langle N+2 | T \hat{\Psi}_\alpha^+(X_1) \hat{\Psi}_\beta^+(X_2) | N \rangle. \end{aligned} \quad (41.3)$$

Puesto que cada una de las funciones $F_{\alpha\beta}$ y $F_{\alpha\beta}^+$ se compone de dos operadores iguales,

$$F_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = -F_{\beta\alpha}(X_2, X_1), \quad F_{\alpha\beta}^+(X_1, X_2) = -F_{\beta\alpha}^+(X_2, X_1). \quad (41.4)$$

El intercambio de los operadores de Fermi ψ con los factores en orden cronológico produce un cambio en el signo del producto.

De acuerdo con los principios fundamentales de la física estadística, el resultado de los promedios estadísticos no depende de si se realiza respecto a la fun-

ción de onda exacta de un estado estacionario de un sistema cerrado o mediante la distribución de Gibbs. La única diferencia es que en el primer caso el resultado de dicho promedio se expresa en función de E y N , la energía y el número de partículas del cuerpo; en el segundo caso, en función de T y μ , la temperatura y el potencial químico. El primer método es más conveniente para el estudio que se sigue en esta sección.

En el modelo de un gas de Fermi considerado en § 39, los pares ligados están en un estado singlete. La dependencia de los elementos de matriz de los operadores de creación y aniquilación de dichos pares con el spin se reduce a un espín antísimétrico unidad:

$$g_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (41.5)$$

Las funciones (41.3) pueden escribirse†

$$F_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta} F(X_1, X_2), \quad F_{\alpha\beta}^+ = g_{\alpha\beta} F^+(X_1, X_2); \quad (41.6)$$

según (41.4), F y F^+ son simétricos en x_1 y x_2 . La dependencia con el spin de la función de Green $G_{\alpha\beta}$ en el caso de un sistema ferromagnético se reduce a la matriz unidad $\delta_{\alpha\beta}$:

$$G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G.$$

En un sistema homogéneo macroscópicamente en reposo, las funciones de Green G , F y F^+ dependen únicamente de las diferencias de las coordenadas de los puntos y de la diferencia de los tiempos (ver la sexta nota a pie de página de § 31).

De igual manera que la función $\Xi(X)$ definida en § 26 tuvo el sentido de una función de onda para las partículas en el condensado, igualmente la función $iF(t, \mathbf{r}_1; t, \mathbf{r}_2)$ puede considerarse como la función de onda de las partículas ligadas en pares de Cooper en el condensado. Entonces la función

$$\Xi(X) = iF(X, X) \quad (41.7)$$

será la función de onda para el movimiento de estos pares como una unidad. A partir de las definiciones (41.3) y (41.5) se ve fácilmente que entonces $F^+(X, X) = i\Xi^*(X)$. En un sistema estacionario macroscópicamente en reposo, la función $\Xi(X)$ se reduce a una constante, que puede hacerse real mediante la selección adecuada de las fases de los operadores ψ .

† Cf. la quinta nota a § 7. Mientras que $G_{\alpha\beta}$ en su estructura de spin es un espín mezcla de rango dos, $F_{\alpha\beta}^+$ y $F_{\alpha\beta}$ son espines contravariantes y covariantes, respectivamente.

Calculemos a continuación las funciones de Green así definidas para el modelo de un gas de Fermi con atracción débil entre las partículas.

El operador de Heisenberg ψ satisface la ecuación (7.8). Debido a que es pequeño el alcance de las fuerzas existentes entre las partículas del gas considerado, en el término integral de esta ecuación podemos tomar los factores $\hat{\Psi}(t, \mathbf{r}')$ en el punto $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ y sacarlos fuera de la integral. La ecuación se reduce entonces a[†]

$$i \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha}{\partial t} = - \left(\frac{\Delta}{2m} + \mu \right) \hat{\Psi}_\alpha - g \hat{\Psi}_\gamma^+ \hat{\Psi}_\gamma \hat{\Psi}_\alpha. \quad (41.8)$$

Tomando el hermítico conjugado de cada término de esta ecuación, se obtiene una ecuación correspondiente para el operador $\hat{\Psi}^+$:

$$i \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha^+}{\partial t} = \left(\frac{\Delta}{2m} + \mu \right) \hat{\Psi}_\alpha^+ + g \hat{\Psi}_\alpha^+ \hat{\Psi}_\gamma^+ \hat{\Psi}_\gamma. \quad (41.9)$$

Sustituyendo (41.8) en la derivada $\partial G_{\alpha\beta}/\partial t$ (9.5), obtenemos, la ecuación

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \right) G_{\alpha\beta}(X - X') \\ & - ig \langle N | T \hat{\Psi}_\gamma^+(X) \hat{\Psi}_\gamma(X) \hat{\Psi}_\alpha(X) \hat{\Psi}_\beta^+(X') | N \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(4)}(X - X'); \end{aligned} \quad (41.10)$$

cf. (15.12). El elemento de matriz diagonal del producto de cuatro operadores ψ puede escribirse, por la regla de multiplicación de matrices, como una suma de productos de elementos de matriz de dos pares de operadores. De todos estos productos, conservaremos únicamente aquellos que contienen elementos de matriz correspondientes a transiciones en las que el cambio en el número de partículas sea $N \leftrightarrow N + 2$ y omitiremos todos los demás:

$$\begin{aligned} & \langle N | T \hat{\Psi}_\gamma^+ \hat{\Psi}_\gamma \hat{\Psi}_\alpha \hat{\Psi}_\beta^+ | N \rangle \rightarrow \langle N | T \hat{\Psi}_\gamma \hat{\Psi}_\alpha | N + 2 \rangle \langle N + 2 | T \hat{\Psi}_\gamma^+ \hat{\Psi}_\beta^+ | N \rangle \\ & = -F_{\gamma\alpha}(X, X) F_{\gamma\beta}^+(X, X') = -\delta_{\alpha\beta} F(0) F^+(X - X'); \end{aligned} \quad (41.11)$$

se han utilizado las expresiones (41.5) para deducir la fórmula final. Este término corresponde físicamente al apareamiento de partículas y tiene el mismo orden de magnitud que la densidad del condensado.

Sin embargo, debemos resaltar que existe una diferencia fundamental respecto a las aproximaciones utilizadas para el caso de un gas de Bose ligeramente no ideal. En este último, casi todas las partículas están en el condensado a $T = 0$ y el número de partículas que están encima del condensado, que aparecen únicamente debido

[†] Como en § 39, utilizamos la notación g para la constante de acople, igual a $-U_0 = -\int U d^3x$. En §§ 41 y 42 hemos puesto $\hbar = 1$.

a la débil interacción de las partículas, es relativamente pequeña. Por otra parte, en el caso presente, el propio condensado se debe a la interacción débil y, por consiguiente, contiene únicamente una pequeña fracción de partículas. En otras palabras, los términos que se omiten al hacer la sustitución (41.11) son grandes, y no pequeños, en comparación con los que se retienen. Sin embargo, estos últimos dan origen a un efecto cualitativamente nuevo, que es un cambio en la naturaleza del espectro, mientras que los anteriores sólo se necesitarían para calcular las correcciones (que carecen de interés ahora) al estado fundamental del sistema; cf. la última nota a pie de página a § 40.

Después de sustituir (41.11), la ecuación (41.10) se reduce a

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \right) G(X) + g\Xi F^+(X) = \delta^{(4)}(X); \quad (41.12)$$

el argumento $X - X'$ se sustituye por X y la constante $iF(0)$ se designa por Ξ , de acuerdo con la definición (41.7). En este caso existen dos funciones incógnitas, $G(X)$ y $F^+(X)$ y, por consiguiente, se necesita otra ecuación para calcularlas.

Esta ecuación puede hallarse mediante el cálculo de la derivada

$$i \frac{\partial F_{\alpha\beta}^+(X - X')}{\partial t} = \left\langle N + 2 \left| T \frac{\partial \hat{\Psi}_{\alpha}^+(X)}{\partial t} \hat{\Psi}_{\beta}^+(X') \right| N \right\rangle;$$

ahora no surge ningún término que sea una función delta [semejante al segundo término de (9.5)], puesto que la función $F_{\alpha\beta}^+(X - X')$, a diferencia de $G_{\alpha\beta}(X - X')$, es continua en $t = t'$.[†] Sustituyendo (41.9) y separando de nuevo el término del condensado como en (41.11), obtenemos la ecuación

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\Delta}{2m} - \mu \right) F^+(X) + g\Xi^* G(X) = 0. \quad (41.13)$$

Ésta contiene las dos mismas funciones G y F^+ como en (41.12); por tanto, las dos ecuaciones son suficientes para calcular estas funciones. Para calcular F , tendría que deducirse otra ecuación de modo análogo.

En estas ecuaciones podemos cambiar a la representación de los impulsos mediante el empleo de los componentes de Fourier $G(P)$ y $F^+(P)$ del modo acostumbrado:

$$\begin{cases} (\omega - \eta_p) G(P) + g\Xi F^+(P) = 1, \\ (\omega + \eta_p) F^+(P) + g\Xi^* G(P) = 0, \end{cases} \quad (41.14)$$

[†] Esto se ve fácilmente calculando la discontinuidad de $F_{\alpha\beta}^+$ del mismo modo que para $G_{\alpha\beta}$ en § 9 y observando que los operadores $\hat{\Psi}_{\alpha}^+(t, \mathbf{r})$ y $\hat{\Psi}_{\beta}^+(t, \mathbf{r}')$ se anticommutan.

en donde $P = (\omega, \mathbf{p})$ y $\eta_p = p^2/2m - \mu$. Puesto que $F^+(X)$ es una función par, también lo son sus componentes de Fourier: $F^+(P) = F^+(-P)$.

Eliminando F^+ entre ambas ecuaciones, se halla la ecuación para G

$$(\omega^2 - \eta_p^2 - \Delta^2) G(P) = \omega + \eta_p, \quad (41.15)$$

con la notación

$$\Delta = g |\Xi|. \quad (41.16)$$

La solución formal de (41.15) es

$$G(P) = \frac{\omega + \eta_p}{\omega^2 - \varepsilon^2(p)} = \frac{u_p^2}{\omega - \varepsilon(p)} + \frac{v_p^2}{\omega + \varepsilon(p)}, \quad (41.17)$$

en donde $\varepsilon(p) = \sqrt{\Delta^2 + \eta_p^2}$ y u_p y v_p vienen dadas por (39.13). Es evidente a partir de ella que el espectro de excitaciones elementales, determinado por el polo positivo de la función de Green, viene dado por $\varepsilon(p)$, y recuperaremos el resultado (39.20). Vemos también que el intervalo vacío de energía Δ y el módulo de la función de onda del condensado correspondiente al movimiento de pares como unidades aisladas son proporcionales entre sí.

La expresión (41.17) para $G(P)$ sin embargo, no es completa todavía, puesto que aún no se ha definido el modo de pasar alrededor de los polos. Es decir, todavía no se ha determinado la parte imaginaria de G ; contiene la función delta $\delta(\omega \pm \varepsilon)$ y, por consiguiente, desaparece al multiplicar por $\omega^2 - \varepsilon^2$ en (41.15).

Cuando $T = 0$, la regla para rodear los polos se establece por comparación directa de (41.17) con el desarrollo (8.7): en los términos que tengan polos positivos y negativos ha de sustituirse la variable por $\omega + i0$ y $\omega - i0$, respectivamente; entonces (41.17) se reduce a

$$\begin{aligned} G(\omega, \mathbf{p}) &= \frac{u_p^2}{\omega - \varepsilon(p) + i0} + \frac{v_p^2}{\omega + \varepsilon(p) - i0} \\ &= \frac{\omega + \eta_p}{(\omega - \varepsilon + i0)(\omega + \varepsilon - i0)}. \end{aligned} \quad (41.18)$$

Expresando a continuación F^+ mediante la segunda ecuación (41.14) resulta

$$F^+(\omega, \mathbf{p}) = \frac{-g\Xi^*}{(\omega - \varepsilon + i0)(\omega + \varepsilon - i0)}. \quad (41.19)$$

Pero, por definición,

$$i\Xi^* \equiv F^+(X=0) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F^+(\mathbf{P}) \frac{d\omega d^3 p}{(2\pi)^4}. \quad (41.20)$$

Sustituyendo (41.19), se integra respecto a ω cerrando el contorno con una semi-circunferencia infinita en el semiplano superior y así se expresa la integral en función del residuo en el polo $\omega = \varepsilon$. Entonces, después de eliminar Ξ^* , se tiene la ecuación (39.16) para Δ_0 .

Cuando $T \neq 0$, es un poco más complicado determinar la parte imaginaria de las funciones de Green. Para construir $G(\omega, \mathbf{p})$ con las propiedades analíticas correctas respecto a la variable ω , debemos escribir primero la función retardada $G^R(\omega, \mathbf{p})$; debe ser analítica en el semiplano superior y, por consiguiente, se obtiene a partir de (41.17) mediante la sustitución $\omega \rightarrow \omega + i0$. La parte imaginaria de esta función es

$$\text{im } G^R = -\pi[u_p^2\delta(\omega - \varepsilon) + v_p^2\delta(\omega + \varepsilon)].$$

La parte imaginaria de la función G buscada se obtiene a partir de esta expresión mediante (36.14), resultando

$$\begin{aligned} \text{im } G(\omega, \mathbf{p}) &= \tgh(\omega/2T) \text{im } G^R(\omega, \mathbf{p}) \\ &= -(1 - 2n_p)\pi[u_p^2\delta(\omega - \varepsilon) - v_p^2\delta(\omega + \varepsilon)], \end{aligned}$$

en donde n_p es la función de distribución de Fermi (39.14); utilizando esta fórmula, pasamos de promediar respecto a un estado estacionario del sistema a promediar respecto a la distribución de Gibbs. Puede escribirse la función G con esta parte imaginaria en la forma

$$G(\omega, \mathbf{p}) = \frac{u_p^2}{\omega - \varepsilon + i0} + \frac{v_p^2}{\omega + \varepsilon - i0} + 2\pi i n_p [u_p^2\delta(\omega - \varepsilon) - v_p^2\delta(\omega + \varepsilon)]. \quad (41.21)$$

A continuación, para la función $F^+(\omega, \mathbf{p})$ se halla

$$F^+(\omega, \mathbf{p}) = [F^+(\omega, \mathbf{p})]_{T=0} - \frac{i\pi g \Xi n_p}{\varepsilon} [\delta(\omega - \varepsilon) + \delta(\omega + \varepsilon)], \quad (41.22)$$

en donde el primer término es la función (41.19), relacionada con $T = 0$. Sustituyendo esta expresión en (41.20) y llevando a cabo la integración, volvemos a encontrar la ecuación (39.15) para $\Delta(T)$.

Las ecuaciones (41.14) pueden ponerse en forma diagramática, análogamente a la representación de las ecuaciones (33.7) en el caso de un sistema de Bose superfluido. Las funciones G , F y E^+ se representan mediante los mismos elementos grá-

ficos (33.6) —flechas en uno o en dos sentidos. Las dos ecuaciones (41.14) se escriben

$$\begin{aligned} \overleftarrow{\overleftarrow{P}} &= \overleftarrow{\overleftarrow{P}} + \overrightarrow{\overrightarrow{P}} \quad (41.23) \\ \overrightarrow{\overrightarrow{-P}} &= \overrightarrow{-P} + \overleftarrow{P} \end{aligned}$$

Una flecha delgada corresponde a un factor $iG^{(0)}(P)$, siendo $G^{(0)}(P)$ la función de Green de un gas de Fermi ideal. Las líneas onduladas que entran y salen de un vértice corresponden a factores $ig\Xi$ y $-ig\Xi^*$, respectivamente. Comparando (41.23) y (33.7), vemos que estos últimos factores corresponden a las funciones de autoenergía $i\Sigma_{02}$ e $i\Sigma_{20}$, respectivamente, es decir, son las primeras aproximaciones a estas magnitudes. Los nuevos elementos (flechas con dos sentidos, líneas onduladas) son las únicas características especiales de la técnica diagramática en el caso de los sistemas superfluidos de Fermi; a diferencia del caso de los sistemas de Bose, no aparecen vértices «triples». Por consiguiente, la técnica diagramática es mucho más sencilla ahora y más parecida a la clase «ordinaria» que en el caso de sistemas de Bose superfluidos.

§ 42. Funciones de Green de temperatura en un gas de Fermi superfluido

En § 41 hemos determinado el espectro de energía de un gas de Fermi superfluido utilizando las funciones de Green temporales ordinarias. Sin embargo, a fin de resolver problemas más complejos (en particular, para investigar las propiedades del sistema en campos externos) es más conveniente utilizar el formalismo matemático de las funciones de Green de la temperatura (A. A. Abrikosov y L. P. Gor'kov 1958).

Se define la función de temperatura $\mathcal{G}_{\alpha\beta}$ mediante la misma fórmula (37.3) que en el caso de un gas de Fermi normal. Las funciones de temperatura $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$ y $\bar{\mathcal{F}}_{\alpha\beta}$ (correspondientes a las funciones temporales $F_{\alpha\beta}$ y $F_{\alpha\beta}^+$) se definirán mediante las fórmulas análogas

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{F}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) &= \sum_m \langle m, N | \hat{w}T_\tau \hat{\Psi}_{\alpha 1}^M \hat{\Psi}_{\beta 2}^M | m, N+2 \rangle, \\ \bar{\mathcal{F}}_{\alpha\beta}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) &= \sum_m \langle m, N+2 | \hat{w}T_\tau \hat{\Psi}_{\alpha 1}^M \hat{\Psi}_{\beta 2}^M | m, N \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (42.1)$$

La dependencia del spin de estas funciones se separa [como en (41.5)] en la forma de factores $g_{\alpha\beta}$:†

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta} \mathcal{F}, \quad \bar{\mathcal{F}}_{\alpha\beta} = -g_{\alpha\beta} \bar{\mathcal{F}}. \quad (42.2)$$

† Son adecuados los signos diferentes en las definiciones de \mathcal{F} y $\bar{\mathcal{F}}$ [en contraste con los mismos signos en (41.5)] debido a que el factor i no aparece en (42.1).

Como \mathcal{G} , las funciones \mathcal{F} y $\bar{\mathcal{F}}$ dependen solamente de la diferencia $\tau = \tau_1 - \tau_2$ y satisfacen las relaciones (37.6) con el signo superior:

$$\mathcal{F}(\tau) = -\mathcal{F}(\tau + 1/T), \quad \bar{\mathcal{F}}(\tau) = -\bar{\mathcal{F}}(\tau + 1/T). \quad (42.3)$$

Por consiguiente, las series de Fourier en τ para estas funciones contienen sólo «frecuencias» impares (37.8a): $\zeta_s = (2s + 1)\pi T$.

Los operadores ψ de Matsubara para $\tau = 0$ son los mismos que los operadores de Heisenberg para $t = 0$:

$$\hat{\Psi}^M(\tau = 0, \mathbf{r}) = \hat{\Psi}(t = 0, \mathbf{r}).$$

Comparando las definiciones de $\mathcal{F}, \bar{\mathcal{F}}$ con las de F, F^+ se encuentra así que

$$\mathcal{F}(0, \mathbf{r}; 0, \mathbf{r}) = \Xi(\mathbf{r}), \quad \bar{\mathcal{F}}(0, \mathbf{r}; 0, \mathbf{r}) = \Xi^*(\mathbf{r}), \quad (42.4)$$

en donde ha de entenderse Ξ como la función de onda del condensado promediada sobre la distribución de Gibbs, es decir, expresada en función de la temperatura del sistema.

Mostraremos ahora cómo pueden utilizarse las funciones de Green de la temperatura para obtener de nuevo el espectro de energía de un gas de Fermi superfluido a temperatura no nula.

Las ecuaciones para las funciones de temperatura $\mathcal{G}, \mathcal{F}, \bar{\mathcal{F}}$ se deducen de un modo totalmente análogo a las ecuaciones (41.12) y (41.13); se sustituye la derivación respecto a t por la derivación respecto a τ y las ecuaciones (41.8) y (41.9) se reemplazan por otras que difieren en la sustitución de it por τ . Como en (41.11), separamos del valor medio del producto de cuatro operadores ψ de Matsubara los términos que contienen elementos de matriz correspondientes a transiciones en las que cambia en 2 el número de partículas. Las ecuaciones resultantes son

$$\left. \begin{aligned} & \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \right) \mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') + g\Xi \bar{\mathcal{F}}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') = \delta(\tau - \tau') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ & \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\Delta}{2m} + \mu \right) \bar{\mathcal{F}}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') - g\Xi^* \mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}') = 0. \end{aligned} \right\} \quad (42.5)$$

Después de pasar a componentes de Fourier, estas ecuaciones se convierten en

$$\left. \begin{aligned} & (i\zeta_s - \eta_p) \mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) + g\Xi \bar{\mathcal{F}}(\zeta_s, \mathbf{p}) = 1, \\ & -(i\zeta_s + \eta_p) \bar{\mathcal{F}}(\zeta_s, \mathbf{p}) - g\Xi^* \mathcal{G}(\zeta_s, \mathbf{p}) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (42.6)$$

Las soluciones son

$$\mathcal{Q}(\zeta_s, \mathbf{p}) = -\frac{i\zeta_s + \eta_p}{\zeta_s^2 + \varepsilon^2}, \quad (42.7)$$

$$\bar{\mathcal{F}}(\zeta_s, \mathbf{p}) = g\Xi^*/(\zeta_s^2 + \varepsilon^2) = F^*(i\zeta_s, \mathbf{p}), \quad (42.8)$$

en donde de nuevo $\varepsilon^2 = \Delta^2 + \eta_p^2$, $\Delta = g\Xi$; esta solución está definida únicamente y no contiene funciones delta, a diferencia de G y F^* .

La condición que determina el intervalo vacío de energía en el espectro se obtiene ahora a partir de la ecuación

$$\Xi^* = \bar{\mathcal{F}}(\tau = 0, \mathbf{r} = 0) = T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \bar{\mathcal{F}}(\zeta_s, \mathbf{p}) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3},$$

o sea, después de la sustitución de (42.8),

$$\frac{gT}{(2\pi)^3} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 p}{\zeta_s^2 + \varepsilon^2(p)} = 1. \quad (42.9)$$

La suma respecto a s viene dada por la fórmula†

$$\sum_{s=-\infty}^{\infty} [(2s+1)^2 \pi^2 + a^2]^{-1} = \frac{1}{2a} \operatorname{tgh} \frac{1}{2} a \quad (42.10)$$

y conduce a

$$\frac{1}{2} g \int \frac{1}{\varepsilon} \operatorname{tgh} \frac{\varepsilon}{2T} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} = 1, \quad (42.11)$$

de acuerdo con (39.15).

† Ésta puede obtenerse escribiendo

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2s+1)^2 \pi^2 + a^2} &= \frac{1}{2a} \left[\frac{1}{a+i\pi(2s+1)} + \frac{1}{a-i\pi(2s+1)} \right] \\ &= \frac{1}{2a} \int_0^\infty e^{-ax} [e^{-i\pi(2s+1)x} + e^{i\pi(2s+1)x}] dx \end{aligned}$$

y sumando la progresión geométrica antes de integrar.

§ 43. Superconductividad en metales

La superconductividad en los metales es un fenómeno de superfluidez del líquido de Fermi de electrones que hay en ellos, análogo al del gas de Fermi degenerado que hemos considerado en las secciones precedentes. Como es natural, el líquido de electrones y el gas de Fermi son sistemas físicos totalmente diferentes en muchos aspectos importantes. Sin embargo, las características físicas básicas del espectro de energía son semejantes para ambos tipos de sistemas. Examinemos cualitativamente qué características del modelo anterior pueden aplicarse a los electrones en los metales y hasta qué punto pueden aplicarse.

Una propiedad importante de los metales es la anisotropía de su espectro de energía electrónica, en contraste con la isotropía del espectro correspondiente al gas de Fermi considerado anteriormente. Sin embargo, esto no impide la aparición del efecto Cooper, que depende únicamente de la existencia de una superficie de Fermi netamente definida (cualquiera que sea su forma) y de una densidad finita para el número de estados sobre dicha superficie. Es también necesario que posean la misma energía los electrones con impulsos y spins opuestos, es decir ambos deben estar sobre la superficie de Fermi. Esta condición resulta automáticamente de la simetría bajo la inversión temporal. Podemos decir que los electrones están apareados en estados que se obtienen uno del otro mediante inversión temporal.

A continuación conviene señalar la cuestión del signo de la interacción de los electrones en un metal. De un modo muy simplificado podemos decir que esta interacción se construye a base de la repulsión de Coulomb, apantallada a distancias interatómicas y de la interacción a través de la red. Esta última puede describirse como resultante del intercambio de fonones virtuales y es atractiva (§ 64). Si prepondera esta atracción, el metal será superconductor a temperaturas suficiente bajas.

Es importante señalar que en la interacción mediante intercambio de fonones intervienen únicamente los electrones que están en una capa comparativamente delgada del espacio \mathbf{p} próximo a la superficie de Fermi, cuyo espesor ($\sim \hbar\omega_D$, siendo ω_D la frecuencia de Debye del cristal) es pequeño en comparación con el potencial químico de los electrones μ . De aquí que, si describimos la superconductividad mediante un modelo de un gas de Fermi ligeramente no ideal, el parámetro de corte ε que aparece en (39.19) debe tomarse como

$$\tilde{\varepsilon} \sim \hbar\omega_D \quad (43.1)$$

en lugar de $\tilde{\varepsilon} \sim \mu$.

En cuanto a la hipótesis que considera la pequeña intensidad de la interacción, de hecho tenemos para todos los superconductores actuales

$$T_c \ll \hbar\omega_D \ll \mu. \quad (43.2)$$

Sin embargo, la hipótesis realizada en § 39 implica algo más, a saber, que también es pequeña la constante de acople g y, por tanto, que es grande el exponente adimensional en (39.19). En el caso presente esta condición se expresa como

$$\log(\hbar\omega_D/T_c) \gg 1; \quad (43.3)$$

y no sólo el cociente $\hbar\omega_D/T_c$ debe ser grande, sino también su logaritmo. En la práctica esta condición se ve satisfecha bastante peor que la anterior. †

Cuando se tienen en cuenta todas las diferencias reales entre el líquido de electrones en un metal y el modelo de un gas de Fermi ligeramente no ideal, la teoría de la superconductividad se hace muy complicada. No obstante, resulta que incluso una teoría sencilla basada en este modelo da en muchos aspectos una buena descripción de las propiedades de los superconductores, tanto cualitativa como cuantitativamente. Como ya se ha mencionado, esta teoría se debe a Bardeen, Cooper y Schrieffer; por ello, el modelo de un gas de Fermi con atracción débil entre sus partículas se conoce como *modelo BCS*.

§ 44. Corriente en el caso de superconductividad

Los dos tipos de movimiento en un superfluído eléctricamente neutro (helio líquido) se corresponden, en un metal superconductor, a los dos tipos de corriente eléctrica que pueden circular simultáneamente por él. En el caso de la *corriente de superconductividad* no hay transferencia de calor y no se produce ninguna disipación de energía; puede existir en un sistema en equilibrio termodinámico. La *corriente normal* está asociada con la evolución del calor de Joule. Designaremos a cada densidad de corriente por \mathbf{j}_s y \mathbf{j}_n ; la densidad de corriente total es $\mathbf{j} = \mathbf{j}_s + \mathbf{j}_n$.

Independientemente de cualquier modelo particular pueden extraerse varias conclusiones importantes acerca de las propiedades de la corriente de superconductividad simplemente a partir de la existencia de una nueva magnitud macroscópica, la función de onda del condensado $\Xi(t, \mathbf{r})$.

Como en § 26, utilicemos la fase Φ de esta función:

$$\Xi(t, \mathbf{r}) = |\Xi| e^{i\Phi}. \quad (44.1)$$

Del mismo modo que en el helio líquido el gradiente de Φ determina la velocidad \mathbf{v}_s del flujo superfluído mediante (26.12), así también en un superconductor el gradiente de la fase determina la magnitud observable, que es la densidad de corriente

† Esto, incidentalmente, elimina el problema de la divergencia de la integral (39.16) para impulsos grandes (cf. la última nota a § 39).

‡ El cociente $\hbar\omega_D/T_c$ varía entre 10 para el plomo y 300 para el aluminio y el cadmio, aproximadamente.

de superconductividad. Debido a la anisotropía del metal, la dirección de \mathbf{j}_s no coincide en general con la de $\nabla\Phi$ y los componentes de estos vectores están relacionados mediante un tensor de rango dos. Sin embargo, para evitar complicaciones innecesarias, consideraremos ahora únicamente un cristal metálico con simetría cúbica.

Entonces el tensor se reduce a un escalar y existe una simple proporcionalidad entre \mathbf{j}_s y $\nabla\Phi$, que puede escribirse

$$\mathbf{j}_s = (e\hbar/2m) n_s \nabla\Phi. \quad (44.2)$$

Por definición, $e = -|e|$ es la carga del electrón y m su masa (actual). La magnitud n_s , así definida, se denomina *densidad numérica de los electrones superconductores*, que resulta ser función de la temperatura y actúa ahora de modo análogo a la densidad del componente superfluido en el helio líquido. Debe resaltarse que esta magnitud no es la misma que la densidad del condensado de pares de Cooper, del mismo modo que en el helio líquido, ϱ_s no es la densidad de los átomos del condensado.[†]

La fórmula (44.2), como la (26.12) correspondiente al helio líquido, presupone que la fase varía en el espacio con suficiente lentitud. Sin embargo, en un líquido de Bose Φ ha de variar sólo ligeramente en distancias interatómicas, mientras que ahora la condición es considerablemente más severa. La dimensión característica en el caso de un líquido de Fermi superfluido en la longitud de coherencia $\xi_0 \sim \hbar v_F / \Delta_0$ y la fase Φ debe variar sólo ligeramente a lo largo de esta distancia que es grande en comparación con las distancias interatómicas. Debemos hacer hincapié en que este parámetro de longitud ξ_0 es una constante (no dependiente de la temperatura). Posteriormente se dará una justificación rigurosa de la condición anterior (ver el final de § 51).

La relación entre \mathbf{j}_s y Φ resulta más complicada si el superconductor está en un campo magnético externo. Consideraremos ahora el caso de un campo constante en el tiempo. Pueden averiguararse los cambios necesarios en la fórmula (44.2) a partir de la condición de que la teoría es invariantante ante la transformación «gauge».

Esta condición establece que todas las magnitudes físicas observables deben permanecer sin cambios en una transformación de este tipo del potencial vector del campo magnético:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi(\mathbf{r}), \quad (44.3)$$

[†] El coeficiente de (44.2) se escribe de tal modo que en un gas de Fermi superfluido libre (modelo BCS) mn_s es igual a ϱ_s como se calculó en § 40. Este último se define de modo que la corriente \mathbf{j}_s debe expresarse como $en_s \mathbf{v}_s$, siendo \mathbf{v}_s la velocidad del movimiento superfluido. A su vez, \mathbf{v}_s está relacionada con el gradiente de la fase por $\mathbf{v}_s = (\hbar/2m)\nabla\Phi$; aquí aparece el doble de la masa (en lugar de m como en (26.12)] debido a que el condensado se compone de partículas apareadas.

siendo $\chi(\mathbf{r})$ una función arbitraria de las coordenadas. Los operadores ψ se transforman del mismo modo que las funciones de onda:

$$\hat{\Psi} \rightarrow \hat{\Psi} \exp(i\epsilon\chi/\hbar c), \quad \hat{\Psi}^+ \rightarrow \hat{\Psi}^+ \exp(-i\epsilon\chi/\hbar c), \quad (44.4)$$

en donde e es la carga de las partículas descritas por el operador ψ ; ver MC(111.9).† Las funciones de Green $G(X, X')$ y $F(X, X')$, como elementos de matriz de los productos $\hat{\Psi}\hat{\Psi}'^+$ o $\hat{\Psi}'\hat{\Psi}$, se transforman de acuerdo con

$$\begin{aligned} G(X, X') &\rightarrow \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar c} [\chi(\mathbf{r}) - \chi(\mathbf{r}')] \right\} G(X, X'), \\ F(X, X') &\rightarrow \exp \left\{ \frac{ie}{\hbar c} [\chi(\mathbf{r}) + \chi(\mathbf{r}')] \right\} F(X, X'). \end{aligned} \quad (44.5)$$

En esta expresión

$$\Xi = iF(X, X) \rightarrow \exp(2ie\chi/\hbar c) \Xi,$$

es decir, la fase de la función de onda del condensado

$$\Phi \rightarrow \Phi + (2e/\hbar c) \chi(\mathbf{r}). \quad (44.6)$$

La relación (44.2) no es invarianta frente a dicha transformación de fase. Para obtener la invariancia requerida, esta relación debe incluir otro término adicional que contiene el potencial vector del campo magnético:

$$\mathbf{j}_s = \frac{e\hbar}{2m} n_s \left(\nabla \Phi - \frac{2e}{\hbar c} \mathbf{A} \right). \quad (44.7)$$

El hecho de duplicar la carga en este término corresponde a los pares de electrones que existen en el superconductor.

Esta expresión es ya suficiente para dar cuenta de la propiedad macroscópica fundamental de un superconductor; la expulsión del flujo magnético de su interior cuando el metal sufre la transición a la fase superconductora (*efecto Meissner*).‡

Consideremos un superconductor homogéneo dentro de un campo magnético que es débil en comparación con el campo crítico H_c en el que se pierde la superconductividad. Esta condición excluye cualquier influencia significativa del campo magnético sobre el valor de n_s . Supongamos que el cuerpo está en un estado de equi-

† Como los operadores ψ aparecen en el hamiltoniano de la segunda cuantización (7.7) como pares $\hat{\Psi}(X)$ y $\hat{\Psi}^+(X)$, éste se transforma mediante los cambios (44.3), (44.4) del mismo modo que el hamiltoniano ordinario en el caso de una transformación semejante de funciones de onda ordinarias (no operadores). De hecho ya se ha realizado una transformación de la forma (44.3), (44.4) en § 19.

‡ Ver EMC, capítulo VI, para la electrodinámica fenomenológica de los superconductores.

librio termodinámico, de modo que no existe corriente normal y $\mathbf{j}_s = \mathbf{j}$.[‡] Tomando el rotacional de ambos miembros de (44.7) y observando que $\text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{B}$, que es la inducción magnética en el cuerpo, se obtiene la *ecuación de London*

$$\text{rot } \mathbf{j} = -(e^2 n_s / mc) \mathbf{B} \quad (44.8)$$

(F. y H. London 1935).[§]

Esta ecuación es específica para los superconductores. Haremos uso también de las ecuaciones generales de Maxwell

$$\text{rot } \mathbf{B} = (4\pi/c) \mathbf{j}, \quad (44.9)$$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0. \quad (44.10)$$

Sustituyendo \mathbf{j} de (44.9) en (44.8) y observando que, según (44.10), $\text{rot rot } \mathbf{B} = -\Delta \mathbf{B}$ obtenemos una ecuación para el campo magnético en un superconductor:

$$\Delta \mathbf{B} = \mathbf{B}/\delta^2, \quad (44.11)$$

en donde

$$\delta^2 = mc^2/4\pi e^2 n_s. \quad (44.12)$$

Podemos utilizar (44.11) para hallar la distribución del campo cerca de la superficie (supuesta plana) de un superconductor. Se escoge la superficie como plano yz , con el eje x dirigido hacia el interior del cuerpo. En estas condiciones, la distribución del campo depende únicamente de esta coordenada x y (44.10) da $dB_x/dx = 0$; entonces, a partir de (44.11), es necesario que se tenga $B_x = 0$. La ecuación (44.11) se transforma entonces en $d^2 \mathbf{B}/dx^2 = \mathbf{B}/\delta^2$, de aquí que

$$\mathbf{B}(x) = \mathfrak{H} e^{-x/\delta}, \quad (44.13)$$

en donde el vector \mathfrak{H} es paralelo a la superficie.

Vemos que el campo magnético disminuye exponencialmente dentro del superconductor, penetrando únicamente a distancias $\sim \delta$. Esta distancia es macroscópica, pero pequeña comparada con las dimensiones normales de los objetos sólidos ($\delta \sim 10^{-6}\text{--}10^{-5}$ cm) y así el campo penetra realmente sólo en una capa superficial delgada. La distancia δ se denomina *profundidad de penetración de London* del campo. Debemos resaltar que se puede medir directamente y que tiene un significado totalmente definido, a diferencia del significado convencional del parámetro n_s .

[‡] Esto se admitirá a través de todo lo que queda del capítulo V y, por consiguiente, \mathbf{j} designará siempre en todo él la densidad de corriente de superconductividad.

[§] La deducción de (44.8) que damos aquí se debe a L. D. Landau (1941).

La deducción anterior exige, sin embargo, una precaución o cautela importante. La fórmula original es válida únicamente si todas las magnitudes varían en el espacio con suficiente lentitud: las distancias características sobre las que varían considerablemente deben ser grandes comparadas con la longitud de coherencia ξ_0 .[†] En el caso presente esto significa que debemos tener

$$\delta \gg \xi_0. \quad (44.14)$$

Este requisito, como es natural, no afecta a la prueba de que el campo resulta desplazado del superconductor: el suponer que el campo no se vería expulsado conduciría a una contradicción lógica, puesto que entonces ciertamente variaría lentamente y sería válida la ecuación (44.11), pero la ecuación específica (44.11) y la resultante ley de disminución del campo (44.13) son únicamente válidas si se satisface (44.14).

Un superconductor en el que se ve satisfecha la desigualdad $\delta \gg \xi_0$ es un *superconductor de London*; el caso opuesto, con $\delta \ll \xi_0$, se denomina *caso de Pippard* (la disminución del campo en el interior del superconductor es entonces del tipo que consideraremos en § 52). Cuando $T \rightarrow T_c$, la densidad de electrones superconductores $n_s \rightarrow 0$, de modo que $\delta \rightarrow \infty$. Así pues, siempre tenemos el caso de London suficientemente cerca del punto de transición. Cuando $T \rightarrow 0$, sin embargo, la relación entre δ y ξ_0 depende de las propiedades específicas del metal.[‡]

Finalmente consideremos una consecuencia más de la ecuación (44.7) que es independiente de la relación existente entre δ y ξ_0 . Como sabemos a partir de la electrodinámica macroscópica de los superconductores, si existe un flujo magnético en un toro superconductor, permanece constante independientemente de cualquier cambio de estado del cuerpo (si éste no destruye su superconductividad). Ahora admitimos que el toro tiene un diámetro y un espesor grandes en comparación con la longitud de coherencia y con la profundidad de penetración del campo. Demostremos que el flujo magnético «congelado» en la abertura del toro sólo puede ser un múltiplo entero de cierto «cuanto de flujo» (F. London 1954).

Dentro del cuerpo (más allá del alcance de penetración del campo) la densidad de corriente $j = 0$; sin embargo, el potencial vector no es nulo, sino que únicamente lo es su rotacional, es decir, la inducción magnética B . Tomemos cualquier contorno cerrado C que abarque la abertura del toro y que pase a través de éste lejos de su superficie, de modo que se satisfaga la condición para la validez de la ecuación (44.7), a saber, la lentitud de la variación espacial de la fase Φ y del potencial A .

[†] La propia inducción B es la verdadera intensidad microscópica del campo magnético promediado sobre elementos de volumen físicamente infinitesimales que son grandes en comparación con la constante de la red.

[‡] Se produce el caso de London a todas las temperaturas por ejemplo en los metales de transición puros y en algunos compuestos intermetálicos. Se presenta el caso de Pippard (lejos de T_c) en metales puros no de transición.

La circulación del vector \mathbf{A} a lo largo del contorno C es igual al flujo de la inducción magnética a través de una superficie que se apoye en dicho contorno, es decir, el flujo ϕ a través de la abertura del toro:

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int \text{rot } \mathbf{A} \cdot d\mathbf{f} = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{f} = \phi.$$

Por otra parte, igualando (44.7) a cero e integrándola a lo largo del contorno tenemos

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \frac{\hbar c}{2e} \oint \nabla \Phi \cdot d\mathbf{l} = \frac{\hbar c}{2e} \delta \Phi,$$

en donde $\delta \Phi$ es el cambio de fase de la función de onda al pasar alrededor del contorno. Como esta función debe ser uniforme, se deduce que el cambio de fase sólo puede ser un múltiplo entero de 2π . Así pues, tenemos el resultado

$$\phi = n\phi_0, \quad \phi_0 = \pi \hbar c / |e| = 2 \times 10^{-7} \text{ G.cm}^2, \quad (44.15)$$

en donde n es un número entero. La magnitud ϕ_0 es el *cuanto de flujo magnético*.

La cuantización del flujo magnético tiene otro aspecto: hace que sean discretos los valores de la corriente total J que puede fluir a lo largo de un anillo superconductor (en ausencia de un campo magnético externo). Esta corriente crea un flujo magnético a través del anillo igual a LJ/c , en donde L es la autoinducción. Igualando esta expresión a $n\phi_0$, hallamos como valores posibles de la corriente

$$J = c\phi_0 n / L = \pi \hbar c^2 n / |e| L. \quad (44.16)$$

En contraste con el flujo magnético cuántico, el «cuanto de corriente total», siendo L la autoinducción, depende de la forma y tamaño del anillo.

PROBLEMA

Determinar el momento magnético de una esfera superconductora de radio $R \ll \delta$ en un campo magnético, en el caso de London.

SOLUCIÓN. Cuando $R \ll \delta$, el campo magnético dentro de la esfera puede considerarse como constante e igual al campo externo \mathfrak{H} . Si se toma el potencial vector en la forma $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathfrak{H} \times \mathbf{r}$, podemos escribir simplemente

$$\mathbf{j} = -(n_s e^2 / mc) \mathbf{A},$$

es decir, tomar $\Phi = 0$ en (44.7): la condición límite para que sea nula la componente normal de la corriente en la superficie de la esfera ($\mathbf{n} \cdot \mathbf{j} = 0$) se satisface entonces automáticamente. Se calcula el momento magnético como la integral

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2c} \int \mathbf{r} \times \mathbf{j} dV$$

sobre todo el volumen de la esfera y vale

$$\mathbf{M} = -R^5 \mathfrak{H} / 30\delta^2.$$

§ 45. Ecuaciones de Ginzburg-Landau

La teoría completa del comportamiento de un superconductor en el interior de un campo magnético es muy compleja. Sin embargo, el problema es considerablemente más sencillo en el margen de temperaturas cercano al punto de transición. Entonces es posible establecer un sistema de ecuaciones relativamente sencillas, que es válido tanto en el caso de campos débiles como intensos.†

En la teoría general de Landau de las transiciones de fase de segundo orden, se describe la diferencia entre las fases «asimétrica» y «simétrica» mediante el parámetro de orden, que es cero en el punto de transición (ver Parte 1, § 142). Cuando se trata de una fase superconductora, el parámetro de orden natural es la función de onda del condensado Ξ . Para evitar complicaciones que en principio son innecesarias, admitiremos que el cristal metálico tiene simetría cúbica; como ya se mencionó en § 44, el estado superconductor se caracteriza entonces por una magnitud escalar, la densidad de electrones superconductores. En este caso resulta más conveniente escoger como parámetro de orden una magnitud ψ que sea proporcional a Ξ pero que esté normalizada por la condición $|\psi|^2 = \frac{1}{2}n_s$. La fase de ψ es la misma que la de Ξ :

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{2}n_s} e^{i\Phi}. \quad (45.1)$$

La densidad de corriente de superconductividad (44.2), expresada en función de ψ , es

$$\mathbf{j}_s = \frac{e\hbar}{m} |\psi|^2 \nabla \Phi = -\frac{ie\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (45.2)$$

El punto de partida de la teoría es la expresión correspondiente a la energía libre del superconductor como una función de $\psi(\mathbf{r})$. De acuerdo con las ideas generales de la teoría de Landau, ésta se encuentra desarrollando la densidad de energía libre en potencias del parámetro de orden ψ (que es pequeño cerca del punto de transición) y de sus derivadas respecto a las coordenadas. Como un primer paso, consideraremos un superconductor en ausencia de un campo magnético.

De acuerdo con su significado en cuanto es una magnitud proporcional a la función de Green $F(X, X) \equiv -i\Xi(X)$, el parámetro de orden no es único: puesto que $F(X, X)$ se construye mediante dos operadores Ψ , un cambio arbitrario de la fase de estos operadores, $\Psi \rightarrow \Psi e^{i\alpha/2}$, produce un cambio de la fase de la función F en α . Como es natural, las magnitudes físicas no se ven afectadas por este punto de arbitrariedad, es decir deben ser invariantes bajo una transformación del pará-

† La teoría que damos a continuación se debe a V. L. Ginzburg y L. D. Landau (1950). Es interesante señalar que esta teoría se construyó fenomenológicamente antes que la teoría microscópica de la superconductividad.

metro de orden complejo $\psi \rightarrow \psi e^{ia}$. Esto excluye las potencias impares de ψ en el desarrollo de la energía libre.

Se establece la forma específica de este desarrollo mediante las mismas consideraciones que en la teoría general de las transiciones de fase de segundo orden (ver Parte 1, § 146). Sin repetir los argumentos, podemos escribir a continuación el desarrollo siguiente de la energía libre total de un cuerpo superconductor:[†]

$$F = F_n + \int \left\{ \frac{\hbar^2}{4m} |\nabla\psi|^2 + a |\psi|^2 + \frac{1}{2} b |\psi|^4 \right\} dV. \quad (45.3)$$

En donde F_n es la energía libre en el estado normal (es decir, para $\psi = 0$); b es un coeficiente positivo que depende únicamente de la densidad de la sustancia (no de la temperatura); a es una función de la temperatura dada por

$$a = \alpha(T - T_c), \quad (45.4)$$

y es cero en el punto de transición; el coeficiente $\alpha > 0$, de acuerdo con el hecho de que la fase superconductora corresponde al intervalo $T < T_c$; el coeficiente de $|\nabla\psi|^2$ en (45.3) se escoge de modo que se obtenga la expresión (45.2) para la corriente (ver más adelante).[‡] El hecho de que (45.3) contenga únicamente las primeras derivadas de ψ es el resultado de admitir que la variación espacial de ψ es lo suficiente lenta.

En un superconductor homogéneo, en ausencia de campo externo, el parámetro ψ es independiente de las coordenadas. Entonces la expresión (45.3) se reduce a

$$F = F_n + aV |\psi|^2 + \frac{1}{2} bV |\psi|^4. \quad (45.5)$$

Se determina el valor de equilibrio de $|\psi|^2$ (para $T < T_c$) mediante la condición de que esta expresión sea un mínimo:

$$|\psi|^2 = -a/b = \alpha(T_c - T)b; \quad (45.6)$$

la densidad de electrones superconductores, como función de la temperatura, disminuye linealmente hasta cero en el punto de transición.

Sustituyendo (45.6) de nuevo en (45.5), se halla la diferencia entre las energías libres de los estados superconductor y normal:

$$F_s - F_n = -V(\alpha^2/2b)(T_c - T)^2. \quad (45.7)$$

[†] Mencionaremos únicamente de nuevo que esta forma del término del gradiente depende de la hipótesis de que el cristal tiene simetría cúbica. Con simetría inferior, tendría una dependencia cuadrática más general con las derivadas $\partial\psi/\partial x_i$.

[‡] Esta selección (incluyendo la identificación de m con la masa real del electrón) no tiene como es natural ningún significado profundo y es convencional en el mismo grado que lo es la definición de n_s en (44.2).

A partir de esta expresión, y derivando respecto a la temperatura, podemos hallar la diferencia de entropías y luego la discontinuidad del calor específico en el punto de transición:[§]

$$C_s - C_n = V\alpha^2 T_c/b. \quad (45.8)$$

Cerca del punto de transición, la diferencia (45.7) es una pequeña adición a la energía libre. De acuerdo con el teorema de incrementos pequeños (Parte 1, § 15), la misma magnitud nos da la diferencia entre los potenciales termodinámicos $\Phi_1 - \Phi_n$ si se expresa en función de la temperatura y de la presión, en lugar de la temperatura y el volumen. Por otra parte, de acuerdo con la fórmula general de la termodinámica de superconductores [ver EMC (43.7)], esta diferencia es $-VH_c^2/8\pi$, siendo H_c el campo crítico que destruye la superconductividad. Así pues, hallamos en el caso de este campo, la siguiente dependencia con la temperatura cerca del punto de transición:[†]

$$H_c = (4\pi a^2/b)^{1/2} = (4\pi\alpha^2/b)^{1/2}(T_c - T). \quad (45.9)$$

Cuando está presente un campo magnético, ha de modificarse la expresión (45.3) correspondiente a la energía libre de dos maneras. En primer lugar ha de sumarse al integrando la densidad de energía del campo magnético $\mathbf{B}^2/8\pi$ (en donde $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ es la inducción magnética del cuerpo). En segundo lugar, ha de cambiarse el término del gradiente de modo que satisfaga a los requisitos de la invariancia «gauge». En la sección anterior se ha demostrado que esta condición hace innecesario sustituir el gradiente $\nabla\Phi$ de la fase de la función de onda del condensado por $\nabla\Phi - 2e\mathbf{A}/\hbar c$. En el caso presente esto significa hacer la sustitución

$$\nabla\psi = e^{i\Phi} \nabla |\psi| + i\psi \nabla\Phi \rightarrow \nabla\psi - (2ie/\hbar c) \mathbf{A}\psi.$$

[§] La comparación de (45.6) y (45.8) para $|\psi|^2 = \rho_s/2m$ y para la discontinuidad del calor específico con (40.16) y (40.11) para las mismas magnitudes en el modelo de BCS da los valores de a y b en este modelo (L. P. Gor'kov 1959):

$$\alpha = 6\pi^2 T_c / 7\zeta(3), \mu = 7.04 T_c / \mu, \quad b = \alpha T_c / n;$$

ahora hemos utilizando la relación existente entre la densidad numérica de partículas $n = \rho/m$, el potencial químico μ (a $T = 0$) y el impulso límite en el caso de un gas ideal:

$$n = p_F^3 / 3\pi^2 \hbar^3, \quad \mu = p_F^2 / 2m.$$

[†] En el modelo de BCS,

$$H_c = 2.44 (mp_F/\hbar^3)^{1/2} (T_c - T) \quad \text{as } T \rightarrow T_c.$$

En el mismo modelo a $T = 0$,

$$H_c = 0.99 T_c (mp_F/\hbar^3)^{1/2},$$

como se halla igualando $-VH_c^2/8\pi$ a la diferencia de energías (40.9).

Así pues, tenemos la siguiente ecuación básica:

$$F = F_{n0} + \int \left\{ \frac{\mathbf{B}^2}{8\pi} + \frac{\hbar^2}{4m} \left| \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + a |\psi|^2 + \frac{1}{2} b |\psi|^4 \right\} dV, \quad (45.10)$$

en donde F_{n0} es la energía libre del cuerpo en el estado normal en ausencia de campo magnético. Debe resaltarse que el coeficiente $2ie/\hbar c$ en esta expresión no es arbitrario (en contraste con la selección convencional del coeficiente $\hbar^2/4m$ que se mencionó anteriormente). El duplicar la carga del electrón se debe al efecto Cooper (L. P. Gor'kov 1959); como es natural, este coeficiente no puede hallarse por medios puramente fenomenológicos.

Las ecuaciones diferenciales que determinan la distribución de la función de onda ψ y el campo magnético en un superconductor se encuentran ahora haciendo mínima la energía libre como una funcional de las tres funciones independientes ψ , ψ^* y \mathbf{A} .

La magnitud compleja ψ es un conjunto de dos magnitudes reales, de modo que ψ y ψ^* deben considerarse como funciones independientes en la variación. Variando la integral respecto a ψ^* e integrando por partes en la integral del término $(\nabla\psi - 2ieA/\hbar c)\nabla\delta\psi^*$ se halla

$$\begin{aligned} \delta F = & \int \left\{ -\frac{\hbar^2}{4m} \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \psi + a\psi + b |\psi|^2 \psi \right\} \delta\psi^* dV \\ & + \frac{\hbar^2}{4m} \oint \left(\nabla\psi - \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A}\psi \right) \delta\psi^* d\mathbf{f}; \end{aligned} \quad (45.11)$$

la segunda integral se extiende a toda la superficie del cuerpo. Poniendo $\delta F = 0$, obtenemos como condición para que la integral de volumen sea cero en el caso de un $\delta\psi^*$ arbitrario

$$\frac{1}{4m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi + a\psi + b |\psi|^2 \psi = 0; \quad (45.12)$$

haciendo variar la integral respecto a ψ se tiene la ecuación compleja conjugada y, por tanto, nada nuevo.

Análogamente variando la integral respecto a \mathbf{A} se tiene la ecuación de Maxwell

$$\text{rot } \mathbf{B} = (4\pi/c) \mathbf{j}, \quad (45.13)$$

y la densidad de corriente es

$$\mathbf{j} = -\frac{ie\hbar}{2m} (\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*) - \frac{2e^2}{mc} |\psi|^2 \mathbf{A}, \quad (45.14)$$

que está de acuerdo con (44.7); hemos escrito \mathbf{j} en lugar de \mathbf{j}_s , puesto que en el equilibrio termodinámico no existe corriente normal. A partir de (45.13) tenemos la ecuación de continuidad $\operatorname{div} \mathbf{j} = 0$, que puede obtenerse también mediante derivación directa de (45.14), utilizando (45.12).

Las ecuaciones (45.12)-(45.14) forman el conjunto completo de *ecuaciones de Ginzburg-Landau*.

Las condiciones límites que hay que aplicar a estas ecuaciones se encuentran mediante la condición de que las integrales de superficie en la variación δF son nulas. Así pues, se obtiene de (45.11) la condición límite o de contorno

$$\mathbf{n} \cdot \left(-i\hbar \nabla \psi - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \psi \right) = 0, \quad (45.15)$$

en donde \mathbf{n} es el vector normal a la superficie del cuerpo. Como resultado de esta condición, también resulta nula la componente normal de la corriente (45.14), como debería suceder: $\mathbf{n} \cdot \mathbf{j} = 0$.†

Las condiciones límites o de contorno correspondientes al campo son las siguientes. A partir de la ecuación (45.13), puesto que \mathbf{j} es finita en todo el espacio (hasta la superficie del cuerpo), resulta continua la componente tangencial B_t de la inducción. La ecuación $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ muestra que la componente normal B_n de la inducción es también continua. Así pues, las condiciones límites exigen la continuidad del vector completo \mathbf{B} .

En un campo magnético débil podemos despreciar la influencia del campo sobre $|\psi|^2$ y podemos tomar para ésta el valor (45.6) en todos los puntos del cuerpo. Entonces, la sustitución de (45.14) en (45.13), seguida de la operación de aplicar el rotacional de ambos miembros, da la ecuación de London (44.11) con una profundidad de penetración

$$\delta = \left[\frac{mc^2 b}{8\pi e^2 |a|} \right]^{1/2} = \left[\frac{mc^2 b}{8\pi e^2 \alpha (T_c - T)} \right]^{1/2} \quad (45.16)$$

Las ecuaciones de Ginzburg-Landau contienen otra longitud característica además de ésta: el radio de correlación de las fluctuaciones del parámetro de orden ψ

† Con la condición de contorno (45.15), el propio ψ no es cero, puesto que la función de onda aparentemente debe estar en el límite del cuerpo. Esto se debe a que realmente ψ cae a cero sólo a distancias $\sim \xi_0$ de la superficie, pero estas distancias se consideran despreciables en la teoría de Ginzburg-Landau.

Aquí se ha deducido la condición (45.15) esencialmente para un límite vacío-superconductor. Sigue siendo válida para un límite con un aislante, pero no es correcta en el caso de una intercara entre metales diferentes (uno superconductor, el otro normal) puesto que no tiene en cuenta la penetración parcial de los electrones superconductores dentro del metal normal. En este caso, se sustituye (45.15) por una condición más general compatible con $\mathbf{n} \cdot \mathbf{j} = 0$:

$$\mathbf{n} \cdot \left(-i\hbar \nabla \psi - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \psi \right) = i\psi/\lambda, \quad (45.15a)$$

en donde λ es una constante real (con las dimensiones de longitud); sin embargo, una estimación de esta constante exigiría una investigación microscópica más detallada.

(en ausencia del campo), que designaremos por $\xi(T)$. A partir de las fórmulas de la teoría de fluctuaciones (ver Parte 1, § 146), este radio se expresa en función de los coeficientes de la energía libre (45.3) mediante

$$\begin{aligned}\xi(T) &= \hbar/2(m|a|)^{1/2} \\ &= \hbar/2(m\alpha)^{1/2}(T_c - T)^{1/2}.\end{aligned}\quad (45.17)$$

Las longitudes características (45.16) y (45.17) determinan el orden de magnitud de las distancias sobre las que existe un cambio significativo del parámetro de orden ψ y del campo magnético, según se describe mediante las ecuaciones de Ginzburg-Landau. La longitud δ es en general una característica del campo magnético y $\xi(T)$ lo es de la distribución de ψ . Ambas longitudes deben ser grandes en comparación con las «dimensiones del par» ξ_0 , con objeto de satisfacer la hipótesis de que todas las magnitudes varían con suficiente lentitud en el espacio. Puesto que ambas longitudes aumentan cuando se aproxima el punto de transición [en proporción a $[T_c - T]^{-1/2}$], esta condición se satisface en general cerca del punto de transición (ver más adelante).

En la teoría que hemos expuesto tiene importancia el *parámetro de Ginzburg-Landau*; se define como el cociente constante (independiente de la temperatura) de las dos longitudes:

$$\varkappa = \delta(T)/\xi(T) = mcb^{1/2}/(2\pi)^{1/2}|e|\hbar. \quad (45.18)$$

En orden de magnitud, $\varkappa \sim \delta_0/\xi_0$, siendo ξ_0 la longitud de coherencia (39.21) y δ_0 la profundidad de penetración de London en el cero absoluto. Existe también una fórmula

$$\varkappa = 2\sqrt{2}(|e|/\hbar c)H_c(T)\delta^2(T), \quad (45.19)$$

obtenida a partir de (45.9) y (45.16) que expresa \varkappa directamente en función de magnitudes observables.

Habiendo establecido la forma de las ecuaciones, consideremos ahora su intervalo de aplicabilidad.

A temperaturas bajas, este intervalo está limitado en todo caso por la condición $T_c - T \ll T_c$, lo que nos permite considerar como pequeño el parámetro de orden, que resulta así fundamental para el desarrollo que se ha realizado en el caso de la energía libre. La misma condición asegura que $\xi(T) \gg \xi_0$, pero no es suficientemente fuerte como para asegurar que $\delta(T) \gg \xi_0$ en los superconductores en los que sea pequeño el parámetro \varkappa ;† en estos casos, la desigualdad $\delta \gg \xi_0$ da la condición

$$T_c - T \ll \varkappa^2 T_c. \quad (45.20)$$

† Como ejemplos, los valores de \varkappa para algunos metales son: aluminio 0,01, estaño 0,13, mercurio 0,16 y plomo 0,23.

Cuando $T \rightarrow T_c$, la validez de las ecuaciones está limitada únicamente por la condición general correspondiente a la teoría de Landau de las transiciones de fase, relativa a la presencia de fluctuaciones en el parámetro de orden. Sin embargo, en el caso presente esta condición es extraordinariamente débil: se expresa en función de los coeficientes del desarrollo (45.3) mediante la desigualdad

$$T_c - T \gg b^2 T_c^2 / \alpha (\hbar^2/m)^3$$

[ver Parte 1, (146.15)]. Por ejemplo, una estimación del valor de la expresión del segundo miembro, utilizando los valores de b y α del modelo de CBS, da

$$(T_c - T)/T_c \gg (T_c/\mu)^4. \quad (45.21)$$

Puesto que el cociente $T_c/\mu \sim 10^{-3}-10^{-4}$ es muy pequeño, podemos considerar que esta condición se satisface hasta casi el propio punto de transición. Desaparece prácticamente la región de fluctuación correspondiente a la transición de segundo orden entre las fases superconductora y normal.

PROBLEMA

Hallar el campo magnético crítico (paralelo al plano de la película) que destruye la superconductividad en una película plana de espesor $d \ll \xi, \delta$ (V. L. Ginzburg y L. D. Landau 1950).‡

SOLUCIÓN. Tomemos el plano medio de la película como plano xz , teniendo el eje x la dirección del campo. En la ecuación (45.13) correspondiente al campo $B = B_x(y)$ (que varía a lo largo del eje y normal a la película), podemos tomar $\psi = \text{constante}$. Entonces el primer término de la expresión (45.14) para la corriente es cero y tomando el rotacional de (45.13) se tiene $B'' = \theta B^2 / \delta^2$, en donde $\theta = \psi/\psi_0$, $\psi_0^2 = |a|/b$. La solución de esta ecuación, simétrica en y , es

$$B(y) = \tilde{\Phi} \frac{\cosh(y\theta/\delta)}{\cosh(d\theta/2\delta)} \approx \tilde{\Phi} \left[1 + \frac{y^2 - (\frac{1}{2}d)^2}{2\delta^2} - \theta^2 \right],$$

en donde $\tilde{\Phi}$ es el campo externo. Esto corresponde a una distribución de corriente

$$j = j_z = -cB'/4\pi \approx -c\theta^2 \tilde{\Phi} y / 4\pi\delta^2.$$

Sin embargo, en la ecuación (45.12) no podemos despreciar por completo la dependencia de ψ sobre y : la pequeña derivada $\partial^2\psi/\partial y^2$ está aquí multiplicada por $\hbar^2/m |a| \sim \xi^2$ y así adquiere el coeficiente $(\xi/d)^2$ que es grande por la condición $d \ll \xi$. Podemos despreciar el potencial $A = A_z(y)$ en esta ecuación, que conduce ahora a términos de un menor orden de magnitud en d/ξ . Con objeto de evitar la necesidad de considerar la dependencia de ψ sobre y , promediamos la ecuación (45.12) respecto al espesor de la película; desaparecen entonces las derivadas respecto a y , debido a la condición límite $\partial\psi/\partial y = 0$ en la superficie de la película. Observando también que

$$-\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \approx \left(\frac{mj}{|e|\hbar|\psi|^2} \right)^2 \psi$$

‡ Ver § 47 para el problema correspondiente de una esfera pequeña.

debido a la dependencia respecto a z de la fase de ψ (y a la relación entre su gradiente y la corriente) se encuentra, después de eliminar ψ ,

$$\frac{m\bar{j}^2}{4e^2|\psi|^4} - |a| + b|\psi|^2 = 0,$$

en donde

$$\bar{j}^2 = \frac{1}{d} \int_{-\delta/2}^{\delta/2} j^2 dy = \frac{c^2 d^2 \theta^4 \tilde{\delta}^2}{3(8\pi)^2 \delta^4}.$$

Utilizando también (45.9) y (45.16) llegamos a la ecuación

$$\frac{1}{24} \int \left(\frac{\tilde{\delta} d}{H_e \delta} \right)^2 = 1 - \frac{|\psi|^2}{\psi_0^2},$$

que determina ψ en el caso de una película en un campo magnético. El campo crítico H_c^f para la película es aquél para el cual $\psi = 0$. Está relacionado con el campo crítico H_c para un superconductor grueso por

$$H_c^f = \sqrt{(24) H_c \delta / d}.$$

En las condiciones consideradas, la eliminación de la superconductividad por el campo tiene lugar a través de una transición de fase de segundo orden: ψ tiende a cero de modo continuo cuando aumenta $\tilde{\delta}$. Esto resulta totalmente razonable, puesto que para $d \ll \delta$ el campo penetra realmente dentro de la película superconductora y no existe ninguna causa para una transición de primer orden, que consistiría en una penetración repentina del campo en el interior del cuerpo.

§ 46. Tensión superficial en la frontera entre las fases superconductora y normal

Las ecuaciones de Ginzburg-Landau permiten, en particular, el cálculo de la tensión superficial en el límite de separación de las fases superconductora (s) y normal (p) (de la misma muestra) en función de características del propio material (V. L. Ginzburg y L. D. Landau 1950). Dichos límites existen en muestras metálicas que están en el estado «intermedio» dentro de un campo magnético. Como la única diferencia entre ambas fases es que ψ es cero en una, pero no en la otra, la transición entre ellas es continua sobre una capa determinada y se describe mediante las ecuaciones de Ginzburg-Landau con condiciones límites o de contorno establecidas únicamente a distancias grandes a cada lado de esta capa.

Consideremos una interfase plana entre las fases n y s en un metal, considerando la interfase como el plano yz y estando contenido el eje x en la fase s ; en ambas fases la distribución de todas las magnitudes depende únicamente de la coordenada x . El potencial vector del campo, cuya selección no está todavía unívocamente especificada, estará sometida a la transformación «gauge» en la que $\text{div } \mathbf{A} = 0$; en el problema presente esto da $dA_x/dx = 0$; así resulta que es posible tomar $A_x = 0$.

Por simetría es evidente que el vector \mathbf{A} está contenido en un plano; supongamos que este plano sea el plano xy de modo que $A_y \equiv A$; entonces el vector inducción está en el plano xz , con

$$B \equiv B_z = A' \quad (46.1)$$

(la prima indica derivación respecto a x).

A continuación, volvamos a escribir (45.13) en la forma usual en electrodinámica macroscópica, $\text{rot } \mathbf{H} = 0$, vieniendo dada la intensidad \mathbf{H} del campo por†

$$\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}, \quad c \text{ rot } \mathbf{M} = \mathbf{j}.$$

A partir de esta ecuación se deduce en el caso presente por $H = \text{constante}$. Lejos de la interfase, dentro de la fase normal, coinciden la inducción y el campo y son iguales al campo crítico: $B = H = H_c$ (despreciamos la susceptibilidad magnética de la fase normal). De aquí que $H \equiv H_z = H_c$ en todo el espacio.

Despreciando la variación de la densidad del material en la transición a la fase superconductora, consideraremos la densidad (y la temperatura) como constante a través de todo el cuerpo.‡ Designemos mediante f la energía libre por unidad de volumen (en contraste con F , energía libre de todo el cuerpo). A temperatura y densidad constantes, y si se desprecian los efectos superficiales, la diferencial df es

$$df = \mathbf{H} \cdot d\mathbf{B}/4\pi; \quad (46.2)$$

cf. EMC, § 30. De aquí vemos que el requisito adicional de que \mathbf{B} sea constante lleva en estas condiciones a la constancia de

$$\tilde{f} = f - \mathbf{H} \cdot \mathbf{B}/4\pi. \quad (46.3)$$

Así pues, la contribución total a la integral $\tilde{F} = \int \tilde{f} dV$ de la parte variable de \tilde{F} se debe únicamente a la presencia de la interfase. Tomando esta contribución por unidad de área de la interfase, podemos calcular, por consiguiente, el coeficiente de tensión superficial como la integral

$$\alpha_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{f} - \tilde{f}_n) dx, \quad (46.4)$$

† Para evitar malas interpretaciones, podemos mencionar el comentario de EMC § 41 acerca de lo inadecuado de utilizar \mathbf{H} cuando nos referimos a la electrodinámica de los superconductores, en donde el valor de la penetración del campo magnético se consideró como infinitesimalmente pequeño. Sin embargo, las ecuaciones de Ginzburg-Landau se aplican precisamente a la estructura de esta región.

‡ Estrictamente hablando, en el equilibrio de fases es constante en todo el sistema la densidad y no el potencial químico. Si se toma en cuenta la variación de la densidad sería, por tanto, necesario considerar el potencial termodinámico Ω y no la energía libre.

en donde la constante \tilde{f}_n es el valor de \tilde{f} lejos de la interfase, por ejemplo dentro de la fase normal.

En el caso de la fase normal, la energía libre $f_n = f_{n0} + B^2/8 = f_{n0} + H_c^2/8\pi$, de modo que

$$\begin{aligned}\tilde{f}_n &= f_n - H_c^2/4\pi \\ &= f_{n0} - H_c^2/8\pi \\ &= f_{n0} - a^2/2b,\end{aligned}$$

en donde se obtiene la última expresión mediante (45.9). La magnitud \tilde{f} en un punto cualquiera se expresa en función de la densidad de energía libre f por

$$\tilde{f} = f - H_c B / 4\pi.$$

A continuación, utilizando (45.10), se llega a la fórmula siguiente para la tensión superficial:

$$\alpha_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{B^2}{8\pi} + \frac{\hbar^2}{4m} \left(|\psi'|^2 + \frac{4e^2}{\hbar^2 c^2} A^2 |\psi|^2 + a |\psi|^2 \right) + \frac{1}{2} b |\psi|^4 - \frac{H_c B}{4\pi} + \frac{a^2}{2b} \right\} dx. \quad (46.5)$$

El integrando se anula, como debe ser, tanto dentro de la fase normal ($x \rightarrow -\infty$) en donde $\psi = 0$ y $B = H_c$, como dentro de la fase superconductora ($x \rightarrow \infty$), en donde $|\psi|^2 = -a/b$, $B = 0$.

Debe señalarse que en el integrando de (46.5) el término $i\mathbf{A} \cdot \nabla \psi$ no aparece, puesto que $A_x = 0$. Tampoco aparece el término correspondiente en (45.12) y por ello la ecuación remanente tiene coeficientes reales; por consiguiente, puede tomarse su solución como real, como se supondrá más adelante. El primer término de la densidad de corriente (45.14) desaparece, quedando

$$\mathbf{j} = -(2e^2/mc) \psi^2 \mathbf{A}. \quad (46.6)$$

En lugar de la variable x y de las funciones $A(x)$ y $\psi(x)$ utilizaremos las magnitudes adimensionales

$$\bar{x} = x/\delta, \quad \bar{\psi} = \psi \sqrt{b/|a|}, \quad \bar{A} = A/H_c \delta, \quad \bar{B} = d\bar{A}/d\bar{x} = B/H_c. \quad (46.7)$$

En el resto de esta sección sólo se utilizarán estas magnitudes y se omitirán, por brevedad, las barras sobre las letras. Con estas variables, la ecuación (45.12) se transforma en

$$\psi'' = \kappa^2 \left[\left(\frac{1}{2} \bar{A}^2 - 1 \right) \psi + \psi^3 \right]. \quad (46.8)$$

La ecuación (45.13) tomando \mathbf{j} de (46.6) es

$$A'' = A\psi^2. \quad (46.9)$$

Las condiciones límites a aplicar a estas ecuaciones en el problema que estamos considerando (correspondiente a las fases n y s cuando $x \rightarrow -\infty$ y $x \rightarrow \infty$) son

$$\left. \begin{array}{ll} \psi = 0, & B = A' = 1 \text{ para } x = -\infty, \\ \psi = 1, & A' = 0 \text{ para } x = \infty. \end{array} \right\} \quad (46.10)$$

Se comprueba fácilmente que las ecuaciones (46.8), (46.9) tiene la integral primera

$$(2/\kappa^2)\psi'^2 + (2 - A^2)\psi^2 - \psi^4 + A'^2 = \text{constante} = 1, \quad (46.11)$$

quedando determinado el valor de la constante a partir de las condiciones límites.[†]

Finalmente, la expresión (46.5) se reduce a

$$\begin{aligned} \alpha_{ns} &= \frac{\delta H_c^2}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{2}{\kappa^2} \psi'^2 + (A^2 - 2)\psi^2 + \psi^4 + (A' - 1)^2 \right] dx \\ &= \frac{\delta H_c^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{2}{\kappa^2} \psi'^2 + A'(A' - 1) \right] dx, \end{aligned} \quad (46.12)$$

en donde se ha obtenido la segunda ecuación tomando ψ^4 de (46.11).

A continuación examinemos las ecuaciones anteriores y tomemos primero el caso $\kappa \ll 1$ (que normalmente se presenta en los metales puros superconductores). Esta desigualdad significa que $\delta(T) \ll \xi(T)$, es decir, el campo magnético varía considerablemente en distancias que son pequeñas en comparación con la distancia característica de variación de la función $\psi(x)$.

La figura 6 muestra en un diagrama el esquema de la distribución correspon-

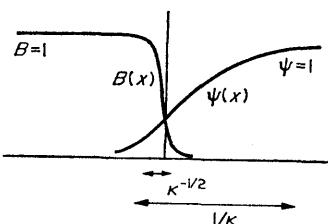


FIG. 6.

[†] A partir de las condiciones (46.10) se deduce necesariamente que $\psi' = 0$ en $x = \pm \infty$ y de las mismas condiciones y de (46.9) que $A'' = 0$ y $A = 0$ en $x = \infty$; el valor de $A(\infty)$ definido es el resultado de tomar a ψ real.

diente al campo y ψ en este caso. En donde el campo es grande tenemos $\psi \approx 0$; luego, el campo cae abruptamente y $\psi(x)$ empieza a variar ligeramente (sobre distancias $\sim 1/\kappa$) en ausencia del campo. Poniendo $A = 0$ en (46.11), encontramos la ecuación

$$\psi' = \frac{\kappa}{\sqrt{2}}(1 - \psi^2),$$

que ha de resolverse con la condición $\psi = 0$ en $x = 0$, tomada en un punto cualquiera de la región del campo decreciente. Esta solución es

$$\psi = \tgh \kappa x / \sqrt{2}, \quad (46.13)$$

y el cálculo de la integral (46.12) con esta función ($y A = 0$) da

$$\alpha_{ns} = \frac{H_c^2 \delta}{3\sqrt{2}\pi\kappa} = \frac{H_c^2}{8\pi} \cdot \frac{1.9\delta}{\kappa}. \quad (46.14)$$

El error de este valor se debe a que hemos despreciado aquí la contribución a la integral procedente de la región en donde disminuye el campo. Para estimar la anchura δ_1 de esta región,[†] observemos en primer lugar que $1/\delta_1^2 \sim \psi^2$ según (46.9); en segundo lugar, que la fórmula (46.13) debe seguir siendo válida en su orden de magnitud incluso en el límite de la región $x \sim \delta_1$, y por tanto $\psi \sim \kappa d_1$. A partir de estas dos relaciones se encuentra $\delta_1 \sim 1/\sqrt{\kappa}$. La contribución a la tensión superficial procedente de esta región es $\sim H_c^2 \delta / \sqrt{\kappa}$, es decir es más pequeña en comparación con (46.14) únicamente en el factor $1/\sqrt{\kappa}$ [de modo que la exactitud de (46.14) es bastante baja].

Cuando aumenta el parámetro κ , el coeficiente de tensión superficial pasa por cero y se hace negativo. Esto resulta evidente a partir del hecho de que se satisface siempre la desigualdad $\alpha_{ns} < 0$ para κ suficientemente grande: las distancias características de variación de $\psi(x)$ en este problema no pueden ser menores que las correspondientes a $A(x)$, puesto que cualquier cambio en A produce una variación en ψ ; de aquí que, para κ grande, pueda despreciarse el término ψ'^2/κ^2 en el integrando de (46.12) y éste es negativo puesto que $0 < A' < 1$ (es decir $0 < B < H_c$ en unidades ordinarias). Demostraremos que α_{ns} es cero en

$$\kappa = 1/\sqrt{2}. \quad (46.15)$$

[†] Debemos resaltar que δ_1 no es el mismo que la profundidad de penetración del campo en un superconductor junto a un vacío. En este último caso, $\psi \sim 1$ en la región de penetración del campo, mientras que en la penetración desde una fase n el campo disminuye en una región en la que ψ es pequeño.

Para ello, volvamos a escribir la expresión correspondiente a α_{ns} como

$$\alpha_{ns} = \frac{H_c^2 \delta}{8\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [(A' - 1)^2 - \psi^4] dx, \quad (46.16)$$

que se obtiene a partir de la integral primera (46.12) integrando el término ψ'^2 por partes y sustituyendo luego ψ'' de (46.8). La integral es ciertamente cero si el integrando es idénticamente nulo, es decir si

$$A' - 1 = -\psi^2; \quad (46.17)$$

el signo opuesto no puede presentarse, puesto que el campo $B = A'$ debe disminuir al aumentar x . Eliminando ψ entre (46.17) y (46.9) se tiene

$$A'' = A(1 - A'), \quad (46.18)$$

cuya solución (con las condiciones límites $A' = 1$ en $x = -\infty$ y $A = 0$ en $x = \infty$) determina la distribución del campo; en virtud de (46.17), se satisfacen entonces automáticamente las condiciones límites (46.10) para ψ . No necesitamos resolver realmente (46.18) sino simplemente comprobar que para $x^2 = \frac{1}{2}$ debe satisfacerse necesariamente la ecuación (46.8), que todavía no se ha utilizado, o lo que es equivalente, su integral primera (46.11). Sustituyendo (46.17) en (46.9), obtenemos $\psi' = -\frac{1}{2}A\psi$; este valor de ψ' , con A' de (46.17), satisface de hecho idénticamente la ecuación (46.11) con $x^2 = \frac{1}{2}$.

PROBLEMA

En el caso de un superconductor con $\kappa \ll 1$, hallar la primera corrección de campo a la profundidad de penetración en campos débiles.

SOLUCIÓN. Tomemos la superficie del superconductor como plano yz , situando el eje z en la dirección del campo externo \mathfrak{H} , y el eje x dentro del cuerpo. La distribución del campo y de ψ en el superconductor vienen dadas por las ecuaciones (46.8), (46.9), que han de resolverse teniendo en cuenta las condiciones límites o de contorno

$$\begin{aligned} \psi' &= 0, & B = A' &= \mathfrak{H} && \text{para } x = 0, \\ \psi' &= 1, & A &= 0 && \text{para } x = \infty; \end{aligned}$$

la primera de ellas es (45.15). Busquemos una solución de la forma

$$\psi = 1 + \psi_1(x), \quad A = -\mathfrak{H} e^{-x} + A_1(x),$$

en donde ψ_1 y A_1 son pequeñas correcciones a la solución en $x = 0$, que corresponde a la disminución de London del campo (44.13). La corrección ψ_1 viene dada por la ecuación

$$\psi_1'' = 2x^2\psi_1 + \frac{1}{2}\kappa^2\mathfrak{H}^2 e^{-2x},$$

de aquí que con las condiciones límites

$$\psi_1 = \frac{1}{8} \kappa^2 \mathfrak{H}^2 e^{-2x} - \frac{1}{4\sqrt{2}} \kappa \mathfrak{H}^2 e^{-\sqrt{2}\kappa x}. \quad (1)$$

Para A_1 podemos ahora escribir la ecuación

$$A_1'' = A_1 - 2\mathfrak{H} e^{-x} \psi_1,$$

y sustituimos para ψ_1 únicamente el segundo término de (1) que es del primer orden en κ . Utilizando la condición límite ($A_1' = 0$ cuando $x = 0$) y despreciando en donde sea posible los términos de orden superior con respecto a κ en los coeficientes, se encuentra

$$A_1 = -\frac{1}{8} \mathfrak{H}^3 [(1 + \sqrt{2}\kappa) e^{-x} - e^{-(1+\sqrt{2}\kappa)x}]. \quad (2)$$

Esta expresión nos da las correcciones a la disminución del campo dentro del superconductor. La profundidad de penetración efectiva δ_{ef} , es, por definición, tal que

$$\mathfrak{H} \delta_{ef} = \int_0^\infty B(x) dx = -A(0) = \mathfrak{H} - A_1(0).$$

Volviendo a las unidades ordinarias, se encuentra a partir de (2)

$$\delta_{ef} = \delta \left[1 + \frac{\kappa}{4\sqrt{2}} \left(\frac{\mathfrak{H}}{H_c} \right)^2 \right].$$

§ 47. Los dos tipos de superconductor

El signo de la tensión superficial α_{ns} tiene una influencia considerable sobre las propiedades de los superconductores. Esto forma la base para la división de todos los superconductores en dos clases: los de primera clase, con $\alpha_{ns} > 0$, y los de segunda clase, en los que $\alpha_{ns} < 0$. Puesto que el signo de α_{ns} resulta gobernado por el valor del parámetro de Ginzburg-Landau κ , los valores de $\kappa < 1/\sqrt{2}$ corresponde (cerca de T_c) a los primeros y $\kappa > 1/\sqrt{2}$ a los últimos.†

Consideremos un superconductor cilíndrico sólido dentro de un campo magnético externo longitudinal \mathfrak{H} . Si el superconductor es de la primera clase, experimenta una transición de fase de primer orden cuando el campo aumenta hasta un valor crítico H_c . El papel de la tensión superficial consiste entonces (como en cualquier transición de fase de primer orden) en impedir la formación de los primeros núcleos de la nueva fase y así hace posible la existencia de una continuación metaestable de la fase s en campos un poco por encima de H_c .

† La primera clase incluye elementos metálicos puros superconductores; la segunda clase incluye las aleaciones superconductoras. La hipótesis de que $\kappa > 1/\sqrt{2}$ en aleaciones fue propuesta por primera vez por L. D. Landau.

Sin embargo, si el superconductor es de segunda clase, la presencia de «inclusiones» de la fase n puede ser termodinámicamente favorable incluso antes de que se alcance H_c ; el aumento de energía de volumen se ve compensado por la energía superficial negativa de dichos núcleos. El valor límite inferior de los campos para los que es posible esto último se designa normalmente por H_{c1} y se denomina *campo crítico inferior*. Análogamente, partiendo de un metal en el estado normal dentro de un campo exterior elevado, se alcanza un valor $H_{c2} > H_c$, *campo crítico superior*, por debajo del cual es termodinámicamente favorable la presencia de «inclusiones» de la fase s , de nuevo por la ventaja que se obtiene mediante la energía negativa de los límites o fronteras. Así pues, en un cierto intervalo de valores de los campos, $H_{c1} < \mathfrak{H} < H_{c2}$, el superconductor se encuentra en un *estado mixto o mezcla*.^f En este estado, sus propiedades van cambiando gradualmente desde el superconductor puro en H_{c1} hasta el normal puro en H_{c2} ; al mismo tiempo, el campo magnético va penetrando gradualmente en él. En este caso carece de significado especial el valor de H_c determinado únicamente por la relación existente entre las energías de las fases n y s en todo el cuerpo.

Como es natural, los dos campos críticos dependen de la temperatura y se anulan a $T = T_c$. Esto nos da un diagrama de fases como el indicado en la figura 7 para el caso de superconductores de la segunda clase. La curva a trazos de dicha figura se explicará más adelante.

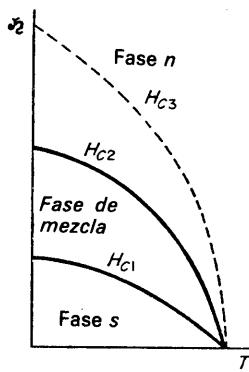


FIG. 7.

El campo crítico superior puede determinarse (en la teoría de Ginzburg-Landau) incluso sin el conocimiento previo de la estructura del estado mezcla. Únicamente necesitamos observar que en campos ligeramente inferiores a H_{c2} un núcleo de la fase s debe tener un parámetro de orden ψ de pequeño valor; es evidente que $\psi \rightarrow 0$

^f No ha de confundirse con el estado intermedio de un superconductor de la primera clase, que resulta de ciertas configuraciones de la muestra en el campo magnético externo.

cuando \mathfrak{H} tiende a H_{c2} . De aquí que pueda describirse el estado de estos núcleos mediante las ecuaciones de Ginzburg-Landau linealizadas respecto a ψ . Omitiendo el término no lineal en (45.12), obtenemos la ecuación en donde \mathbf{A} ha de tomarse

$$\frac{1}{4m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi = |\mathbf{a}| \psi, \quad (47.1)$$

como el potencial vector del campo uniforme \mathfrak{H} a $\psi = 0$, cuando el cuerpo está en el estado normal y el campo externo le penetra por completo.

Pero (47.1) tiene la forma exactamente de la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa $2m$ y carga $2e$ en el interior de un campo magnético, siendo $|\mathbf{a}|$ el nivel de energía, las condiciones de contorno o límites también concuerdan: $\psi = 0$ en el infinito. Se sabe (ver MC, § 112) que la energía mínima de una partícula que se está moviendo en un campo magnético uniforme es $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_H$, en donde $\omega_H = 2|e|\mathfrak{H}/2mc$; éste es el valor de la energía a partir del cual empieza el espectro continuo de energía. La analogía entre los dos problemas muestra, por tanto, que sólo pueden existir los núcleos de la fase *s* descritos por (47.1) si

$$|\mathbf{a}| > |e|\hbar\mathfrak{H}/2mc,$$

de modo que el campo crítico $H_{c2} = 2mc|\mathbf{a}|/|e|\hbar$. Mediante (45.9), (45.17) y (45.18) puede escribirse esta fórmula en la forma

$$H_{c2} = \sqrt{2\kappa}H_c \quad (47.2)$$

(A. A. Abrikosov 1952).

La solución de la ecuación (47.1), con la condición de contorno $\psi = 0$ en el infinito, corresponde a la formación de un núcleo de fase *s* dentro de la muestra, lejos de su superficie. Demostraremos que la presencia de la superficie favorece la nucleación y que pueden formarse así núcleos en una capa delgada superficial incluso si $\mathfrak{H} > H_{c2}$ (P. G. de Gennes y D. Saint-James 1963).

La solución de la ecuación (47.1), que describe un núcleo de la fase *s* cerca de la superficie del cuerpo (supuesta plana). debe satisfacer en dicha superficie la condición límite o de contorno $\partial\psi/\partial x = 0$, siendo x la coordenada a lo largo de la normal a la superficie [condición (45.15) con $A_x = 0$]. Para establecer la analogía cuántica que buscamos, hay que recordar que el problema mencionado anteriormente del movimiento de una partícula dentro de un campo magnético es a su vez equivalente al del movimiento en un pozo de potencial monodimensional parabólico

$$U = \frac{1}{2}2m\omega_H^2(x - x_0)^2,$$

en donde x_0 es una constante que corresponde al «centro de la órbita» (ver MC, § 112). Consideremos ahora un pozo doble compuesto por dos pozos parabólicos iguales colocados simétricamente respecto al plano $x = 0$ (fig. 8). El estado fundamental de la partícula en dicho campo corresponde a una función de onda $\psi(x)$

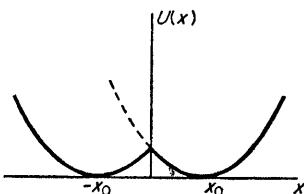


FIG. 8.

que es par en x y no tiene ceros; dicha función satisface automáticamente la condición $\psi' = 0$ en $x = 0$. Sin embargo, el nivel fundamental de una partícula en el pozo doble está debajo del correspondiente al pozo simple;[†] cuando se aplica el problema de nucleación, esto demuestra la afirmación anterior de que era más fácil su formación cerca de la superficie.

El cálculo numérico del nivel en un pozo doble da el resultado de que su valor mínimo (en función del parámetro x_0) es $0,59E_0$. Repitiendo los razonamientos que condujeron a (47.2), se encuentra que el límite superior de los campos en el que se presentan núcleos superficiales de fase s es $H_{c3} = H_{c2}/0,59$, es decir

$$H_{c3} = 1.7H_{c2} = 2.4\pi H_c. \quad (47.3)$$

Así pues, en el intervalo de campos comprendidos entre H_{c2} y H_{c3} es donde surge el fenómeno de la superconductividad; el límite de esta región es el que se ha señalado mediante una línea a trazos en la curva de figura 7. El espesor de la capa superconductora en la superficie de la fase normal es del orden de $\xi(T)$. Esta estimación puede realizarse fácilmente a partir de la misma analogía cuántica: la función de onda de una partícula en un pozo de potencial (en el nivel E_0) está concentrada en la región $x \sim \hbar/\sqrt{mE_0}$. Se obtiene la dimensión correspondiente del núcleo sustituyendo E_0 por $|a|$ y, de acuerdo con (45.17), vale $\xi(T)$.

El análisis anterior se relaciona totalmente con los superconductores de segunda clase, pero los campos críticos H_{c2} y H_{c3} definidos aquí pueden tener también un cierto significado físico para los de primera clase.

Si \varkappa está en el margen $1/\sqrt{2} = 0,71 > \varkappa > 0,59/\sqrt{2} = 0,42$, entonces $H_{c2} < H_c$ pero $H_{c3} > H_c$. Aunque en este caso no aparece ninguna fase mezcla, existe una superconductividad superficial en el intervalo de campos entre H_c y H_{c3} .

[†] Esto se debe a que la energía potencial en el semiespacio $x < 0$ es menor de lo que sería en el caso de un solo pozo como se indica en la curva a trazos de la figura 8; ver, por ejemplo, MC, § 50, problema 3.

Finalmente, en el sentido de la deducción anterior, el valor de H_{c2} (47.2) determina (para cualquier α) el límite superior de los campos en los que es posible la formación de núcleos de fase s con un ψ arbitrariamente pequeño. De aquí que, en un superconductor de la primera clase (en donde $H_{c2} < H_c$) en campos $\mathfrak{H} < H_{c2}$, es absolutamente inestable la fase normal termodinámicamente desfavorable; pero en el intervalo $H_{c2} < \mathfrak{H} < H_c$ la fase normal puede existir como una fase metaestable. En este intervalo, la transición de fase de la primera clase desde la fase n a la fase s sólo puede producirse mediante la formación de núcleos de fase s con valores finitos de ψ , lo cual está en oposición con la tensión superficial positiva en sus límites (V. L. Ginzburg 1956).

PROBLEMA

Determinar el campo crítico para una esfera superconductora de radio pequeño $R \ll \delta$ (V. L. Ginzburg 1958).

SOLUCIÓN. En este caso (como en una película delgada; ver § 45, problema) la superconductividad se destruye mediante una transición de fase de segundo orden. Puede hallarse el campo crítico para una esfera localizando aquél por debajo del cual cesa de ser estable la fase n respecto a la formación de núcleos de fase s . Como sucede en el caso estudiado en el texto, esto equivale a hallar el valor propio más bajo de la ecuación de Schrödinger (47.1). Con la condición $R \ll \delta$, puede buscarse dicho valor mediante la teoría de perturbaciones respecto al campo externo, siendo $\psi = \text{constante}$ la función de onda sin perturbar (el núcleo ocupa todo el volumen de la esfera). El valor propio es entonces simplemente el valor medio del operador de perturbación $(2eA/c)^2/4m$ [el valor medio del operador $(ie\hbar/mc)\mathbf{A} \cdot \nabla$ para $\psi = \text{constante}$ es cero]. El potencial vector del campo uniforme debe tomarse aquí como $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathfrak{H}\mathbf{\hat{r}} \times \mathbf{r}$; con esta transformación «gauge», la solución $\psi = \text{constante}$ satisface en la superficie de la esfera a la condición de contorno (45.15), que se reduce a $\mathbf{n} \cdot \mathbf{A} = 0$. El resultado de la operación de promediar es

$$E_0 = \frac{e^2}{4mc^2} \frac{2}{3} \mathfrak{H}^2 r^2 = \frac{e^2 \mathfrak{H}^2 R^2}{10mc^2}$$

Se encuentra el campo crítico, como en el texto, a partir de la condición $E_0 = |\alpha|$, que da

$$H_c^{ph} = \sqrt{20H_c\delta/R}.$$

Se confirma la legitimidad de la utilización de la teoría de perturbaciones por el hecho de que el valor encontrado para E_0 (con $\mathfrak{H} = H^{ph}$), con la condición $R \ll \delta$, resulta pequeño en comparación con el siguiente valor propio, que correspondería a una función de onda variable dentro de la esfera y que sería del orden \hbar^2/mR^2 .

§ 48. Estructura del estado mezcla

Consideremos de nuevo (como en § 47) una muestra cilíndrica de un superconductor de segunda clase en un campo magnético longitudinal \mathfrak{H} y busquemos la

estructura del estado mezcla del cuerpo en campos que superan ligeramente al campo crítico inferior H_{c1} .[†]

En este caso existen núcleos de la fase normal en la fase superconductora principal. Para conseguir las condiciones termodinámicas más favorables posibles, deben poseer (con tensión superficial negativa) la mayor superficie posible. Por consiguiente, la estructura que es de esperar es aquélla en la que los núcleos de fase n son filamentos paralelos al campo. El campo magnético que penetra dentro del cuerpo y las corrientes anulares de superconductividad que rodean estos *filamentos de vórtices* se concentran cerca de los filamentos.

Cuando el campo externo se aproxima a H_{c1} , el número de dichos filamentos que hay en el interior del cuerpo disminuye mientras aumenta la distancia entre ellos. Cuando esta distancia es suficientemente grande, resulta aplicable el razonamiento dado al final de § 44 a los filamentos de vórtices individuales, según el cual el flujo magnético total concentrado cerca de un filamento debe ser un múltiplo entero del cuarto de flujo $\phi_0 = \pi\hbar c/|e|$; veremos posteriormente que son termodinámicamente favorables los filamentos con el flujo más bajo posible, el propio ϕ_0 . El hecho de que ϕ_0 no sea cero es lo que establece un límite a una fragmentación ulterior de los núcleos de la fase n .

Cuando el campo externo alcanza el valor H_{c1} , creciendo desde valores bajos, aparece en el cilindro un filamento de vórtices. Podemos escribir la condición termodinámica que determina este punto sin investigar de momento la propia estructura del filamento, sino utilizando simplemente el hecho de que está asociada a una cierta energía positiva; esta energía por unidad de longitud del filamento se denominará ε (y se calculará más adelante).

Es evidente que, en un cuerpo cilíndrico en el interior de un campo magnético, la inducción \mathbf{B} también será en todo punto paralela al eje del cilindro. Esto mismo es cierto cuando se aplica al campo macroscópico $\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}$ definido en § 46. La ecuación $\text{rot } \mathbf{H} = 0$ muestra entonces que \mathbf{H} es constante en la sección recta del cilindro (y, por tanto, en todo su volumen); debido a la condición de contorno de que sea continua la componente tangencial de \mathbf{H} , este valor constante debe ser igual al campo externo: $\mathbf{H} = \mathfrak{H}$. Así pues, hemos de considerar el equilibrio termodinámico del cuerpo para un volumen, temperatura e intensidad de campo \mathbf{H} dados. La condición para dicho equilibrio es que sea mínimo (ver EMC, § 30) el potencial termodinámico F respecto a estas variables. Supongamos que sea F_s el potencial en el caso de un cilindro superconductor; puesto que $\mathbf{B} = 0$ en la fase superconductora, \tilde{F}_s coincide con la energía libre F_s . Entonces el potencial F para un cilindro con un filamento de vórtices será

$$\begin{aligned}\tilde{F} &= \tilde{F}_s + L\varepsilon - \int \mathbf{H} \cdot \mathbf{B} dV/4\pi \\ &= F_s + L\varepsilon - \mathfrak{H} \int B dV/4\pi.\end{aligned}$$

[†] Los resultados de esta sección y los problemas se deben a A. A. Abrikosov (1957).

El término $L\varepsilon$ es la energía libre del filamento (siendo L la longitud del filamento que es igual a la del cilindro) y el término último es la diferencia existente entre el potencial \tilde{F} y la energía libre F . Como la inducción \mathbf{B} está enteramente concentrada cerca del filamento de vórtices que existe en el cuerpo, tenemos $\int \mathbf{B} dV = L\phi_0$, siendo ϕ_0 el flujo de la inducción a través de la sección recta del filamento. Así pues,

$$\tilde{F} = \tilde{F}_s + L\varepsilon - L\phi_0 \xi / 4\pi. \quad (48.1)$$

La aparición de filamentos de vórtices resulta termodinámicamente favorable cuando es negativa la cantidad añadida a \tilde{F}_s . Igualándola a cero tenemos así el valor crítico del campo externo

$$H_{c1} = 4\pi\varepsilon/\phi_0. \quad (48.2)$$

Consideremos a continuación la estructura de un filamento de vórtices aislado. Estudiaremos únicamente el caso importante en el que

$$\alpha \gg 1, \quad (48.3)$$

es decir, $\delta \gg \xi$. La longitud ξ determina el orden de magnitud del radio del «núcleo» del filamento en el que $|\psi|^2$ varía desde cero (que corresponde al estado normal sobre el eje del filamento) hasta el valor finito que corresponde a la fase s principal; a distancias r grandes del eje del filamento, $|\psi|^2$ permanece constante.[†] La inducción $B(r)$ varía mucho más lentamente, tendiendo a cero únicamente a distancias $r \sim \delta \gg \xi$. Así pues, esencialmente la totalidad del flujo magnético pasa por la región exterior al núcleo, en donde $|\psi|^2 = \text{constante}$ (fig. 9).

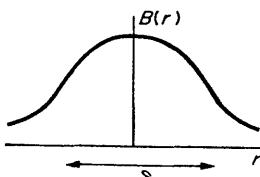
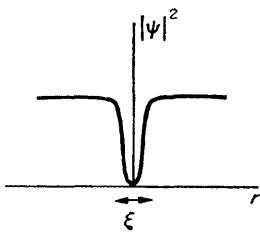


FIG. 9.

[†] En esta sección r designará una coordenada cilíndrica, la distancia al eje.

Este último hecho nos permite utilizar las ecuaciones de London (cuya validez, recordemoslo, no depende de que la temperatura sea próxima a T_c) con objeto de hallar la distribución del campo. Para ponerla en la forma apropiada, primeramente volvamos a escribir la relación (44.7) entre la densidad de corriente de superconductividad y la fase de la función de onda:

$$\mathbf{A} + \delta^2 \operatorname{rot} \mathbf{B} = \phi_0 \nabla \Phi / 2\pi, \quad (48.4)$$

en donde se ha hecho uso de la profundidad de penetración δ y se ha expresado \mathbf{j} en función de la inducción mediante la relación $\mathbf{j} = c \operatorname{rot} \mathbf{B} / 4\pi$. La aproximación de London corresponde a la hipótesis de que δ es constante. Integremos (48.4) a lo largo de un contorno cerrado C que rodee el filamento y pase a distancias $r \gg \xi$ de su eje. Transformando la integral de \mathbf{A} mediante el teorema de Stokes en una integral respecto a una superficie que se apoya en el contorno C se tiene

$$\int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{f} + \delta^2 \oint \operatorname{rot} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{l} = \phi_0, \quad (48.5)$$

y una transformación semejante de la segunda integral nos da

$$\int (\mathbf{B} + \delta^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{B}) \cdot d\mathbf{f} = \phi_0; \quad (48.6)$$

en el segundo miembro hemos escrito el valor más pequeño posible (no nulo), que corresponde a un incremento de la fase en sólo 2π . Si el contorno C pasa a distancias $r \gg \delta$ del filamento, en donde pueden considerarse como cero el campo y las corrientes, puede omitirse la segunda integral en (48.5) y vemos que es igual al flujo total de la inducción concentrada alrededor del filamento de vórtices aislados. El propio eje del filamento es una línea de singularidad, de modo que pasando a su alrededor se altera la fase de la función de onda.

Como la ecuación (48.6) debe ser satisfecha por cualquier contorno C que cumpla las condiciones establecidas, se demuestra que debe cumplirse

$$\mathbf{B} + \delta^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{B} = \mathbf{B} - \delta^2 \Delta \mathbf{B} = \phi_0 \delta(\mathbf{r}), \quad (48.7)$$

en donde \mathbf{r} es el vector de posición bidimensional en el plano de la sección recta del filamento de vórtices. Al escribir el segundo miembro de esta ecuación como una función delta se significa que las distancias $\sim \xi$ se consideran aquí nulas. En todo el espacio, excepto en la línea $\mathbf{r} = 0$, la ecuación (48.7) es la misma que la ecuación de London (44.11), pero para describir el filamento de vórtices necesitamos una solución con una singularidad en $\mathbf{r} = 0$.

La distribución del campo a distancias r del eje dentro del intervalo $\delta \gg r \gg \xi$ puede hallarse directamente de (48.5). Tomemos como contorno C una circunferencia de radio r comprendido dentro de este intervalo. El flujo de inducción a través de este contorno, primer término del primer miembro de (48.5), es únicamente una

pequeña parte del flujo magnético total, en la relación $\sim (r/\delta)^2$; puede despreciarse. En el segundo término $d\mathbf{l}$ es un elemento de longitud de la circunferencia; puesto que el vector \mathbf{B} está dirigido a lo largo del eje z (en coordenadas polares cilíndricas con el eje en la dirección del filamento) y depende únicamente de r , tenemos

$$\mathbf{l} \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = (\mathbf{l} \times \nabla) \cdot \mathbf{B} = -\partial B_z / \partial r = -dB/dr,$$

en donde \mathbf{l} es un vector unidad tangente a la circunferencia. Así obtenemos la ecuación

$$\mathbf{l} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{B} = -dB/dr = \phi_0 / 2\pi r \delta^2, \quad (48.8)$$

de aquí que

$$B(r) = \frac{\phi_0}{2\pi\delta^2} \log \frac{\delta}{r}, \quad \xi \ll r \ll \delta. \quad (48.9)$$

Debido a la dependencia logarítmica, el límite superior de integración (en el que deberíamos tener $B \approx 0$) puede hacerse igual al límite superior del intervalo de distancias r que estamos considerando.

Para continuar la distribución que hemos encontrado anteriormente hasta el intervalo $r \gtrsim \delta$, utilicemos la ecuación (48.7) que es válida para todo $r \gg \xi$. Desarrollando el operador laplaciano en coordenadas cilíndricas polares [con $B = B_z(r)$], podemos volver a escribir la ecuación (para $r \neq 0$) en la forma

$$B'' + B'/r + B/\delta^2 = 0.$$

La solución de esta ecuación que disminuye cuando $r \rightarrow \infty$ es

$$B(r) = \text{constante} \times K_0(r/\delta),$$

en donde K_0 es la función de Macdonald (la función de Hankel con argumento imaginario). Se determina el coeficiente constante por su «coincidencia» con la solución (48.9), utilizando la forma límite conocida $K_0(z) \approx \log(2z/\gamma)$ para $z \ll 1$ ($\gamma = e^\gamma = 1,78$). Así se tiene finalmente

$$B(r) = \frac{\phi_0}{2\pi\delta^2} K_0(r/\delta), \quad r \gg \xi. \quad (48.10)$$

Mediante la expresión asintótica conocida $K_0(z) \approx (\pi/2z)^{1/2} e^{-z}$ para $z \rightarrow \infty$, podemos hallar en particular la ley de decrecimiento del campo lejos del eje del filamento:

$$B(r) = \frac{\phi_0}{(8\pi r \delta^3)^{1/2}} e^{-r/\delta}. \quad (48.11)$$

Debe prestarse atención a la evidente analogía existente entre las propiedades de los filamentos de vórtices en los superconductores y las correspondientes en el helio líquido (§ 29). En ambos casos existen singularidades lineales, de forma que si se pasa a su alrededor se altera la fase de la función de onda del condensado. Los trayectos circulares del movimiento superfluido alrededor de los filamentos de vórtices en el helio líquido se corresponden con las corrientes circulares en el superconductor; en el primero, la velocidad v_s del movimiento superfluido disminuye como $1/r$ y en el segundo la densidad de corriente de superconductividad

$$j = \frac{c}{4\pi} |\operatorname{rot} \mathbf{B}| = \frac{c\phi_0}{8\pi^2\delta^2 r} \quad (48.12)$$

disminuye de la misma manera. Este acuerdo es lógico puesto que en ambos casos la relación es una consecuencia directa de la existencia de la singularidad lineal. Pero, mientras en el helio líquido esta relación $v_s(r)$ se extiende a todas las distancias, en un superconductor la disminución de $j(r)$ resulta exponencial para $r \gg \delta$. La diferencia se debe al estado cargado del líquido de electrones: el movimiento de partículas cargadas crea un campo magnético, que a su vez apantalla el campo: si se hace tender a cero la carga e de la partícula, la profundidad de penetración $\delta \rightarrow \infty$.

Podemos ahora calcular la energía libre de un filamento de vórtices. La contribución de la región del espacio exterior al núcleo ($r \gg \xi$) viene dada por las integrales

$$F_{\text{fil}} = \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{B}^e \cdot d\mathbf{V} + \frac{\delta^2}{8\pi} \int (\operatorname{rot} \mathbf{B})^2 dV \quad (48.13)$$

extendidas a esta región. De hecho, al variar esta expresión respecto a \mathbf{B} (a una temperatura dada, es decir, a una δ dada), obtenemos inmediatamente la ecuación de London (48.7) (para $r \neq 0$).† La segunda integral de (48.13), que diverge logarítmicamente en ambos extremos del intervalo $\delta \gg r \gg \xi$, es grande en comparación con la primera. Sustituyendo aquí $|\operatorname{rot} \mathbf{B}|$ de (48.8), obtenemos como valor de la energía por unidad de longitud del filamento

$$\epsilon = (\phi_0/4\pi\delta)^2 \log(\delta/\xi). \quad (48.14)$$

† El segundo término de (48.13), expresado en función de la corriente j , es

$$2\pi c^2 \delta^2 \int j^2 dV = \int \frac{1}{2} q_s v_s^2 dV;$$

en la segunda expresión hemos sustituido también $\delta^2 = mc^2/4\pi e^2 n$ y la densidad y la velocidad del componente superfluido de acuerdo con $j = eq_s v_s m$; ver la nota primera a § 44. Vemos que este término puede considerarse como la energía cinética de los electrones superconductores.

Esta expresión tiene una exactitud logarítmica, es decir, se admite no sólo que $\delta/\xi \gg 1$ sino también que $\log(\delta/\xi) \gg 1$; hasta esta exactitud podemos despreciar la contribución a ε del núcleo del filamento.

El resultado (48.14) permite, en particular, la prueba de la afirmación realizada anteriormente de que la formación de los filamentos de vórtices con el valor más bajo del flujo magnético es termodinámicamente favorable. Como la energía libre del filamento es proporcional al cuadrado del flujo magnético ligado al filamento, la energía correspondiente a un filamento con flujo $n\phi_0$ debería contener otro factor n^2 y la ruptura de dicho filamento en n filamentos con flujo ϕ_0 conduciría a una ganancia a veces mayor de energía.

Sustituyendo (48.14) en (48.2) se encuentra el campo crítico inferior

$$H_{c1} = \frac{\phi_0}{4\pi\delta^2} \log(\delta/\xi). \quad (48.15)$$

Cuando $T \rightarrow T_c$, esta expresión puede escribirse también, mediante (45.19), como [‡]

$$H_{c1} = H_c \frac{\log z}{\sqrt{2z}}. \quad (48.16)$$

Cuando aumenta el campo externo, aumenta también el número de filamentos de vórtices y, por consiguiente, la penetración del campo magnético en el interior del superconductor. Cuando se tiene en cuenta la interacción entre filamentos, el equilibrio termodinámico corresponde a una cierta configuración ordenada de los filamentos, que forman una red bidimensional en el plano de la sección recta del cilindro.[§] En el caso de una densidad numérica cualquiera de filamentos, el eje de cada uno de ellos sigue siendo una línea tal que al pasar a su alrededor se altera la fase de la función de onda ψ en 2π . El valor medio (sobre la sección recta del cilindro) de la inducción es

$$\bar{B} = v\phi_0, \quad (48.17)$$

en donde v es el número de filamentos por unidad de área de la sección recta. Efectivamente, si integramos la relación (48.4) a lo largo del contorno que rodea la totalidad de la sección recta de la muestra, obtenemos la ecuación (48.5) con el valor $Sv\phi_0$ en el segundo miembro (S es el área de la sección recta); en el primer miembro, la primera integral es el flujo total $\bar{S}B$ de la inducción y la segunda representa un efecto de borde que es pequeño en comparación con el valor de la primera, en la relación $\sim \delta/R$ y, por consiguiente, resulta despreciable (R es la dimensión

[‡] Como se ha deducido esta fórmula con la hipótesis de que $\log z \gg 1$ no puede utilizarse cuando $z \sim 1$. En particular, para $z = 1/\sqrt{2}$ el campo H_{c1} (como el H_{c2}) debe ser simplemente H_c .

[§] La red más favorable parece ser la formada por triángulos equiláteros con filamentos de vórtices en sus vértices.

lineal de la sección recta): como es natural, aquí resulta importante el hecho de que el campo alrededor del filamento se hace prácticamente cero a distancias $\sim \delta$.

Mientras las distancias d entre los filamentos permanezcan grandes en comparación con el radio de correlación ξ , podemos afirmar que los campos magnéticos de los filamentos de vórtices son simplemente aditivos; cuando $d \gg \xi$, todavía podemos dibujar un contorno que rodee un número cualquiera de filamentos de vórtices de tal modo que pase en todos sus puntos suficientemente lejos (a distancias $\gg \xi$) de sus núcleos. Sobre dicho contorno, se satisface la condición para la aproximación de London (δ es constante) y podemos, por consiguiente, llegar de nuevo a una ecuación que difiere de (48.7) sólo en que se sustituye la función delta del segundo miembro por una suma de funciones delta de las distancias a cada filamento; puesto que esta ecuación es lineal, resulta demostrada la afirmación realizada.

Cuando el campo externo se aproxima a H_{c2} , las distancias entre los filamentos de vórtices resulta comparable a ξ . Esto queda claro también a partir de la expresión (47.2) para el campo crítico si éste se escribe, mediante (45.9) y (45.16)-(45.18), en la forma

$$H_{c2} = \phi_0 / 2\pi\xi^2; \quad (48.18)$$

corresponde a un flujo ϕ_0 concentrado sobre una área $\sim \xi^2$.

La desaparición de la superconductividad cuando $\mathfrak{H} = H_{c2}$ tiene lugar como una transición de fase de segundo orden. De acuerdo con la teoría general de dichas transiciones, podemos afirmar que el parámetro de orden ψ en función del campo externo disminuye hasta anularse de acuerdo con la expresión $|\psi|^2 \propto H_2 - \mathfrak{H}$. Por otra parte, la imanación de la sustancia $M = (B - H)/4\pi$, una magnitud que es independiente de la selección de la fase de ψ , es por sí misma proporcional a $|\psi|^2$ en este margen. Cuando $\mathfrak{H} = H_{c2}$, debemos tener también $B = H_{c2}$, obteniéndose así una relación lineal entre la inducción B en un superconductor y el campo externo cerca del punto de transición:

$$B - H_{c2} \propto \mathfrak{H} - H_{c2}. \quad (48.19)$$

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Calcular la energía de interacción de dos filamentos de vórtices separados entre sí una distancia $d \gg \xi$.

SOLUCIÓN. Transformemos la expresión (48.13) para la energía libre de un sistema de dos filamentos de vórtices a una forma en la que se realicen las integraciones sólo cerca de cada filamento separado. Para ello, escribamos utilizando la ecuación (48.7),

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^2 + \delta^2(\text{rot } \mathbf{B})^2 &= \delta^2\{-\mathbf{B} \cdot \text{rot rot } \mathbf{B} + (\text{rot } \mathbf{B})^2\} \\ &= \delta^2 \text{div}(\mathbf{B} \times \text{rot } \mathbf{B}). \end{aligned}$$

La integral de volumen se transforma en

$$F_{\text{má}} = (\delta^2/8\pi) \int_{f_1+f_2} \mathbf{B} \times \text{rot } \mathbf{B} d\mathbf{f}, \quad (1)$$

extendida a las superficies cilíndricas f_1 y f_2 (de radios pequeños r_0 : $\xi \ll r_0 \ll \delta$) que rodean los núcleos de los filamentos. Cuando $d \gg \xi$, los campos de los filamentos son aditivos, es decir, $\mathbf{B} = \mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2$. La energía de interacción de los filamentos viene dada entonces por la parte de la integral (1) que depende tanto de \mathbf{B}_1 como de \mathbf{B}_2 :

$$L\varepsilon_{12} = (\delta^2/8\pi) \left\{ \int \mathbf{B}_2 \times \text{rot } \mathbf{B}_1 d\mathbf{f}_1 + \int \mathbf{B}_1 \times \text{rot } \mathbf{B}_2 d\mathbf{f}_2 \right\};$$

las integrales de la forma $\int \mathbf{B}_2 \times \text{rot } \mathbf{B}_1 d\mathbf{f}_2$ tienden a cero con r_0 . Utilizando (48.8) y (48.10), se encuentra ahora

$$\varepsilon_{12} = 2 \frac{\delta^2}{8\pi} 2\pi r_0 \frac{\phi_0}{2\pi r_0 \delta^2} B(d) = \frac{\phi_0^2}{8\pi^2 \delta^2} K_0(d/\delta).$$

En particular, a distancias $d \gg \delta$,

$$\varepsilon_{12} = \frac{\phi_0^2}{2^{7/2} \pi^{3/2} \delta^2} (\delta/d)^{1/2} e^{-d/\delta}. \quad (2)$$

PROBLEMA 2. Determinar la dependencia existente entre la inducción magnética media \bar{B} (sobre la sección recta de una muestra cilíndrica) y el campo externo \mathfrak{H} en el estado mezcla cuando los filamentos de vórtices están separados a distancias $d \gg \delta$ entre sí, formando (en la sección recta de la muestra) una red de triángulos equiláteros.

SOLUCIÓN. El área de un triángulo equilátero es $\sqrt{3}d^2/4$ (siendo d la longitud de su lado) y el número de filamentos es la mitad del número de triángulos de la red (N triángulos tienen $3N$ vértices, pero cada vértice pertenece a seis triángulos que se encuentran allí) de aquí que $v = 2/\sqrt{3}d^2$.

El potencial termodinámico f por unidad de volumen del cuerpo en el estado mezcla es

$$f = f_s - \frac{\phi_0}{4\pi} v(-H_{c1} + \mathfrak{H}) + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \varepsilon_{ik},$$

en donde el segundo término corresponde a las expresiones (48.1) con H_{c1} tomado de (48.2); en el tercer término, ε_{12} es la energía de interacción de dos filamentos y la suma se extiende a todos los filamentos que pasan a través de una área unidad. Debido a la disminución exponencial de ε_{12} cuando $d \gg \delta$, es suficiente considerar sólo pares de filamentos vecinos. En la red triangular, cada filamento tiene seis vecinos más próximos, de modo que

$$\frac{1}{2} \sum_{i,k} \varepsilon_{ik} = 6 \cdot \frac{1}{2} \sum_i \varepsilon_{i1} = 3v\varepsilon_{12}(d).$$

Sustituyendo ε_{12} de (2), problema 1, se encuentra

$$f = f_s + \frac{\phi_0}{2\sqrt{3}\pi\delta^2} \left[-\frac{\mathfrak{H} - H_{c1}}{a^2} + \frac{3\phi_0}{2\sqrt{(2\pi)\delta^2}} \frac{e^{-a}}{a^{5/2}} \right],$$

en donde $a = d/\delta$. Se determina la relación de dependencia existente entre a y $\tilde{\Phi}$ mediante la condición de que sea mínima la función $f(a)$, lo que nos da

$$\tilde{\Phi} - H_{c1} = \frac{3\phi_0}{4\sqrt{(2\pi)\delta^2}} \sqrt{a} e^{-a}; \quad (3)$$

se omite el término de orden superior al $1/a \ll 1$. Esta ecuación, junto con $\bar{B} = v\phi_0$ es decir

$$a = (2\phi_0/\sqrt{3\delta^2}\bar{B})^{1/2},$$

da la dependencia buscada $\bar{B}(\tilde{\Phi})$. Cuando $\tilde{\Phi} \rightarrow H_{c1}$, la derivada $d\bar{B}/d\tilde{\Phi}$ tiende a infinito de acuerdo con

$$\frac{d\bar{B}}{d\tilde{\Phi}} \propto \frac{1}{\tilde{\Phi} - H_{c1}} \log^{-3} \frac{1}{\tilde{\Phi} - H_{c1}}.$$

§ 49. Susceptibilidad diamagnética por encima del punto de transición

Al final de § 45 se ha mencionado que en los superconductores es extremadamente estrecho el intervalo de temperaturas T_c en el que resultan grandes las fluctuaciones del parámetro de orden ψ . Fuera de este intervalo, las correcciones por las fluctuaciones que hay que hacer a las magnitudes termodinámicas son en general muy pequeñas. Sin embargo, pueden ser importantes cuando se considera la susceptibilidad magnética de un metal por encima de su punto de transición: la presencia, debida a las fluctuaciones, de incluso un número relativamente pequeño de electrones superconductores puede originar una contribución a la susceptibilidad que supere el valor de la susceptibilidad, normalmente muy pequeña, del metal normal lejos del punto de transición.[†]

Consideremos un metal en el interior de un campo magnético externo débil ($\tilde{\Phi} \ll H_c$) a temperatura ligeramente por encima de T_c . El valor de equilibrio del parámetro de orden es ahora $\psi = 0$ y para calcular sus fluctuaciones podemos utilizar la energía libre calculada por la teoría de Ginzburg-Landau. En la expresión (45.10), puesto que las fluctuaciones son pequeñas, sólo necesitamos retener los términos cuadráticos en ψ , omitiendo el término en $|\psi|^4$ y considerando que el vector \mathbf{A} es el potencial vector del campo uniforme $\tilde{\Phi}$. Las fluctuaciones de la inducción \mathbf{B} debidas a las fluctuaciones de ψ son cuadráticas en ψ (puesto que la densidad de corriente \mathbf{j} es cuadrática). De aquí que en el término $\mathbf{B}^2/8\pi$ podemos considerar que \mathbf{B} es el valor medio (termodinámico) de la inducción y despreciar las fluctuaciones. Así pues, la variación de la energía libre total del metal en la fluctuación viene dada por la siguiente funcional de ψ :‡

$$\Delta F[\psi] = \int \left\{ \frac{1}{4m} \left| \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + a |\psi|^2 \right\} dV. \quad (49.1)$$

[†] Este efecto fue señalado por V. V. Shmidt (1966).

[‡] Para evitar equivocaciones debemos mencionar que el campo magnético no es, respecto al superconductor, el «campo externo» h en el sentido en que se definió en la parte 1, § 144. El último habría de aparecer en la energía libre como un término $-h(\psi + \psi^*)$, lo cual es ciertamente imposible en el caso presente porque dicho término no es invariante respecto a la selección de la fase de ψ .

Para calcular la contribución de las fluctuaciones a la energía libre ΔF , debemos considerar al funcional (49.1) como el «hamiltoniano efectivo», que determina ΔF mediante la fórmula

$$\exp(-\Delta F/T) = \int \exp(-\Delta F[\psi]/T) D\psi. \quad (49.2)$$

en donde la integral (de la funcional) se extiende a todas las distribuciones $\psi(\mathbf{r})$; ver Parte 1, § 147. En la práctica, la integración se lleva a cabo desarrollando ψ en serie de un conjunto completo de funciones propias e integrando sobre el infinito número de coeficientes de este desarrollo. En el caso de un sistema homogéneo (sin campo externo), el desarrollo se hace simplemente respecto a ondas planas (ver por ejemplo, el cálculo de la corrección debida a las fluctuaciones para el calor específico en Parte 1, § 147, problema).

En el caso presente, el desarrollo ha de hacerse respecto a las funciones propias de la «ecuación de Schrödinger»

$$\frac{1}{4m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi = E\psi, \quad (49.3)$$

correspondiente al hamiltoniano (49.1). Ya se mencionó en § 47 que esta ecuación es formalmente idéntica a la ecuación de Schrödinger que se tiene para el movimiento de una partícula (con masa $2m$ y carga $2e$) en un campo magnético uniforme. Sus funciones propias están señaladas con un número cuántico discreto (n) y otros dos continuos (p_x, p_z), cuyos valores propios dependen únicamente de n y de p_z (el eje z tiene la dirección de \mathbf{H}) y vienen dados por

$$E(n + \frac{1}{2}, p_z) = (n + \frac{1}{2}) |e| \hbar \tilde{\omega} / mc + p_z^2 / 4m; \quad (49.4)$$

el número de funciones propias diferentes para un n dado en el que p_z está en el intervalo dp_z y se tiene cualquier valor de p_z posible

$$[V \cdot 2 |e| \tilde{\omega} / (2\pi\hbar)^2 c] dp_z$$

(ver MC, § 112).

Por brevedad, designaremos el conjunto de números n, p_z, p_x por un solo símbolo q y escribiremos el desarrollo de la función $\psi(\mathbf{r})$ como

$$\psi = \sum_q c_q \psi_q(\mathbf{r}), \quad (49.5)$$

en donde $c_q = c'_q + i c''_q$ son coeficientes complejos arbitrarios y se supone que las funciones propias están normalizadas por la condición $\int |\psi_q|^2 dV = 1$ (con la integración extendida a todo el volumen del metal).

La sustitución del desarrollo (49.5) en (49.1) nos permite, en primer lugar, pasar de la integración respecto al volumen a la suma respecto a q : integrando por partes el primer término, podemos llevar (49.1) a la forma

$$\Delta F[\psi] = \int \left\{ \psi^* \frac{1}{4m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi + \psi^* a \psi \right\} dV.$$

Sustituyendo (49.5) aquí y observando que cada una de las funciones ψ_q satisface a la ecuación (49.3) con $E = E_q$ y que las funciones con q diferentes son ortonormales, se tiene

$$\Delta F[\psi] = \sum_q |c_q|^2 (E_q + a). \quad (49.6)$$

La integración funcional en (49.2) designa la integración respecto a todo $dc'_q dc''_q$. Después de la sustitución de (49.6), se separan las integraciones respecto a todas estas variables, dando

$$\exp(-\Delta F/T) = \prod_q \frac{\pi T}{E_q + a}$$

o sea

$$\Delta F = -T \sum_q \log \frac{\pi T}{E_q + a}. \quad (49.7)$$

En función de los números cuánticos n y p_z , esta expresión se transforma en

$$\Delta F = -V \frac{2|e|T\zeta}{(2\pi\hbar)^2 c} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \log \frac{\pi T}{E(p_z, n + \frac{1}{2}) + a} dp_z. \quad (49.8)$$

Esta suma diverge para valores grandes de E , pero de hecho la divergencia es espúrea y debida únicamente al hecho de que la fórmula original (49.1) es sólo aplicable en el caso de funciones de variación lenta $\psi(\mathbf{r})$: debe ser pequeña la variación de ψ en distancias $\sim \xi_0$. En función de los valores propios E_q , esto significa que únicamente son permisibles los valores $E_q \ll \hbar^2/m\xi_0^2$. Cortando la suma respecto a n en un determinado valor N grande que satisface la condición establecida, utilizaremos la fórmula de Poisson

$$\sum_{n=0}^N f(n + \frac{1}{2}) \approx \int_0^N f(x) dx - \frac{1}{24} [f'(x)]_0^N;$$

ver Parte 1 (59.10). Cuando se aplica a (49.8), se ve fácilmente que el término integral de una contribución a la energía libre que es independiente de ξ ; este término no se necesita al calcular la susceptibilidad magnética y lo omitiremos. En el segundo término, podemos ahora hacer $N \rightarrow \infty$, de modo que el parámetro de corte no aparezca en el resultado:[†]

$$\Delta F = V \frac{e^2 T_c \xi^2}{48\pi^2 \hbar m c^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_z}{a + p_z^2/4m}.$$

Finalmente, el cálculo de la integral nos da

$$\Delta F = V \frac{e^2 T_c \xi^2}{24\pi \hbar c^2 \sqrt{(ma)}}. \quad (49.9)$$

De aquí que la susceptibilidad magnética sea

$$\chi = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 \Delta F}{\partial \xi^2} = -\frac{e^2 T_c}{12\hbar c^2 (ma)^{1/2} (T - T_c)^{1/2}} \quad (49.10)$$

(H. Schmidt 1968, A. Schmid 1969). Vemos que la susceptibilidad aumenta proporcionalmente a $(T - T_c)^{-1/2}$ cerca del punto de transición. En este intervalo (49.10) es la contribución principal a la susceptibilidad magnética de un metal normal.

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Determinar el momento magnético de una película delgada [espesor $d \ll \xi(T)$] en un campo magnético débil perpendicular a su plano a temperaturas $T > T_c$ con $T - T_c \ll T_c$.

SOLUCIÓN. El espesor finito de la película hace que sea discreto el número cuántico p_z en (49.4); en el caso de una película delgada, únicamente debemos tomar en (49.7) el valor $p_z = 0$; incluso el primer valor no nulo $p_z \sim \hbar/d$, de modo que $E \sim \hbar^2/md^2 \gg \hbar^2/m\xi^2 \sim a$. El número de funciones propias son n y p_z dados (y cualquier posible p_z) es $2 \lfloor e \lfloor \xi S / 2\pi\hbar c \rfloor \rfloor$, siendo S el área de la película; de aquí que la suma sobre q en (49.7) ha de tomarse como $(\xi S / \pi\hbar c)$. Aplicando la fórmula de Poisson a la suma, se tiene

$$\Delta F = S \frac{e^2 T_c \xi^2}{24\pi m c^2 a}.$$

El momento magnético de la película es

$$M = -\partial \Delta F / \partial \xi = -S \frac{e^2 T_c \xi}{12\pi m c^2 a (T - T_c)}.$$

[†] Hemos puesto en el coeficiente $T \approx T_c$. Cuando T es próximo a T_c , los valores importantes de esta integral son $p_z \sim \sqrt{ma} \sim \hbar/\xi(T) \sim \hbar/\xi_0$, es decir, satisfacen los requisitos establecidos.

Debe señalarse que el momento, cuando $T \rightarrow T_c$, aumenta más rápidamente que en el caso de un metal infinito.

PROBLEMA 2. Repetir el problema 1, aplicado al caso de una esfera de radio $R \ll \xi(T)$ (V. V. Shmidt 1966).

SOLUCIÓN. En este caso, entre todos los valores propios de la ecuación (49.3) sólo tiene importancia el más pequeño, que corresponde a la función propia $\psi = \text{constante}$ e igual a $E_0 = -e^2 R^2 \tilde{\Phi}^2 / 10mc^2$; ver la discusión del problema en § 47. La suma (49.7) se reduce a un solo término y el momento magnético es

$$M \approx -\frac{T_c}{a} \frac{\partial E_0}{\partial \tilde{\Phi}} = \frac{e^2 T_c R^2 \tilde{\Phi}}{5mc^2 \alpha(T - T_c)}.$$

§ 50. Efecto Josephson

Consideremos dos superconductores separados por una capa delgada de un material aislante. Para los electrones, esta capa es una barrera de potencial y, si es suficientemente delgada, existe una probabilidad finita de que puedan penetrar en ella por efecto túnel cuántico. Aunque el coeficiente de transmisión de la barrera sea pequeño, su diferencia de cero es de importancia fundamental: los dos superconductores se comportan como un solo sistema descrito mediante una función de onda de condensado aislada. Esto conduce al efecto previsto en primer lugar por B. D. Josephson (1962).

Debido a que sólo existe una función de onda del condensado del sistema, una corriente de superconductividad puede circular a través del contacto entre los dos superconductores, aunque no se aplique ninguna diferencia de potencial externa. Del mismo modo que la densidad de corriente dentro de los superconductores está determinada por el gradiente de la fase Φ de la función de onda del condensado, así depende la densidad j de la corriente de superconductividad a través del contacto de la diferencia de los valores de la fase Φ_1 y Φ_2 en ambos lados del contacto.[†] Puesto que los valores de la diferencia $\Phi_2 - \Phi_1$ que difieran en un múltiplo entero de 2π son idénticos físicamente, es evidente que la función

$$j = j(\Phi_{21}), \quad \Phi_{21} = \Phi_2 - \Phi_1, \quad (50.1)$$

debe ser periódica, con periodo 2π . La operación en la que se invierte el tiempo cambia el signo de la corriente j y también el de la fase Φ_{21} , puesto que las funciones de onda se sustituyen por sus complejas conjugadas. Esto significa que la función (50.1) debe ser impar y es nula cuando $\Phi_{21} = 0$. Como es natural, $j(\Phi_{21})$ tiene valo-

[†] Con objeto de que la corriente de superconductividad a través del contacto tenga un valor apreciable, el espesor de la capa aislante debe de hecho ser muy pequeño, $\sim 10^{-7}$ cm. Dichas distancias son pequeñas incluso en comparación con el más pequeño de los parámetros característicos de longitud, la longitud de coherencia ξ_0 . En este sentido ha de considerarse la capa como de espesor infinitesimal y el comportamiento de la fase dentro de ella no aparece en absoluto en la teoría.

res máximos y mínimos entre los que varía con la diferencia de fase; puesto que la función es impar, estos valores son iguales en valor absoluto y se designarán por $\pm j_m$.

La forma (50.1) presupone que la corriente no se ve afectada por el campo magnético de las corrientes dentro del contacto. En caso contrario, la diferencia Φ_{21} habría de sustituirse por la expresión invariante frente a una transformación «gauge»

$$\Phi_2 - \Phi_1 - \frac{2e}{\hbar c} \int_1^2 A_x dx.$$

Como el espesor de la capa aislante es muy pequeño, se satisface fácilmente la condición para que la integral de la función continua $A_x(x)$ sea despreciable y los propios valores de A_x a cada lado del contacto pueden considerarse como iguales.

La forma de la función $j(\Phi_{21})$ a todas las temperaturas puede establecerse únicamente mediante la teoría microscópica. Daremos ahora sólo un estudio fenomenológico dentro del margen de aplicabilidad de la teoría de Ginzburg-Landau.

Si el contacto fuese totalmente impenetrable a los electrones, las funciones de onda ψ en cada superconductor deberían satisfacer en el límite del contacto las condiciones (45.15):

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \frac{2ie}{\hbar c} A_x \psi_1 = 0, \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \frac{2ie}{\hbar c} A_x \psi_2 = 0.$$

La permeabilidad finita de la barrera y el valor finito de ψ en los límites del contacto conducen a expresiones no nulas en los segundos miembros de estas condiciones, que dependen de los valores de ψ en cada lado del contacto. Como ψ es pequeño (cerca del punto de transición T_c), necesitamos únicamente considerar los términos lineales en ψ en estas funciones, escribiendo

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \frac{2ie}{\hbar c} A_x \psi_1 = \frac{\psi_2}{\lambda}, \quad \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - \frac{2ie}{\hbar c} A_x \psi_2 = \frac{\psi_1}{\lambda}, \quad (50.2)$$

en donde el coeficiente $1/\lambda$ es proporcional a la permeabilidad de la barrera. Las ecuaciones (50.2) deben satisfacer los requisitos de simetría respecto a la inversión temporal, permaneciendo válidas bajo la transformación $\psi \rightarrow \psi^*$, $\mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ y de aquí se deduce que la constante λ es real; entonces, bajo la transformación mencionada, las ecuaciones (50.2) se transforman simplemente en sus complejas conjugadas.

La relación existente entre la corriente de superconductividad a través del contacto y la diferencia entre las fases de ψ puede determinarse mediante la aplicación de la fórmula (45.14) a cada lado del contacto, por ejemplo, al lado 1:

$$j = -\frac{ie\hbar}{2m} \left(\psi_1^* \frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \psi_1 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial x} \right) - \frac{2e^2}{mc} A_x \psi_1^* \psi_1.$$

Sustituyendo $\partial \psi_1 / \partial x$ a partir de la condición de contorno (50.2), se tiene

$$j = -\frac{ie\hbar}{2m\lambda} (\psi_1^* \psi_2 - \psi_1 \psi_2^*).$$

En el caso de contactos del mismo metal, ψ_1 y ψ_2 difieren únicamente en la fase y entonces tenemos para la densidad de corriente

$$j = j_m \operatorname{sen} \Phi_{21}, \quad j_m = (e\hbar/m\lambda) |\psi|^2. \quad (50.3)$$

Cuando se aproxima el punto de transición, $|\psi|^2$ tiende a cero proporcionalmente a $T_c - T$ y, por tanto, lo mismo le ocurre a la densidad de corriente máxima a través del contacto.[†]

A continuación, supongamos que se aplica al contacto túnel una diferencia de potencial procedente de una fuente externa, de modo que en el contacto existe un campo eléctrico E . Describiremos este campo mediante un potencial escalar, que denominaremos V : $E = -\nabla V$. La influencia de este campo sobre la corriente de superconductividad puede aclararse mediante los requisitos que impone la invariancia «gauge».

En ausencia del campo ($V = 0$), la fase de la función de onda es independiente del tiempo: $\partial \Phi / \partial t = 0$.[‡] Para generalizar esta ecuación al caso en que esté presente el campo eléctrico, observemos que la relación general debe ser invariante bajo la transformación «gauge»

$$V \rightarrow V - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} \quad (50.4)$$

del potencial escalar, que no influye sobre el potencial vector (que se supone independiente del tiempo). Igual que en la deducción de la transformación (44.3), (44.6),

[†] La teoría microscópica basada en el modelo CBS muestra que es válida a todas las temperaturas una relación del tipo (50.3) entre j y Φ_{21} . La misma teoría da una relación entre j_m y la resistencia eléctrica del contacto entre dos metales en el estado normal. Esta teoría ha sido descrita por I. O. Kulik e I. K. Yanson, *The Josephson Effect in Superconductive Tunneling Structures*, Israel Program for Scientific Translation, Jerusalem, 1972.

[‡] Se elimina el factor temporal $\exp(-2i\mu/\hbar)$ de la función de onda debido a que el hamiltoniano del sistema \hat{H} se sustituye por $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$; cf. la sexta nota a § 31.

resulta que junto con V , la fase de la función de onda debe transformarse mediante

$$\Phi \rightarrow \Phi + (2e/\hbar c) \chi(t). \quad (50.5)$$

De aquí resulta claro que la relación

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{2e}{\hbar} V = 0 \quad (50.6)$$

es invariante bajo este tipo de transformación; resulta ser $\partial \Phi / \partial t = 0$ cuando $V = 0$.

Cuando el campo eléctrico es independiente del tiempo, la integración de (50.6) da

$$\Phi = \Phi^{(0)} - (2e/\hbar) V t,$$

en donde $\Phi^{(0)}$ es independiente del tiempo. De aquí que, si se aplica al contacto una diferencia de potencial eléctrico V_{21} constante, la diferencia de fases será

$$\Phi_{21} = \Phi_{21}^{(0)} - (2e/\hbar) V_{21} t.$$

Sustituyendo esta expresión en (50.3), se halla la corriente de superconductividad que atraviesa el contacto:

$$j = j_m \operatorname{sen}(\Phi_{21}^{(0)} - (2e/\hbar) V_{21} t). \quad (50.7)$$

Así llegamos a un resultado notable: la aplicación de una diferencia de potencial constante al contacto túnel origina la aparición de una corriente alterna superconductora con frecuencia

$$\omega_j = 2 |eV_{21}| / \hbar. \quad (50.8)$$

La potencia consumida en el contacto es jV_{21} ; su valor medio (temporal) es cero, es decir no existe consumo sistemático de energía de la fuente externa; así debe suceder en el caso de una corriente de superconductividad, en la que no se produce ninguna disipación de energía. Sin embargo, conviene resaltar que cuando existe una f.e.m. externa también habrá una corriente normal (débil cuando V_{21} es pequeña) a través del contacto, la cual irá acompañada de disipación.

La conclusión de que la corriente de superconductividad a través del contacto varía periódicamente con la frecuencia (50.8) resulta realmente de la dependencia periódica de j con Φ_{21} y de la dependencia lineal de Φ_{21} respecto al tiempo; no descansa sobre ninguna hipótesis acerca del valor de la diferencia de potencial, la fórmula específica (50.7) es válida únicamente si es pequeña la frecuencia ω_j en comparación con la frecuencia Δ/\hbar que caracteriza la superconductividad:

$$\hbar\omega_j = 2 |eV| \ll \Delta(T). \quad (50.9)$$

PROBLEMA

Escribir la ecuación que nos da la corriente que circula en un circuito formado por una resistencia R conectada en serie con un superconductor que tenga un contacto tipo túnel, cuando actúa en el mismo una f.e.m. V_0 .

SOLUCIÓN. La caída de potencial total en el circuito es $V_0 = RJ + V_{21}$, siendo J la corriente en el circuito y V_{21} la diferencia de potencial en el contacto.[†] Sustituyendo $J = J_m \operatorname{sen} \Phi_{21}$ y el valor de V_{21} tomado de (50.6) se tiene

$$\frac{\hbar}{2|e|} \frac{\partial \Phi_{21}}{\partial t} = V_0 - RJ_m \operatorname{sen} \Phi_{21}.$$

La corriente variable que describe esta ecuación no es sinusoidal.

§ 51. Relación entre la corriente y el campo magnético en un superconductor

En § 44 se han deducido fórmulas que nos dan la relación existente entre la corriente y el campo magnético dentro de un superconductor en el caso límite (London) en que todas las magnitudes varían lentamente a través del cuerpo; se supuso que el campo era mucho menor que el valor crítico. Consideremos ahora este problema en el caso general en que el campo estático, aunque se suponga todavía débil, varía en el espacio de cualquier modo. La frase «varíe de cualquier modo» significa aquí que el campo puede variar considerablemente en distancias $\sim \xi_0$ (pero, como es natural, aún variará sólo ligeramente en distancias del orden de la constante de la red; por consiguiente, carece de importancia la inhomogeneidad del metal en distancias atómicas).

En el caso general, la relación existente entre la corriente y el campo magnético en un medio espacialmente infinito viene dada por una forma integral del tipo

$$j_i(\mathbf{r}) = - \int Q_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') A_k(\mathbf{r}') d^3x', \quad (51.1)$$

en donde el kernel Q_{ik} depende únicamente de las propiedades del propio medio.[‡] La linealidad de (51.1) corresponde a la hipótesis de que el campo es débil.

La densidad de corriente puede considerarse como la derivada variacional de la energía del sistema respecto al potencial vector: la variación del hamiltoniano del sistema cuando se hace variar a \mathbf{A} es

$$\delta H = -(1/c) \int \mathbf{j} \cdot \delta \mathbf{A} d^3x;$$

[†] Despreciamos la corriente normal en el superconductor, que es pequeña si V_0 es pequeño.

[‡] El problema de un medio infinito tiene aquí sólo un significado formal. Su importancia real radica en la aplicación subsiguiente de los resultados al problema de un medio finito (§ 52).

ver MC (115.1). De aquí que el kernel Q_{ik} en (51.1) sea la segunda derivada variacional y teniendo en cuenta la simetría en el orden de la doble derivación [respecto a $A_i(\mathbf{r})$ y a $A_k(\mathbf{r}')$] se llega al resultado de que

$$Q_{ik}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = Q_{ki}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (51.2)$$

Desarrollando $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ y $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ en integrales de Fourier, podemos escribir la relación (51.1) para los componentes de Fourier como

$$j_i(\mathbf{k}) = -Q_{ik}(\mathbf{k}) A_k(\mathbf{k}), \quad (51.3)$$

en donde, según (51.2), $Q_{ki}(\mathbf{k}) = Q_{ik}(-\mathbf{k})$.

A partir de los requisitos de la invariancia frente a la transformación «gauge» se siguen algunas propiedades importantes de la función $Q_{ik}(\mathbf{k})$. La corriente \mathbf{j} debe resultar inalterada mediante dicha transformación $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \nabla\chi(\mathbf{r})$ o sea, en componentes de Fourier

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{k}) + i\mathbf{k}\chi(\mathbf{k}).$$

Esto significa que el tensor $Q_{ik}(\mathbf{k})$ debe ser ortogonal al vector de ondas:

$$Q_{ik}(\mathbf{k}) k_k = 0. \quad (51.4)$$

En particular, en un cristal con simetría cúbica, la dependencia tensorial de Q_{ik} se reduce a términos de la forma δ_{ik} y $k_i k_k$ de (51.4) se deduce entonces que

$$Q_{ik} = \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) Q(\mathbf{k}), \quad (51.5)$$

en donde $Q(\mathbf{k})$ es una función escalar.

Escojamos a continuación un potencial «gauge» tal que $\operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$. Esto implica que los componentes de Fourier $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) = 0$. De aquí que la relación (51.3) existente entre la corriente y el potencial se reduce a

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}) = -Q(\mathbf{k}) \mathbf{A}(\mathbf{k}), \quad (51.6)$$

es decir está determinada únicamente por la función escalar $Q(\mathbf{k})$.

El caso de London corresponde al límite de $Q(\mathbf{k})$ cuando $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Este resultado se encuentra fácilmente tomando el rotacional de ambos miembros de la ecuación (44.8),

$$\operatorname{rot} \mathbf{j} = - (e^2 n_s / mc) \operatorname{rot} \mathbf{A},$$

y utilizando el hecho de que $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$. Como la ecuación de continuidad de $\operatorname{div} \mathbf{j} = -$, tenemos

$$\Delta \mathbf{j} = -(e^2 n_s / mc) \Delta \mathbf{A}.$$

En un espacio infinito con las funciones $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ y $A(\mathbf{r})$ finitas en todos sus puntos, se deduce entonces que

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -(e^2 n_s / mc) \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (51.7)$$

es decir, el valor de la corriente en todo punto está determinado únicamente por el valor del potencial en dicho punto. Entre los componentes de Fourier $j(k)$ y $A(k)$ es válida una ecuación semejante y la comparación con (51.6) nos demuestra que $Q(k)$ es independiente de k :†

$$Q(k) = e^2 n_s / mc (= c / 4\pi \delta_L^2 \text{ cuando } k \rightarrow 0). \quad (51.8)$$

El resto de esta sección se ocupará del cálculo de $Q(k)$ para el modelo BCS, que supone como ya se ha mencionado, la existencia de un gas de Fermi degenerado isótropo con atracción débil entre las partículas (electrones). También se supone que estas partículas interaccionan con el campo magnético a través de su carga e .

En § 42 hemos dado las ecuaciones (42.5) para las funciones de Green de la temperatura de un gas de Fermi en ausencia de un campo externo. Se consigue la introducción del campo magnético reemplazando el operador ∇ por $\nabla - ie\mathbf{A}/c$ en el hamiltoniano $H^{(0)}$ (7.7).‡ Por consiguiente, se produce un cambio semejante en la ecuación (7.8) para Ψ y en correspondencia hay que hacer el cambio $\nabla \rightarrow \nabla + ie\mathbf{A}/c$ en la ecuación análoga para Ψ^+ ; es evidente que lo mismo debe aplicarse a las ecuaciones correspondientes a Ψ^M y $\hat{\Psi}^M$. El término de spin ($\sim \sigma \cdot \mathbf{H}$) que corresponde a la interacción directa del momento magnético del electrón con el campo es pequeño y puede despreciarse en el hamiltoniano y en las ecuaciones. Cuando el operador ∇ actúa sobre las funciones $\mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r})$ y $\mathcal{F}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}')$, se derivan los operadores $\Psi^M(\tau, \mathbf{r})$ y $\hat{\Psi}^M(\tau, \mathbf{r})$ respectivamente. De aquí que, en las ecuaciones (42.5), se introduzca el campo magnético mediante las mismas sustituciones $\nabla \rightarrow \nabla + ie\mathbf{A}/c$.

La presencia del campo magnético hace que el sistema deje de ser homogéneo en el espacio y la dependencia que existe ahora entre las funciones de Green y sus argumentos \mathbf{r} y \mathbf{r}' deja de ser ya simplemente una dependencia con $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$; pero las funciones todavía dependen de τ y τ' únicamente a través de la diferencia $\tau - \tau'$.

† En esta sección y en las siguientes, la profundidad de penetración de London se designará mediante δ_L .

‡ Pondremos $\hbar = 1$ en el resto de esta sección (en las ecuaciones (51.9)-(51.19)).

Escribiremos así inmediatamente las ecuaciones correspondientes a los componentes de Fourier respecto a $\tau - \tau'$:

$$\left. \begin{cases} i\zeta_s + \frac{1}{2m} \left[\nabla - \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + \mu \end{cases} \right\} \mathcal{Q}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') + g\Xi \bar{\mathcal{F}}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}), \\ \left. \begin{cases} -i\zeta_s + \frac{1}{2m} \left[\nabla + \frac{ie}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + \mu \end{cases} \right\} \bar{\mathcal{F}}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') - g\Xi^* \mathcal{Q}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0. \quad (51.9)$$

En el caso de campo débil, que es el único caso que consideraremos aquí, estas ecuaciones pueden linealizarse; pongamos

$$\mathcal{Q} = \mathcal{Q}^{(0)} + \mathcal{Q}^{(1)}, \quad \bar{\mathcal{F}} = \bar{\mathcal{F}}^{(0)} + \bar{\mathcal{F}}^{(1)}, \quad (51.10)$$

en donde los primeros términos son los valores de las funciones en ausencia de campo y los segundos términos son pequeñas correcciones lineales en el campo, y retengamos en las ecuaciones únicamente los términos de primer orden de magnitud en A .

Ahora deberemos recordar que la presencia del campo hace variar también la función de onda del condensado Ξ , que en este caso no se reduce a una constante. Sin embargo, esta complicación no aparece con nuestra selección del potencial vector de la transformación «gauge», en la que

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (51.11)$$

Esto se debe a que la corrección de primer orden (al valor constante $\Xi^{(0)}$) de la función escalar $\Xi(\mathbf{r})$ únicamente puede ser proporcional a $\operatorname{div} \mathbf{A}$ y es cero con la condición (51.11). De aquí que, con la exactitud necesaria, podemos escribir $g\Xi = g\Xi^{(0)} \equiv \Delta$ en las ecuaciones linealizadas, en donde Δ , que es el intervalo vacío de energía del espectro de energía del gas en ausencia del campo, es una magnitud real.

Las ecuaciones linealizadas (51.9) se reducen entonces a

$$\left. \begin{cases} \left(i\zeta_s + \frac{\Delta}{2m} + \mu \right) \mathcal{Q}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') + \Delta \bar{\mathcal{F}}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ = (ie/mc) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \mathcal{Q}^{(0)}(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ -i\zeta_s + \frac{\Delta}{2m} + \mu \end{cases} \right\} \bar{\mathcal{F}}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') - \Delta \mathcal{Q}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ = -(ie/mc) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \bar{\mathcal{F}}^{(0)}(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (51.12)$$

como estas ecuaciones son lineales en \mathbf{A} , es suficiente resolverlas para un componente de Fourier del campo, es decir

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \mathbf{k}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{k}) = 0. \quad (51.13)$$

Con este valor de $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, puede separarse inmediatamente la dependencia existente entre $\mathcal{Q}^{(1)}$ y $\bar{\mathcal{F}}^{(1)}$ con $\mathbf{r} + \mathbf{r}'$ poniendo

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{Q}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= g(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2}, \\ \bar{\mathcal{F}}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= f(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2}. \end{aligned} \right\} \quad (51.14)$$

Por ejemplo, la primera ecuación (51.12) se convierte entonces en

$$\begin{aligned} &\left[i\zeta_s + \frac{1}{2m} \left(\nabla + \frac{1}{2} i\mathbf{k} \right)^2 + \mu \right] g(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}') + \Delta f(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= (ie/mc) \mathbf{A}(\mathbf{k}) \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/2} \nabla \mathcal{Q}^{(0)}(\zeta_s; \mathbf{r} - \mathbf{r}'), \end{aligned}$$

y análogamente para la segunda ecuación. Hagamos a continuación una transformación de Fourier de las funciones g y f respecto a $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Finalmente llegaremos al siguiente par de ecuaciones algebraicas:

$$\left. \begin{aligned} &\left[i\zeta_s - \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{k} \right)^2 + \mu \right] g(\zeta_s, \mathbf{p}) + \Delta f(\zeta_s, \mathbf{p}) \\ &= -(e/mc) \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) \mathcal{Q}^{(0)} \left(\zeta_s, \mathbf{p} - \frac{1}{2} \mathbf{k} \right), \\ &\left[-i\zeta_s - \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{k} \right)^2 + \mu \right] f(\zeta_s, \mathbf{p}) - \Delta g(\zeta_s, \mathbf{p}) \\ &= (e/mc) \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) \bar{\mathcal{F}}^{(0)} \left(\zeta_s, \mathbf{p} - \frac{1}{2} \mathbf{k} \right). \end{aligned} \right\} \quad (51.15)$$

Después de algunos cálculos sencillos utilizando (42.7) y (42.8) para $\mathcal{Q}^{(0)}$ y $\bar{\mathcal{F}}^{(0)}$, resulta ser la solución de estas ecuaciones

$$g(\zeta_s, \mathbf{p}) = -\frac{e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) \frac{(i\zeta_s + \eta_+) (i\zeta_s + \eta_-) + \Delta^2}{(\zeta_s^2 + \varepsilon_+^2) (\zeta_s^2 + \varepsilon_-^2)}, \quad (51.16)$$

en donde $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon(\mathbf{p} \pm \frac{1}{2}\mathbf{k})$, $\eta_{\pm} = \eta(\mathbf{p} \pm \frac{1}{2}\mathbf{k})$; en lo que sigue no se necesitará la función $f(\zeta, \mathbf{p})$.

Calculemos ahora la corriente. Para ello, partiremos de la expresión que nos da el operador densidad de corriente en la representación de la segunda cuantización:[†]

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{ie}{2m} [(\nabla \Psi_a^+) \Psi_a - \Psi_a^+ (\nabla \Psi_a)] - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \Psi_a^+ \Psi_a.$$

Para pasar a la representación de Matsubara de este operador, han de sustituirse los operadores de Heisenberg Ψ, Ψ^+ por los operadores de Matsubara $\Psi^M, \hat{\Psi}^M$. Utilizando la definición de la función de Green (37.2) vemos que la densidad de corriente (el elemento de matriz diagonal del operador $\hat{\mathbf{j}}$, promediado respecto a la distribución de Gibbs) puede escribirse en la forma

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 2 \frac{ie}{2m} [(\nabla' - \nabla) \mathcal{G}(\tau, \mathbf{r}; \tau', \mathbf{r}')]_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}, \tau'=\tau+0} - (e^2/mc) \mathbf{A}(\mathbf{r}) n, \quad (51.17)$$

siendo n la densidad del número de partículas; el factor 2 viene de $\mathcal{G}_{aa} = 2\mathcal{G}$.

Cuando sustituimos $\mathcal{G} = \mathcal{G}^{(0)} + \mathcal{G}^{(1)}$ en (51.17), desaparece el término en $\mathcal{G}^{(0)}$: en el caso de un sistema homogéneo isótropo, $\mathcal{G}^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ es par y su derivada es cero para $\mathbf{r} - \mathbf{r}' = 0$. Realizando un desarrollo de Fourier respecto a $\tau - \tau'$, obtenemos

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{ie}{m} T \sum_{s=-\infty}^{\infty} [(\nabla' - \nabla) \mathcal{G}^{(1)}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}')]_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} - \frac{e^2 n}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}),$$

y al sustituir $A(\mathbf{r})$ y $\mathcal{G}^{(1)}$ de (51.13) y (51.14),

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}) = \frac{2eT}{m} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \mathbf{p} g(\zeta_s, \mathbf{p}) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} - \frac{ne^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{k}).$$

Cuando se sustituye aquí $g(\zeta_s, \mathbf{r})$ a partir de (51.16) es conveniente utilizar al mismo tiempo el hecho de que los vectores $\mathbf{j}(\mathbf{k})$ y $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ son transversales y promediar respecto a las direcciones de \mathbf{p}_\perp en un plano perpendicular a \mathbf{k} , utilizando la fórmula

$$\overline{p_{\perp i} p_{\perp k}} = \frac{1}{2} p^2 \sin^2 \theta (\delta_{ik} - k_i k_k / k^2),$$

[†] Ver MC, § 115. Se ha omitido aquí el término que da la contribución a la corriente procedente del spin de la partícula. En el caso de un sistema no ferromagnético, en el que la función de Green $\mathcal{G}_{\alpha\beta} = \mathcal{G}\delta_{\alpha\beta}$, este término se anula al promediar.

en donde θ es el ángulo existente entre \mathbf{k} y \mathbf{p} . Obtenemos así la siguiente expresión para la función $Q(\mathbf{k})$ que determina la relación entre $\mathbf{j}(\mathbf{k})$ y $\mathbf{A}(\mathbf{k})$:

$$\left. \begin{aligned} Q(\mathbf{k}) &= \frac{e^2 T}{m^2 c} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int p^2 \operatorname{sen}^2 \theta \frac{(i\zeta_s + \eta_+)(i\zeta_s + \eta_-) + \Delta^2}{(\zeta_s^2 + \varepsilon_+^2)(\zeta_s^2 + \varepsilon_-^2)} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} + \frac{ne^2}{mc}, \\ \varepsilon_{\pm}^2 &= \eta_{\pm}^2 + \Delta^2, \quad \eta_{\pm} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} \pm \frac{1}{2} \mathbf{k} \right)^2 - \mu. \end{aligned} \right\} \quad (51.18)$$

Las integrales y sumas que hemos escrito aquí son formalmente divergentes. Aunque estas divergencias sean realmente espúreas, el cálculo debe hacerse con cuidado: hasta que se elimine la divergencia, el resultado puede depender del orden de integración y suma.

Puede evitarse esta dificultad haciendo uso del hecho evidente de que $Q = 0$ cuando $\Delta = 0$: en un metal normal no existe corriente de superconductividad. Por consiguiente, no se altera el resultado si se resta de (51.18) la misma expresión con $\Delta = 0$:

$$\left. \begin{aligned} Q(\mathbf{k}) &= \frac{e^2 T}{m^2 c} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int p^2 \operatorname{sen}^2 \theta \left\{ \frac{(i\zeta_s + \eta_+)(i\zeta_s + \eta_-) + \Delta^2}{(\zeta_s^2 + \varepsilon_+^2)(\zeta_s^2 + \varepsilon_-^2)} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{(i\zeta_s - \eta_+)(i\zeta_s - \eta_-)} \right\} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \right\} \quad (51.19)$$

Esta expresión resulta satisfactoriamente convergente y la integración y la suma pueden realizarse en un orden cualquiera.

En primer lugar, observemos que los valores de \mathbf{k} de interés son pequeños en el sentido que $k \ll p_F$; esta desigualdad expresa simplemente el hecho de que las distancias características en las que varían el campo y la corriente en un superconductor son grandes en comparación con las distancias entre las partículas, es decir, en comparación con $\sim 1/p_F$.

En (51.19) integremos primeramente respecto a p . La integral procede principalmente de un margen estrecho de valores de los impulsos cerca de la superficie de Fermi, $|p - p_F| \sim k$. En este margen,

$$\eta_{\pm} \approx \eta \pm \frac{1}{2} v_F k \cos \theta \approx v_F (p - p_F) \pm \frac{1}{2} v_F k \cos \theta;$$

el factor p^2 del integrando puede sustituirse por p_F^2 y la integración respecto a $d^3 p$ por la integración respecto a $2\pi m p_F d\eta d\cos \theta$. La integral respecto a $d\eta$ del segundo término dentro de las llaves en (51.19) es entonces nula: el contorno de integración puede cerrarse por una semicircunferencia en el plano complejo η y la integral se anula debido a que ambos polos del integrando están en el mismo semiplano (superior o inferior, dependiendo del signo de ζ_s). La integración respecto a $d\eta$ en el primer término de (51.19) es elemental y esto nos deja únicamente la integral respecto

a $x = \cos \theta$. Despejando la densidad n de la ecuación $p_F^3 = 3\pi^2 n$, tenemos como resultado final (en unidades ordinarias)

$$Q(\mathbf{k}) = \left. \frac{3\pi T n e^2}{4mc} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int_{-1}^1 \frac{\Delta^2(1-x^2) dx}{[\zeta_s^2 + \Delta^2 + (\frac{1}{2}\hbar v_F k x)^2] (\zeta_s^2 + \Delta^2)^{1/2}}, \right\} \quad (51.20)$$

$$\zeta_s = (2s+1)\pi T$$

(J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer 1957).†

En el límite de valores pequeños de k ($k\xi_0 \ll 1$, en donde $\xi_0 \sim \hbar v_F / \Delta_0 \sim \hbar v_F / T_c$ es la longitud de coherencia) puede demostrarse que (51.20) se reduce a la expresión de London (51.8), que es independiente de k , pero no realizaremos aquí su demostración.

En el límite opuesto, cuando $k\xi_0 \gg 1$, el intervalo de valores que tiene importancia en la integral (51.20) es $x \lesssim T_c / \hbar v_F k \ll 1$. Por consiguiente, podemos despreciar x^2 en comparación con la unidad en el numerador del integrando y luego (debido a la rápida convergencia) extender la integración desde $-\infty$ hasta ∞ . El resultado es

$$Q(\mathbf{k}) = \frac{3\pi^2 n e^2 T}{2mc\hbar v_F k} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{\zeta_s^2 + \Delta^2}.$$

Llevando a cabo la suma mediante (42.10), podemos escribir esta expresión como‡

$$Q(\mathbf{k}) = c\beta/4\pi k, \\ \beta = \left. \frac{4\pi n e^2}{mc^2} \frac{3\pi^2}{4\hbar v_F} \Delta \operatorname{tgh} \frac{\Delta}{2T}, \quad k\xi_0 \gg 1. \right\} \quad (51.21)$$

Cuando $T \ll T_c$ tenemos $n_s \approx n$, $\Delta \approx \Delta_0$ y $\beta \sim 1/\delta_L^2 \xi_0$. Cuando $T_c - T \ll T_c$, el intervalo vacío Δ es pequeño, de modo que $\operatorname{tgh}(\Delta/2T) \approx \Delta/2T$; utilizando las fórmulas (40.4) y (40.5), se encuentra de nuevo $\beta \sim 1/\delta_L^2 \xi_0$. Así pues, a todas las temperaturas desde 0 hasta T_c ,

$$\beta \sim 1/\delta_L^2 \xi_0. \quad (51.22)$$

Por tanto, la función $Q(\mathbf{k})$ permanece aproximadamente constante en el intervalo $k \lesssim 1/\xi_0$ (y tiene un desarrollo regular en potencias de k^2 cerca de $\mathbf{k} = 0$); fuera de este intervalo $Q(\mathbf{k})$ disminuye como $1/k$ cuando $k \gg 1/\xi_0$. Este comportamiento de $Q(\mathbf{k})$ corresponde a una función coordenada $Q(\mathbf{r})$ que disminuye lentamente (como $1/r^2$) en el intervalo $r \lesssim \xi_0$ y rápidamente (exponencialmente) fuera del mismo. Así pues, la correlación entre el campo y la corriente se extiende siempre a distancias

† La deducción que damos aquí, utilizando las funciones de Green de la temperatura, se debe a A. A. Abrikosov y L. P. Gor'kov (1958).

‡ A. B. Pippard sugirió una fórmula de este tipo (1953) mediante razonamientos cualitativos, antes de que existiese la teoría microscópica de la superconductividad.

$\sim \xi_0$. Debe resaltarse que esta afirmación es válida a todas las temperaturas desde cero hasta T_c . Así hemos justificado el punto señalado en § 44 de que ξ_0 es universal como parámetro de longitud característico de la superconductividad.

§ 52. Profundidad de penetración de un campo magnético dentro de un superconductor

Aplicemos el resultado de § 51 al problema de la penetración de un campo magnético externo en un superconductor, que ya ha sido analizado en § 44 en la aproximación de London.

Supongamos que el superconductor tiene una superficie límite plana y que se encuentra en el semiespacio $x > 0$; supongamos también que el campo externo \mathfrak{H} (y, por tanto, la inducción \mathbf{B} dentro del superconductor) está dirigido a lo largo de un eje z que es paralelo a la superficie. Entonces todas las magnitudes dependen únicamente de las coordenadas x y la corriente \mathbf{j} y el potencial vector \mathbf{A} (en la transformación con $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$) están dirigidas a lo largo del eje y . La ecuación de Maxwell $\operatorname{rot} \mathbf{B} = -\Delta \mathbf{A} = 4\pi \mathbf{j}/c$ se reduce a

$$A''(x) = -4\pi j(x)/c, \quad x > 0, \quad (52.1)$$

en donde las primas indican derivación respecto a x .

Sin embargo, las condiciones límites o de contorno de esta ecuación dependen de las propiedades físicas de la superficie metálica por lo que se refiere a los electrones que inciden sobre ella. El caso más sencillo es el de la reflexión especular de los electrones en la superficie. Es evidente que con esta ley de reflexión el problema del semiespacio es equivalente al de un medio infinito en el que el campo $A(x)$ está distribuido simétricamente a cada lado del plano $x = 0$: $A(x) = A(-x)$. La derivada $A'(x)$, función impar de x , es discontinua en $x = 0$, cambiando de signo cuando x pasa por cero. Así pues, la condición $B = A' = \mathfrak{H}$ en la superficie del semiespacio corresponde en el problema del medio infinito a la condición

$$A'(+0) - A'(-0) = 2\mathfrak{H}. \quad (52.2)$$

Multipliquemos (52.1) por e^{-ikx} e integramos respecto a x desde $-\infty$ hasta ∞ . En el primer miembro escribamos

$$\int_{-\infty}^{\infty} A'' e^{-ikx} dx = \int_{-\infty}^0 (A' e^{-ikx})' dx + \int_0^{\infty} (A' e^{-ikx})' dx + ik \int_{-\infty}^{\infty} A' e^{-ikx} dx.$$

Las dos primeras integrales juntas dan $-2\mathfrak{H}$ y en la tercera integral podemos simplemente integrar por partes, puesto que la propia $A(x)$ es continua en $x = 0$. El resultado es

$$2\mathfrak{H} + k^2 A(k) = 4\pi j(k)/c,$$

en donde $A(k)$ y $j(k)$ son los componentes de Fourier de las funciones $A(x)$ y $j(x)$ definidas en todo el espacio. Están relacionadas entre sí por $j(k) = -Q(k) A(k)$, en donde $Q(k)$ viene dado por la fórmula deducida en § 51. Así pues, tenemos para los componentes de Fourier del campo

$$A(k) = -\frac{2\mathfrak{H}}{k^2 + 4\pi Q(k)/c}. \quad (52.3)$$

Se define la profundidad de penetración δ como†

$$\delta = \frac{1}{\mathfrak{H}} \int_{-\infty}^{\infty} B(x) dx = -\frac{A(x=0)}{\mathfrak{H}}. \quad (52.4)$$

Expresando $A(x=0)$ en función de los componentes de Fourier $A(k)$ y sustituyendo estos últimos de (52.3), tenemos

$$\delta = -\frac{1}{\mathfrak{H}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \frac{dk}{2\pi} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{k^2 + 4\pi Q(|k|)/c}. \quad (52.5)$$

El intervalo de valores de k que tiene importancia en esta integral es aquel en el cual $k^2 \sim 4\pi Q/c$. En el caso de London (cuando $\delta_L \gg \xi_0$) estos valores son pequeños en el sentido de que $k\xi_0 \ll 1$. Aquí $Q(k)$ viene dado por la expresión (51.8) que es independiente de k y la integración en (52.5) conduce como es natural, el valor $\delta = \delta_L$.

En el caso opuesto (Pippard), en el que $\delta_L \ll \xi_0$, los valores importantes en la integral son $k \gg 1/\xi_0$. Aquí $Q(k)$ viene dado por (51.21) y la integral (52.5) da

$$\delta = \delta_P = 4/3^{3/2}\beta^{1/3}. \quad (52.6)$$

Utilizando (51.22), se halla así para la profundidad de penetración de Pippard

$$\delta_P \sim (\delta_L^2 \xi_0)^{1/3}. \quad (52.7)$$

Estos cálculos se han relacionado con el caso de reflexión especular de los electrones en la superficie del metal. Sin embargo, en el caso de London la profundidad de penetración es independiente de la ley de reflexión, como resulta claro a partir de la deducción del valor de δ_L en § 44; carece de significado el detalle de la estructura de la superficie.

No obstante, también en el caso de Pippard es de hecho muy ligera la dependencia de la profundidad de penetración sobre la ley de reflexión. Por ejemplo en el caso opuesto a la reflexión especular, es decir la reflexión difusa, cuando las velo-

† Cuando el campo disminuye exponencialmente, esta definición concuerda con (44.13).

cidades de los electrones reflejados tienen direcciones que están distribuidas isotropamente respecto a cualquier dirección de incidencia, el valor de δ_p es únicamente mayor en un factor de 9/8 respecto al caso de la reflexión especular.

§ 53. Aleaciones superconductoras

La presencia de impurezas tiene una influencia mucho mayor sobre las propiedades de los semiconductores que sobre las propiedades de los metales normales. En tanto que sea pequeña la concentración x de átomos de impureza se mantienen también pequeñas las correcciones a las magnitudes termodinámicas de los metales normales y sólo empiezan a ser considerables cuando $x \sim 1$, es decir cuando la distancia media entre átomos de impureza resulta ser comparable con la constante a de la red. Debemos resaltar que ahora estamos hablando, como es natural, sólo de las contribuciones electrónicas a las magnitudes termodinámicas y sólo de aquéllas que están determinadas por la densidad media de la distribución de estados cuánticos de los electrones de conducción en el espacio de los impulsos (por ejemplo, el calor específico y la susceptibilidad magnética en el caso de campos débiles).

La situación es diferente en el caso de los metales superconductores debido a la existencia de un parámetro de longitud característico, que es grande en comparación con a , a saber la longitud de coherencia ξ_0 . Como la dispersión o scattering de los electrones por los átomos de impureza destruye la correlación entre los electrones, pueden verse considerablemente alteradas las propiedades de los superconductores cuando el recorrido libre medio l de los electrones es comparable con ξ_0 , siendo todavía pequeña la concentración x . A continuación describiremos cualitativamente los resultados básicos que es necesario conocer para una comprensión general de las propiedades de dichas aleaciones de baja concentración.[†]

Supongamos que los átomos de impureza no poseen momento angular o cinético y, por consiguiente, no tienen momento magnético (impurezas no paramagnéticas). En este caso, y en ausencia de un campo magnético influyen sólo ligeramente sobre las propiedades termodinámicas del superconductor. La razón consiste en que dichas impurezas no destruyen la simetría bajo la inversión temporal: puede describirse la interacción entre los átomos de impureza (distribuidos de una cierta manera) y los electrones mediante la especificación de un campo potencial $U(\mathbf{r})$. De acuerdo con el teorema de Kramers, los niveles energéticos de los electrones en dicho campo permanecen doblemente degenerados y los estados correspondientes a estos niveles se intercambian entre sí mediante inversión temporal de modo que los electrones que hay en ellos pueden formar pares de Cooper. Esto ocurrirá,

[†] La teoría completa de las aleaciones superconductoras desarrollada por A. A. Abrikosov y L. P. Gor'kov es muy complicada y cae fuera de las líneas de este texto. Ver artículos originales en *Soviet Physics JETP* 8, 1090, 1959; 9, 220, 1959.

como antes, cerca de la superficie de Fermi netamente definida, con la diferencia de que esta misma superficie forma ahora la frontera o límite entre los estados ocupados, no en el espacio de los impulsos sino en el espacio de los números cuánticos en el campo $U(\mathbf{r})$; con concentraciones bajas de impureza, la densidad de los estados cuánticos cerca de la superficie de Fermi sólo cambia ligeramente.

Por tanto, resulta evidente que, después de promediar respecto a las posiciones de los átomos de impureza, debemos obtener fórmulas que difieran de las correspondientes a la teoría de los superconductores puros únicamente en correcciones que son del mismo orden de magnitud que x . Cuando se desprecian estas correcciones sin importancia, no existe, en particular, ninguna variación en la temperatura T_c del punto de transición ni en la discontinuidad del calor específico en dicho punto (P. W. Anderson 1959). Por consiguiente, tampoco existe ningún cambio en el cociente α^2/b de los coeficientes de la ecuación de Ginzburg-Landau [ver (45.8)]; la forma de esta ecuación es independiente de la presencia o ausencia de impurezas y resulta igualmente válida para superconductores puros que para aleaciones superconductoras.

Por otra parte, las propiedades magnéticas de un superconductor y en particular la profundidad de penetración del campo magnético, cambian considerablemente aun cuando $l \sim \xi_0$. Vamos a estimar la profundidad de penetración, admitiendo que el recorrido libre medio $l \ll \xi_0$, aunque la concentración $x \ll l$ (A. B. Pippard 1953).

Las colisiones de los electrones con los átomos de impureza aniquilan la correlación del movimiento de los electrones a distancias $r \gtrsim l$. Esto significa que el kernel $Q(r)$ en la relación integral entre la corriente y el campo en el superconductor disminuirá exponencialmente a distancias $r \sim l \ll \xi_0$. De acuerdo con ello, en la representación de los impulsos, la función $Q(k)$ permanecerá constante en el intervalo $k \lesssim 1/l$. Puede hallarse el valor de esta constante si nos «unimos» en $kl \sim 1$ a la fórmula (51.21) que sigue siendo válida para $k \gg 1/l \gg 1/\xi_0$. Así pues se tiene que

$$Q(k) \sim \frac{ne^2}{mc} \frac{l\Delta}{\hbar v_F} \operatorname{tgh} \frac{\Delta}{2T} \quad \text{para } kl \lesssim 1. \quad (53.1)$$

Se determina la profundidad de penetración mediante la relación $k^2 \sim Q(k)/c$ cuando $k^2 \sim 1/\delta$ (ver § 52). Utilizando (53.1) se tiene

$$\begin{aligned} \delta &\sim \delta_L^{\text{puro}}(T=0) \left[\frac{\xi_0}{l \operatorname{tgh}(\Delta/2T)} \right]^{1/2} \\ &\sim \delta_L^{\text{puro}}(T) (\xi_0/l)^{1/2}; \end{aligned} \quad (53.2)$$

para que esta fórmula sea válida debemos tener $\delta \gg l$, que justifica el empleo de (53.1). El superíndice «puro» indica el valor en ausencia de impurezas y se supone

también que ξ_0 tiene su valor correspondiente a un superconductor puro. La expresión (53.2) puede representarse también mediante una fórmula de London, poniendo en ella la densidad numérica de los electrones superconductores en él como

$$n_s \sim n_s^{\text{puro}} \xi_0/l. \quad (53.3)$$

En función de los coeficientes α y b de la ecuación de Ginzburg-Landau, la relación (53.2) implica [ver (45.16)] que

$$b/\alpha \sim (b/\alpha)_{\text{puro}} \xi_0/l.$$

Puesto que, como ya se mencionó anteriormente, también α^2/b es independiente de la presencia de impurezas, se encuentra que

$$\alpha \sim \alpha_{\text{puro}} \xi_0/l, \quad b \sim b_{\text{puro}} (\xi_0/l)^2. \quad (53.4)$$

De acuerdo con (45.17) tenemos a partir de aquí para el radio de correlación

$$\xi(T) \sim \xi(T)_{\text{puro}} (l/\xi_0)^{1/2} \quad (53.5)$$

y para el parámetro \varkappa (45.18)

$$\varkappa \sim \varkappa_{\text{puro}} \xi_0/l \gg \varkappa_{\text{puro}}. \quad (53.6)$$

Cuando el recorrido libre medio es suficientemente corto, \varkappa excede de $1/\sqrt{2}$ y, por ello, los superconductores suficientemente «sucios» son de la segunda clase.

El margen de aplicabilidad de las ecuaciones de Ginzburg-Landau a los superconductores «sucios» está limitado a las temperaturas bajas, en la práctica, únicamente por la condición $T_c - T \ll T_c$. La necesaria desigualdad $\delta(T) \gg l$ es equivalente en este caso a la condición menos exigente

$$\frac{T_c - T}{T_c} \ll \varkappa_{\text{puro}}^2 (\xi_0/l)^3 \sim \varkappa^2 \xi_0/l.$$

Finalmente, algunos comentarios acerca de las propiedades de los superconductores que contienen impurezas paramagnéticas. Dichas impurezas destruyen la simetría del sistema bajo la inversión temporal y, por tanto, destruyen el aparcamiento de los electrones (cuando se encuentran presentes momentos magnéticos, la inversión temporal implica un cambio en su signo, es decir, desde un punto de vista esencial sustituye un sistema físico por otro). Una medida cuantitativa de la influencia de estas impurezas sobre las propiedades del superconductor es el recorrido libre medio l_s en el caso de dispersión o scattering con cambio de la dirección del spin (debido a la interacción de cambio con los átomos de impurezas). La superconductividad desaparece cuando la concentración x alcanza el valor crítico en el cual $l_s \sim \xi_0$.

Sin embargo, realmente existen dos concentraciones críticas del mismo orden de magnitud. En la inferior (x_1), el intervalo vacío de energía Δ del espectro de energía se hace cero; no obstante, la función de onda del condensado Ξ únicamente resulta cero a cierta concentración $x_2 > x_1$. A concentraciones comprendidas entre x_1 y x_2 existe una superconductividad *de intervalo vacío de energía nulo*. Como al deducir la ecuación de London en § 44 utilizamos únicamente el hecho de la existencia de la función de onda del condensado y consideraciones de invariancia frente a la transformación «gauge», resulta claro que continuarán existiendo las propiedades básicas del superconductor (corriente de superconductividad y efecto Meissner) en este margen. Se demuestra la ausencia de un intervalo vacío en el espectro (en las propiedades de equilibrio del superconductor) mediante una dependencia de temperatura no exponencial del calor específico. No existe conflicto con la condición de Landau para la superfluidez (§ 23) debido a que en sistemas desordenados (como son las aleaciones en cuestión) no se aplica esta condición, no teniendo impulso definido las excitaciones elementales.†

§ 54. Efecto Cooper en el caso de momentos angulares orbitales no nulos del par

Ya se ha mencionado varias veces que la presencia de la superconductividad en un sistema de Fermi se debe en último término al efecto Cooper, es decir, a la formación de estados ligados apareados por la atracción mutua de partículas en la superficie de Fermi. En el caso de un gas de Fermi, se formula la condición de atracción como la de una longitud de dispersión o scattering negativa $a = \int U d^3x$, es decir, una amplitud de dispersión o scattering positiva para dos partículas en un estado con momento angular orbital nulo de su movimiento relativo $l = 0$ (este estado posee la contribución principal a la dispersión a energías bajas).

Sin embargo, resulta válida una enunciación más fuerte todavía: se produce el apareamiento (y, por consiguiente, la superfluidez) si la interacción es atractiva incluso para sólo un valor del momento angular l (L. D. Landau 1959). Debemos resaltar que el sistema en cuestión es isótropo (líquido o gas) en donde pueden clasificarse los estados de acuerdo con el valor de l .

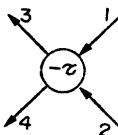
Demostraremos este punto para un gas de Fermi mediante un método que en principio nos permite determinar la temperatura T_c a la que se produce la transición al estado superfluido, utilizando únicamente las propiedades del sistema (gas de Fermi normal) a temperaturas $T > T_c$.

En § 18 se ha señalado que en el formalismo matemático de las funciones de Green en el caso de un sistema de Fermi normal de energía del estado ligado del

† Ver también la cuarta nota a § 39. La teoría de la superconductividad de intervalo de energía cero está descrita en el artículo original debido a A. A. Abrikosov y L. P. Gar'kov, *Soviet Physics JETP* 12, 1243, 1961.

par de partículas aparece como el polo de la función vértice Γ ; esto mismo es cierto también (cuando $T \neq 0$) para la función de la temperatura, que designaremos por τ . Cuando aparece dicho polo, resulta de hecho inaplicable el formalismo completo, aunque todavía sea aplicable en el instante en que aparezca el polo, cuando disminuye la temperatura hasta $T = T_c$; la energía de enlace del par debe ser entonces nula y coinciden los estados de las fases normal y superfluida.

En el diagrama esqueleto



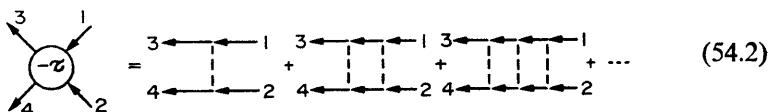
el círculo designa $-\mathcal{C}$. A partir de lo dicho anteriormente se determina el punto de transición T_c como la temperatura a la cual \mathcal{C} tiene un polo con

$$\zeta_{s1} = \zeta_{s2} = 0, \quad \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = 0. \quad (54.1)$$

La primera ecuación establece que las partículas apareadas están sobre la superficie de Fermi y que es nula la energía de enlace del par; la segunda ecuación establece que las partículas apareadas tienen impulsos opuestos.

El apareado de las partículas se produce si tienen entre sí alguna atracción, por pequeña que sea. Es claro que si se ha de presentar un polo, las series de las teorías de perturbaciones para la función vértice deben incluir términos que contengan integrales que divergen con la condición (54.1) y cuando $T_c \rightarrow 0$ (T_c es pequeña cuando la atracción es débil); en otro caso serían ciertamente pequeñas todas las correcciones al término de primera aproximación (finito) en comparación con dicho término a todas las temperaturas y no podría aparecer ningún polo.

Este requisito lo satisface la serie de diagramas escalera



Como veremos a continuación, en todos estos diagramas (desde el segundo en adelante) se compensa el pequeño valor respecto a la interacción (procedente de la adición de líneas a trazos) en el sentido mencionado mediante la divergencia de las integrales.†

† Los diagramas (54.2) deberán suplementarse mediante una serie de diagramas en los que se intercambian las líneas externas 3 y 4, lo que hace que la función vértice sea antisimétrica respecto a sus argumentos de spin y orbital. Sin embargo, para nuestro objetivo actual de determinar T_c esto no es necesario puesto que el polo aparece simultáneamente en ambas partes de la función vértice.

Aplicando a esta serie el procedimiento utilizado para obtener (17.4) de (17.3), resulta que la ecuación (54.2) es equivalente a la ecuación diagramática

$$(54.3)$$

Las líneas externas e internas de los diagramas corresponden a los argumentos que se indican en (54.3) teniendo en cuenta (54.1):

$$P_1 = (0, \mathbf{p}_1), \quad P_3 = (0, \mathbf{p}_3), \quad Q = (i\zeta_s, \mathbf{q}).$$

La dependencia con el spin de las funciones de Green de un gas ideal se separa en la forma $\mathcal{G}_{\alpha\beta}^{(0)} = \delta_{\alpha\beta} \mathcal{G}^{(0)}$ y la dependencia con el spin de la función vértice (sin antisimetrización) se separa en la forma

$$\mathcal{V}_{\gamma\delta, \alpha\beta}(P_3, P_4; P_1, P_2) = \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} \mathcal{V}(P_3, P_4; P_1, P_2).$$

Desarrollando los diagramas (54.3) mediante las reglas dadas en § 38 y eliminando los factores de spin, obtenemos para \mathcal{V} la ecuación integral

$$\begin{aligned} & \mathcal{V}(\mathbf{p}_3, -\mathbf{p}_3; \mathbf{p}_1, -\mathbf{p}_1) \\ & + T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int U(\mathbf{p}_3 - \mathbf{q}) \mathcal{Q}^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{q}) \mathcal{Q}^{(0)}(-\zeta_s, -\mathbf{q}) \times \\ & \times \mathcal{V}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; \mathbf{p}_1, -\mathbf{p}_1) \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} = U(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3). \end{aligned} \quad (54.4)$$

En estas sumas e integrales son importantes los valores pequeños de la variable discreta ζ_s y los valores de \mathbf{q} cerca de la superficie de Fermi (ver más adelante). De aquí que podamos escribir $\zeta_s = 0$ y $\mathbf{q} = \mathbf{p}_F$ en los factores U y \mathcal{V} del integrando. Los vectores \mathbf{p}_1 y \mathbf{p}_3 están también sobre la superficie de Fermi. Así pues, las funciones \mathcal{V} y U en (54.4) dependerán entre sí sólo a través de una variable independiente, el ángulo existente entre dos cualesquiera de los tres vectores \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_3 y \mathbf{q} sobre la superficie de Fermi.

Puede resolverse ahora la ecuación (54.4) desarrollando U y \mathcal{V} en serie de polinomios de Legendre:

$$\left. \begin{aligned} U(\vartheta) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \vartheta), \\ \mathcal{V}(\vartheta) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \mathcal{V}_l P_l(\cos \vartheta), \end{aligned} \right\} \quad (54.5)$$

siendo θ uno cualquiera de los ángulos mencionados. Sustituyendo estos desarrollos en (54.4) e integrando mediante el teorema de adición de armónicos esféricos, se tiene

$$\mathcal{C}_l(1+a_l\pi)=a_l, \quad (54.0)$$

en donde

$$\pi = T \sum_{s=-\infty}^{\infty} |\mathcal{G}^{(0)}(\zeta_s, \mathbf{q})|^2 \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} = \frac{T}{(2\pi)^3} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 q}{\zeta_s^2 + \eta_q^2}; \quad (54.7)$$

la función $\mathcal{G}^{(0)}$ se toma de (37.13) y $\eta_q = q^2/2m - \mu \approx v_F(q - p_F)$. De acuerdo con la fórmula de la suma (42.10),

$$\pi = \frac{1}{2(2\pi)^3} \int \operatorname{tgh} \frac{\eta_q}{2T} \frac{d^3 q}{\eta_q}. \quad (54.8)$$

La divergencia de la integral respecto a $dq = d\eta/v_F$ en el límite superior es es-púrea (cf. la última nota a pie de página de § 39) y debe cortarse la integral a cierto $\eta \approx \tilde{\epsilon}_i$.[†] Sin embargo, cuando $T \rightarrow 0$, la integral diverge logarítmicamente también en el límite inferior, es decir se comporta como $\log(1/T)$.

A partir de (54.6) se ve que \mathcal{C}_l se hace infinito (es decir \mathcal{C} tiene un polo) bajo la condición

$$1 + a_l\pi = 0. \quad (54.9)$$

Esta ecuación tiene la misma forma que la que determina el punto de transición para el apareamiento con $l = 0$, difiriendo de ella únicamente en que se sustituye la «constante de acople» g por $-a_l$ [cf. (42.11)]; considerando esta ecuación como la necesaria para determinar T_c , debemos poner $\Delta = 0$ y entonces $\varepsilon(p)$ coincide con η_p . Por consiguiente, vemos que la función vértice tiene un polo si es negativa cualquiera de las magnitudes a_l ; la temperatura de transición es entonces

$$T_c^{(l)} = (\gamma \tilde{\epsilon}_l / \pi) \exp(-2/|a_l|v_F); \quad (54.10)$$

cf. (40.4) y (39.19). Si $a_l < 0$ para diversos valores diferentes de l , la transición se produce a una temperatura $T_c^{(1)}$ correspondiente al mayor valor $|a_l|$.[‡]

[†] Debido a la rápida convergencia de la suma extendida a s en (54.7), únicamente tienen importancia real los valores pequeños de ζ_c y la forma logarítmica de la integral respecto a dq justifica la hipótesis de que q está próximo a p_F .

[‡] Si todo $a_l > 0$ no existe transición y la fórmula (54.6) para \mathcal{C}_l es válida a todas las temperaturas hasta cero. Entonces todo \mathcal{C}_l tiende a cero como $1/|\log T|$ cuando $T \rightarrow 0$. Esto es un ejemplo del hecho ya mencionado en la última nota del § 6 de que cuando $T = 0$ la función $\mathcal{C}(y)$, por tanto, la función f de interacción de las cuasipartículas) es cero en el caso de partículas con impulsos opuestos.

Puede demostrarse que en el caso de un gas (o líquido) de Fermi cualquiera compuesto por átomos eléctricamente neutros, las cantidades a_l deben resultar siempre negativas para valores de l suficientemente grandes (L. P. Pitaevskii 1959). La razón está en que, en la interacción de átomos neutros, existe siempre margen de distancias (grandes) en las que se produce una atracción (atracción de van der Waals).

En un líquido real de esta clase, el isótopo líquido He³, la aparición de la superfluidez parece deberse al apareamiento con $l = 1$.‡ No consideraremos ahora la estructura de la fase superfluida y únicamente estudiaremos brevemente la selección del parámetro de orden que distingue esta fase de la normal. La función de Green anómala $F_{\alpha\beta}(t, \mathbf{r}_1; t, \mathbf{r}_2) \equiv F_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ es una magnitud que resulta nula por encima del punto de transición pero no por debajo de ella; como ya se ha mencionado en § 41, actúa como la función de onda para pares ligados de partículas. Su componente de Fourier $F_{\alpha\beta}(\mathbf{p})$ sobre la superficie de Fermi (es decir, para $\mathbf{p} = 2p_F \mathbf{n}$) es una función de la dirección \mathbf{n} y no una constante como sucede con el apareamiento con $l = 0$. Puesto que los operadores ψ se anticonmutan, la función $F_{\alpha\beta}(\mathbf{n})$ es antisimétrica, como debería ser, con respecto al intercambio de partículas $F_{\alpha\beta}(\mathbf{n}) = -F_{\alpha\beta}(-\mathbf{n})$.

Al producir el apareamiento con $l = 1$, igual que con cualquier momento angular impar, $F_{\alpha\beta}$ es una función impar de \mathbf{n} y, por ello, resulta ser un espinor simétrico. Esto significa que el spin del par es 1, como debería ocurrir en el caso de un estado de dos fermiones iguales con l impar. Un espinor simétrico de rango dos es equivalente a un vector y lo llamaremos \mathbf{d} . En el caso $l = 1$, la dependencia entre \mathbf{d} y \mathbf{n} debe corresponder al polinomio de Legendre $P_1(\cos \theta)$, es decir debe ser lineal, $d_i = \psi_{ik} n_k$. El tensor complejo ψ_{ik} de rango dos (no necesariamente complejo) describe la fase superfluida. De hecho existen dos fases superfluidas diferentes del He³ líquido con formas diferentes del tensor ψ_{ik} .

‡ La transición se presenta a una temperatura $\sim 10^{-3}$ K. El pequeño valor de T_c asegura la existencia de un margen en el que es aplicable al He³ líquido de teoría del líquido de Fermi normal.

CAPÍTULO VI

ELECTRONES EN LA RED CRISTALINA

§ 55. Un electrón en un campo periódico

Las nubes electrónicas de los átomos en un cristal interactúan fuertemente entre sí y, en consecuencia, no podemos hablar de los niveles energéticos de los átomos individuales, sino únicamente de los niveles de las nubes electrónicas de todos los átomos del cuerpo considerado globalmente. La naturaleza del espectro de energía de los electrones es diferente para cada tipo de sólido. Sin embargo, como primera etapa en el estudio de estos espectros debemos considerar el problema más formal del comportamiento de un solo electrón en un campo eléctrico externo con periodicidad espacial, el cual sirve de modelo para una red cristalina. Este tema se tratará en las secciones §§ 55-60.

La periodicidad del campo significa que no se ve alterado por una traslación de la forma $\mathbf{a} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ (en donde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 son los vectores básicos de la red y n_1 , n_2 y n_3 , números enteros cualesquiera):

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{r}). \quad (55.1)$$

De aquí que la ecuación de Schrödinger que describe el movimiento de electrón en un campo de este tipo resulte invariante frente a una transformación de la forma $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$. Así pues, si $\psi(\mathbf{r})$ es la función de onda de un estado estacionario, entonces también $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ es una solución de la ecuación de Schrödinger que describe el mismo estado del electrón. Esto significa que las dos funciones deben ser las mismas excepto en un factor constante: $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \text{constante} \times \psi(\mathbf{r})$. Es evidente que la constante debe tener un módulo unidad; si no fuese así, la función de onda tendería a infinito cuando se repitiese indefinidamente el desplazamiento a través de \mathbf{a} (o de $-\mathbf{a}$). La forma general de una función que posee esta propiedad es

$$\psi_{sk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{sk}(\mathbf{r}), \quad (55.2)$$

en donde \mathbf{k} es un vector constante (real) arbitrario y u_{sk} una función periódica:

$$u_{sk}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{sk}(\mathbf{r}). \quad (55.3)$$

Este resultado fue deducido en primer lugar por F. Bloch (1929); las funciones de onda que poseen la forma (55.2) se denominan *funciones de Bloch* y en conexión con este punto suele denominarse *electrón de Bloch* a un electrón en un campo periódico.

Para un valor dado de \mathbf{k} , la ecuación de Schrödinger tiene en general una infinidad de soluciones diferentes correspondientes a una infinidad de valores discretos diferentes de la energía $\varepsilon(\mathbf{k})$ del electrón; estas soluciones se señalan mediante el subíndice s en $\psi_{s\mathbf{k}}$. A cada una de las diversas ramas de la función $\varepsilon = \varepsilon_s(\mathbf{k})$, que es la relación de dispersión del electrón en el campo periódico, debe asignarse un subíndice semejante, que será el número de la *banda de energía*. En cada banda la energía toma valores comprendidos en un cierto intervalo finito.

Cuando se consideran bandas diferentes, estos intervalos están separados a su vez por «intervalos vacíos de energía» «energy gaps» o se solapan parcialmente; en este último caso y en la región de solapamiento, cada valor de la energía corresponde a valores de \mathbf{k} que son diferentes para las diversas bandas. Geométricamente esto significa que las superficies de energía constante correspondientes a dos bandas superpuestas s y s' están en diferentes regiones del espacio \mathbf{k} . Formalmente, el solapamiento de las bandas significa que existe degeneración: estados diferentes tienen la misma energía, pero esto no origina ninguna peculiaridad del espectro, porque corresponden a valores diferentes de \mathbf{k} . Ha de distinguirse el caso general del solapamiento del correspondiente a la intersección de bandas, cuando los valores de $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_{s'}(\mathbf{k})$ coinciden en puntos particulares \mathbf{k} (las superficies de energía constante se cortan). Normalmente se entiende que la degeneración se refiere únicamente a este caso; la intersección origina la aparición de ciertas peculiaridades del espectro.

Todas las funciones $\psi_{s\mathbf{k}}$ con s o \mathbf{k} diferentes son, como es natural, ortogonales. En particular, la ortogonalidad de $\psi_{s\mathbf{k}}$ con distintos valores de s e iguales \mathbf{k} implica que las funciones $u_{s\mathbf{k}}$ son ortogonales. Puesto que son periódicas, basta integrar respecto al volumen v de una celdilla de la red; con la normalización apropiada,

$$\int u_{s'\mathbf{k}}^* u_{s\mathbf{k}} dv = \delta_{ss'}. \quad (55.4)$$

El significado del vector \mathbf{k} es que determina el comportamiento de la función de onda en la traslación: la transformación $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$ la multiplica por $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}$,

$$\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} \psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (55.5)$$

De aquí se deduce inmediatamente que \mathbf{k} por definición no es único: valores que difieren entre sí en un vector \mathbf{b} cualquiera de la red recíproca dan el mismo valor de la función de onda; el factor $\exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{b}) \cdot \mathbf{a}\} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})$. Así pues, dichos valores de \mathbf{k} son físicamente equivalentes; corresponden al mismo estado del elec-

trón, es decir, a la misma función de onda. Podemos decir que las funciones $\psi_{s\mathbf{k}}$ son periódicas (en la red recíproca) respecto al subíndice \mathbf{k} :

$$\psi_{s,\mathbf{k}+\mathbf{b}}(\mathbf{r}) = \psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (55.6)$$

La energía también es periódica:

$$\varepsilon_s(\mathbf{k} + \mathbf{b}) = \varepsilon_s(\mathbf{k}). \quad (55.7)$$

Las funciones (55.2) tienen una cierta semejanza con las funciones de onda de un electrón libre, las ondas planas $\psi = \text{constante} \times \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar)$, sustituyendo el impulso por el vector constante $\hbar\mathbf{k}$. Así llegamos de nuevo, igual que ocurrió con el fonón (ver Parte 1, § 71) al concepto de *cuasiimpulso* de un electrón en un campo periódico. Debe resaltarse que en este caso no existe ningún impulso real que se conserve, puesto que en el campo externo no se cumple el principio de conservación del impulso. Sin embargo, interesa señalar que en un campo periódico un electrón sigue estando caracterizado por un vector constante.

En un estado estacionario con un cuasiimpulso dado $\hbar\mathbf{k}$, el impulso real puede tener una infinidad de valores de la forma $\hbar(\mathbf{k} + \mathbf{b})$, con diversas probabilidades. Esto es debido a que el desarrollo en serie de Fourier de una función periódica en el espacio contiene términos $e^{i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}}$:

$$u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} a_{s,\mathbf{k}+\mathbf{b}} e^{i\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}},$$

y el desarrollo de la función de onda (55.2) en ondas planas es, por tanto,

$$\psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} a_{s,\mathbf{k}+\mathbf{b}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{b}) \cdot \mathbf{r}}. \quad (55.8)$$

El hecho de que los coeficientes del desarrollo dependan únicamente de las sumas $\mathbf{k} + \mathbf{b}$ expresa la propiedad de periodicidad de la red recíproca (55.6). Debemos resaltar que este hecho, como la propiedad (55.6), no es una condición extra impuesta sobre la función de onda, sino que se deduce necesariamente de la periodicidad del campo $U(\mathbf{r})$.

Todos los valores físicamente diferentes del vector \mathbf{k} caen dentro de una celda unidad de la red recíproca. El «volumen» de esta celda es $(2\pi)^3/v$, siendo v el volumen de la celda unidad de la propia red cristalina. Por otra parte, el volumen en el espacio $(\mathbf{k}/2\pi)$ determina el número de estados correspondientes (por unidad de volumen del cuerpo). Así pues, el número de dichos estados en cada banda de energía es $1/v$, es decir el número de celdas unidad por unidad de volumen del cristal.

Además de ser periódicas en el espacio \mathbf{k} , las funciones $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ son simétricas frente a las rotaciones y reflexiones que correspondan a la simetría de las direcciones

de la red (la clase cristalina). Independientemente de la presencia o ausencia de un centro de simetría en la clase cristalina que nos ocupe, se tiene siempre

$$\varepsilon_s(-\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{k}). \quad (55.9)$$

Esta propiedad es una consecuencia de la simetría frente a la inversión temporal: por esta simetría, si ψ_{sk} es la función de onda de un estado estacionario del electrón, la función compleja conjugada ψ_{sk}^* describe también un estado con la misma energía. Pero ψ_{sk}^* se multiplica por $e^{-ik \cdot a}$ en la traslación, es decir corresponde a un cuasiimpulso $-\mathbf{k}$.†

A continuación consideremos dos electrones en un campo periódico. Considerándolos conjuntamente como un sistema con la función de onda $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, vemos que esta función debe multiplicarse por un factor $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}$ en la traslación, en donde \mathbf{k} puede considerarse como el cuasiimpulso del sistema. Por otra parte, para distancias grandes entre los electrones $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ se reduce al producto de las funciones de onda de los electrones individuales y se multiplica por $e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{a}}$ en la traslación. Como ambas formas deben ser iguales al factor se tiene que

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{b}. \quad (55.10)$$

En particular, se deduce de esto que, en un choque de los dos electrones cuando se mueven en un campo periódico, se conserva la suma de sus cuasiimpulsos, incluyendo un vector de la red recíproca:

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 + \mathbf{b}. \quad (55.11)$$

Se encuentra otra analogía más entre los cuasiimpulsos y los impulsos reales determinando la velocidad media del electrón. El cálculo requiere el conocimiento del operador velocidad $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{r}}$ en la representación \mathbf{k} . El operador en esta representación actúa sobre los coeficientes c_{sk} del desarrollo de una función de onda arbitraria en función de las funciones propias ψ_{sk} :

$$\psi = \sum_s \int c_{sk} \psi_{sk} d^3k. \quad (55.12)$$

Hallemos primero el operador $\hat{\mathbf{r}}$. Tenemos idénticamente

$$\begin{aligned} \mathbf{r}\psi &= \sum_s \int c_{sk} \mathbf{r} \psi_{sk} d^3k \\ &= \sum_s \int c_{sk} \left(-i \frac{\partial \psi_{sk}}{\partial \mathbf{k}} + ie^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{\partial u_{sk}}{\partial \mathbf{k}} \right) d^3k. \end{aligned}$$

† En presencia de bandas que se solapan, se deduce a partir de estas consideraciones, estrictamente hablando, únicamente que $\varepsilon_s(-\mathbf{k}) = \varepsilon_{s'}(\mathbf{k})$, siendo s y s' los números de determinadas bandas. No obstante la ecuación (55.9) puede satisfacerse siempre mediante la numeración apropiada de las diversas ramas de la función $\varepsilon(\mathbf{k})$.

En el primer término integremos por partes y en el segundo desarrollemos la función $\partial u_{sk}/\partial \mathbf{k}$, que es periódica (como u_{sk}), en función de las funciones mutuamente ortogonales u_{sk} con el mismo \mathbf{k} :

$$\partial u_{sk}/\partial \mathbf{k} = -i \sum_{s'} \langle s\mathbf{k} | \Omega | s'\mathbf{k} \rangle u_{s'\mathbf{k}}, \quad (55.13)$$

en donde $\langle s\mathbf{k} | \Omega | s'\mathbf{k} \rangle$ son coeficientes constantes. Tenemos, entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{r}\psi &= \sum_s \int i\psi_{s\mathbf{k}} \frac{\partial c_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} d^3k + \sum_{s, s'} \int c_{s\mathbf{k}} \langle s\mathbf{k} | \Omega | s'\mathbf{k} \rangle \psi_{s'\mathbf{k}} d^3k \\ &= \sum_s \int \left\{ i \frac{\partial c_{s\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + \sum_{s'} \langle s'\mathbf{k} | \Omega | s\mathbf{k} \rangle c_{s'\mathbf{k}} \right\} \psi_{s\mathbf{k}} d^3k. \end{aligned}$$

A partir de la definición del operador \mathbf{r} debemos tener

$$\mathbf{r}\psi = \sum_s \int (\hat{\mathbf{r}}c_{s\mathbf{k}}) \psi_{s\mathbf{k}} d^3k.$$

Comparando con la expresión dada anteriormente se tiene

$$\hat{\mathbf{r}} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \hat{\Omega}, \quad (55.14)$$

en donde el operador hermítico $\hat{\Omega}$ está especificado por su matriz $\langle s'\mathbf{k} | \Omega | s\mathbf{k} \rangle$. Es importante observar que esta matriz es diagonal en \mathbf{k} y, por tanto, el operador $\hat{\Omega}$ commuta con el operador $\hat{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{k}$.

De acuerdo con las reglas generales, se encuentra el operador velocidad commutando el operador $\hat{\mathbf{r}}$ con el hamiltoniano del electrón. En la representación \mathbf{k} , el hamiltoniano \hat{H} es una matriz diagonal (respecto a \mathbf{k} y a los números de banda s) con elementos $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ [†]. El operador $\partial/\partial \mathbf{k}$ que actúa sólo sobre la variable \mathbf{k} es diagonal respecto a s . De aquí que, en la expresión

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{v}} &= \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}\hat{H}) \\ &= -\frac{1}{\hbar} \left(\hat{H} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \hat{H} \right) + \hat{\Omega}. \end{aligned}$$

[†] Más precisamente, está en la representación $\mathbf{k}s$. Podemos recordar que las funciones de onda $c_{s\mathbf{k}}$ en esta representación no son completamente arbitrarias, sino que deben ser periódicas en \mathbf{k} .

el primer término sea una matriz diagonal con elementos

$$-\frac{1}{\hbar} \left(\varepsilon_s(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \varepsilon_s(\mathbf{k}) \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_s(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}.$$

Los elementos de matriz de $\hat{\Omega}$ están relacionados con los de Ω por

$$\langle s\mathbf{k} | \hat{\Omega} | s'\mathbf{k} \rangle = (i/\hbar) [\varepsilon_s(\mathbf{k}) - \varepsilon_{s'}(\mathbf{k})] \langle s\mathbf{k} | \Omega | s'\mathbf{k} \rangle;$$

que es cero cuando $s = s'$, es decir $\hat{\Omega}$ no tiene elementos diagonales respecto al número de la banda. Así pues, se tiene finalmente para los elementos de la matriz de la velocidad de los electrones la expresión

$$\langle s\mathbf{k} | \mathbf{v} | s\mathbf{k} \rangle = \partial \varepsilon_s(\mathbf{k}) / \hbar \partial \mathbf{k}, \quad \langle s\mathbf{k} | \mathbf{v} | s'\mathbf{k} \rangle = \langle s\mathbf{k} | \Omega | s'\mathbf{k} \rangle \quad (s \neq s'). \quad (55.15)$$

Los elementos diagonales de esta matriz son los valores medios de la velocidad en los estados correspondientes. Por consiguiente, estos valores vienen dados en función de los cuasiimpulsos por

$$\bar{\mathbf{v}}_s = \partial \varepsilon_s(\mathbf{k}) / \hbar \partial \mathbf{k}, \quad (55.16)$$

que es totalmente análoga a la relación clásica usual.

Hasta ahora la discusión ha ignorado la existencia del spin del electrón. Cuando se desprecian los efectos relativistas (la interacción spin-órbita), la inclusión del spin produce simplemente una doble degeneración de cada nivel energético con un valor dado del cuasiimpulso \mathbf{k} , existiendo dos valores de la proyección del spin sobre cualquier dirección fija del espacio. Cuando se tiene en cuenta la interacción spin-órbita, la situación resulta diferente de acuerdo con que la red cristalina tenga o no un centro de inversión.

La interacción spin-órbita en el caso de un electrón en un campo periódico se describe mediante el operador

$$\hat{H}_{sl} = \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U \cdot \nabla, \quad (55.17)$$

en donde $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector matricial de Pauli (ver TCR, § 33). Las funciones de onda sobre las cuales actúa el operador son espinores ψ_{ska} de rango uno, siendo α el índice del espinor. De acuerdo con el teorema de Kramers (ver MC, § 60), que está relacionado con cualquier campo eléctrico (sea periódico o no), los espinores complejos conjugados ψ_{ska} y ψ_{ska}^* siempre describen dos estados diferentes con la misma energía. Como también la función ψ_{ska}^* corresponde al cuasiimpulso $-\mathbf{k}$, se ob-

tiene de nuevo (y ahora con inclusión de la interacción spin-órbita) una relación del tipo (55.9):

$$\varepsilon_{s\sigma}(-\mathbf{k}) = \varepsilon_{s\sigma'}(\mathbf{k}), \quad (55.18)$$

en donde σ y σ' designan dos estados de spin diferentes† (con inversión temporal).

La ecuación (55.18) no implica, como es natural, degeneración en el sentido considerado anteriormente, puesto que las energías en ambos miembros de la ecuación se refieren a distintos valores de \mathbf{k} . Sin embargo, si la red tiene un centro de inversión, los estados \mathbf{k} y $-\mathbf{k}$ tienen la misma energía. Igualmente entonces $\varepsilon_{s\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{s\sigma'}(\mathbf{k})$, lo cual vuelve a significar una doble degeneración de cada nivel con un cuasiimpulso determinado.

De modo semejante a la degeneración debida a la simetría bajo la inversión temporal, en el caso de un electrón en un campo periódico también puede existir degeneración debida a la simetría espacial de la red. Esto se verá en § 68.

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Hallar la relación de dispersión para el movimiento monodimensional de un electrón en el campo periódico indicado en la figura 10 (R. de L. Kronig y W. G. Penney 1930).

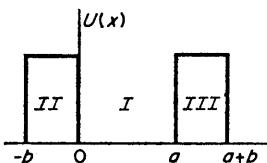


FIG. 10.

SOLUCIÓN. La función de onda en la región del pozo I ($0 < x < a$) tiene la forma

$$\psi = c_1 e^{i\kappa_1 x} + c_2 e^{-i\kappa_1 x}, \quad \kappa_1 = \sqrt{2m(\epsilon - U_0)/\hbar}, \quad (1)$$

y en la región de la barrera II ($-b < x < 0$)

$$\psi = c_3 e^{i\kappa_2 x} + c_4 e^{-i\kappa_2 x}, \quad \kappa_2 = \sqrt{2m(\epsilon - U_0)/\hbar}. \quad (2)$$

En la siguiente región de barrera III, la función de onda únicamente puede diferir de (2) en el factor de fase $e^{ik(a+b)}$, siendo $a + b$ el periodo del campo:

$$\psi = e^{ik(a+b)}(c_3 e^{i\kappa_2(x-a-b)} + c_4 e^{-i\kappa_2(x-a-b)}). \quad (3)$$

† Cuando se tiene en cuenta la interacción spin-órbita, el operador de proyección del spin no se comunica con el hamiltoniano; por consiguiente, no se conserva la proyección del spin y, estrictamente hablando, el spin no puede estar caracterizado por este número.

Las condiciones de continuidad de ψ y ψ' en $x = 0$ y $x = a$ dan cuatro ecuaciones para c_1, \dots, c_4 ; la condición para que sean compatibles estas ecuaciones conduce a la relación de dispersión

$$\cos k(a+b) = \cos \kappa_1 a \cos \kappa_2 b - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa_2}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{\kappa_2} \right) \sin \kappa_1 a \sin \kappa_2 b, \quad (4)$$

que implícitamente determina la relación $\varepsilon(k)$ requerida. Para $\varepsilon < U_0$, κ_2 es imaginario y la ecuación debe escribirse entonces

$$\cos k(a+b) = \cos \kappa_1 a \cosh |\kappa_2 b| + \frac{1}{2} \left(\frac{|\kappa_2|}{\kappa_1} - \frac{\kappa_1}{|\kappa_2|} \right) \sin \kappa_1 a \operatorname{senh} |\kappa_2 b|. \quad (5)$$

Si tomamos en (5) el límite $U_0 \rightarrow \infty$, $b \rightarrow 0$ con $U_0 b = \text{constante} \equiv Pa$, obtenemos la relación de dispersión

$$\cos ka = \cos \kappa_1 a + \frac{Pma^2}{\hbar^2} \frac{\sin \kappa_1 a}{\kappa_1 a}. \quad (6)$$

Esto resuelve el problema de los niveles energéticos en un campo periódico compuesto por picos de funciones delta:

$$U(x) = aP \sum_n \delta(x - an).$$

La figura 11 muestra una representación gráfica de la distribución de las raíces de la ecuación (6). Se ha representado el segundo miembro como una función de $\kappa_1 a$; cuando toma valores entre ± 1 , las raíces de la ecuación toman valores comprendidos en los márgenes indicados por los segmentos gruesos del eje horizontal.

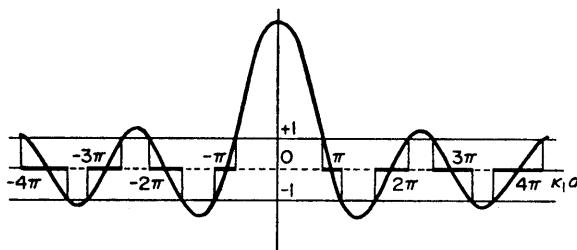


FIG. 11.

PROBLEMA 2. Hallar la relación de dispersión en el caso de un movimiento monodimensional de una partícula en un campo periódico débil $U(x)$.

SOLUCIÓN. Considerando el campo como una pequeña perturbación, empezamos con la aproximación de orden cero, en la cual se encuentra la partícula en movimiento libre descrito por la onda plana

$$\psi^{(0)}(x) = (Na)^{-1/2} e^{ikx}$$

(con la normalización a una partícula en la longitud Na , en donde a es el periodo del campo); la energía de la partícula $\epsilon^{(0)} = \hbar^2 k^2 / 2m$. Escribamos la función periódica $U(x)$ como una serie de Fourier:

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n e^{2\pi i n x/a}.$$

Los elementos de matriz de este campo respecto a las ondas planas son cero excepto en el caso de las transiciones entre estados con números de ondas k y $k' = k + 2\pi n/a$; para éstas, son $U_{k'k} = U_n$.

En la teoría de perturbaciones de primer orden, la corrección a la energía viene dada por el elemento de matriz diagonal $\epsilon^{(1)} = U_{kk} = U_0$, que es una constante independiente de k , lo cual simplemente desplaza el origen de energía. Sin embargo, se presenta una excepción en el caso de los niveles de energía cercanos a $k = \pi n/a$ ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$). En estos puntos k difiere únicamente el signo respecto a $k' = k - 2\pi n/a$, de modo que las energías $\epsilon^{(0)}(k)$ y $\epsilon^{(0)}(k')$ son iguales. Por tanto, cerca de estos valores los elementos de matriz son no nulos para las transiciones entre estados con energías semejantes y para hallar la corrección debemos utilizar la teoría de perturbaciones tal y como se aplica al caso de valores propios (ver MC, § 79). La respuesta se halla en MC (79.4), de acuerdo con la cual tenemos en el caso presente

$$\begin{aligned} \epsilon_n(k) = & \frac{1}{2} [\epsilon^{(0)}(k) + \epsilon^{(0)}(k - K_n)] \pm \\ & \pm \left\{ \frac{1}{4} [\epsilon^{(0)}(k) - \epsilon^{(0)}(k - K_n)]^2 + |U_n|^2 \right\}^{1/2}, \end{aligned}$$

en donde $K_n = 2\pi n/a$ y la constante aditiva U_0 se omite; la selección del signo de la raíz cuadrada se determina por el requisito de que la función $\epsilon(k)$ resulte $\epsilon^{(0)}(k)$ lejos del valor $k = \pm \frac{1}{2}K_n$: los signos $+$ y $-$ se refieren respectivamente a los intervalos $|k| > |\frac{1}{2}K_n|$ y $|k| < |\frac{1}{2}K_n|$. En los propios puntos $k = \pm \frac{1}{2}K_n$, la función $\epsilon(k)$ tiene una discontinuidad de $2|U_n|$. En la figura 12a se indica la energía $\epsilon(k)$ como una función de la variable k , que varía desde $-\infty$ hasta ∞ . Si se restringe k , el cuasiimpulso, al intervalo comprendido entre $\pm \pi/a$, tenemos la figura 12b, que muestra las dos primeras bandas de energía.

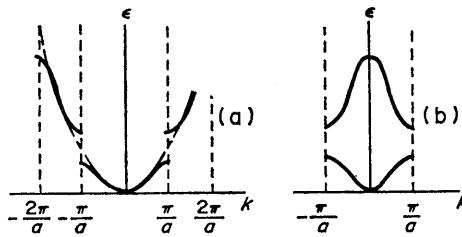


FIG. 12.

Debe señalarse que las bandas de la figura 12, como en la figura 11, no se solapan. Esto es una propiedad general del movimiento monodimensional en un campo periódico. Cada nivel energético es doblemente degenerado (respecto al signo de k) y no es posible un grado superior de degeneración en el movimiento monodimensional. Además en el caso monodimensional, los límites de cada banda, valores mínimo y máximo de $\epsilon(k)$ corresponden a $k = 0$ y $k = \pi/a$. Esto se debe a que las funciones de onda correspondientes a energías comprendidas en el intervalo prohibido están multiplicadas por un cierto factor real en su desplazamiento a través del periodo a y, por tanto, aumenta sin límite en el infinito. Las funciones de onda en los intervalos de energía permitidos están multiplicados por e^{ika} en cuanto a dicho desplazamiento. En el límite entre los intervalos permitidos y prohibidos este factor debe ser en consecuencia una cantidad a la vez real y de módulo unidad, de donde se deduce que $ka = 0$ o π .

PROBLEMA 3. Hallar la relación de dispersión para una partícula en un campo periódico monodimensional compuesto por una secuencia de pozos de potencial simétricos que satisfacen la condición de comportamiento cuasiclásico (de modo que es pequeña la probabilidad de que la partícula penetre la barrera entre los pozos).

SOLUCIÓN. Es semejante a la solución del problema del desdoblamiento de niveles en un pozo doble (*MC* § 50, problema 3). Sea $\psi_0(x)$ la función de onda normalizada que describe el movimiento (con una cierta energía ϵ_0 , figura 13) en uno de los pozos, de modo que debe disminuir exponen-

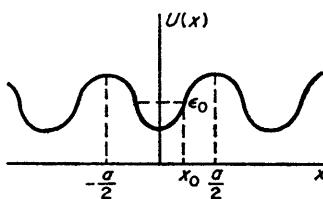


FIG. 13.

cialmente a cada lado más allá de los límites de este pozo; puede ser una función par o impar de x . La función de onda correcta en la aproximación de orden cero para el movimiento de una partícula en un campo periódico es la suma

$$\psi_k(x) = C \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikna} \psi_0(x-na), \quad (1)$$

en donde C es una constante de normalización; el desplazamiento $x \rightarrow x + a$ multiplica esta función por e^{ika} , como debía ocurrir.

Las ecuaciones de Schrödinger son

$$\begin{aligned} \psi_k'' + (2m/\hbar^2)[\epsilon(k) - U(x)] \psi_k &= 0, \\ \psi_0'' + (2m/\hbar^2)[\epsilon_0 - U(x)] \psi_0 &= 0; \end{aligned}$$

multipliquemos la primera por ψ_0 , la segunda por ψ_k , restemos los miembros correspondientes e integremos respecto a x desde $-\frac{1}{2}a$ hasta $\frac{1}{2}a$ (fig. 13). Como los productos $\psi_0(x)\psi_0(x-na)$ con $n \neq 0$ son despreciables en todo punto, tenemos

$$\int_{-a/2}^{a/2} \psi_k(x) \psi_0(x) dx \approx C.$$

El resultado es

$$\epsilon(k) - \epsilon(0) = (\hbar^2/2mC) [\psi_0' \psi_k - \psi_0 \psi_k']_{-a/2}^{a/2}.$$

En $x = \frac{1}{2}a$ sólo es necesario retener en la suma (1) los términos $n = 0$ y 1 ; $\psi_0(-\frac{1}{2}a) = \pm \psi_0(\frac{1}{2}a)$, según sea par o impar la función $\psi_0(x)$

$$\psi_k(\frac{1}{2}a) = C \psi_0(\frac{1}{2}a) (1 \pm e^{ika}),$$

$$\psi_k'(\frac{1}{2}a) = C \psi_0'(\frac{1}{2}a) (1 \mp e^{ika});$$

análogamente, cuando $x = -\frac{1}{2}a$, sólo es necesario retener los términos con $n = 0$ y -1 . El resultado es

$$\varepsilon(k) - \varepsilon_0 = \pm(2\hbar^2/m)\psi_0(\frac{1}{2}a)\psi'_0(\frac{1}{2}a)\cos ka.$$

Ahora debemos sustituir

$$\begin{aligned}\psi_0(\frac{1}{2}a) &= \left[\frac{m\omega}{2\pi p(\frac{1}{2}a)}\right]^{1/2} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{a/2} |p(x)| dx\right], \\ \psi'_0(\frac{1}{2}a) &= \frac{p(\frac{1}{2}a)}{\hbar}\psi_0(\frac{1}{2}a),\end{aligned}$$

en donde ω es la frecuencia clásica de las oscilaciones de la partícula en el pozo y x_0 es el punto de retorno, que corresponde a la energía ε_0 . El resultado final es

$$\varepsilon(k) - \varepsilon_0 = \pm(\hbar\omega/\pi)\sqrt{D}\cos ka,$$

$$D = \exp\left[-\frac{4}{\hbar}\int_{x_0}^{a/2} |p(x)| dx\right]$$

Así pues, cada nivel energético ε_0 correspondiente al movimiento de una partícula en un pozo aislado se ve ensanchado en una banda de anchura pequeña $2\hbar\omega\sqrt{D}/\pi$, que depende del coeficiente de transmisión de la barrera de potencial entre los dos pozos.

§ 56. Efecto de un campo externo sobre el movimiento de los electrones en una red

Consideremos el movimiento de un electrón cuando se aplica a la red un campo magnético constante \mathbf{H} . Si partimos del hamiltoniano de un electrón en un campo periódico $U(\mathbf{r})$ en la representación de las coordenadas,

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + U(\mathbf{r}), \quad (56.1)$$

en donde $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ es el operador del impulso real, el campo magnético externo se incluye en la forma ordinaria:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}), \quad (56.2)$$

siendo $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ el potencial vector del campo. Sin embargo, el problema se simplifica mucho (en el caso de un campo suficientemente débil) pasando a la representación del cuasiimpulso.

Debido a la gran diversidad de formas posibles de la estructura de bandas en el espectro energético de un electrón en una red, la condición para que el campo externo sea pequeño sólo puede formularse generalmente en una forma realmente

poco precisa. Supongamos que el electrón está en una banda s antes de que se aplique el campo. Designemos por ε_0 el menor valor de una energía característica de esta banda, su anchura característica, por ejemplo, o bien la distancia entre bandas vecinas, es decir la diferencia $\varepsilon_s(\mathbf{k}) - \varepsilon_s'(\mathbf{k})$ para un \mathbf{k} dado. Si el campo magnético puede suponerse pequeño, debe satisfacerse ciertamente la siguiente condición:

$$\hbar\omega_H \ll \varepsilon_0, \quad (56.3)$$

en donde $\omega_H \sim |e|H/m^*c$ es la «frecuencia de Larmor» y $m^* \sim \hbar k/v$ es la masa efectiva del electrón.[†]

En ausencia de un campo externo, el hamiltoniano del electrón en la red en la representación \mathbf{k} es, como ya se ha mencionado, una matriz diagonal con elementos $\varepsilon_s(\mathbf{k})$. En presencia del campo, el hamiltoniano contendrá también el potencial $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ y sus derivadas respecto a las coordenadas, el campo \mathbf{H} (y en un campo no uniforme también las derivadas del campo); en la representación \mathbf{k} se sustituye la función $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ por el operador $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})$, siendo $\hat{\mathbf{r}}$ el operador (55.14).

El potencial $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ es una función creciente de las coordenadas (y si el campo es uniforme, linealmente creciente). Debido a esta tendencia el potencial no es una pequeña perturbación, ni siquiera en un campo débil, del hamiltoniano de un sistema infinito (un electrón en una red). Por esta razón, incluso un campo magnético débil altera considerablemente las propiedades de un sistema grande, haciendo que el espectro sea discreto en lugar de continuo; cuantiza los niveles (ver § 58). Una intensidad de campo débil, en contraste con el potencial, origina sólo correcciones pequeñas.

Veremos que, si se desprecian estas correcciones, puede describirse la dependencia entre el hamiltoniano y el potencial del campo de una forma general mediante la utilización únicamente de los requisitos de la invariancia de la transformación «gauge». Como estamos considerando campos constantes, es suficiente emplear la invariancia de las ecuaciones cuando se someten a transformaciones independientes del tiempo del potencial y de las funciones de onda, de la forma

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f, \quad \psi \rightarrow \psi \exp(ief/\hbar c), \quad (56.4)$$

en donde $f(\mathbf{r})$ es una función arbitraria de las coordenadas; ver MC (111.8), (111.9).

En un campo débil, el potencial $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ es una función de las coordenadas de variación lenta. Con objeto de aclarar el significado de esta lenta variación, consideremos en primer lugar el caso límite de un potencial constante, $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \text{constante} \equiv \mathbf{A}_0$

[†] Se dará una definición más precisa de la frecuencia en (57.7). En el caso de los electrones de conducción de los metales (ver § 61), los valores característicos de $k \sim 1/a$ (en donde a es la constante de la red); poniendo también $\varepsilon_0 \sim \hbar^2/m^*a^2$, vemos que la condición (56.3) es equivalente a $r_H \gg a$, siendo el «radio de la órbita» $r_H \sim v/\omega_H$.

(como es natural el potencial constante resulta ficticio, ya que entonces no existe campo real, de modo que se trata simplemente de una transformación formal). El paso de $\mathbf{A} = 0$ a $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0$ es equivalente a la transformación (56.4) con $f = \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{r}$; de aquí que, en lugar de las funciones propias originales (para $\mathbf{A} = 0$)

$$\psi_{s\mathbf{k}} = u_{s\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (56.5)$$

las funciones propias del nuevo hamiltoniano serán

$$u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp \left\{ i \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}_0 \right) \cdot \mathbf{r} \right\}.$$

De esto se deduce que, con objeto de dar el cuasiimpulso su significado previo como magnitud que determina el cambio en la fase de la función de onda en las traslaciones, debemos poner $\mathbf{k} + e\mathbf{A}_0/\hbar c = \mathbf{K}$; la magnitud \mathbf{K} así definida puede denominarse *cuasiimpulso generalizado*. Entonces las nuevas funciones propias son

$$\psi_{s\mathbf{K}} = u_{s, \mathbf{K} - e\mathbf{A}_0/\hbar c}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}},$$

y los valores de la energía del electrón correspondientes son $\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{K} - e\mathbf{A}_0/\hbar c)$.

Ahora podemos afirmar que, en el caso de un potencial $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ que no es constante sino que varía lentamente en el espacio, las funciones de onda de la aproximación de «orden cero» (con respecto al campo) son

$$\psi_{s\mathbf{K}} = u_{s, \mathbf{K} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})/\hbar c} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}; \quad (56.6)$$

las funciones u ya no son estrictamente periódicas, debido a la variabilidad de \mathbf{A} .[†] Las energías $\varepsilon_s(\mathbf{K} - e\mathbf{A}/\hbar c)$ deben considerarse ahora como operadores que forman el hamiltoniano en la representación \mathbf{K} . Además en esta representación ha de considerarse que $\hat{\mathbf{r}}$ es el operador $\hat{\mathbf{r}} = i\partial/\partial\mathbf{K}$, omitiéndose el segundo término ($\hat{\Omega}$) de la definición (55.14). Porque cuando el operador $i\partial/\partial\mathbf{K}$ actúa sobre la función de onda, el efecto en cuanto al orden de magnitud consiste en multiplicarla por la «dimensión de la órbita» r_H , que aumenta cuando el campo disminuye; el resultado de la acción del operador $\hat{\Omega}$ sobre la función de onda no contiene dicho factor creciente. En este sentido, $\hat{\Omega}$ en un campo débil es pequeño en comparación con $i\partial/\partial\mathbf{K}$. Por otra parte, puesto que el operador $\partial/\partial\mathbf{K}$ es diagonal respecto al número de la banda, el hamiltoniano también es diagonal.

[†] Si se desarrollan las funciones (56.6) en función de $\psi_{s\mathbf{k}}$, en el desarrollo se incluirán en general las funciones con varios s . Sin embargo, conviene recalcar que esto no significa una transición real a una banda diferente, sino que simplemente expresa la variación de la función de onda bajo la acción del campo constante. En conexión con esto puede recordarse que un campo constante no puede producir una transición real con cambio de energía. Para comprender esto, debe resaltarse que, aunque el campo es débil, la variación resultante en la clasificación de estados es considerable (incluyendo la relación existente entre los cuasiimpulso y la energía).

Llegamos así a la conclusión de que el movimiento de un electrón en un campo magnético débil está descrito por el hamiltoniano (en la representación \mathbf{K})

$$\hat{H}_s = \varepsilon_s \left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) \right), \quad \hat{\mathbf{r}} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{K}} \quad (56.7)$$

(R. E. Peierls 1933). Por consiguiente, en esta aproximación existe una analogía completa con la inclusión del campo magnético en el hamiltoniano de una partícula libre en la representación de los impulsos.

La expresión (56.7) no está todavía totalmente determinada, puesto que no se ha especificado el orden de acción de los operadores no conmutables (los componentes del vector $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{K} - e\hat{\mathbf{A}}/\hbar c$). Este orden ha de determinarse de tal modo que el hamiltoniano sea hermítico, lo cual puede en principio obtenerse siempre expresando la función $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ que es periódica (en la red recíproca) como una serie de Fourier

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{a}} A_{s\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}; \quad (56.8)$$

la suma se extiende a todos los vectores \mathbf{a} de la red original. Después del cambio $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\mathbf{k}}$ el exponente de cada término de esta serie sólo contendrá un operador (la proyección del vector $\hat{\mathbf{A}}$ sobre \mathbf{a}), de modo que no surge la cuestión del orden de acción, reduciéndose todo a potencias de este único operador. Naturalmente este método de «hermitización» no es el único, pero es importante el que la diferencia entre los distintos métodos caiga más allá del margen de aproximación considerado, puesto que en esta aproximación los conmutadores de los operadores $\hat{k}_x, \hat{k}_y, \hat{k}_z$ son cantidades pequeñas. Por ejemplo, en un campo uniforme el operador

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} \mathbf{H} \times \hat{\mathbf{r}} = \frac{1}{2} i \mathbf{H} \times \partial / \partial \mathbf{K}; \quad (56.9)$$

un cálculo directo muestra fácilmente que los conmutadores

$$\hat{k}_x \hat{k}_y - \hat{k}_y \hat{k}_x = i(e/\hbar c) H_z, \dots, \quad (56.10)$$

son proporcionales a la intensidad del campo \mathbf{H} , que es pequeña.

Los operadores $\hat{\mathbf{r}} = i\partial/\partial \mathbf{K}$ y $\hat{\mathbf{K}} \equiv \mathbf{K}$ obedecen las mismas reglas de conmutación que las coordenadas e impulsos generalizados de una partícula «libre» (sin la red). Por lo tanto, resulta natural que el cálculo de los conmutadores de estos operadores con el hamiltoniano nos dé las ecuaciones entre operadores

$$\hbar \hat{\mathbf{K}} = -\partial \hat{H} / \partial \mathbf{r}, \quad \hat{\mathbf{r}} = \partial \hat{H} / \hbar \partial \mathbf{K}, \quad (56.11)$$

que tienen la forma de las ecuaciones de Hamilton usuales; para su cálculo ver MC (16.4) y (16.5).

Repetimos que el hamiltoniano (56.7) es aproximado en el sentido de que omite todos los términos que dependen del campo \mathbf{H} y que no contienen factores grandes del orden del tamaño de la órbita r_H . En las aproximaciones subsiguientes, puede expresarse de nuevo el resultado como un hamiltoniano efectivo $\hat{H}_s(\mathbf{K} - e\hat{\mathbf{A}}/\hbar c, \mathbf{H})$, diagonal respecto a los números de banda pero no expresable mediante las funciones $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ únicamente.^f

Si se desprecia la interacción spin-órbita, la inclusión del spin electrónico hace que el hamiltoniano contenga el término normal que describe la interacción del momento magnético con el campo: $-\beta\sigma \cdot \mathbf{H}$, en donde σ son las matrices de Pauli y $\beta = |e| \hbar/2mc$ es el magnetón de Bohr. Si el cristal tiene un centro de inversión, la interacción spin-órbita cambia simplemente el momento magnético del electrón, de modo que la interacción del spin con el campo magnético se convierte en

$$-\beta\sigma_i H_k \xi_{ik}(\mathbf{k}). \quad (56.12)$$

En este caso el hamiltoniano debe ser efectivamente invariante ante las operaciones simultáneas de inversión temporal y espacial. La transformación debe venir acompañada por los cambios $\mathbf{H} \rightarrow -\mathbf{H}$ y $\sigma \rightarrow -\sigma$ sin cambio en \mathbf{k} ; (56.12) es la expresión más general que satisface la condición dada. Como es natural, el tensor $\xi_{ik}(\mathbf{k})$ no puede calcularse de forma general.

Finalmente consideremos el comportamiento del electrón cuando se aplica a la red un campo eléctrico débil \mathbf{E} . La condición para considerarlo pequeño es que la energía adquirida por el electrón en el campo a lo largo de una distancia $\sim a$ sea pequeña en comparación con la energía característica ε_0 : $|e| Ea \ll \varepsilon_0$.

Igual que en el caso del campo magnético, los términos más importantes son aquellos que contienen una función creciente de las coordenadas, el potencial escalar $\phi(\mathbf{r})$ del campo eléctrico. Puede hallarse de nuevo la relación existente entre el hamiltoniano y ϕ de una forma general mediante argumentos semejantes a los utilizados anteriormente, la aplicación de un potencial ficticio constante $\phi = \phi_0$ es equivalente en la ecuación de Schrödinger a la inclusión en la energía de un término constante $e\phi_0$; dicho término se añade también a cada uno de los valores propios $\varepsilon_s(\mathbf{k})$. Cuando no es constante el potencial $\phi(\mathbf{r})$ sino que varía en el espacio lentamente, se añade un término operador correspondiente al hamiltoniano efectivo en la representación \mathbf{k} :

$$\hat{H}_s = \varepsilon_s(\mathbf{k}) + e\phi(\hat{\mathbf{r}}). \quad (56.13)$$

^f Se dará un ejemplo sencillo del cálculo del término de corrección en § 59. Se tiene una descripción del método regular para deducir el hamiltoniano en una serie de potencias de \mathbf{H} y las expresiones generales para los primeros términos de la serie en E. I. Blount, *Physical Review* **126**, 1636, 1962; *Solid State Physics* **13**, 305, 1962. Si el cristal tiene un centro de inversión, la serie empieza con términos de orden \mathbf{H}^2 (ver § 59).

§ 57. Trayectorias cuasiclásicas

Aplicemos los resultados del § 56 al caso importante en el cual el movimiento electrónico dentro del campo magnético es cuasiclásico. Como sabemos, la condición necesaria es que la longitud de onda de Broglie de la partícula varíe sólo ligeramente en distancias del orden de ella misma. En el caso presente esta condición es equivalente a la desigualdad

$$r_H \gg \lambda: \quad (57.1)$$

el radio de curvatura de la órbita es grande en comparación con la longitud de onda $\lambda \sim 1/k$.†

En el caso cuasiclásico, la trayectoria de la partícula es un concepto con total significado y se determina mediante las ecuaciones del movimiento, que se obtienen de (56.11) sustituyendo los operadores por las magnitudes clásicas correspondientes:

$$\hbar \dot{\mathbf{K}} = -\partial H/\partial \mathbf{r}, \quad \mathbf{v} = \partial H/\hbar \partial \mathbf{K}, \quad H = \epsilon \left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right);$$

se omite el subíndice s por brevedad. Desarrollemos estas ecuaciones pasando del cuasiimpulso generalizado \mathbf{K} al «cuasiimpulso cinético»

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})/\hbar c.$$

Tenemos

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} + \frac{e}{c} \frac{d\mathbf{A}(\mathbf{r})}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = \frac{e}{c} v_i \frac{\partial A_i}{\partial \mathbf{r}}.$$

Escribiendo aquí $d\mathbf{A}/dt = (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A}$ y observando que

$$(v_i \nabla) \mathbf{A}_i - (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} = \mathbf{v} \times \text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{v} \times \mathbf{H},$$

obtenemos la ecuación del movimiento

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}, \quad \mathbf{v} = \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}}. \quad (57.2)$$

Esta ecuación difiere de la ecuación clásica ordinaria de Lorentz únicamente respecto a la función $\epsilon(\mathbf{k})$ que es una función periódica complicada, en lugar de

† En general esta condición es más fuerte que (56.3). Pero, si $k \sim 1/a$, como ocurre en el caso de los electrones de conducción en un metal, coinciden las dos condiciones y en la práctica siempre se satisfacen: para $r_H \sim c\hbar k/|e|H \sim c\hbar/a|e|H$, la condición $r_H \gg a$ conduce a $H \ll c\hbar/|e|a^2 \sim 10^8 \sim 10^9$ Oe.

ser una función cuadrática simple, y la función $v(\mathbf{k})$ también es de este mismo tipo, por tanto. Como es natural, se produce un cambio notable en el movimiento de electrón.

Consideremos este movimiento en un campo magnético uniforme. Multiplicando la ecuación (57.2) por \mathbf{v} se tiene del modo usual que $\hbar \mathbf{v} \cdot d\mathbf{k}/dt = d\varepsilon/dt = 0$. Multiplicando (57.2) por \mathbf{H} se tiene $d(\mathbf{H} \cdot \mathbf{k})/dt = 0$. Así pues, en el caso del movimiento del electrón en la red, como en el movimiento de un electrón libre en un campo magnético,

$$\varepsilon = \text{constante}, \quad k_z = \text{constante}, \quad (57.3)$$

teniendo el eje z la dirección del campo \mathbf{H} . Las ecuaciones (57.3) definen la trayectoria del electrón en el espacio \mathbf{k} . Geométricamente es la línea de corte de la superficie de energía constante $\varepsilon(\mathbf{k})$ por un plano perpendicular al campo magnético.

Las superficies de energía constante pueden tener muchas formas diferentes. Pueden incluir (en cada celda de la red recíproca) varias hojas desconectadas, que pueden ser de conexión simple o múltiple, abiertas o cerradas. Para ilustrar esta última diferencia es útil considerar una superficie de energía constante que continúa periódicamente a través de la red recíproca. En cada celda, existirán cavidades cerradas iguales; las superficies abiertas pasan continuamente a través de toda la red hasta el infinito.[†]

Las secciones de la superficie de energía constante están formadas por una infinidad de contornos. Entre ellos hay que incluir los contornos de las secciones de diferentes hojas de la superficie de energía constante y los de hojas repetidas en diferentes celdas. Si una hoja de la superficie de energía constante es cerrada, todas sus líneas de corte serán cerradas. Si la hoja es abierta, sus líneas de corte podrán ser cerradas o abiertas (es decir, continuas a través de la red recíproca).

El comportamiento cuasiclásico del movimiento presupone también el que sea pequeña la probabilidad de la *ruptura magnética*, o variación discontinua del cuasiimpulso del electrón cuando pasa de un contorno a otro; daremos al final de la sección la condición para que sea pequeña dicha probabilidad. Por tanto, si se desprecia esta probabilidad, el electrón se mueve únicamente a lo largo de un contorno en la superficie de energía constante.

Consideremos con más detalle el movimiento a lo largo de trayectorias cerradas en el espacio de los cuasiimpulsos. Es evidente que dicho movimiento es periódico en el tiempo y podemos determinar su periodo del modo siguiente. Tomando la proyección de la ecuación (57.2) sobre el plano $k_x k_y$ perpendicular al campo, se tiene

$$\frac{dl_k}{dt} = \frac{|e| H}{c\hbar} v_{\perp}, \quad v_{\perp} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2},$$

[†] Para evitar malas interpretaciones debemos mencionar que puede que sea imposible escoger la celda de la red recíproca de tal modo que todas las cavidades cerradas esencialmente diferentes (es decir, sin repeticiones periódicas) estén dentro de una celda y no corten sus caras.

en donde $dl_k = \sqrt{dk_x^2 + dk_y^2}$ es un elemento de longitud de la órbita \mathbf{k} . De aquí que

$$t = \frac{c\hbar}{|e|H} \int \frac{dl_k}{v_\perp}.$$

Si la trayectoria es cerrada, el periodo del movimiento viene dado por la integral

$$T = \frac{c\hbar}{|e|H} \oint \frac{dl_k}{v_\perp}, \quad (57.4)$$

tomada a lo largo del contorno completo. Esta expresión puede ponerse ahora en otra forma cuyo significado sea más obvio.

Utilicemos el área $S(\epsilon, k_z)$ de la sección de la superficie de energía constante $\epsilon = \text{constante}$ que corta el plano $k_z = \text{constante}$. La anchura en este plano del anillo que limitan los contornos de $\epsilon = \text{constante}$ y $\epsilon + d\epsilon = \text{constante}$ es en cada punto

$$\frac{d\epsilon}{|\partial\epsilon/\partial\mathbf{k}_\perp|} = \frac{d\epsilon}{\hbar v_\perp},$$

de modo que el área del anillo es

$$dS = d\epsilon \oint dl_k / \hbar v_\perp.$$

De aquí resulta que la integral en (57.4) es precisamente la derivada parcial $\partial S/\partial\epsilon$. Así pues, el periodo del movimiento es

$$T = \frac{c\hbar^2}{|e|H} \frac{\partial S(\epsilon, k_z)}{\partial\epsilon} \quad (57.5)$$

(W. Shockley 1950). Ahora resulta natural introducir la magnitud

$$m^* = (\hbar^2/2\pi) \partial S/\partial\epsilon, \quad (57.6)$$

denominada la *masa ciclotrónica* del electrón en la red. La frecuencia de revolución orbital del electrón se expresa en función de esta magnitud por

$$\omega_H = |e|H/m^*c, \quad (57.7)$$

que difiere de la forma usual para la frecuencia de Larmor de los electrones libres en que su masa se ha sustituido por m^* .†

† En el caso de un electrón libre, la superficie de energía constante es la esfera $\epsilon = \hbar^2 k^2/2m$. Sus secciones rectas son círculos de área $S = \pi(2me/\hbar^2 - k_z^2)$ y, por ello, la derivada vale $\partial S/\partial\epsilon = 2\pi m/\hbar^2$ y $m^* = m$.

Sin embargo, debemos resaltar que en el caso de electrones en una red la masa de ciclotrón no es constante, sino que es una función de s y k_z y, por consiguiente, resulta diferente para los distintos electrones. Además, puede ser o positiva o negativa, moviéndose el electrón en su órbita como una partícula con carga negativa o como un hueco con carga positiva, respectivamente. De acuerdo con ello hablamos de *trayectoria de electrón* o *de hueco*.

Hasta ahora hemos estudiado la trayectoria de un electrón en el espacio \mathbf{k} . Sin embargo, es fácil ver que existe una estrecha relación entre las trayectorias en el espacio de los cuasiimpulsos y en el espacio ordinario. La ecuación del movimiento (57.2) escrita en la forma

$$\hbar d\mathbf{k} = -|e| d\mathbf{r} \times \mathbf{H}/c,$$

da al integrar (con la selección apropiada del origen de las coordenadas \mathbf{r} y de los cuasiimpulsos \mathbf{k})

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -|e| \mathbf{r} \times \mathbf{H}/c. \quad (57.8)$$

A partir de aquí vemos que la proyección xy de la órbita en el espacio ordinario repite esencialmente la trayectoria \mathbf{k} , difiriendo de ella únicamente en la orientación y en la escala: se obtiene a partir de la trayectoria \mathbf{k} mediante los cambios

$$k_x \rightarrow -|e| Hy/\hbar c, \quad k_y \rightarrow |e| Hx/\hbar c.$$

Además, en el espacio ordinario existe un movimiento a lo largo del eje z con velocidad $v_z = \partial \epsilon / \hbar \partial k_z$. Si la trayectoria en el espacio \mathbf{k} es cerrada, en el espacio ordinario es una hélice con el eje a lo largo del campo. Si la trayectoria es abierta, también lo es su proyección sobre el plano xy en el espacio ordinario y, por consiguiente, el movimiento en este plano resulta infinito.

Pueden añadirse algunos comentarios acerca del movimiento cuasiclásico de un electrón cuando se aplica a la red un campo eléctrico \mathbf{E} constante y uniforme. La ecuación cuasiclásica $\hbar \dot{\mathbf{k}} = e\mathbf{E}$ da

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + e\mathbf{E}t/\hbar. \quad (57.9)$$

La ley de conservación de la energía nos da a su vez

$$\epsilon(\mathbf{k}) - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} = \text{constante}. \quad (57.10)$$

Pero la energía $\epsilon(\mathbf{k})$ toma valores en un margen finito $\Delta\epsilon$ (anchura de banda); por consiguiente, se deduce de (57.10) que el movimiento de un electrón en un campo

eléctrico uniforme es finito en la dirección del campo: el electrón oscila en dicha dirección con amplitud $\Delta\varepsilon/|e|E$. Si el campo es paralelo a un vector básico cualquiera \mathbf{b} de la red recíproca, el movimiento es periódico con frecuencia $\omega = 2\pi|e|E/\hbar b$; cuando $b \sim 1/a$, tenemos $\hbar\omega_E \sim |e|Ea$. En el caso general de una dirección arbitraria del campo, el movimiento es cuasiperiódico.

Finalmente consideremos la condición para que sea despreciable la ruptura magnética mencionada anteriormente. La probabilidad de transición de una trayectoria (en el espacio \mathbf{k}) a otra es, como es lógico, grande si estas trayectorias pasan en un punto cualquiera inusualmente cerca una de la otra. Esta situación surge cuando la trayectoria está próxima a una que se autointerseca o bien si pasa cerca de la intersección de dos hojas de la superficie de energía constante (es decir cerca de un punto de degeneración) la figura 14 muestra un esquema típico de trayectorias

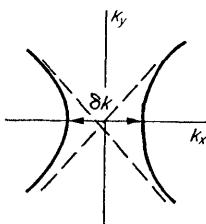


FIG. 14.

en estos casos; el espacio prohibido δk entre las trayectorias es pequeño en comparación con las dimensiones características de las órbitas consideradas como un todo y el radio de curvatura R_k de las trayectorias cerca de sus puntos de máxima aproximación es en general del orden de δk . La transición desde una órbita a otra tiene lugar mediante efecto túnel cuántico. La probabilidad de este proceso es pequeña (exponencialmente) si δk es grande en comparación con la distancia Δk_x a lo largo de la cual la función de onda tiende a anularse en la región inaccesible clásicamente entre las trayectorias.

Puede obtenerse una estimación de Δk_x utilizando la analogía entre el movimiento de un electrón en el campo magnético y el movimiento monodimensional en un campo potencial $U(x)$. Se basa la analogía en el hecho de que, de acuerdo con (56.10), los operadores $\hat{q} = \hat{k}_x \hbar c / |e| H$ y $\hat{p} = \hbar \hat{k}$ obedecen a una regla de conmutación que es la misma que cumplen la coordenada y el impulso. Cerca de los puntos de máxima aproximación las trayectorias son parabólicas, como la trayectoria de fase (x, p) de un movimiento monodimensional en un campo uniforme ($U = -Fx$), cuya ecuación es $p^2/2m = Fx$ si se mide la coordenada x desde el punto de retorno. En el último caso, la función de onda disminuye a lo largo de la distancia $\Delta x \sim (\hbar^2/mF)^{1/3}$ más allá del punto de retorno (ver MC, § 24); teniendo en cuenta que el radio de curvatura de la trayectoria de fase $R \sim (d^2x/dp^2)^{-1} \sim mF$,

se tiene $\Delta x \sim (\hbar^2/R)^{1/3}$. Por la analogía mencionada, puede hallarse el Δk_x que buscamos haciendo los cambios $\Delta x \rightarrow \hbar c \Delta k_x / |e| H$, $R \rightarrow R \hbar / |e| H/c$. Así pues, tenemos $\Delta k_x \sim (|e| H/\hbar c)^{2/3} (\delta k)^{-1/3}$, y la condición $\Delta k_x \ll \delta k$ se reduce a

$$|e| H/\hbar c \ll (\delta k)^2. \quad (57.11)$$

§ 58. Niveles de energía cuasiclásicos

Hemos visto que el movimiento clásico de un electrón en una red dentro de un campo magnético, a lo largo de una trayectoria cerrada en el espacio \mathbf{k} , corresponde en el espacio ordinario a un movimiento que es finito en un plano perpendicular a la dirección del campo \mathbf{H} . Cuando pasamos a la mecánica cuántica, existen niveles discretos para cualquier valor fijo del cuasiimpulso longitudinal k_z . Éstos se determinan mediante las reglas generales de la cuantización cuasiclásica.

Escojamos el potencial vector del campo magnético uniforme (a lo largo del eje z) en la forma $A_x = -Hy$, $A_y = A_z = 0$. Entonces los componentes del cuasiimpulso generalizado son

$$K_x = k_x + |e| Hy/c\hbar, \quad K_y = k_y, \quad K_z = k_z. \quad (58.1)$$

La coordenada x es una variable cíclica y la componente x del cuasiimpulso generalizado se conserva, por tanto:

$$K_x = k_x + |e| Hy/c\hbar = \text{constante}. \quad (58.2)$$

De acuerdo con la regla de cuantización de Bohr y Sommerfeld (ver *MC*, § 48), podemos escribir la condición

$$\frac{1}{2\pi} \left| \oint K_y dy \right| = n, \quad (58.3)$$

en donde la integración ha de extenderse a todo el periodo del movimiento y n es un número entero positivo, supuesto grande.[†] Sustituyendo aquí de (58.1) y (58.2) $K_y = k_y$ y $dy = -(c\hbar/e|H|)dk_x$ se tiene

$$\frac{c\hbar}{2\pi|e|H} \left| \oint k_y dk_x \right| = n, \quad (58.4)$$

[†] Para el movimiento en un campo magnético uniforme, la integral $\oint \mathbf{K}_t \cdot d\mathbf{r}/2\pi$ es una invariante adiabática independiente de la selección del potencial vector, siendo \mathbf{K}_t la proyección del cuasiimpulso generalizado sobre el plano perpendicular al campo; cf. *Campos*, § 21. Con nuestra selección de \mathbf{A} , la integral $\oint K_x dx = K_x \oint dx = 0$, de modo que la invariante adiabática es la misma que la integral de (58.3).

en donde la integral se toma ahora a lo largo de una trayectoria cerrada en el espacio \mathbf{k} . Esta integral coincide con el área encerrada por la trayectoria, es decir, el área $S(\varepsilon, k_z)$ de la sección recta que corta sobre la superficie de energía constante el plano $k_z = \text{constante}$, como se definió en § 57.

Así pues, tenemos finalmente

$$S(\varepsilon, k_z) = 2\pi(|e|H/c\hbar)n \quad (58.5)$$

(I. M. Lifshitz 1951, L. Onsager 1952). Esta condición determina implícitamente los niveles de energía $\varepsilon_n(k_z)$. Así pues, la banda de energía (cuyo número s se omite por brevedad) se compone de un conjunto discreto de *sub-bandas de Landau*, cada una de las cuales es un intervalo de niveles de energía que se distinguen por el valor de la variable continua k_z .

La condición de cuantización cuasiclásica puede refinarse incluyendo una corrección que equivale a adicionar un número del orden de la unidad al número cuántico grande n . La determinación de esta corrección exige una consideración del movimiento cerca de los «puntos de retorno» que forman los límites del intervalo de integración en (58.3).

Se determina la relación existente entre $K_y = k_y$ e y sobre la trayectoria del electrón mediante la ecuación

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \left(K_x - \frac{|e|H}{c\hbar} y, k_y, k_z \right) = \text{constante} \quad (58.6)$$

para un valor dado de k_z y son $K_x = \text{constante}$; el punto de retorno $y = y_0$ se determina mediante la condición de que sea cero la velocidad $v_y = \partial\varepsilon/\hbar\partial k_y$. Cerca de este punto, el desarrollo de (58.6) en potencias de $y - y_0$ da

$$-\frac{|e|H}{c\hbar} \left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x} \right)_0 (y - y_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k_y^2} \right)_0 (k_y - k_{y0})^2 = 0,$$

en donde $k_{y0} = k_y(y_0)$. A partir de aquí vemos que el punto de retorno se approxima de acuerdo con una ley de proporcionalidad con la raíz cuadrada:

$$k_y - k_{y0} = \pm A\sqrt{y - y_0};$$

consideraremos el caso particular en el que la región clásicamente inaccesible esté en $y < y_0$. Esta ley es la misma que la que rige la deducción normal de la corrección a la cuantización cuasiclásica (ver MC, §§ 47 y 48). En consecuencia la regla corregida es

$$S(\varepsilon, k_z) = 2\pi(|e|H/c\hbar)(n + \frac{1}{2}). \quad (58.7)$$

Como resulta claro a partir de la deducción, que se basa en el desarrollo de la función (58.6), es necesario para la validez de la regla de cuantización corregida que la trayectoria pase suficientemente lejos de los puntos singulares de la función $\epsilon(\mathbf{k})$ (incluyendo los puntos de ramificación complejos). También es necesario que la condición cuasiclásica se satisfaga en todos los puntos cercanos a la trayectoria y en particular que la proyección xy de la velocidad $\partial\epsilon/\partial\mathbf{k}$ no sea cero.[†] Finalmente debe recordarse que el hamiltoniano (56.7) sobre el que se basa toda la deducción, es a su vez aproximado. Si la red tiene un centro de inversión, las correcciones al hamiltoniano son cuadráticas respecto al campo y no influyen en la condición (58.7), pero si no existe centro de inversión son lineales en \mathbf{H} ; en este último caso el término de corrección $\frac{1}{2}$ en (58.7) carece de significado, puesto que la naturaleza aproximada del hamiltoniano implica un error del mismo orden.[‡]

El intervalo $\Delta\epsilon$ entre dos niveles sucesivos corresponde a un cambio de una unidad en el número n grande. Por consiguiente, está determinado por

$$\Delta S = (\partial S / \partial \epsilon) \Delta \epsilon = 2\pi |e| H / \hbar c. \quad (58.8)$$

Con la frecuencia clásica ω_H del movimiento periódico dada en (57.7) tenemos

$$\Delta \epsilon = \hbar \omega_H. \quad (58.9)$$

Debe resaltarse que la frecuencia ω_H es a su vez función de ϵ (y de k_z). Por ello los niveles sucesivos de energía ϵ_n (para un k_z dado) son estrictamente equidistantes como en el caso de los electrones libres (en donde es constante ω_H).

El hecho de que los niveles de energía sean independientes de la magnitud K_z que se conserva significa que son degenerados (como ocurre en el caso de los electrones libres en un campo magnético; ver MC, § 112). Si imaginamos una red con un volumen grande pero finito V , el grado de degeneración es finito. El número de estados en el intervalo dk_z con un valor dado de n es $V\Delta S \cdot dk_z/(2\pi)^3$, siendo ΔS el área en el plano $k_z = \text{constante}$ comprendida entre trayectorias con números cuánticos n y $n + 1$. Esta área viene dada por (58.8) y así encontramos para el número requerido de estados

$$\frac{V dk_z}{(2\pi)^2} \frac{|e| H}{c \hbar}, \quad (58.10)$$

el mismo que en el caso de los electrones libres.

[†] Cerca de los puntos de aproximación anómala de dos trayectorias, esta condición coincide con el requisito de que sea pequeña la probabilidad de ruptura magnética.

[‡] En el caso de electrones libres (ver la nota a § 57) la condición (58.7) da

$$\epsilon = \hbar\omega_B(n + \frac{1}{2}) + \hbar^2 k_z^2 / 2m, \quad \omega_B = |e| H / mc$$

de acuerdo con la fórmula familiar de Landau para un electrón libre en un campo magnético (MC, § 112).

La razón intuitiva para la degeneración de niveles en un campo magnético es que la energía es independiente de la posición espacial del centro de la órbita de Larmor del electrón. En el caso de un electrón libre de degeneración es exacta, pero para un electrón en una red únicamente puede ser aproximada: debido a la presencia de un campo eléctrico no uniforme (periódico), no son equivalentes las diferentes posiciones del centro de la órbita en la celda unidad de la red. Esto debe originar cierto desdoblamiento de los niveles de Landau.

El tener en cuenta el spin del electrón hace que cada nivel se desdoble en dos componentes; si se desprecia el acoplamiento spin-órbita, estos componentes están separados (como los correspondientes a un electrón libre) por un intervalo constante $2\beta H$, siendo β el magnetón de Bohr:

$$\varepsilon_{no}(k_z) = \varepsilon_n(k_z) + \sigma\beta H, \quad \sigma = \pm 1. \quad (58.11)$$

Se tiene la misma situación cuando no se desprecia la interacción spin-órbita, si el cristal tiene un centro de inversión. En este caso, los estados del electrón en ausencia de campo son degenerados respecto al spin y el campo magnético elimina esta degeneración. Como resultado se obtiene la misma fórmula (58.11) sustituyendo β por $\beta\xi_n(k_z)$ en donde $\xi_n(k_z)$ representa la variación del momento magnético del electrón.

§ 59. Tensor de masa efectiva del electrón en la red

Consideremos un punto $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ en el espacio \mathbf{k} en donde la energía del electrón $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ tiene un extremo; por ejemplo, los puntos correspondientes a la parte superior e inferior de una banda. Si en este punto no existe degeneración (aparte de la posible degeneración de Kramers respecto al spin; ver el final de § 55), la función $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ cerca de él tiene un desarrollo regular en potencias de la diferencia $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$. Los primeros términos de este desarrollo son cuadráticos:

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_s(\mathbf{k}_0) + \frac{1}{2} \hbar^2 m^{-1} i_k q_i q_k. \quad (59.1)$$

El tensor m_{ik} , inverso del tensor de los coeficientes m^{-1}_{ik} en (59.1), se denomina *tensor de masa efectiva* del electrón en la red. Veremos cómo puede expresarse este tensor en función de elementos de matriz respecto a las funciones de Bloch $\psi_{s\mathbf{k}}$ en el punto \mathbf{k}_0 .

Si se desprecia la interacción spin-órbita, el hamiltoniano del electrón tiene la forma (56.1). Sustituyamos en la ecuación de Schrödinger con este hamiltoniano la función de onda en la forma

$$\psi_{s\mathbf{k}} = e^{i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} u_{s\mathbf{k}} \equiv e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \phi_{s\mathbf{k}}. \quad (59.2)$$

La ecuación se convierte entonces en

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) + \left[\frac{\hbar}{m} \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right] \right\} \phi_{sk} = \varepsilon_s(\mathbf{k}) \phi_{sk}, \quad (59.3)$$

en donde $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ es el operador del impulso real.

En la proximidad del punto $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, el vector \mathbf{q} es una magnitud pequeña y puede considerarse la expresión entre corchetes de (59.3) como el operador de una perturbación. En la aproximación de orden cero, cuando $\mathbf{q} = 0$, las funciones ϕ_{sk} son las mismas que las ψ_{sk_0} . Por tanto, la teoría usual de perturbaciones nos permite expresar la corrección a la energía en función de los elementos de matriz respecto a estas funciones.

Como \mathbf{k}_0 es un punto extremal, no existe corrección lineal a \mathbf{q} . Esto significa que los elementos diagonales de la matriz son

$$\langle sk_0 | \mathbf{p} | sk_0 \rangle = 0. \quad (59.4)$$

Para determinar la corrección cuadrática en \mathbf{q} , debemos tener en cuenta el término q^2 del operador de perturbación en la teoría de perturbaciones de primer orden y el término \mathbf{q} en el segundo orden. Esto conduce a la fórmula (59.1) para $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ en donde

$$m^{-1}_{ik} = \frac{\delta_{ik}}{m} + \frac{1}{m^2} \sum'_{s'} \frac{(p_i)_{ss'}(p_k)_{s's} + (p_k)_{ss'}(p_i)_{s's}}{\varepsilon_{s'}(\mathbf{k}_0) - \varepsilon_s(\mathbf{k}_0)}; \quad (59.5)$$

la suma se realiza para todo $s' \neq s$.[†] Para simplificar la notación, se escriben de ahora en adelante los elementos de matriz sin el subíndice diagonal \mathbf{k}_0 : $p_{ss'} \equiv \equiv \langle sk_0 | \mathbf{p} | s'k_0 \rangle$. Cuando existen bandas cerradas (es decir, pequeñas diferencias $\varepsilon_{s'} - \varepsilon_s$), el segundo término de (59.5) puede ser grande en comparación con el primero y las masas efectivas son entonces pequeñas en comparación con m .

A continuación supongamos que se aplica al cristal un campo magnético uniforme \mathbf{H} . De acuerdo con (56.7) se obtiene el hamiltoniano que actúa sobre funciones de los cuasiimpulsos generalizados \mathbf{Q} sustituyendo en (59.1) a \mathbf{q} por el operador

$$\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{Q} - e\hat{\mathbf{A}}/\hbar c, \quad \hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} \mathbf{H} \times i \partial / \partial \mathbf{Q}. \quad (59.6)$$

Como es natural, el hamiltoniano resultante

$$\hat{H}_s^{(0)} = \varepsilon_s(\mathbf{k}_0) + \frac{1}{2} \hbar^2 m^{-1}_{ik} \hat{q}_i \hat{q}_k \quad (59.7)$$

[†] La suma respecto a \mathbf{k}' no aparece, puesto que de acuerdo con (55.15) el impulso $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ sólo tiene elementos de matriz diagonales en \mathbf{k} , de modo que todos los estados intermedios pertenecen al mismo cuasiimpulso \mathbf{k}_0 .

es válido únicamente en el mismo intervalo de energías que la fórmula original (59.1). Esto significa que, igual que la condición (56.3) para que sea débil el campo, se supone que los niveles de Landau considerados no son demasiado elevados. En este sentido han de considerarse como pequeñas las magnitudes \mathbf{q} y \mathbf{Q} ; el aumento del potencial realiza el efecto de que, incluso en un campo débil, no podemos suponer que \mathbf{A} sea pequeño en comparación con \mathbf{Q} .

Los términos siguientes del hamiltoniano después de (59.7) contienen el campo \mathbf{H} en la forma «pura» (es decir, sin que le acompañen los operadores $\partial/\partial\mathbf{Q}$). Dichos términos no pueden hallarse de forma simple mediante consideraciones de invariancia «gauge». Determinemos el primero de estos términos, que es lineal en \mathbf{H} . Debido a la pequeñez relativa de esta corrección, podemos calcularla con $\mathbf{Q}=0$.

Investigaremos en primer lugar este problema sin la interacción spin-órbita. El término de interés, lineal en \mathbf{H} , sólo puede proceder del término lineal en \mathbf{A} del hamiltoniano exacto original (56.2) del electrón, es decir, promediando respecto a la función de onda ψ_{sk_0} la expresión

$$-(e/2mc)(\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = -(e/mc)\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}; \quad (59.8)$$

la igualdad depende de la transformación «gauge» ya escogida, con $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$. Esto añade al hamiltoniano (59.7) el término

$$H_s^{(1)} = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{H}, \quad (59.9)$$

en donde

$$\mathbf{M} = (e/2mc)\langle sk_0 | \mathbf{r} \times \mathbf{p} | sk_0 \rangle \quad (59.10)$$

es precisamente el valor medio del momento magnético del electrón en el estado sk_0 . Debemos resaltar que la corrección (59.9) puede adicionarse al hamiltoniano (59.7) sin ningún temor de que su influencia ya se haya tenido parcialmente en cuenta por la sustitución (59.6): los términos lineales en \mathbf{H} en (59.7) no aparecen cuando $\mathbf{Q}=0$.

Desarrollemos la expresión (59.10) mediante la regla de multiplicación de matrices, utilizando el hecho de que según (59.4) \mathbf{p} no tiene elementos diagonales:

$$M_x = \frac{e}{2mc} \sum'_s [(\Omega_y)_{ss'}(p_z)_{s's} - (\Omega_z)_{ss'}(p_y)_{s's}]$$

(y análogamente para M_y y M_z); la corrección al hamiltoniano (59.7) se expresa, como debería ser, en función de los elementos de matriz del operador $\boldsymbol{\Omega}$. Utilizando la relación

$$\Omega_{s's} = \mathbf{p}_{s's}/i(\varepsilon_{s'} - \varepsilon_s),$$

podemos poner \mathbf{M} en la forma

$$M_x = \frac{ie}{2mc} \sum'_{s'} \frac{(p_z)_{ss'}(p_y)_{s's} - (p_y)_{ss'}(p_z)_{s's}}{\varepsilon_{s'}(\mathbf{k}_0) - \varepsilon_s(\mathbf{k}_0)}, \dots \quad (59.11)$$

Si el cristal tiene un centro de inversión, \mathbf{M} es cero y, por consiguiente, lo mismo le ocurre a la corrección total (59.9): si se produce la inversión simultánea temporal y espacial, permanece sin variar el estado del electrón (si se ignora el spin) y por tanto resulta sin cambio el segundo miembro de (59.11), mientras que el momento magnético debe cambiar de signo bajo esta transformación.

Incluyamos ahora la interacción spin-órbita en el cristal sumando el hamiltoniano (56.11) el término de spin-órbita \hat{H}_{sl} de (55.17). Esto modifica el término lineal en \mathbf{q} de la ecuación (59.3): se sustituye el operador $\hat{\mathbf{p}}$ de este término por

$$\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} + (\hbar^2/4m^2c^2) \boldsymbol{\sigma} \times \nabla U. \quad (59.12)$$

El operador $\hat{\pi}$ tiene un significado físico sencillo: al comutar directamente el hamiltoniano (incluyendo \hat{H}_{sl}) con \mathbf{r} , en ausencia de un campo magnético, se tiene

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{\pi}/m. \quad (59.13)$$

Análogamente en presencia de un campo magnético y haciendo la sustitución usual $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c$ en el hamiltoniano original (incluyendo \hat{H}_{sl}) vemos que el término lineal en \mathbf{A} tiene la forma $-e\hat{\pi} \cdot \mathbf{A}/mc$, que difiere de (59.8) únicamente en que se ha sustituido $\hat{\mathbf{p}}$ por $\hat{\pi}$. El momento magnético (59.11) debe suplementarse con el momento magnético del spin del electrón libre, lo que da

$$M_x = \beta \langle s\mathbf{k}_0 | \sigma_x | s\mathbf{k}_0 \rangle + \frac{ie}{2mc} \sum'_{s'} \frac{(\pi_z)_{ss'}(\pi_y)_{s's} - (\pi_y)_{ss'}(\pi_z)_{s's}}{\varepsilon_{s'} - \varepsilon_s}. \quad (59.14)$$

Con la inclusión de la interacción spin-órbita, el segundo término de esta expresión no es nulo ni aunque tenga centro de inversión el cristal: la inversión temporal y espacial simultánea origina un estado con sentido del spin opuesto de modo que la expresión completa (59.14) debe reducirse al valor medio del operador $\beta\sigma_i\xi_{ik}(\varphi)$, si cambia de signo bajo esta transformación; cf. (56.12).

Calculemos el tensor ξ_{ik} para el caso en el que pueda considerarse como una perturbación la interacción spin-órbita.[†] Podemos volver a escribir (55.17) como

$$\hat{H}_{sl} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\chi}, \quad \hat{\chi} = (i\hbar^2/4m^2c^2) \nabla U \times \nabla. \quad (59.15)$$

[†] La expresión (55.17) para \hat{H}_{sl} es el primer término de un desarrollo en potencias del cociente relativista $(v/c)^2$ y, por consiguiente, es siempre en cierto sentido pequeña. Sin embargo, su pequeño valor resulta carecer de importancia para la aplicación de la teoría de perturbaciones en una banda particular. De aquí que \hat{H}_{sl} , en el problema que estamos considerando, no puede considerarse siempre como una pequeña perturbación.

Considerando a (59.9) y (59.15) como una perturbación, hallamos la corrección a la energía con la teoría de perturbaciones de segundo orden, reteniendo únicamente los términos cruzados de (59.9) y (59.15). Esta corrección (que es todavía un operador, una matriz respecto a las variables de spin) tiene la forma (56.12) vieniendo dado el tensor ξ_{ik} por

$$\xi_{ik} = \delta_{ik} + \frac{1}{2} \sum_{s'} \frac{(\chi_i)_{ss'}(L_k)_{s's} + (L_k)_{ss'}(\chi_i)_{s's}}{\varepsilon_{s'} - \varepsilon_s} \quad (59.16)$$

en donde $\hbar\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$.

El análisis anterior está relacionado con estados que no son degenerados (excepto por lo que se refiere al spin). Si existe degeneración en $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, la energía ha de determinarse estableciendo la ecuación secular que tiene en cuenta la perturbación [el corchete de (59.3)] hasta los términos de segundo orden, es decir, de acuerdo con *MC* (39.4). Las propiedades de la ecuación secular resultante dependen de la simetría en el punto \mathbf{k}_0 . Volveremos a este tema en § 68.

PROBLEMA

Hallar los niveles energéticos cuasimáximos para una partícula con la relación de dispersión cuadrática (59.1) en un campo magnético que actúa en una dirección cualquiera.

SOLUCIÓN. Reduzcamos el tensor m_{ik} a la forma diagonal y midamos la energía y el impulso desde un punto extremal, por ejemplo el mínimo. Entonces

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \hbar^2 \left(\frac{k_1^2}{m_1} + \frac{k_2^2}{m_2} + \frac{k_3^2}{m_3} \right), \quad (1)$$

en donde m_1 , m_2 y m_3 son los valores principales del tensor m_{ik} (y son magnitudes positivas). Sea \mathbf{n} un vector unidad en la dirección del campo \mathbf{H} ; entonces

$$k_z = \mathbf{n} \cdot \mathbf{k} = n_1 k_1 + n_2 k_2 + n_3 k_3, \quad (2)$$

en donde n_1 , n_2 y n_3 son los cosenos directores del campo respecto a los ejes principales del tensor m_{ik} . Tenemos que hallar el área S de la parte del plano (2) que cae dentro del elipsoide (1); puede escribirse como la integral

$$S = \int \delta(\mathbf{n} \cdot \mathbf{k} - k_z) d^3 k, \quad (3)$$

extendida al volumen del elipsoide (1).† Cambiando de variables $\hbar k_i = (2\varepsilon m_i)^{1/2} q_i$, se lleva la integral a la forma

$$S = (2\varepsilon)^{3/2} \hbar^{-3} (m_1 m_2 m_3)^{1/2} \int \delta(\mathbf{v} \cdot \mathbf{q} - k_z) d^3 q,$$

† Sea $f(x, y, z) = \text{constante}$ una familia de superficies que ocupan un determinado volumen. La distancia dl entre dos de estas superficies, infinitamente próximas entre sí, es $dl = df / |\nabla f|$, y el volumen entre ellas es $dV = S(f)dl$, en donde $S(f)$ es el área de la superficie que tiene un determinado valor de f . Multiplicando la ecuación $S(f)df = |\nabla f| dV$ por la función delta $\delta(f)$ e integrando respecto al volumen y df , encontramos que el área de la superficie $f(x, y, z) = 0$ es $S(0) = \int |\nabla f| \delta(f) d^3 x$. En nuestro caso $|\nabla f| = 1$ y esto da la ecuación (3).

en donde el vector \mathbf{v} en el espacio \mathbf{q} tiene los componentes $v_i = (2\epsilon m_i)^{1/2} n_i/\hbar$ y la integración se extiende al volumen de la esfera $\mathbf{q}^2 = 1$. La integración se lleva a cabo fácilmente en coordenadas polares cilíndricas con el eje a lo largo de \mathbf{v} y se tiene

$$S(\epsilon, k_z) = (2\pi/\hbar^2) m_{||} (\epsilon - \hbar^2 k_z^2 / 2m_{||}),$$

en donde

$$\begin{aligned} m_{||} &= m_1 n_1^2 + m_2 n_2^2 + m_3 n_3^2, \\ m_{\perp} &= (m_1 m_2 m_3 / m_{||})^{1/2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Sustituyendo en (58.7) se tienen los niveles energéticos

$$\epsilon_n(k_z) = \frac{|e| \hbar H}{m_{\perp} c} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{||}}. \quad (5)$$

§ 60. Simetría de los estados del electrón en una red dentro de un campo magnético

En esta sección consideraremos las propiedades generales exactas de la simetría de traslación de las funciones de onda de un electrón de Bloch en un campo magnético, que no dependen de ninguna aproximación (tal como la condición para que el campo sea débil o la condición cuasiclásica).

La aplicación de un campo magnético uniforme no influye sobre la simetría de traslación del sistema, que permanece espacialmente periódica. No obstante, existe una característica distintiva que consiste en que el hamiltoniano del electrón (56.2) no pierde su simetría debido a que en él no interviene la intensidad del campo \mathbf{H} constante sino el potencial vector $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ que depende de las coordenadas y es periódico.

La no invariancia del hamiltoniano complica naturalmente la ley de transformación para las funciones de onda bajo la traslación. Tomemos el potencial vector del campo uniforme en la transformación «gauge»

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{H} \times \mathbf{r}, \quad (60.1)$$

y sea $\psi(\mathbf{r})$ una función propia del hamiltoniano $\hat{H}(\mathbf{r})$. Bajo la traslación $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$ (en donde \mathbf{a} es uno cualquiera de los vectores de la red básica), esta función se transforma en $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ y es entonces una función propia del hamiltoniano $\hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ que no es el mismo que $\hat{H}(\mathbf{r})$ porque ha cambiado el potencial vector:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \mathbf{H} \times \mathbf{a}.$$

Para hallar la ley de transformación requerida debemos volver al hamiltoniano original mediante la transformación «gauge»

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f, \quad f = -\frac{1}{2} \mathbf{H} \times \mathbf{a} \cdot \mathbf{r}.$$

La función de onda se transforma entonces de acuerdo con (56.4); $\psi \rightarrow \psi \exp(ief/\hbar c)$. Designando el resultado de todas estas operaciones por $\hat{T}_a \psi(\mathbf{r})$, se halla así

$$\hat{T}_a \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \exp\left(\frac{1}{2} i \mathbf{r} \cdot \mathbf{h} \times \mathbf{a}\right), \quad (60.2)$$

en donde $\mathbf{h} = |e| \mathbf{H}/\hbar c$; \hat{T}_a se denomina operador de *traslación magnético*. Si $\psi(\mathbf{r})$ es una solución de la ecuación de Schrödinger $\hat{H}(\mathbf{r})\psi = \varepsilon\psi$, entonces (60.2) es una solución de esta ecuación para la misma energía ε (R. E. Peierls 1933). A partir de la definición se encuentra fácilmente que

$$\hat{T}_a \hat{T}_{a'} = \hat{T}_{a+a'} \omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}'), \quad \omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}') = \exp\left(-\frac{1}{2} i \mathbf{h} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{a}'\right). \quad (60.3)$$

Cuando se intercambian \mathbf{a} y \mathbf{a}' , cambia de signo el exponente del factor $\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}')$ y, por tanto, los operadores \hat{T}_a y $\hat{T}_{a'}$ en general no se comutan:

$$\hat{T}_a \hat{T}_{a'} = \hat{T}_{a'} \hat{T}_a \exp(-i \mathbf{h} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{a}'). \quad (60.4)$$

Así pues, el producto de dos operadores \hat{T}_a y $\hat{T}_{a'}$ difieren generalmente en un factor de fase del operador $\hat{T}_{a+a'}$. En términos matemáticos, esto significa que los operadores \hat{T}_a dan una representación proyectiva y no ordinaria del grupo de traslación; la base de estas representaciones está formada por las funciones de onda de los estados estacionarios de un electrón de Bloch en un campo magnético.† En consecuencia la clasificación de los niveles de energía debe basarse sobre las representaciones proyectivas irreducibles del grupo de traslación, del mismo modo que, en ausencia de campo, se basan en las representaciones irreducibles ordinarias de este grupo.

El grupo de traslación es abeliano (todos sus elementos se comutan) y, por tanto, todas sus representaciones ordinarias irreducibles son monodimensionales. La función base ψ de cada representación está simplemente multiplicada por un factor de fase bajo la traslación; en el caso de dos traslaciones sucesivas, este factor debe ser igual al producto de factores de cada traslación por separado. Esto significa que

$$\hat{T}_a \psi = e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}} \psi,$$

† Ya han aparecido representaciones proyectivas de grupos en la parte 1, § 134. Las representaciones proyectivas de un grupo G son aquellas dadas por operadores \hat{G} tales que las relaciones entre ellos son las mismas que las existentes entre los elementos correspondientes de G excepto únicamente en unos factores de fase: si $G_1 G_2 = G_3$ tenemos para los operadores $\hat{G}_1 \hat{G}_2 = \omega_{12} \hat{G}_3$, en donde ω_{12} únicamente necesita tener un módulo unidad.

en donde \mathbf{k} es un vector constante, el cuasiimpulso del electrón, que es el parámetro que clasifica las representaciones irreducibles.

Puede hacerse una clasificación completa de las representaciones proyectivas irreducibles del grupo de traslación (E. Brown 1964, J. Zak 1964) si el campo magnético satisface a la condición

$$\mathbf{h} = 4\pi p \mathbf{a}_3 / qv, \quad (60.5)$$

en donde p y q son dos enteros cualesquiera primos entre sí y \mathbf{a}_3 es uno de los tres vectores básicos \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 de la red escogidos arbitrariamente; $v = \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3$ en el volumen de la celda unidad de la red. Así pues, el campo magnético debe tener la misma dirección que uno de los vectores de la red y $hv/4\pi a_3$ debe ser un número racional. Multiplicando (60.5) por $\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2$ podemos escribir también esta condición como

$$\mathbf{h} \cdot \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 = 4\pi p/q. \quad (60.6)$$

Para clasificar las representaciones proyectivas irreducibles del grupo de traslación es importante señalar que podemos seleccionar un subgrupo dentro de este grupo (*el subgrupo magnético*) respecto al cual la representación es ordinaria y no proyectiva. Con la condición (60.6) dicho subgrupo es el conjunto de traslaciones de la forma

$$\mathbf{a}_m = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 q \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (60.7)$$

con coeficientes enteros n_1 , n_2 y n_3 . En efecto, cuando el vector \mathbf{h} tiene la dirección de \mathbf{a}_3 y satisface la condición (60.6) para todas las traslaciones de esta forma, el exponente de (60.3) es cero o un múltiplo de 2π , de modo que todos los factores $\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}') = 1$.[†] El conjunto de traslaciones (60.7) forman una red con vectores básicos \mathbf{a}_1 , $q\mathbf{a}_2$, \mathbf{a}_3 que podemos denominar la *red magnética*. La red recíproca magnética correspondiente tiene vectores básicos \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2/q , \mathbf{b}_3 en donde \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 , \mathbf{b}_3 son vectores básicos de la red recíproca original.

Las representaciones ordinarias irreducibles del subgrupo magnético, como las del grupo de traslación completo, son monodimensionales; se caracterizan por los vectores de onda \mathbf{K} (cuasiimpulsos), con la propiedad de que todos los valores no equivalentes de los mismos están dentro de una celda de la red recíproca magnética.

[†] La selección del subgrupo magnético no es en general única: en lugar de (60.7) podemos tomar cualquier conjunto de traslaciones de la forma $\mathbf{a}_m = n_1 q_1 \mathbf{a}_1 + n_2 q_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ en donde q_1 y q_2 son enteros tales que $q_1 q_2 = q$.

Sea $\psi^{(1)}$ la función base de una de estas representaciones con cuasiimpulso $\mathbf{k}^{(1)} \equiv \mathbf{K}$. Para esta función

$$\hat{T}_{\mathbf{a}_m} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}^{(1)} \cdot \mathbf{a}_m} \psi^{(1)}(\mathbf{r}). \quad (60.8)$$

En una traslación a lo largo del vector básico \mathbf{a}_2 (que no está en el subgrupo magnético) obtenemos a partir de $\psi^{(1)}$ una función $\psi^{(2)}$ con un cuasiimpulso diferente. Para determinar este último, utilizaremos (60.4) y (60.8) para escribir

$$\begin{aligned}\hat{T}_{\mathbf{a}_m} \psi^{(2)} &= \hat{T}_{\mathbf{a}_m} \hat{T}_{\mathbf{a}_2} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) \\ &= \exp(-i\mathbf{h} \cdot \mathbf{a}_m \times \mathbf{a}_2) \hat{T}_{\mathbf{a}_2} \hat{T}_{\mathbf{a}_m} \psi^{(1)}(\mathbf{r}) \\ &= \exp\{-i\mathbf{a}_m \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{h} + i\mathbf{a}_m \cdot \mathbf{k}^{(1)}\} \hat{T}_{\mathbf{a}_2} \psi^{(1)}(\mathbf{r})\end{aligned}$$

o, finalmente,

$$\hat{T}_{\mathbf{a}_m} \psi^{(2)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}^{(2)} \cdot \mathbf{a}_m} \psi^{(2)}(\mathbf{r}),$$

en donde

$$\mathbf{k}^{(2)} = \mathbf{k}^{(1)} - \mathbf{a}_2 \times \mathbf{h} = \mathbf{K} - 2(p/q) \mathbf{b}_1;$$

en la última ecuación hemos sustituido (60.5) y el vector de la red recíproca $\mathbf{b}_1 = 2\pi\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3/\nu$. A continuación debemos considerar separadamente los casos par o impar de q . †

Supongamos q impar. Repitiendo $q - 2$ veces más la traslación a lo largo de \mathbf{a}_2 , obtenemos un total de q funciones diferentes con cuasiimpulsos

$$\mathbf{k}^{(1)} = \mathbf{K}, \quad \mathbf{k}^{(2)} = \mathbf{K} - 2(p/q) \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{k}^{(q)} = \mathbf{K} - 2 \frac{p(q-1)}{q} \mathbf{b}_1. \quad (60.9)$$

Restándole un múltiplo entero apropiado del vector \mathbf{b}_1 , estos valores se convierten (en cierto orden) a los valores

$$\mathbf{k} = \mathbf{K}, \quad \mathbf{K} + \mathbf{b}_1/q, \quad \mathbf{K} + 2\mathbf{b}_1/q, \dots, \mathbf{K} + (q-1)\mathbf{b}_1/q. \quad (60.10)$$

Estas q funciones forman una representación proyectiva irreducible q -dimensional del grupo de traslación. Obtenemos todas las representaciones no equivalentes cuando \mathbf{K} toma valores en una celda con aristas $\mathbf{b}_1/q, \mathbf{b}_2/q, \mathbf{b}_3$; los cuasiimpulsos $\mathbf{k}^{(1)}, \mathbf{k}^{(2)}, \dots$, toman entonces valores en una celda con lados $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2/q, \mathbf{b}_3$.

† Cuando $q = 1$, el subgrupo magnético coincide con el grupo completo de traslación. Así pues, si \mathbf{h} es un múltiplo entero de $4\pi\mathbf{a}_3/\nu$, las representaciones proyectivas irreducibles del grupo de traslación son las mismas que las representaciones irreducibles ordinarias y los estados de los electrones se clasifican del mismo modo que en ausencia del campo.

Supongamos ahora que q es par. Entonces en la secuencia (60.9), el valor de orden $(\frac{1}{2}q + 1)$, igual a $\mathbf{K} - p\mathbf{b}_1$, difiere de \mathbf{K} únicamente en un múltiplo entero del vector de la red recíproca \mathbf{b}_1 . Así pues, existen únicamente $\frac{1}{2}q$ valores de \mathbf{k} no equivalentes, que vienen dados por (60.10) sustituyendo q por $\frac{1}{2}q$. Por tanto en este caso las representaciones irreducibles son $\frac{1}{2}q$ -dimensionales y \mathbf{K} toma valores en una celda con aristas $2\mathbf{b}_1/q, \mathbf{b}_2/q, \mathbf{b}_3$.

Estos resultados nos permiten formular la siguiente conclusión acerca de la forma en que varía el espectro energético del electrón en la red cuando se le aplica un campo magnético que satisface la condición (60.5). En ausencia del campo, el espectro se compone de bandas discretas de energía, en cada una de las cuales su energía $\epsilon(\mathbf{k})$ es función del cuasiimpulso, el cual toma valores en una red recíproca. Cuando se aplica el campo, la banda se desdobra en q subbandas, en cada una de las cuales todos los niveles de energía son q veces o $\frac{1}{2}q$ veces degenerados, según que q sea impar o par. La energía en la subbanda puede expresarse como una función $\epsilon(\mathbf{K})$ del vector \mathbf{K} , en el que este último toma valores en $1/q^2$ o $2/q^2$ de la celda de la red recíproca, según q sea impar o par.

La descripción dada anteriormente en un cierto sentido extremadamente sensible al módulo y dirección del campo magnético. En efecto, existen valores de \mathbf{H} arbitrariamente próximos al valor que satisface (60.5) con ciertos valores de p y q , que satisfacen la misma condición con un valor mucho más elevado de q , de modo que, mediante un cambio infinitesimal del campo, puede crecer indefinidamente el número de subbandas. Sin embargo, debe resaltarse que esto no implica una inestabilidad análoga en las propiedades físicas observables. Éstas quedan determinadas no por la estructura específica de las bandas, sino por la distribución del número de estados entre intervalos de energía pequeños pero finitos y esta distribución sólo cambia ligeramente con el campo, debido a que lo que varía notablemente no es la energía de los estados sino únicamente su clasificación como resultado del intervalo de definición del cuasiimpulso.

§ 61. Espectros electrónicos de los metales normales

En los cristales reales de metales normales (no superconductores), los electrones forman un líquido de Fermi cuántico del tipo descrito en el capítulo 1. No obstante, aparecen ciertas diferencias porque este líquido no es isótropo «libre» sino un líquido en el campo periódico anisótropo de la red.

Del mismo modo que el espectro de energía de un líquido de Fermi libre tiene una estructura semejante a la de un gas ideal de Fermi, así el espectro del líquido de Fermi de electrones en un metal tiene una estructura semejante a la de un «gas en la red» ideal. La aparición del cuasiimpulso como una magnitud que se conserva se debe únicamente a la periodicidad espacial del sistema (igual que la conservación

del impulso real es una consecuencia de la completa homogeneidad espacial). Por consiguiente, resulta natural que se apliquen las propiedades enumeradas en § 55 a la clasificación de niveles en el espectro de un líquido de electrones en un metal, representando ahora las cuasipartículas el papel de las partículas (electrones).

En el cero absoluto, las partículas de un gas de Fermi ideal en un campo periódico ocupan todos los niveles más bajos, con energías ε hasta un valor límite ε_F (que es igual a su potencial químico μ a $T = 0$), determinado por la condición de que el número de estados con $\varepsilon \leq \varepsilon_F$ sea igual al número total de electrones. Las bandas de energía en las que $\varepsilon_s(\mathbf{k}) < \varepsilon_F$ para todo \mathbf{k} están completamente ocupadas; aquellas con $\varepsilon_s(\mathbf{k}) > \varepsilon_F$ están vacías y aquellas en las que tiene una solución la ecuación

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_F \quad (61.1)$$

están ocupadas parcialmente. La ecuación (61.1) determina en el espacio \mathbf{k} la superficie límite de Fermi que (para cada banda) separa los estados llenos de los vacíos.

Análogamente, en un metal real existe una superficie en el espacio \mathbf{k} que separa la región de los estados de cuasipartícula que están llenos (a $T = 0$) de los estados sin ocupar; a un lado de dicha superficie las energías de las cuasipartículas $\varepsilon > \varepsilon_F$ y al otro lado $\varepsilon < \varepsilon_F$. Sin embargo, el concepto de cuasipartículas en un líquido de Fermi tiene sólo un significado real cerca de la superficie de Fermi, en donde el decaimiento de las excitaciones elementales es relativamente ligero (ver § 1). De aquí que la idea de bandas de energía ocupadas que aparece en la descripción del espectro de un gas de Fermi ideal no tiene un significado literal en el líquido electrónico real.

Las cuasipartículas próximas a la superficie de Fermi se denominan *electrones de conducción*. Su energía es en general una función lineal del cuasiimpulso; análogamente a (1.12), tenemos

$$\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_F \approx \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) \cdot \mathbf{v}_F, \quad (61.2)$$

en donde \mathbf{k}_F es un punto de la superficie de Fermi y

$$\hbar\mathbf{v}_F \approx (\partial\varepsilon/\partial\mathbf{k})_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_F} \quad (61.3)$$

da la velocidad de los electrones de conducción en dicho punto.[†]

Cerca de la superficie de Fermi debe existir también una «zona de transición» en la distribución de los electrones de conducción a temperaturas no nulas. De

[†] Como es natural al líquido de electrones de una red cristalina no se le aplican las fórmulas como la (2.11) para la masa efectiva, deducida en § 2 para el líquido de Fermi «libre» mediante consideraciones de invariancia galileana.

aquí se deduce que para que sea válida la teoría del líquido de Fermi ha de cumplirse la condición $T \ll \hbar k_F v_F$, en donde k_F y v_F son los valores característicos que corresponden a las dimensiones de la superficie de Fermi y a la velocidad en ella. Los valores de k_F son normalmente del mismo orden de magnitud que los de la celda de la red recíproca, de modo que $k_F \sim 1/a$; se presenta una excepción en el caso de los semimetales (ver más adelante). Poniendo también como valor estimado $v_F \sim \hbar k_F/m$, se obtiene la condición $T \ll 10^4\text{--}10^5$ K, que siempre se satisface en la práctica.

Casi todos los metales tienen redes cristalinas con un centro de inversión. De acuerdo con el estudio realizado al final de § 55, todos los niveles energéticos de los electrones de conducción (con k dado) son doblemente degenerados respecto al spin (los metales a que se refería no eran ni ferromagnéticos ni antiferromagnéticos).

La forma y configuración de la superficie de Fermi son características importantes de un metal determinado cualquiera. En los diversos metales son en general muy diferentes y complicados. La superficie de Fermi puede estar compuesta por varias hojas separadas que pueden estar simple o múltiplemente conectadas, abiertas o cerradas; cf. la discusión sobre las superficies de energía constante en § 56.

Las hojas cerradas de la superficie de Fermi pueden dividirse en dos clases, de acuerdo con la forma que den a los límites de las regiones de estados llenos ($a T = 0$) o vacíos de cuasipartículas (en el primer caso $\varepsilon < \varepsilon_F$ dentro de la cavidad, en el segundo caso $\varepsilon > \varepsilon_F$). Sin embargo, ambos casos pueden describirse de manera semejante si suponemos en el segundo caso que la cavidad «vacía» está llena con «cuasihuecos»; se describe entonces la transición del sistema al estado excitado como una transición de cuasihuecos desde el interior hacia el exterior de la superficie de Fermi. La propia superficie de Fermi se dice entonces que es del *tipo hueco* en contraste con el *tipo electrón* del primer caso.† La diferencia física entre los dos tipos de cuasipartículas (electrones y huecos) se ve claramente cuando se mueven en campos externos. Por ejemplo, todas las secciones de una superficie de Fermi tipo hueco (o tipo electrón), que determinan las trayectorias cuasiclásicas en el caso del movimiento en el interior de un campo magnético, son del tipo hueco (o electrón) según se definieron en § 57.

En un líquido de Fermi «libre» isótropo, como el considerado en § 1, la superficie de Fermi era una esfera cuyo radio se determinaba mediante la densidad del líquido de acuerdo con el teorema de Landau (1.1). En el caso del líquido de electrones en un metal es válida una relación análoga, pero la naturaleza específica de las propiedades que se derivan de la periodicidad de la red originan algunos cambios en su formación.

† Sin embargo, debemos resaltar para evitar malas interpretaciones que el término «hueco» no se utiliza aquí en el mismo sentido que en el método alternativo (ver al final de § 1) para describir el espectro de un líquido de Fermi; en aquel caso los huecos eran simplemente lugares vacíos formados en la región llena por la excitación del sistema.

Se expresa de modo conveniente el número de electrones en el metal por celda de red unidad. Sea n el número total de electrones de los átomos de una celda unidad de la red y τ_F el volumen total por celda de la red recíproca en el lado de la superficie de Fermi que se ve ocupado (es decir, en la parte en que $\epsilon < \epsilon_F$). La palabra «total» significa aquí que si las regiones ocupadas correspondientes a hojas diferentes de la superficie de Fermi se solapan parcialmente, todavía deben combinarse con independencia unas de otras. El volumen τ_F se medirá en unidades del volumen propio de la celda de la red recíproca y el punto que acabamos de señalar sobre las regiones que solapan significa que el τ_F así definido puede superar a la unidad.

La proposición exigida (*teorema de Luttinger*) que ha de sustituir al teorema de Landau (§ 20) en el caso de un total, se expresa como

$$n_c \equiv 2\tau_F = n - 2l \quad (61.4)$$

siendo l un número entero (≥ 0). En el modelo de un gas ideal en una red, este número tiene un significado simple: la ocupación completa de cada banda corresponde a dos electrones en la celda de la red recíproca (debido a los dos estados de spin) de modo que $2l$ es el número de electrones que ocupan las l bandas inferiores y $n - 2l$ es el número de electrones en las bandas parcialmente llenas, la fórmula (61.4) expresa el resultado, que no es trivial en absoluto, de que sigue siendo válida una situación semejante cuando se tiene en cuenta la interacción entre electrones.[†] Según la definición de lo que es un metal, el número entero n_c no es cero.

Supongamos que sólo existen hojas cerradas (tipo electrón y tipo hueco) de la superficie de Fermi de un metal; sean $\tau_-^{(s)}$ y $\tau_+^{(s)}$ las contribuciones a τ_F de las cavidades de electrones y huecos individualmente:

$$\tau_F = \sum_s \tau_-^{(s)} + \sum_s \tau_+^{(s)};$$

la suma se extiende a todas las hojas tipo electrón y tipo hueco, respectivamente. La cantidad $\tau_-^{(s)}$ es el volumen de la cavidad tipo electrón y $1 - \tau_+^{(s)}$ es el de la cavidad tipo hueco. Los números de cuasipartículas electrón y hueco son

$$n_- = 2 \sum_s \tau_-^{(s)}, \quad n_+ = 2 \sum_s (1 - \tau_+^{(s)}).$$

Cuando n es par (y, por tanto, n_c par), pueden presentarse casos en los que n_c sea igual al doble del número de cavidades tipo hueco. Entonces se encuentra fácilmente que la ecuación (61.4) se reduce a

$$n_- = n_+. \quad (61.5)$$

[†] Para una deducción rigurosa de este resultado, ver J. M. Luttinger, *Physical Review* 119, 1153, 1960.

Los metales que tienen números iguales de cuasipartículas y cuasihuecos se dice que están *compensados*.

Debe señalarse que, cuando se satisface la ecuación (61.5) exactamente, los propios n_- y n_+ pueden ser arbitrarios y en particular pueden ser arbitrariamente pequeños. En estos casos, cuando son muy pequeños los volúmenes de todas las cavidades de la superficie de Fermi (en comparación con el volumen de una celda de la red recíproca), se dice que la sustancia es un *semimetal*. ‡ Sin embargo, existe un límite inferior al número de electrones de conducción, por debajo del cual el espectro electrónico del tipo de metal considerado se hace inestable y no puede existir (ver el final de § 66).

En el caso de un metal las magnitudes termodinámicas constan de dos partes: la parte de la red y la de los electrones. La relación con la temperatura de esta última está determinada por las cuasipartículas en la proximidad de la superficie de Fermi (relación de dispersión (61.2)]. La naturaleza de esta relación como es natural resulta ser la misma que la de un gas ideal de Fermi o la de un líquido isótropo de Fermi (cf. § 1); la única diferencia en la formulación se debe al número diferente de estados de cuasipartículas cerca de la superficie de Fermi, que deja de ser una esfera.

Sea vde el número de estados (por unidad de volumen del metal) dentro de un intervalo de energía de . El elemento de volumen en el espacio \mathbf{k} entre superficies de energía constante infinitamente próximas correspondientes a energías ε_F y $\varepsilon_F + de$ es $df de/\hbar v_F$, en donde df es un elemento de área sobre la superficie de la esfera y v_F es el módulo del vector $\mathbf{v}_F = (1/\hbar)\partial\varepsilon/\partial\mathbf{k}$ normal a la superficie. De aquí que

$$v_F = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \frac{df}{\hbar v_F}, \quad (61.6)$$

en donde la integración se extiende a todas las hojas de la superficie de Fermi dentro de una celda de la red recíproca; en el caso de una superficie de Fermi abierta, las caras de la propia celda no forman parte, como es natural, del intervalo de integración.

La magnitud (61.6) reemplaza en las magnitudes termodinámicas a la expresión que en el caso de un gas de partículas libres (con una superficie de Fermi esférica) era

$$\frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi p_F^2}{p_F/m} = \frac{mp_F}{\pi^2\hbar^3}.$$

‡ Por ejemplo, en el bismuto $n_- = n_+ \sim 10^{-5}$.

Por ejemplo, la parte de los electrones del potencial termodinámico Ω de un metal es (cf. Parte 1, § 58)

$$\Omega_e = \Omega_{0e} - \frac{1}{6} \pi^2 v_F V T^2, \quad (61.7)$$

en donde Ω_{0e} es el valor del potencial a $T = 0$. Considerando el segundo término de (61.7) como una corrección pequeña a Ω_{0e} , podemos escribir una fórmula semejante para el potencial termodinámico Φ , mediante el teorema de los incrementos pequeños:

$$\Phi_e = \Phi_{0e} - \frac{1}{6} \pi^2 v_F V T^2, \quad (61.8)$$

en donde v_F y V se suponen ahora que están expresados en función de P (en la aproximación «cero», es decir a $T = 0$).

Determinando la entropía a partir de (61.8) y de ella el calor específico, se tiene

$$C_e = \frac{1}{3} \pi^2 v_F V T. \quad (61.9)$$

La parte de la red del calor específico es proporcional a T^3 (a temperaturas pequeñas comparadas con la temperatura de Debye Θ); de aquí que a temperaturas suficientemente bajas, resulta predominante la contribución de los electrones al calor específico. †

Por la misma razón, la contribución de los electrones a la dilatación térmica del metal resulta predominante en este margen de temperaturas. Determinando a partir de (61.8) el volumen $V = \partial\Phi/\partial P$ y de aquí el coeficiente de dilatación térmica α , tenemos

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = -T \frac{\pi^2}{3V} \frac{\partial(Vv_F)}{\partial P}. \quad (61.10)$$

Además, como también en el intervalo $T \gg \Theta$ (ver parte 1, § 67), el cociente

$$\alpha V/C = -\partial \log(Vv_F)/\partial P$$

es independiente de la temperatura.

† El parámetro pequeño del desarrollo de (61.9) es el cociente T/ε_F ; en el calor específico de la red es T/Θ ; así pues, las dos partes del calor específico resultan comparables cuando $T^2 \sim \Theta^3/\varepsilon_F$.

§ 62. Función de Green de los electrones en un metal

El estudio realizado en §§ 56-58 se relaciona con el movimiento de un electrón en una red a la que se le aplica un campo magnético externo. Ahora veremos que los resultados obtenidos permanecen siendo válidos en el caso de cuasipartículas (electrones de conducción) en el líquido electrónico de un metal real; únicamente existe cierto cambio en las definiciones de las magnitudes que aparecen en las relaciones (Yu. A. Bychkov y L. P. Gor'kov 1961 y J. M. Luttinger 1961). El formalismo de la función de Green es adecuado para un estudio general del líquido de electrones.

En el capítulo II se ha desarrollado este formalismo para el caso de un líquido de Fermi «libre». Veremos ahora como debe modificarse cuando se trata de un líquido en una red.

La función de Green en el caso de un líquido de electrones ($a T = 0$) se define en función de los operadores ψ de Heisenberg de los electrones mediante la misma fórmula (7.9), en donde la operación de promediar se realiza respecto al estado fundamental del metal. Debido a la homogeneidad del tiempo, esta función depende de los argumentos t_1 y t_2 únicamente a través de la diferencia $t = t_1 - t_2$. Sin embargo, la homogeneidad espacial se ve ahora destruida por la presencia del campo de la red, que es externo al líquido. De aquí que la función de Green no dependa únicamente de la diferencia $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Todo lo que podemos decir es que resulta invariante bajo un desplazamiento simultáneo de \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 en el mismo vector básico de la red escogido arbitrariamente. En lo que sigue consideraremos la función de Green en la representación ω, \mathbf{r} , es decir utilizaremos sus componentes de Fourier respecto a t , $G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Esta función nos permite en principio determinar el espectro de energía del líquido de electrones en el metal. Repetiremos (sin llevar a cabo de nuevo todos los cálculos) los razonamientos de § 8 de la forma en que se aplican al caso presente.

Se ha visto en § 8 que la homogeneidad del sistema permite una determinación completa de la dependencia que existe entre las coordenadas y los elementos de matriz de los operadores ψ y así se ha obtenido la formulación de una expresión general para la función de Green en la representación espacio-tiempo en la forma (8.5), (8.6); a partir de ellas podemos pasar a la representación de los impulsos en la forma del desarrollo (8.7).

En el caso del líquido electrónico en una red, se produce la invariancia de los elementos de matriz, expresada por la ecuación (8.4), únicamente para traslaciones a través de vectores básicos de la red, es decir para $\mathbf{r} = \mathbf{a}$. Esto conduce de modo natural a que la dependencia de las coordenadas sea menos definida: en lugar de (8.4), sólo podemos decir que

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}) | m\mathbf{k} \rangle &= \chi_{am\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \exp [-i\omega_{m0}(\mathbf{k}) t], \\ \langle m\mathbf{k} | \hat{\Psi}_{\alpha}(t, \mathbf{r}) | 0 \rangle &= \chi_{am, -\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) \exp [i\omega_{m0}(\mathbf{k}) t], \end{aligned} \quad (62.1)$$

en donde

$$\begin{aligned}\chi_{\alpha m k}^{(+)}(\mathbf{r}) &= e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\alpha m k}(\mathbf{r}), \\ \chi_{\alpha m k}^{(-)}(\mathbf{r}) &= e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} v_{\alpha m k}(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (62.2)$$

\mathbf{k} es el cuasiimpulso del estado, m es el conjunto de todos los demás números cuánticos que describen el estado y u y v son ciertas funciones de las coordenadas, periódicas en la red; hemos escrito los elementos de matriz únicamente para las transiciones desde el estado fundamental, es decir, el estado 0. Las propiedades de las funciones $\chi^{(+)}$ y $\chi^{(-)}$ son semejantes a las que poseen las funciones de onda de Bloch de un electrón en un campo periódico. Expresando la función de Green mediante estos elementos de matriz y pasando luego a los componentes de Fourier respecto al tiempo (como en § 8), obtenemos ahora en lugar de (8.7) el desarrollo

$$G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{m, \mathbf{k}} \left\{ \frac{\chi_{\alpha m k}^{(+)}(\mathbf{r}_1) \chi_{\beta m k}^{(+)*}(\mathbf{r}_2)}{\omega + \mu - \varepsilon_{m k}^{(+)} + i0} + \frac{\chi_{\alpha m k}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \chi_{\beta m k}^{(-)*}(\mathbf{r}_2)}{\omega + \mu - \varepsilon_{m k}^{(-)} - i0} \right\}, \quad (62.3)$$

con la misma notación $\varepsilon^{(+)}$ y $\varepsilon^{(-)}$ que anteriormente y el cambio $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ en el segundo miembro.

La presencia de excitaciones elementales de una partícula que no decaen cerca de la superficie de Fermi de un metal tiene el resultado de que, cuando ε es próximo a μ , la energía del estado depende únicamente de \mathbf{k} . Para dichos estados la función $G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ tiene un polo en $\omega = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$. Cerca del polo tiene la forma

$$G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\chi_{\alpha k}(\mathbf{r}_1) \chi_{\beta k}^*(\mathbf{r}_2)}{\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) + i0. \text{ signo } \omega}. \quad (62.4)$$

Cuando existe degeneración respecto al spin, debemos sumar también respecto a los dos estados de spin.

La determinación del espectro de energía a partir de las funciones de Green se reduce en principio a un problema de valores propios para un cierto operador integrodiferencial lineal.

Las ideas básicas de la técnica diagramática en el espacio de las coordenadas siguen siendo las mismas en este caso que cuando se trata de un líquido de Fermi ordinario. En particular, considerando la función de autoenergía $\Sigma_{\alpha\beta}(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ como la suma del conjunto de diagramas determinados en § 14, podemos escribir la función de Green $G_{\alpha\beta}(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ como la serie (14.3), que se suma dando la ecuación diagramática (14.4). La línea delgada continua en estos diagramas representa la función de Green $G_{\alpha\beta}^{(0)}(t, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ de los electrones libres que no interaccionan entre sí ni con la red. De acuerdo con (9.6), esta función satisface la ecuación

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\Delta_1}{2m} + \mu \right) G_{\alpha\beta}^{(0)}(t, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \delta_{\alpha\beta} \delta(t) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Aplicando el operador (...) a la izquierda de (14.4) y pasando luego a los componentes de Fourier respecto al tiempo, obtenemos la ecuación buscada

$$(\omega + \mu + \Delta_1/2m) G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \int \Sigma_{\alpha\gamma}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}') G_{\gamma\beta}(\omega; \mathbf{r}', \mathbf{r}_2) d^3x' \\ = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (62.5)$$

Cerca del polo de G (respecto a la variable ω) puede omitirse el segundo miembro de la ecuación, quedando una ecuación integrodiferencial homogénea, cuyos valores propios determinan el espectro de energía del sistema. El subíndice β y la variable \mathbf{r}_2 no se ven afectados ahora por ninguna operación, es decir, actúan como parámetros sin importancia en la ecuación. Para determinar el espectro podemos, por tanto, utilizar la ecuación†

$$(\omega + \mu + \Delta_1/2m) \chi_\alpha(\mathbf{r}) - \int \Sigma_{\alpha\gamma}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \chi_\gamma(\mathbf{r}') d^3x' \equiv (\omega - \hat{L}) \chi(\mathbf{r}) = 0. \quad (62.6)$$

En el caso de un líquido de Fermi de electrones en un metal, esta ecuación sustituye a la ecuación de Schrödinger ordinaria. Sus valores propios determinan, como ya se ha mencionado, el espectro con $\omega = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu$; las funciones propias correspondientes son $\chi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ según (62.4) como resulta evidente mediante una sustitución directa de (62.4) en (62.5). Como el decaimiento de las excitaciones cerca de la superficie de Fermi es sólo ligero, el operador \hat{L} es hermítico para ω pequeño (hasta términos del orden de ω , e incluyendo ésta).

Para estudiar el caso en que se encuentra presente un campo magnético externo débil, debemos observar que en una transformación «gauge» del potencial vector, los operadores ψ se transforman como funciones de onda [cf. (44.3), (44.4)] y, por tanto, las funciones de Green $G_{\alpha\beta}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ se transforman como un producto de funciones ψ , a saber $\psi(\mathbf{r}_1)\psi^*(\mathbf{r}_2)$. Esto significa que la función $\chi(\mathbf{r})$ en (62.6) debe transformarse también como una función ψ ordinaria. Si se continúan los razonamientos de § 56, se encuentra fácilmente que solamente hacen uso de la periodicidad de la red cristalina, de las propiedades generales de la transformación «gauge» y del hecho de que el espectro de energía está determinado por los valores propios de cierto hamiltoniano; en el caso presente, este último es el operador \hat{L} de (62.6).‡

† En el caso de un líquido de Fermi microscópicamente homogéneo, esta ecuación en la representación de los impulsos se reduce a (14.13):

$$\omega + \mu = \epsilon^{(0)}(\mathbf{p}) + \Sigma(\omega, \mathbf{p}).$$

‡ Puede parecer que existe aquí una diferencia importante consistente en que el operador \hat{L} en (62.6) depende de ω . De hecho esto simplemente hace que el hamiltoniano haya de escribirse en forma implícita. Para ω pequeño (cerca de la superficie de Fermi) podemos cambiar a la forma explícita desarrollando $\hat{L} \approx \hat{L}_0 + \omega \hat{L}_1$ y luego multiplicando la ecuación $\hat{L}_0\chi = m(1 - \hat{L}_1)\chi$ por la izquierda por el operador $(1 - \hat{L}_1)^{-1}$.

Por tanto, queda claro que se tendrá el mismo resultado, que consiste en la regla para pasar del espectro en ausencia del campo al correspondiente en presencia del hamiltoniano

$$\varepsilon \left(\mathbf{K} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) \right), \quad \hat{\mathbf{r}} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{K}}, \quad (62.7)$$

en donde $\varepsilon(\mathbf{k})$ es el espectro en ausencia del campo. Como es natural, ahora el propio significado de $\varepsilon(\mathbf{k})$ es diferente del que se dio en (56.7), puesto que tiene en cuenta la interacción colectiva de todos los electrones del sistema.

Ahora bien, puesto que el estudio del caso cuasiclásico dado en §§ 57 y 58 estaba basado totalmente en la existencia de un hamiltoniano de la forma (62.7), los resultados obtenidos allí son también directamente aplicables a un líquido de electrones. Sin embargo, se plantea la cuestión de lo que debe considerarse como intensidad del campo que actúa sobre un electrón de conducción (y, por tanto, lo que debe considerarse como potencial vector \mathbf{A}). Estrictamente hablando, debería ser el valor microscópico exacto del campo en el punto \mathbf{r} debido a todos los electrones (y al campo externo). Sin embargo, en el caso cuasiclásico la dimensión característica r_H de la región en la que se produce la interacción (el radio de Larmor de la órbita) es grande en comparación con el orden de magnitud de las distancias entre electrones, es decir, la constante a de la red. Esto origina un promediado automático del campo microscópico. Puede explicarse del modo siguiente el origen de dicho promediado.

Representemos la intensidad del campo microscópico como la suma de su valor medio (que es, de acuerdo con la terminología acostumbrada de la electrodinámica macroscópica, la inducción magnética \mathbf{B}) más una parte rápidamente variable \mathbf{H} . El potencial vector correspondiente al campo uniforme \mathbf{B} aumenta en toda la extensión de la órbita tomando valores característicos $\sim Br_H$. El potencial correspondiente al campo \mathbf{H} que oscila en distancias $\sim a$ no aumenta constantemente y únicamente alcanza valores $\sim Ba$, que son despreciables en comparación con Br_H . Pero, como se vio en § 56, el potencial del campo es el que determina la cuantización del movimiento del electrón. Así pues, llegamos a la conclusión de que es suficiente tener en cuenta el potencial \mathbf{A} sólo de la inducción uniforme $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$, que jugará el papel de la parte del campo que actúa sobre el electrón (D. Shoenberg 1962). Veremos posteriormente (al final de § 63) que esta situación puede conducir a algunos fenómenos nuevos en la imanación de los metales.

Así pues, la regla de cuantización cuasiclásica (58.7) para el líquido de electrones en un metal se escribe

$$S(\varepsilon, k_z) = (2\pi |e|/\hbar c) B(n + \frac{1}{2}), \quad (62.8)$$

en donde $S(\varepsilon, k_z)$ es ahora el área de la sección recta de las superficies de energía constante real de los electrones de conducción en un metal (cerca de su superficie de Fermi).

Como en el problema de un electrón en una red que tiene un centro de inversión†, la inclusión del spin del electrón de conducción produce un desdoblamiento de los niveles en el campo magnético en dos componentes:

$$\varepsilon_{n\sigma}(k_z) = \varepsilon_n(k_z) + \sigma\beta\xi(k_z)B, \quad \sigma = \pm 1. \quad (62.9)$$

Se obtiene la magnitud $\xi(k_z)$ al promediar una función $\xi(\mathbf{k})$ sobre la trayectoria cuasiclásica. Con suficiente aproximación podemos considerar todas las trayectorias como incluidas en la propia superficie de Fermi, de modo que el resultado del promediado dependa únicamente de k_z . Debemos resaltar que, en el caso de electrones en el líquido de Fermi, la diferencia de $\xi(k_z)$ respecto al valor unidad que se tiene en el caso de electrones libres se debe, no sólo a la interacción spin-órbita, sino también a la interacción de intercambio entre electrones.

§ 63. Efecto de Haas-van Alphen

La susceptibilidad magnética de un metal en campos magnéticos débiles ($\beta B \ll T$, siendo β el magnetón de Bohr y B la inducción magnética) no puede calcularse en forma general. La razón consiste en que en la teoría del líquido de Fermi únicamente podemos tratar con la parte paramagnética (del spin) de la susceptibilidad: se determina esta parte por los electrones de conducción cerca de la superficie de Fermi, puesto que los spines electrónicos de la parte del interior de la distribución se compensan entre sí. Sin embargo, la parte de la susceptibilidad diamagnética contiene contribuciones de todos los electrones, incluyendo los del interior de la distribución, en donde carece de significado el concepto de cuasipartículas de la teoría del líquido de Fermi. Las dos partes de la conductividad tienen en general el mismo orden de magnitud y únicamente tiene un significado físico real su suma.

Consideremos ahora campos «fuertes» en los que

$$T \lesssim \beta B \ll \mu, \quad (63.1)$$

es decir, los intervalos entre los niveles de Landau son comparables con la temperatura, pero todavía son pequeños en comparación con el potencial químico. En este caso, no pueden separarse en absoluto las partes paramagnética y diamagnética de la imanación, pero la situación discrepa en el hecho de que la imanación

† Como sucede de hecho en las redes cristalinas de todos los metales.

del metal tiene una parte oscilatoria que depende del campo (*efecto de Haas-van Alphen*)†. La parte monótona de la imanación depende también en este caso de todos los electrones del metal y no puede calcularse dentro de la teoría del líquido de Fermi. Pero, como veremos, la parte oscilante de la imanación está determinada únicamente por los electrones de conducción cerca de la superficie de Fermi y puede considerarse de una forma general (I. M. Lifshitz y A. M. Kosevich 1965); estudiaremos ahora esta parte.

La dependencia oscilante de la imanación con el campo es una consecuencia de la cuantización de los niveles de energía del movimiento orbital de los electrones. Pero la cuantización influye solamente en los estados correspondientes al movimiento de los electrones en trayectorias que son cerradas (en el espacio k). De aquí que la contribución a la parte oscilante de las magnitudes termodinámicas proceda únicamente de los electrones de conducción sobre secciones rectas cerradas de las superficies de energía constante producidas por planos perpendiculares a la dirección dada del campo. Admitiremos que se satisface la condición necesaria para el tratamiento cuasiclásico sobre estas secciones, es decir, que son grandes los números n determinados por la ecuación (62.8):

$$\hbar c S / |e| B \gg 1. \quad (63.2)$$

En el caso de las superficies típicas de Fermi de los metales, las dimensiones lineales de dichas secciones son $\sim 1/a$, de modo que $S \sim a^{-2}$ y se satisface ciertamente la condición (63.2); cf. la primera nota a § 57.

Los niveles cuasiclásicos vienen dados (teniendo en cuenta el spin) por la expresión (62.9) en donde $\varepsilon_n(k_z)$ son las soluciones de la ecuación (62.8); para cada nivel existe un número de estados dados por la fórmula (58.10). De aquí que la función de partición que determina el potencial termodinámico Ω (función de μ , T y el volumen V del sistema) tiene la forma indicada en

$$\Omega = -T \frac{|e| BV}{4\pi^2 \hbar c} \sum_n \int_s \sum_{\sigma} \log \left\{ 1 + \exp \frac{\mu - \varepsilon_n^{(s)}(k_z)}{T} \right\} dk_z. \quad (63.3)$$

El índice s numera las diversas hojas de la superficie de energía constante; este índice se omitirá por brevedad junto con el signo de suma respecto al mismo. La interacción respecto a k_z se toma sobre un intervalo tal que incluya todas las secciones rectas diferentes (es decir, excluyendo las repeticiones periódicas) de todas las hojas de las superficies de energía constante.

† Cf. parte 1, § 60, en donde se ha estudiado este efecto en el caso de un gas de electrones ideal.

Separaremos en primer lugar de Ω la parte $\tilde{\Omega}$ que es una función oscilante del campo, transformando la suma (63.3) mediante la fórmula de Poisson:[†]

$$\frac{1}{2}F(0) + \sum_{n=1}^{\infty} F(n) = \int_0^{\infty} F(x) dx + 2 \operatorname{re} \sum_{l=1}^{\infty} \int_0^{\infty} F(x) e^{2\pi i l x} dx. \quad (63.4)$$

Cuando se aplica a (63.3) el primer término de esta fórmula da la contribución no oscilante a Ω ; la omitiremos y escribiremos así

$$\tilde{\Omega} = -\frac{|e| BVT}{4\pi^2 c \hbar} 2 \operatorname{re} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{\sigma=\pm 1} I_{l\sigma}, \quad (63.5)$$

en donde $\tilde{I}_{l\sigma}$ es la parte oscilante de la integral

$$I_{l\sigma} = \int_0^{\infty} dn \int \log \left\{ 1 + \exp \frac{\mu_{\sigma} - \epsilon_n(k_z)}{T} \right\} e^{2\pi i l n} dk_z \quad (63.6)$$

y hemos utilizado la notación $\mu_{\sigma} = \mu - \sigma \beta \xi B$.

Para el análisis siguiente definiremos la función

$$n(\epsilon, k_z) = \frac{c \hbar S(\epsilon, k_z)}{2\pi |e| B} - \frac{1}{2} \quad (63.7)$$

[cf. (62.8)] y pasaremos de la integración respecto a n en (63.6) a la integración respecto a ϵ :

$$I_{l\sigma} = \int_0^{\infty} \int \log \left\{ 1 + \exp \frac{\mu_{\sigma} - \epsilon}{T} \right\} e^{2\pi i l n} \frac{\partial n}{\partial \epsilon} dk_z d\epsilon; \quad (63.8)$$

carece de importancia la selección del límite inferior de la integración respecto a ϵ , que se ha tomado arbitrariamente como cero, puesto que en cualquier caso sólo tiene importancia en la integral la proximidad de $\epsilon = \mu_{\sigma}$.

Como la función $n(\epsilon, k_z)$ es grande, el factor exponencial en el integrando de (63.8) es una función rápidamente oscilante de k_z . Estas oscilaciones reducen a cero la integral respecto a k_z y, por ello, la contribución principal procede de los intervalos de la variable k_z en los que $n(\epsilon, k_z)$ varía menos rápidamente y, por consiguiente, las oscilaciones son más lentas. Es decir, la contribución principal a la integral procede de las regiones cercanas a los extremos de n considerada como una función de k_z para una ϵ cualquiera dada. Sea $k_{z,\text{ex}}(\epsilon)$ uno de dichos puntos; cerca

[†] Ver parte 1, § 60. No tiene importancia el que el término $F(0)$ de la suma que aparece en (63.4) tenga un coeficiente $\frac{1}{2}$, puesto que sólo los términos con n grande tienen significado en la suma (63.3).

de él, calculemos la integral por el método del punto de silla, poniendo en el exponente de la exponencial

$$n(\varepsilon, k_z) \approx n_{\text{ex}}(\varepsilon) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 n}{\partial k_z^2} \right)_{\text{ex}} (\varepsilon - k_{z,\text{ex}})^2,$$

$$n_{\text{ex}}(\varepsilon) = n(\varepsilon - k_{z,\text{ex}}(\varepsilon)),$$

y tomando en los factores no exponenciales el valor para $k_z = k_{z,\text{ex}}$. El resultado es que cada uno de los extremos contribuye a la integral con el término

$$\int_0^\infty \log \left\{ 1 + \exp \frac{\mu_\sigma - \varepsilon}{T} \right\} \frac{dn_{\text{ex}}}{d\varepsilon} \cdot \frac{1}{\sqrt{l}} \left| \frac{\partial^2 n}{\partial k_z^2} \right|_{\text{ex}}^{-1/2} \exp \left\{ 2\pi i l n_{\text{ex}} \pm \frac{1}{4} i\pi \right\} d\varepsilon.$$

La sustitución de $\partial n(\varepsilon, k_z)/\partial \varepsilon$ por $dn/d_{\text{ex}}\varepsilon$ es legítima puesto que en el extremo $\partial n/\partial k_z = 0$. Los signos más y menos del exponente se refieren respectivamente a los casos en que $k_{z,\text{ex}}$ es un mínimo y un máximo de $n(\varepsilon, k_z)$.† Transformemos esta expresión mediante integración por partes, con

$$\frac{dn_{\text{ex}}}{d\varepsilon} \exp(2\pi i l n_{\text{ex}}) d\varepsilon = \frac{1}{2\pi i l} d \exp(2\pi i l n_{\text{ex}}(\varepsilon))$$

y haciendo uso del hecho de que la función de variación lenta $| \partial^2 n / \partial k_z^2 |_{\text{ex}}$ no necesita derivarse. El término integrado no da ninguna relación de dependencia oscilante sobre el campo; omitiéndole, tenemos

$$I_{l\sigma} = \sum_{\text{ex}} \frac{e^{\pm i\pi/4}}{2\pi i T^{3/2}} \int_0^\infty \frac{\exp(2\pi i l n_{\text{ex}}) d\varepsilon}{\left[1 + \exp \left(\frac{\varepsilon - \mu_\sigma}{T} \right) \right] |\partial^2 n / \partial k_z^2|_{\text{ex}}^{1/2}}, \quad (63.9)$$

en donde la suma se extiende a todos los extremos (cuyo significado se estudiará más adelante).

El factor $\exp(2\pi i l n_{\text{ex}})$ del numerador del integrando es una función rápidamente oscilante de ε . Estas oscilaciones reducen a cero la integral respecto a ε en todo punto excepto en la región $\varepsilon - \mu_\sigma \sim T$, en donde el denominador varía rápidamente. La propia función $n_{\text{ex}}(\varepsilon)$ varía suavemente en esta región y, por tanto, puede representarse como

$$n_{\text{ex}}(\varepsilon) \approx n_{\text{ex}}(\mu_\sigma) + n'_{\text{ex}}(\mu_\sigma)(\varepsilon - \mu_\sigma);$$

† Se calcula la integral de punto de silla de la forma $\int e^{iaz^2} dz$ haciendo $z = ue^{i\pi/4}$ o $z = ue^{-i\pi/4}$ para $a > 0$ o $a < 0$, después de lo cual se extiende la integración respecto a u desde $-\infty$ hasta ∞ .

el factor $|\partial^2 n / \partial k_z^2|_{\text{ex}}^{-1/2}$ se sustituye simplemente por su valor para $\varepsilon = \mu_\sigma$. Entonces, pasando de la integración respecto a ε a otra con respecto a $x = (\varepsilon - \mu_\sigma)/T$ y sustituyendo el límite inferior de la integral $-\mu_\sigma/T$ por $-\infty$ (puesto que $\mu/T \gg 1$) obtenemos‡

$$I_{l\sigma} = - \sum_{\text{ex}} \frac{\exp [2\pi i l n_{\text{ex}}(\mu_\sigma) \pm \frac{1}{4} i\pi]}{2^{3/2} |\partial^2 n / \partial k_z^2|_{\text{ex}, \mu_\sigma}^{1/2}} \operatorname{senh}^{-1} [2\pi^2 l T n'_{\text{ex}}(\mu_\sigma)].$$

Al sumar esta expresión respecto a $\sigma = \pm 1$, podemos sustituir en toda ella μ_σ por μ (excepto en el factor exponencial), puesto que por hipótesis (63.1) $\beta B \ll 1$. Sin embargo, en el factor de fase (exponencial) no se puede realizar dicho cambio: puesto que $n_{\text{ex}}(\varepsilon)$ es grande, incluso un cambio de su argumento relativamente pequeño produce un cambio notable en la fase. No obstante, ahora basta con desarrollar $n_{\text{ex}}(\mu \pm \beta B)$ en potencias de βB , tomando únicamente los términos lineales. El resultado es

$$\sum_{\sigma} I_{l\sigma} = - \sum_{\text{ex}} \frac{\exp [2\pi i l n_{\text{ex}}(\mu) \pm \frac{1}{4} i\pi]}{l^{3/2} |\partial^2 n / \partial k_z^2|_{\text{ex}, \mu}^{1/2}} \times \\ \times \operatorname{senh}^{-1} [2\pi^2 l T n'_{\text{ex}}(\mu)] \cos [2\pi l \beta B \xi_{\text{ex}} n'_{\text{ex}}(\mu)], \quad (63.10)$$

en donde $\xi_{\text{ex}} = \xi(k_z, \text{ex})$. Queda por aclarar el significado de las magnitudes que aparecen en esta expresión y sustituirla en (63.5).

De acuerdo con la definición (63.7), la función $n_{\text{ex}}(\varepsilon)$ está relacionada con el valor extremo $S_{\text{ex}}(\varepsilon)$ del área de la sección recta de la superficie de energía constante $S(\varepsilon, k_z)$ en función de k_z y su valor cuando $\varepsilon = \mu$ es el área de la sección extremal de la superficie de Fermi. Como ilustración, la figura 15 muestra las secciones extremales (dos máximas y una mínima) de una superficie de Fermi de forma seme-

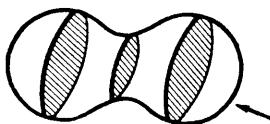


FIG. 15.

‡ Utilizamos el valor de la integral

$$I \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\alpha z}}{e^z + 1} dz = - \frac{i\pi}{\operatorname{senh} \pi\alpha}.$$

Puede deducirse esta fórmula considerando la integral a lo largo de un contorno cerrado en el plano complejo z , compuesto del eje real, la línea recta $\operatorname{im} z = 2\pi$ y dos «lados» en el infinito; para asegurar la convergencia sobre éstos, se sustituye el parámetro real α por $\alpha - i0$. Se determina la integral a lo largo de este contorno mediante el residuo en el polo $z = i\pi$, hallándose así $I - e^{-2\pi\alpha} I = -2\pi i e^{-\pi\alpha}$.

jante a una pesa de gimnasia; son perpendiculares a la dirección del campo, que se muestra mediante una flecha. La suma respecto a ϵ_{ex} en (63.10) se extiende a todas las secciones rectas cerradas extremales de todas las hojas de la superficie de Fermi. Para simplificar la notación, utilizaremos también la masa de ciclotrón del electrón de conducción en su movimiento a lo largo de una trayectoria extremal cerrada. De acuerdo con la definición (57.6) esta masa es

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \left[\frac{\partial S(\epsilon, k_z)}{\partial \epsilon} \right]_{\mu, k_z, \text{ex}} = \frac{\hbar^2}{2\pi} S'_{\text{ex}}(\mu),$$

en donde $S_{\text{ex}}(\epsilon) = S(\epsilon, k_{z,\text{ex}}(\epsilon))$; la segunda ecuación es consecuencia de nuevo de que en el punto extremal $\partial S(\epsilon, k_z)/\partial k_z = 0$.

Así pues, tenemos la fórmula final para la parte oscilante del potencial termodinámico:

$$\begin{aligned} \Omega &= \sum_{\text{ex}} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l \Omega_l \cos \left(\frac{l\hbar^2 S_{\text{ex}}}{2m\beta B} \pm \frac{1}{4}\pi \right), \\ \Omega_l &= \frac{2V(m\beta B)^{5/2}}{\pi^{7/2}\hbar^3 m^* l^{5/2}} \left| \frac{\partial^2 S(\mu, k_z)}{\partial k_z^2} \right|_{\text{ex}}^{-1/2} \frac{\lambda}{\operatorname{senh} \lambda} \cos \pi l m^* \xi_{\text{ex}}/m, \quad (63.11) \\ \lambda &= l\pi^2 T m^* / m\beta B, \end{aligned}$$

siendo m la masa real del electrón y el signo más y menos en el argumento del coseno se relacionan con las secciones mínima y máxima respectivamente.[†]

Se calcula la imanación \mathbf{M} (el momento magnético por unidad de volumen) como la derivada[‡]

$$\mathbf{M} = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{B}}. \quad (63.12)$$

[†] En el caso de un gas de electrones libres, la superficie de Fermi es una esfera con radio $k_F = \sqrt{2m\mu}/\hbar$, $S_{\text{ex}} = \pi k_F^2$ y la fórmula (63.11) se transforma en la (60.5) de la Parte 1.

[‡] Necesita explicarse la derivación respecto a \mathbf{B} . La fórmula (63.12) puede deducirse de la forma siguiente. La variación del hamiltoniano del sistema debida a un cambio infinitesimal del potencial vector del campo es

$$\delta \hat{H} = - \int \hat{\mathbf{j}} \cdot \delta \mathbf{A} dV/c,$$

en donde $\hat{\mathbf{j}}$ es el operador densidad de corriente; ver MC, (115.1). Se encuentra la variación del potencial termodinámico Ω promediando $\delta \hat{H}$ para valores dados de μ , T y V . Como la cuantización del sistema está determinada (como se vio en § 62) no por el campo microscópico exacto \mathbf{H} sino por su valor medio macroscópico \mathbf{B} , esto significa que en $\delta \hat{H}$ también ha de tomarse \mathbf{A} como el potencial vector del campo medio \mathbf{B} . Por consiguiente, puede sacarse fuera de la operación de promediar la variación $\delta \mathbf{A}$, después de lo cual

$$\delta \Omega = \langle \delta H \rangle = - \int \langle \hat{\mathbf{j}} \cdot \delta \mathbf{A} \rangle dV/c.$$

A continuación con el momento magnético definido mediante $\langle \mathbf{j} \rangle = c \operatorname{rot} \mathbf{M}$, la integración por partes nos da

$$\delta \Omega = - \delta \mathbf{B} \cdot \int \mathbf{M} dV.$$

En (63.11) únicamente han de derivarse los factores que varían con mayor rapidez, los cosenos. Debido a la anisotropía de la superficie de Fermi (m^* y S_{ex} dependen de la dirección del campo) la dirección de \mathbf{M} no es en general la misma que la de \mathbf{B} . Para la parte oscilante de la imanación longitudinal (a lo largo del campo) se tiene

$$\begin{aligned} M_z &= \sum_{\text{ex}} (-1)^{l+1} M_l \operatorname{sen} \left(\frac{l\hbar^2 S_{\text{ex}}}{2m\beta B} \pm \frac{1}{4}\pi \right), \\ M_l &= \frac{B^{1/2}(m\beta)^{3/2} S_{\text{ex}}}{\pi^{7/2} m^{*l^{3/2}} \hbar} \left| \frac{\partial^2 S(\mu, k_z)}{\partial k_z^2} \right|_{\text{ex}}^{-1/2} \frac{\lambda}{\operatorname{senh} \lambda} \cos \pi l m^* \xi_{\text{ex}} / m. \end{aligned} \quad (63.13)$$

Las expresiones (63.11) y (63.13) son funciones oscilantes complicadas del campo magnético y en general contienen términos de diversas periodicidades: términos que se originan de cada una de las secciones extremales de la superficie de Fermi tienen períodos diferentes respecto a la variable $1/B$, a saber

$$\Delta \frac{1}{B} = \frac{4\pi m\beta}{\hbar^2 S_{\text{ex}}} = \frac{2\pi |e|}{c\hbar S_{\text{ex}}}. \quad (63.14)$$

Estos períodos no dependen de la temperatura.

La relación entre la temperatura y la amplitud de las oscilaciones viene dada por el factor $\lambda/\operatorname{senh} \lambda$. Cuando $\lambda \gg 1$, las amplitudes decrecen exponencialmente y las oscilaciones casi desaparecen. Cuando $\lambda \lesssim 1$, el factor $\lambda/\operatorname{senh} \lambda \sim 1$ y el orden de magnitud de las amplitudes queda determinado por los factores restantes en Ω_l y M_l ; todas las estimaciones que vamos a ver a continuación se refieren a este caso.

Para una estimación poco exacta pongamos $m^* \sim m$, $\mu \sim \hbar^2 k_F/m$, $S \sim k_F^2$, en donde $k_F \sim 1/a$ es la dimensión lineal de la superficie de Fermi. Entonces

$$\tilde{\Omega} \sim V(m\beta B)^{5/2}/\hbar^3 \sim Vn\mu(\beta B/\mu)^{5/2}, \quad \tilde{M} \sim n\beta(\beta B/\mu)^{1/2}, \quad (63.15)$$

en donde $n \sim k_F^3$ es la densidad numérica de los electrones. La parte \bar{M} de la imanación que varía monótonamente con el campo puede estimarse poniendo

$$\bar{M} \sim \bar{\chi}B \sim \beta^2 m k_F B / \hbar^2 \sim n\beta \cdot \beta B / \mu, \quad (63.16)$$

en donde $\bar{\chi}$ es la parte «monótona» de la susceptibilidad, estimada por ejemplo mediante la fórmula correspondiente a la susceptibilidad de un gas de electrones en campos débiles (ver Parte 1, § 59). De acuerdo con ello, la parte monótona del potencial termodinámico en $\tilde{\Omega} \ll V\bar{M}R \sim Vn\mu(\beta B/\mu)^2$. Comparando las expresiones anteriores se ve que la parte oscilante del potencial termodinámico es pequeña en comparación con su parte magnética monótona:

$$\tilde{\Omega}/\bar{M} \sim (\beta B/\mu)^{1/2} \ll 1,$$

y, por tanto, en comparación con su valor $\Omega_0 \sim Vn\mu$ en ausencia del campo: $\tilde{\Omega}/\Omega_0 \ll (\beta B/\mu)^{5/2}$. Por otra parte, la parte oscilante de la imanación es grande en comparación con la parte monótona:

$$\tilde{M}/\bar{M} \sim (\mu/\beta B)^{1/2} \gg 1.$$

Considerando la totalidad de la teoría de las oscilaciones de la imanación debe señalarse que ésta se aplica a un líquido de electrones en un cristal ideal y no tiene en cuenta una posible influencia originada por los procesos de dispersión de los electrones de conducción por los fonones y los defectos de la red (por ejemplo, átomos de impureza). Estos procesos producen una cierta incertidumbre en la energía de los electrones, $\Delta\varepsilon \sim \hbar/\tau \sim \hbar v_F/l$, en donde τ es el tiempo que transcurre entre las colisiones, l es el recorrido libre medio y v_F es la velocidad de los electrones. Cuando los niveles nítidos de energía se difuminan, ello a su vez origina una suavización de las oscilaciones de la imanación. La condición para que sea posible despreciar los procesos de dispersión es que la incertidumbre $\Delta\varepsilon$ sea pequeña en comparación con los intervalos entre los niveles:

$$\hbar\omega_B \gg \hbar v_F/l. \quad (63.17)$$

Cuando $T \rightarrow 0$ los valores de B permitidos por la condición (63.1) resultan arbitrariamente pequeños y únicamente establece un límite la condición (63.17). La imanación \tilde{M} puede en principio resultar comparable con la propia inducción B (puesto que $\tilde{M}B \sim \bar{\chi}(\mu/\beta B)^{1/2}$), pero la susceptibilidad magnética $\chi = \partial M/\partial H$ resulta grande más pronto† (en módulo): puesto que de nuevo es necesario sólo derivar los factores oscilantes, tenemos

$$|\tilde{\chi}| \sim \bar{\chi}(\mu/\beta B)^{3/2}. \quad (63.18)$$

En dicha situación, las oscilaciones de la imanación hacen que la curva del campo macroscópico $H = B - 4\pi M(B)$ en función de la inducción B presente una serie de ondulaciones, como puede verse esquemáticamente en la figura 16 (A. B. Pippard 1963). La condición para la estabilidad termodinámica exige que‡

$$(\partial H/\partial B)_{T,\mu} > 0.$$

† Para evitar complicaciones innecesarias, puede ignorarse la influencia de la anisotropía en el estudio cualitativo siguiente.

‡ Cf. EMC, § 18, en donde se deduce una condición análoga para el caso eléctrico.

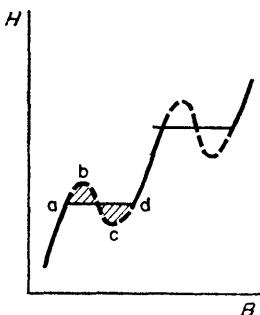


FIG. 16.

De aquí que los estados correspondientes a partes de la curva tales como bc no puedan aparecer. La situación resultante es exactamente semejante a la que produce una transición de fase en una sustancia cuando existe una ondulación de la curva de presión en función del volumen (cf. Parte 1, §§ 84 y 152). La curva de equilibrio $H(B)$ incluirá de hecho un segmento horizontal recto ad , trazado de tal forma que las dos áreas sombreadas en la figura 16 sean iguales; las secciones ab y cd corresponden a estados metaestables.

Supongamos que una muestra metálica tiene la forma de un cilindro con su eje dirigido en la dirección del campo externo. Entonces el campo H dentro del cilindro es el mismo que \mathfrak{H} y cuando este último aumente, el cuerpo sufrirá transiciones de fase sucesivas con cambios discontinuos de la inducción: cada vez que se alcance un punto tal como el a , la inducción varía discontinuamente de B_a a B_d .[†] Sin embargo, si la muestra es una placa plana situada en un campo magnético perpendicular a la misma, el cuerpo se puede separar en capas alternantes (*dominios magnéticos*) con valores diferentes de la inducción, exactamente igual a como se producía la separación de un superconductor en el estado intermedio en capas superconductoras y normales (J. H. Condon 1966). En este caso el campo externo \mathfrak{H} es igual a la inducción magnética promediada en todas sus capas. Por ejemplo, en el margen $B_a < \mathfrak{H} < B_d$, la placa se separa en capas por inducción B_a y B_d y, cuando \mathfrak{H} aumenta, el volumen de esta última aumenta a expensas del volumen de la primera.

§ 64. Interacción electrón-fonón

Hasta ahora hemos considerado los electrones de conducción en un cristal sin referencia a su interacción con las vibraciones de la red, es decir, con los fonones. Esta interacción representa el hecho de que la deformación de la red altera el campo

[†] Admitimos que es positiva la energía superficial de la intercara entre las fases.

en el que se mueve el electrón; este cambio del campo se denomina *potencial de deformación*.

La interacción electrón-fonón juega un papel decisivo en los fenómenos de transporte tanto en los semiconductores como en los metales, pero ahora sólo estamos interesados en la influencia cualitativa de esta interacción sobre el espectro de energía de los electrones. Para su estudio podemos empezar ignorando las complicaciones debidas a la anisotropía de la red y a su inhomogeneidad microscópica. Así pues, consideraremos el medio como un líquido isotrópico microscópicamente homogéneo y, de acuerdo con ello, sólo podrán presentarse en él vibraciones acústicas longitudinales.

En la primera aproximación respecto a la deformación, puede escribirse el potencial correspondiente a este modelo simplificado en la forma

$$U_{\text{def}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\varrho} \int W(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varrho'(\mathbf{r}') d^3x', \quad (64.1)$$

en donde ϱ' es la parte variable de la densidad del medio (y ϱ es el valor de equilibrio constante). La función $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ disminuye en distancias del orden de las distancias interatómicas a . Simplificaremos la expresión (64.1) un poco más observando que pueden tomarse como cero estas distancias en el caso de interacciones con fonones con números de onda $k \ll 1/a$, es decir supondremos que $W = w\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ con w constante. Entonces $U_{\text{def}} = w\varrho'(\mathbf{r})/\varrho$. En la teoría cuántica y en la representación de la segunda cuantización, se escribe este potencial como el hamiltoniano de la interacción electrón-fonón,

$$\hat{H}_{\text{ep}} = (w/\varrho) \int \hat{\Psi}_\alpha^+(t, \mathbf{r}) \hat{\varrho}'(t, \mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha(t, \mathbf{r}) d^3x, \quad (64.2)$$

en donde los operadores $\hat{\Psi}$ y $\hat{\Psi}^+$ se refieren a los electrones y $\hat{\varrho}'$ es el operador densidad de Heisenberg que describe el campo de fonones; en el caso de fonones libres (sin interaccionar con electrones) viene dado por (24.10).

En el formalismo matemático de las funciones de Green, tal y como se aplica a la interacción electrón-fonón, tenemos no sólo la función de Green G del electrón sino también la función de Green de los fonones definida por

$$D(X_1, X_2) \equiv D(X_1 - X_2) = -i\langle T \hat{\varrho}'(X_1) \hat{\varrho}'(X_2) \rangle, \quad (64.3)$$

el producto cronológico debe desarrollarse mediante la regla (31.2) que corresponde

al caso de bosones. En el caso de fonones libres, la función de Green en la representación de los impulsos es

$$\begin{aligned} D^{(0)}(\omega, \mathbf{k}) &= \frac{\varrho k}{2u} \left\{ \frac{1}{\omega - u\mathbf{k} + i0} - \frac{1}{\omega + u\mathbf{k} - i0} \right\} \\ &= \frac{\varrho k^2}{\omega^2 - u^2 k^2 + i0}; \end{aligned} \quad (64.4)$$

ver § 31, Problema. (En estas fórmulas intermedias hacemos $\hbar = 1$.)

Si se considera la interacción electrón-fonón como una perturbación pequeña podemos establecer una técnica diagramática basada en el operador (64.2), como se hizo en § 13 para una interacción de fermiones por pares. Sin repetir todos los razonamientos, formularemos las reglas resultantes para la construcción de los diagramas (en la representación de los impulsos).†

Los elementos básicos de los diagramas son las líneas de electrón (continuas) y las líneas de fonón (a trazos), mientras se asigna a cada una de ellas un cierto «4-impulso». Una línea de electrón con 4-impulso P corresponde a un factor $iG_{\alpha\beta}^{(0)} = i\delta_{\alpha\beta} G^{(0)}(P)$, que es la función de Green de los electrones libres. Una línea de fonón con 4-impulso K corresponde a un factor $iD^{(0)}(K)$, que es la función de Green de los fonones libres. En cada vértice del diagrama se encuentran dos líneas continuas y una a trazos; estos puntos tienen un factor adicional $-iw/\varrho$.

Por ejemplo, la primera corrección a la función de Green del electrón se representa mediante el diagrama‡



con la expresión analítica correspondiente

$$i\delta G(P) = -(w^2/\varrho^2) [G^{(0)}(P)]^2 \int G^{(0)}(P-K) D^{(0)}(K) d^4 K / (2\pi)^4. \quad (64.6)$$

La primera corrección a la función de Green del fonón se representa mediante el diagrama



† La estructura de la expresión (64.2) para el operador de la interacción electrón-fonón es semejante al operador de interacción electrón-fonón en electrodinámica cuántica. Por tanto, son también análogas en ambos casos las reglas de las técnicas diagramáticas.

‡ No existe ningún diagrama con una línea cerrada de electrón, análoga a (13.13a), debido a que $D^{(0)}(0) = 0$. Suponemos aquí que se toma antes el límite $\mathbf{k} \rightarrow 0$ que el $\omega \rightarrow 0$. Esto corresponde al hecho de que en el espacio coordenado la integración respecto a d^3x (que en el caso presente significa el paso a $\mathbf{k} \rightarrow 0$) está presente en la definición del hamiltoniano (64.2) y, por consiguiente, se lleva a cabo antes que la integración respecto al tiempo que aparece cuando se aplica a este hamiltoniano la teoría de perturbaciones.

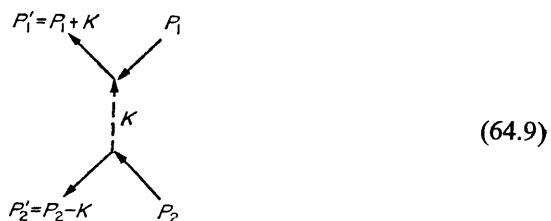
o bien, en forma analítica,

$$i\delta D(K) = 2(w^2/\varrho^2)[D^{(0)}(K)]^2 \int G^{(0)}(P) G^{(0)}(P-K) d^4P/(2\pi)^4; \quad (64.8)$$

el coeficiente 2 procede de la contracción de los factores de spin ($\delta_{\alpha\beta}\delta_{\beta\alpha} = 2$) y hemos incluido también el factor — 1 debido a la presencia de un lazo cerrado de fermiones (cf. § 13).

Veremos que la interacción electrón-fonón en un metal conduce a la aparición de una «atracción efectiva» entre electrones cerca de la superficie de Fermi. Puede describirse intuitivamente como el resultado de la emisión de un fonón virtual por un electrón y su absorción por otro (J. Bardeen 1950, H. Fröhlich 1950).

Consideremos el diagrama



que representa la dispersión de dos electrones mediante el intercambio de fonones virtuales; los 4-impulsos $P = (\varepsilon - \mu, \mathbf{p})$, $\mathbf{K} = (\omega, \mathbf{k})$, mientras que μ es el potencial químico de los electrones a $T = 0$, que es igual a la energía límite ε_F . Este diagrama corresponde a la función vértice

$$\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta} = \Gamma\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}, \quad i\Gamma = (-iw/\varrho)^2 iD^{(0)}(K),$$

o sea

$$\Gamma = -\frac{w^2 k^2}{\varrho(\omega^2 - u^2 k^2 + i0)}, \quad (64.10)$$

con $\hbar\omega = \varepsilon'_1 - \varepsilon_1$, $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1$.

Los impulsos de los electrones cerca de la superficie de Fermi son del orden de magnitud $p \sim p_F \sim \hbar/a$. La dispersión de electrones a través de un ángulo ~ 1 corresponde a un impulso de fonón $\hbar\mathbf{k} \sim \hbar/a$ y una energía de fonón $\hbar\omega \sim \hbar u/a \sim \hbar\omega_D$, siendo ω_D la frecuencia de Debye; en los metales $\hbar\omega_D \ll \varepsilon_F$. Por otra parte, el electrón no puede transferir una cantidad de energía mayor que $\varepsilon - \varepsilon_F$. De aquí que, si para ambos electrones $|\varepsilon - \varepsilon_F| \ll \omega_D$, tenemos ciertamente

$$\Gamma \approx w^2/\varrho u^2 > 0. \quad (64.11)$$

Teniendo en cuenta el significado de Γ como una amplitud de dispersión (§ 16), vemos que su signo corresponde a una atracción entre partículas. Debe resaltarse que este resultado sólo es válido para electrones en una corteza comparativamente estrecha (con espesor correspondiente a una energía $\sim \hbar\omega_D$) en el espacio de los impulsos cercana a la superficie de Fermi. Ya se ha utilizado este hecho en § 43 para determinar el valor del parámetro de corte en la teoría de la superconductividad de los metales.[†]

§ 65. Influencia de la interacción electrón-fonón sobre el espectro de los electrones en un metal

Consideremos la influencia de la interacción electrón-fonón en el espectro de energía de los electrones en un metal*.

En § 14 se ha visto que en el caso de un espectro tipo Fermi la corrección a la relación de dispersión $\varepsilon(\mathbf{p})$ (en comparación con el espectro de un sistema de fermiones libres) vale

$$\delta\varepsilon(\mathbf{p}) = \Sigma(\varepsilon - \mu, \mathbf{p}) - \Sigma(0, \mathbf{p}), \quad (65.1)$$

en donde $\Sigma = [G^{(0)}]^{-1} - G^{-1}$ es la función de autoenergía. En el caso presente, la corrección se debe a la interacción con fonones y el espectro «sin perturbar» es el que tiene en cuenta la interacción «directa» de las partículas (electrones). De acuerdo con (64.6)[‡],

$$\Sigma(P) = -\delta G^{-1} = \delta G/[G^{(0)}]^2 = i(w^2/\varrho^2) \int G^{(0)}(P - K) D^{(0)}(K) d^4K/(2\pi)^4, \quad (65.2)$$

pero $G^{(0)}$ debe tomarse ahora como la función de Green para los electrones que interactúan entre sí. Cerca de su polo dicha función tiene la forma

$$G^{(0)}(\varepsilon - \mu, \mathbf{p}) = Z[\varepsilon - \mu - v_F^{(0)}(p - p_F) + i0 \cdot \text{signo } (\varepsilon - \mu)]^{-1}; \quad (65.3)$$

ver (10.2). El superíndice (0) que afecta a v_F indica que esta magnitud todavía no incluye el efecto de la interacción electrón-fonón.

Nuestro objetivo consiste ahora en obtener una estimación de la magnitud (65.1), es decir, de la integral

$$\delta\varepsilon = \frac{iw^2}{\varrho^2} \int \{G^{(0)}(\varepsilon - \mu - \omega, \mathbf{p} - \mathbf{k}) - G^{(0)}(-\omega, \mathbf{p} - \mathbf{k})\} D^{(0)}(\omega, \mathbf{k}) d^4K/(2\pi)^4. \quad (65.4)$$

[†] Para una tosca estimación de la constante ω en los metales, podemos observar que el cambio en la energía electrónica debe ser del orden de la energía propia ($\sim \varepsilon_F$) cuando el cambio de densidad $\varrho' \sim \varrho$; por lo tanto $w \sim \varepsilon_F$.

* Los resultados de esta sección se deben a A. B. Migdal (1958).

[‡] En las fórmulas intermedias hacemos $\hbar = 1$.

Se verá en los cálculos siguientes que la contribución principal a esta integral procede del intervalo en donde el impulso $\mathbf{p} - \mathbf{k}$ y la energía $\varepsilon - \omega$ (como \mathbf{p} y ε) caen dentro de la superficie de Fermi, es decir, $k \ll p_F$, $\omega \ll \mu$. Por esta razón podemos tomar (65.3) como las funciones $G^{(0)}$.

En coordenadas esféricas polares en el espacio \mathbf{k} , con el eje polar paralelo a \mathbf{p} , tenemos $d^4\mathbf{K} = 2\pi k^2 dk d\omega d\cos\theta$, en donde θ es el ángulo formado entre \mathbf{k} y \mathbf{p} . En lugar de $\cos\theta$ utilicemos la variable $p_1 = |\mathbf{p} - \mathbf{k}|$; puesto que $p_1^2 = p^2 + k^2 - 2pk \cos\theta$, tenemos

$$d^4K = 2\pi k^2 dk d\omega p_1 dp_1/pk \approx 2\pi k dk d\omega dp_1,$$

en donde $p_1 \approx p \approx p_F$.

En el integrando de (65.4), únicamente el factor entre corchetes depende de p_1 ; es

$$\{\dots\} = -(\varepsilon - \mu) Z[\varepsilon - \mu - \omega - v_F^{(0)}(p_1 - p_F) + i0 \cdot \text{signo } (\varepsilon - \mu - \omega)]^{-1} \times \\ \times [-\omega - v_F^{(0)}(p_1 - p_F) - i0 \cdot \text{signo } \omega]^{-1}.$$

Debido a la rápida convergencia de la integral respecto a $p_1 - p_F$, podemos ampliar la integración a $\pm\infty$: con la variable $\eta = v_F^{(0)}(p_1 - p_F)$, obtenemos la integral

$$\int \{\dots\} dp_1 \\ = -\frac{(\varepsilon - \mu) Z}{v_F^{(0)}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{[\eta - (\varepsilon - \mu - \omega) - i0 \cdot \text{signo } (\varepsilon - \mu - \omega)][\eta + \omega + i0 \cdot \text{signo } \omega]}.$$

Si los dos polos del integrando están en el mismo lado del eje real, la integral es cero (como puede demostrarse cerrando el contorno de integración en el otro semiplano). Por consiguiente, la integral es no nula únicamente si $\varepsilon - \mu > \omega > 0$ o bien $\varepsilon - \mu < \omega < 0$; vale $-2\pi i Z/v_F^{(0)}$ en el primer caso y $2\pi i Z/v_F^{(0)}$ en el segundo. Así pues, utilizando el hecho de que $D^{(0)}(\omega, \mathbf{k})$ es una función par de ω , tenemos

$$\delta\varepsilon = \frac{Zw^2}{8\pi^2\varrho uv_F^{(0)}} \int_0^{|\varepsilon - \mu|} \left[\frac{1}{\omega - uk + i0} - \frac{1}{\omega + uk - i0} \right] k^2 d\omega dk. \quad (65.5)$$

Las partes real e imaginaria de esta expresión determinan respectivamente la corrección al espectro de cuasipartículas (electrones de conducción) y su decaimiento. Consideraremos en primer lugar este último.

Separando de (65.5) la parte imaginaria mediante la regla (8.11), se tiene

$$-\text{im } \delta\varepsilon = \frac{Zw^2}{8\pi\varrho uv_F^{(0)}} \int k^2 dk; \quad (65.6)$$

la integración respecto a k se toma desde 0 hasta $|\varepsilon - \mu|/u$, en cuyo intervalo el polo $\omega = uk$ del integrando de (65.5) cae en el margen comprendido entre 0 y $|\varepsilon - \mu|$. Así pues (en unidades ordinarias)

$$-\text{im } \delta\varepsilon = \frac{Zw^2 |\varepsilon - \mu|^3}{24\pi\hbar^3 \varrho u^4 v_F^{(0)}}. \quad (65.7)$$

Para una estimación sólo aproximada de esta magnitud, observemos que los parámetros $v_F^{(0)}$ y w son de origen electrónico y se expresan, en orden de magnitud, en función únicamente de la distancia interatómica a y de la masa del electrón m : $v_F^{(0)} \sim p_F/m \sim \hbar/ma$, $w \sim \varepsilon_F \sim \hbar^2/ma^2$; ver la última nota a § 64. La densidad ϱ y la velocidad del sonido u dependen también de la masa del ion M : $\varrho \propto M$, $u \propto M^{-1/2}$, y por ello $\varrho u^4 \propto 1/M$. De aquí que pueda estimarse la expresión anterior como

$$-\text{im } \delta\varepsilon \sim |\varepsilon - \mu|^3 / (\hbar\omega_D)^2, \quad (65.8)$$

en donde la frecuencia de Debye $\omega_D \sim u/a \propto M^{-1/2}$.

Estrictamente hablando, la estimación (65.8) se relaciona con los valores $|\varepsilon - \mu| \ll \hbar\omega_D$, para los cuales la integración en (65.6) se toma en el intervalo $k < |\varepsilon - \mu|/\hbar \ll \omega_D/u$, en el que la relación de dispersión de los fonones $\omega = ku$ que hemos utilizado es de hecho válida. Sin embargo, para una estimación aproximada puede aplicarse (65.8) incluso en el límite del intervalo en el que $\varepsilon - \mu \sim \hbar\omega_D$, obteniéndose

$$-\text{im } \delta\varepsilon \sim \hbar\omega_D \sim |\varepsilon - \mu|. \quad (65.9)$$

Finalmente, cuando $\varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D$, el intervalo de integración en (65.6) es independiente de $\varepsilon - \mu$, puesto que el polo $\omega = uk \lesssim \omega_D$ está siempre entre 0 y $\varepsilon - \mu$. En este caso, $\int k^2 dk \sim (\omega_D u)^3$ y el decaimiento es

$$-\text{im } \delta\varepsilon \sim \hbar\omega_D \ll \varepsilon - \mu. \quad (65.10)$$

Las expresiones (65.8)-(65.10) dan el decaimiento específico debido a la emisión de fonones por electrones.[†] Vemos que, en la proximidad inmediata de la superficie de Fermi, cuando $|\varepsilon - \mu| \ll \hbar\omega_D$, de acuerdo a (65.8), el decaimiento es débil ($|\text{im } (\varepsilon - \mu)| \ll |\varepsilon - \mu|$), de modo que el concepto de cuasipartícula (electrones de conducción) tiene un significado totalmente definido. Sin embargo, en el intervalo $|\varepsilon - \mu| \sim \hbar\omega_D$, el decaimiento de las cuasipartículas resulta com-

[†] Se expresa la conservación de la energía en la creación de un fonón de baja frecuencia por una cuasipartícula por $(\partial\varepsilon/\partial k) \cdot \partial\mathbf{k} = \mathbf{v} \cdot \partial\mathbf{k} = \mathbf{u}\partial\mathbf{k}$; esto sólo puede ser cierto si $v > u$. En un metal esta condición se satisface siempre puesto que $v_F \gg u$.

parable con su energía y el espectro se difumina y pierde mucho de su significado. A distancias todavía mayores por encima de la superficie de Fermi, cuando $\varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D$ (pero, como es natural, sigue siendo $\varepsilon - \mu \ll \mu$), de acuerdo con (65.14), el decaimiento permanece siendo el mismo en valor absoluto pero de nuevo resulta pequeño en comparación con la energía $\varepsilon - \mu$, de modo que las partículas recuperan cierto significado. Como es natural, igual que el decaimiento por fonones de los electrones de conducción, existe también el originado por las colisiones entre electrones. Este último, característico de cualquier líquido normal de Fermi (§ 1), es proporcional a $(\varepsilon - \mu)^2$ y su orden de magnitud es $\sim (\varepsilon - \mu)^2/\mu$, es decir siempre resulta pequeño en el margen en que resulta aplicable la teoría.

A continuación estimemos la corrección a la parte real de ε , es decir al propio espectro. La parte real de la integral respecto a ω en (65.5) viene dada por su valor principal:

$$\begin{aligned} \operatorname{re} \int_0^{|\varepsilon-\mu|} D^{(0)}(\omega, \mathbf{k}) d\omega &= \frac{\varrho k}{2u} P \int_0^{|\varepsilon-\mu|} \left\{ \frac{1}{\omega - uk} - \frac{1}{\omega + uk} \right\} d\omega \\ &= \frac{\varrho k}{2u} \log \left| \frac{\varepsilon - \mu - uk}{\varepsilon - \mu + uk} \right|. \end{aligned}$$

Por tanto tenemos para $\operatorname{re} \delta\varepsilon$ (en unidades ordinarias)

$$\operatorname{re} \delta\varepsilon = \frac{Z\omega^2}{8\pi^2\varrho u v_F^{(0)}} \int k^2 \log \left| \frac{\varepsilon - \mu - \hbar uk}{\varepsilon - \mu + \hbar uk} \right| dk. \quad (65.11)$$

Cuando $\varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D$, el logaritmo del integrando es $\sim \hbar uk/(\varepsilon - \mu)$ y la integral entera se estima que vale $\hbar uk^3_{\max}/(\varepsilon - \mu) \sim \hbar u/a^3(\varepsilon - \mu)$. Observando también que el factor ϱ del denominador de (65.11) hace que la expresión completa sea $\propto 1/M$, llegamos al valor estimado

$$\operatorname{re} \delta\varepsilon \sim (\hbar\omega_D)^2/(\varepsilon - \mu) \ll \varepsilon - \mu.$$

Así pues, es este caso la corrección al espectro es relativamente pequeña y por ello el espectro viene dado por

$$\varepsilon - \mu \approx v_F^{(0)}(p - p_F) \quad \text{para } \varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D, \quad (65.12)$$

con el valor «sin perturbar» $v_F^{(0)}$ de la velocidad en la superficie de Fermi.

En el intervalo $\varepsilon - \mu \ll \hbar\omega_D$, el logaritmo de (65.11) es $\sim (\varepsilon - \mu)/\hbar uk$ y la integral se estima como $(\varepsilon - \mu)k^2_{\max}/\hbar u \sim (\varepsilon - \mu)/\hbar ua^2$. La expresión completa resulta ser así proporcional a $\varepsilon - \mu$, con un coeficiente independiente de la masa

del ion M (puesto que el producto ϱu^2 es independiente de M). Esto significa que el espectro en este intervalo es de nuevo del mismo tipo:

$$\varepsilon - \mu \approx v_F(p - p_F) \quad \text{para } \varepsilon - \mu \ll \hbar\omega_D, \quad (65.13)$$

pero con la velocidad v_F que difiere de $v_F^{(0)}$ en una cantidad del orden del propio $v_F^{(0)}$. †

Así pues, el espectro tipo Fermi de los electrones en un metal tiene dos valores diferentes de la velocidad v_F y $v_F^{(0)}$, uno en la proximidad inmediata de la superficie de Fermi ($\varepsilon - \mu \ll \hbar\omega_D$) y el otro cuando $\varepsilon - \mu \gg \hbar\omega_D$. En las propiedades termodinámicas del metal a bajas temperaturas ($T \ll \hbar\omega_D$) interviene el parámetro v_F según (65.13). Fenómenos tales como las propiedades ópticas de los metales a frecuencias $\omega \gg \omega_D$ están determinados por la velocidad $v_F^{(0)}$.

PROBLEMAS

Determinar el decaimiento de fonones de longitud de onda larga ($k \ll p_F$) en un metal debido a su absorción por electrones.

SOLUCIÓN. La corrección a la función de Green de los fonones viene dada, de acuerdo con (64.8) por

$$i\delta D^{-1}(K) = -(2w^2/\varrho^2) \int G^{(0)}(P) G^{(0)}(P - K) d^4P/(2\pi)^4,$$

$$P = (p_0, \mathbf{p}), \quad K = (\omega, \mathbf{k}).$$

Sin embargo, en las funciones G debemos incluir también correcciones debidas a la interacción de los electrones con fotones de corta longitud de onda. De acuerdo con el estudio realizado en el texto, estos cambios consisten simplemente en sustituir $G^{(0)}$ por una función G que difiere de (65.3) únicamente en que la velocidad $v_F^{(0)}$ se ha de cambiar por v_F y la constante de renormalización Z por otra Z' . En el caso de K pequeño, puede utilizarse la fórmula (17.10) para el producto $G^{(0)}(P)G^{(0)}(P - K)$. La integración respecto a $dp_0 dp$ se reduce a la eliminación de las funciones delta, después de lo cual permanece la integración respecto a $d \cos \theta$ (en donde θ es el ángulo formado entre \mathbf{p} y \mathbf{k}):

$$\delta D^{-1}(\omega, k) = -\frac{Z'^2 w^2 p_F^2 k}{2\pi^2 \varrho^2} \int_{-1}^1 \frac{\cos \theta d \cos \theta}{\omega - v_F k \cos \theta + i0}$$

(tomamos $\omega > 0$). El polo en $\cos \theta = \omega/kv_F$ está dentro del intervalo de integración (puesto que $v_F > u$) y la parte imaginaria de la integral es

$$\text{im } \delta D^{-1} = Z'^2 w^2 p_F^2 \omega / 2\pi \varrho^2 v_F^2 k.$$

† Como es natural, en estas condiciones el empleo de la primera aproximación de la teoría de perturbaciones no es legítima, estrictamente hablando. Sin embargo, el empleo de aproximaciones de orden superior no puede alterar la naturaleza del resultado; cuando resulta ser del orden de la unidad la corrección de primer orden, las restantes correcciones son también del mismo orden.

Se encuentra la relación de dispersión de fonones a partir de la ecuación $[D^{(0)}]^{-1} + \delta D^{-1} = 0$, de aquí que (en unidades ordinarias)

$$\omega = uk(1-i\alpha), \quad \alpha = Z'^2 w^2 p_F^2 / 4\pi\hbar^3 \varrho u v_F^2,$$

la corrección a la parte real de ω carece de interés ahora. El producto $\rho u \propto \sqrt{M}$; de forma que como estimación aproximada pueda ponerse $\alpha \sim \sqrt{m/M}$, es decir, el decaimiento es siempre pequeño.

§ 66. Espectro electrónico de los aislantes sólidos

Una característica especial del espectro energético de los electrones de un cristal aislante no magnético es que incluso el primer nivel excitado está a una distancia finita del nivel fundamental, es decir existe un espacio vacío o prohibido de energía (que en los aislantes ordinarios es del orden de algunos electronvoltios) entre el nivel fundamental y el espectro de los niveles excitados.

Podemos hacernos una idea de una excitación elemental en un cristal aislante como un estado excitado de un átomo pero que no puede asignarse a ningún átomo en particular; la simetría de traslación de la red conduce, como siempre, a una «colectivización» de la excitación que se propaga en el cristal como si estuviese saltando de un átomo a otro. Como en los demás casos, estas excitaciones pueden considerarse como cuasipartículas (que ahora se denominan *exciton*) con energías y cuasiimpulsos definidos. Como todas las cuasipartículas que pueden presentarse aisladamente, los excitones tienen momentos angulares enteros y obedecen a la estadística de Bose.[†]

En el caso de un cuasiimpulso determinado \mathbf{k} , la energía del excitón puede tomar una serie discreta de valores $\varepsilon_s(\mathbf{k})$. Cuando el cuasiimpulso toma valores en una celda de la red recíproca, cada una de las funciones $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ cubre una cierta banda de valores de energía de los excitones; bandas diferentes pueden solaparse parcialmente. El valor mínimo de cada función $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ es no nulo.

El aislante puede contener, no sólo excitones, sino también excitaciones electrónicas de otra clase. Estas excitaciones pueden considerarse como el resultado de la ionización de los átomos individuales. Cada una de estas ionizaciones origina la presencia en el aislante de dos cuasipartículas que se propagan independientemente, un electrón de conducción y un «hueco». Este último consiste en la ausencia de un electrón en un átomo y, por ello, se comporta como una partícula cargada positivamente. Una vez más, al hablar del movimiento de un electrón y de un hueco, nos estamos refiriendo realmente a ciertos estados excitados colectivos de los electrones en el aislante, acompañados (a diferencia de los estados de excitones) de una transferencia de una unidad de carga positiva o negativa.

[†] El concepto de excitones fue introducido en primer lugar por Ya. I. Frenkel (1931).

Los electrones y los huecos tienen spin semientero y obedecen a la estadística de Fermi. Sin embargo, conviene hacer hincapié en que el espectro electrón-hueco del aislante no es semejante en absoluto al espectro electrónico tipo Fermi de los metales. Este último está caracterizado por la existencia de una superficie de Fermi límite en el espacio \mathbf{k} , cerca de la cual cae el cuasiimpulso del electrón. Sin embargo, en el caso presente no existe dicha superficie y el electrón y el hueco que aparecen simultáneamente pueden tener cualquier cuasiimpulso.

Puede entenderse más fácilmente la diferencia entre ambos tipos de espectros considerando el decaimiento de las excitaciones elementales. En un líquido de Fermi cualquier cuasipartícula fuera de la superficie de Fermi puede crear pares de nuevas excitaciones (una partícula y un hueco) y por tanto, tiene un periodo de vida que disminuye rápidamente al alejarse de la superficie de Fermi (un electrón en un metal puede emitir también fotones; ver § 65). El decaimiento de un electrón (o hueco) individual en un aislante con una red ideal ($a T = 0$) es, no obstante, cero precisamente en un intervalo finito de energía por encima de su valor mínimo:[†] la formación de un par electrón-hueco exige siempre un gasto finito de energía, debido al intervalo vacío o prohibido de energía Δ (ver más adelante). Únicamente es posible la emisión de un fonón acústico por una cuasipartícula si la velocidad v de esta última no es menor que la velocidad del sonido u ; ver la tercera nota a § 65.

Los valores posibles de la energía del electrón de conducción $\varepsilon^{(e)}(\mathbf{k})$ y de la energía del hueco $\varepsilon^{(h)}(\mathbf{k})$ también ocupan bandas. Normalmente se toma la anchura del intervalo de energía prohibida en un aislante como la suma $\Delta = \varepsilon_{\min}^{(e)} + \varepsilon_{\min}^{(h)}$ de los valores más pequeños posibles de las energías del electrón y del hueco. Como el electrón y el hueco aparecen o desaparecen conjuntamente, es esta suma la que tiene un significado real y no $\varepsilon_{\min}^{(e)}$ o $\varepsilon_{\min}^{(h)}$ por separado; es normal el considerar arbitrariamente $\varepsilon_{\min}^{(h)} = 0$. Los electrones y huecos pueden obtener los valores mínimos de energía con valores iguales o distintos del cuasiimpulso $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$; el espacio prohibido se dice que es *directo* o *indirecto*, respectivamente. Si los niveles de energía en la banda no son degenerados (o tienen únicamente una degeneración doble respecto al spin debido a la simetría bajo la inversión temporal), $\varepsilon(\mathbf{k})$ cerca de su mínimo tiene la forma

$$\varepsilon^{(e)}(\mathbf{k}) = \Delta + \frac{1}{2} m^{(e)-1} i_k q_i q_k, \quad \varepsilon^{(h)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} m^{(h)-1} i_k q_i q_k, \quad (66.1)$$

en donde $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ y $m_{ik}^{(e)}$ y $m_{ik}^{(h)}$ son los tensores de masa efectiva del electrón y del hueco.

En la bibliografía suele denominarse *banda de conducción* a la banda de los electrones y *banda de valencia* a la banda de los huecos. La formación de un par de cuasipartículas (electrón y hueco) se considera entonces como el resultado de pasar

[†] A temperaturas finitas existe siempre, como es natural, un decaimiento debido a la dispersión por otras cuasipartículas.

un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción, dejando un hueco en su posición original.

A distancias grandes (comparadas con las que existen entre los átomos), el electrón y el hueco se atraen entre sí de acuerdo con la ley de Coulomb. Por consiguiente, pueden formar estados ligados. El electrón y el hueco juntos constituyen una cuasipartícula eléctricamente neutra, es decir un excitón. En el caso de un cuasiimpulso dado, los estados ligados corresponden a niveles de energía discretos del sistema electrón-hueco con una banda de energía del excitón para cada nivel. Por ello las energías de los excitones caen debajo de las correspondientes a las excitaciones electrón-hueco; la energía prohibida en el sentido mencionado al principio de estas sección no es en consecuencia la misma que Δ sino que es menor en una cantidad igual a la máxima energía de enlace del excitón†.

Los niveles energéticos de los excitones se calculan fácilmente en el caso límite de estados débilmente ligados, cuando las distancias medias entre el electrón y el hueco son grandes en comparación con la constante a de la red; se le da el nombre de *excitón de Wannier-Mott*. En el caso límite opuesto, cuando la distancia electrón-hueco es del orden de las distancias atómicas, tenemos un *excitón de Frenkel*, el cual como es natural sólo puede considerarse formalmente como un estado ligado del electrón y hueco.

Consideremos un cristal aislante con simetría cúbica. En el caso de un excitón de Wannier-Mott podemos suponer que el electrón y el hueco se atraen entre sí de acuerdo con la ley de Coulomb, mientras que los átomos restantes únicamente sirven para crear un fondo dieléctrico uniforme que debilita la interacción en un factor ϵ , la permitividad del cristal (tomada a las frecuencias que corresponden en orden de magnitud a la energía de enlace del excitón); así pues, se escribe la energía de interacción electrón-hueco como $U = -e^2/\epsilon r$. Supongamos que el espacio prohibido del espectro sea directo y también por sencillez que los mínimos de energía del electrón y del hueco se presenten a $\mathbf{k} = 0$. En un cristal cúbico, los tensores de masa efectiva se reducen a constantes escalares m_e y m_h , de modo que

$$\varepsilon^{(e)}(\mathbf{k}) = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad \varepsilon^{(h)}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}. \quad (66.2)$$

Al final de § 56 se mencionó que el movimiento de la partícula en una red cristalina sometida a un campo eléctrico externo con variación lenta en el espacio se describe mediante una ecuación de Schrödinger con un hamiltoniano en el que $\varepsilon(\mathbf{k})$ juega el papel de la energía cinética. Como en el caso presente las funciones $\varepsilon^{(e)}(\mathbf{k}) - \Delta$ y $\varepsilon^{(h)}(\mathbf{k})$ tienen la misma forma que las energías cinéticas de partículas libres ordinarias, la ecuación de Schrödinger para el sistema en cuestión coincide formalmente con la ecuación correspondiente para un sistema de dos partículas ordinarias por

† Sin embargo, los estados de excitones tienen un periodo de vida limitado, puesto que el electrón y el hueco pueden recombinarse con la emisión de un fonón o fotón, por ejemplo.

interacción de Coulomb, es decir, la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno. Por consiguiente, podemos escribir inmediatamente los niveles energéticos del sistema, es decir la energía de los excitones en la forma

$$\varepsilon_n^{\text{ex}}(\mathbf{k}) - \Delta = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)} - \frac{me^4}{2\epsilon^2 \hbar^2 n^2} \quad (66.3)$$

(G. H. Wannier 1937). El primer término de esta expresión es la energía del excitón moviéndose «como un todo» con cuasiimpulso \mathbf{k} . El segundo término de la energía de enlace del electrón y hueco en el excitón: $m = m_e m_h / (m_e + m_h)$ es la masa reducida del sistema. Para un \mathbf{k} dado, los niveles energéticos discretos del sistema resultan más próximos cuando aumenta la energía hasta el límite del espectro continuo. La condición para que (66.3) sea válida es que el radio de la órbita sea suficientemente grande, $r_{ex} \sim \hbar^2 n^2 / me^2 \gg a$. Esto es realmente cierto para n grande, pero en cristales con ϵ grande también puede ser satisfecha esta condición si $n \sim 1$ [†].

Para terminar esta sección volvamos a la afirmación realizada en § 61 de que existe un límite inferior para la densidad numérica de los electrones de conducción en un semimetal.

En un aislante en donde no existen electrones y huecos a $T = 0$, la posibilidad de que puedan formar estados ligados significa únicamente la aparición de nuevas ramas del espectro de energía. En un metal compensado, esta posibilidad significaría que un estado con electrones y hueco libres no corresponde al estado más bajo, es decir que resultaría inestable el espectro de tipo metálico. La posibilidad de formar estados ligados queda eliminada por el apantallamiento de la interacción de Coulomb entre el electrón y el hueco por otras cuasipartículas que estén «entre aquellos». Es decir, la distancia media entre las cuasipartículas debe ser del orden del tamaño del excitón r_{ex} o menor (en su estado fundamental). El límite inferior de las densidades numéricas de los electrones y huecos en un metal, establecido por esta condición, disminuye con su masa efectiva.

§ 67. Electrones y huecos en semiconductores

El espectro energético de los semiconductores cristalinos puros (o *intrínsecos*) difiere sólo cuantitativamente del espectro de los aislantes: el intervalo prohibido Δ es menor y, por tanto, existe en un semiconductor a temperaturas ordinarias una densidad de portadores considerable (en comparación con un aislante). La distinción es evidentemente arbitraria y depende también del margen de temperatu-

[†] Es interesante señalar que cerca del borde superior (máximo) de la banda en donde son negativas las masas efectivas, pueden formarse estados ligados de dos electrones (o dos huecos). La energía de estos estados cae dentro de la región prohibida por encima de la energía total máxima de los electrones.

ras de que se trate.[‡] En los semiconductores con *impurezas* (o *dopados*), los átomos de impureza son una fuente adicional de electrones o huecos, siendo el intervalo prohibido de energías de estos átomos para la transferencia de electrones a la red (*impureza dadora*) o desde la red (*impureza aceptora*) menor que el intervalo prohibido de energías del espectro original.

Consideremos a continuación la relación existente entre el intervalo prohibido Δ y la densidad de los electrones y huecos de conducción en un semiconductor (o aislante).

La formación o desaparición de un par electrón (e) y hueco (h) puede considerarse termodinámicamente como una «reacción química» $e + h \rightleftharpoons 0$, actuando el estado fundamental del cristal como un «vacío». A partir de las reglas generales (ver Parte 1, § 101), la condición para el equilibrio termodinámico de esta reacción es

$$\mu_e + \mu_h = 0, \quad (67.1)$$

en donde μ_e y μ_h son los potenciales químicos de los electrones y huecos. Debido a las densidades comparativamente bajas de los electrones (n_e) y huecos (n_h) en un semiconductor (a $T \ll \Delta$), la distribución de Fermi para ellos es casi exactamente la distribución de Boltzmann, de modo que los electrones y huecos forman un gas clásico.[†] Entonces la ley de acción de masas se deduce de la forma usual (ver Parte 1, § 101) a partir de (67.1); de acuerdo con esta ley, el producto de las densidades de equilibrio es

$$n_e n_h = K(T), \quad (67.2)$$

en donde el segundo miembro es una función de la temperatura que depende únicamente de las propiedades de la red matriz o huésped, en cuyos átomos se crean y aniquilan los electrones y huecos; esta función es independiente de la presencia o ausencia de impurezas. Calculemos la función $K(T)$ para el caso particular en el que las energías del electrón y del hueco son funciones cuadráticas del cuasiimpulso (66.1).

La distribución de los cuasiimpulsores de los electrones (por unidad de volumen) viene dada por la fórmula de Boltzmann

$$\exp\left[\frac{\mu_e - \varepsilon_e(\mathbf{k})}{T}\right] 2 \frac{d^3 k}{(2\pi)^3},$$

[‡] Los valores del intervalo vacío o prohibido de energías Δ para diversos semiconductores son: silicio 1,17 eV, germanio 0,74 eV, antimoníuro de indio 0,24 eV, arseníuro de galio 1,52 eV, sulfuro de plomo 0,29 eV. En el caso del diamante, un aislante típico, $\Delta = 5,4$ eV.

[†] Las densidades de electrones y huecos en semiconductores a temperaturas ordinarias son 10^{13} - 10^{17} cm⁻³, mientras que en metales son 10^{22} - 10^{23} cm⁻³.

teniendo en cuenta el factor 2 los dos sentidos del spin. La distribución de energía viene dada por la sustitución

$$2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \rightarrow \frac{\sqrt{2}m_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{\varepsilon_e - \Delta} d\varepsilon_e,$$

en donde $m_e = (m_1 m_2 m_3)^{1/3}$ y m_1, m_2, m_3 son los valores principales del tensor de masa efectiva $m_{ik}^{(e)}$. El número total de electrones por unidad de volumen es así

$$n_e = \frac{\sqrt{2}m_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} e^{\mu_e/T} \int_{\Delta}^{\infty} \sqrt{\varepsilon_e - \Delta} e^{-\varepsilon_e/T} d\varepsilon_e;$$

la integración puede ampliarse hasta el infinito, debido a su rápida convergencia. El cálculo de la integral da

$$n_e = 2 \left(\frac{m_e T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\mu_e - \Delta)/T}. \quad (67.3)$$

Análogamente,

$$n_h = 2 \left(\frac{m_h T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{\mu_h/T}. \quad (67.4)$$

Finalmente, multiplicando las dos expresiones y utilizando (67.1) obtenemos el resultado que se buscaba:

$$n_e n_h = \frac{(m_e m_h)^{3/2}}{2\pi^3\hbar^6} T^3 e^{-\Delta/T}. \quad (67.5)$$

En un semiconductor intrínseco en donde todos los electrones y huecos se forman en parejas,

$$n_e = n_h = \frac{(m_e m_h)^{3/4}}{\sqrt{2}\pi^{3/2}\hbar^3} T^{3/2} e^{-\Delta/2T}. \quad (67.6)$$

Igualando (67.6) y (67.3) se halla el potencial químico de los electrones †:

$$\mu_e = \frac{1}{2} \Delta + \frac{3}{4} T \log(m_h/m_e). \quad (67.7)$$

† En la bibliografía suele denominarse nivel de Fermi, pero el potencial químico de los electrones en un semiconductor no tiene el significado de una energía límite como en los metales.

La contribución de los electrones y huecos a las magnitudes termodinámicas de un semiconductor es exponencialmente pequeña cuando $T \ll \Delta$. Como la creación de un par electrón-hueco exige una energía próxima a Δ , tenemos como contribución a la energía interna $E_{eh} \approx Vn_e\Delta$ con n_e tomado de (67.6). Este valor puede despreciarse normalmente en comparación con la contribución de la red a la energía del cristal.

§ 68. Espectro electrónico cerca del punto de degeneración

En esta sección utilizaremos ejemplos sencillos para demostrar cómo los razonamientos basados en la simetría dan la forma del espectro de energía de los electrones y huecos en un semiconductor cerca de ciertos puntos del espacio k (la red recíproca) que se distinguen por su simetría.[‡]

Consideremos una red de la clase de cristal cúbico O_h y las propiedades del espectro de energía cerca del punto $k = 0$, un vértice de una celda cúbica de la red recíproca; este punto tiene la simetría intrínseca al grupo puntual completo O_h .

Como primer ejemplo, consideremos el espectro sin tener en cuenta el spin del electrón y supongamos que el nivel energético de la banda, que pertenece a la representación irreducible E_g del grupo O_h , está doblemente degenerado en el propio punto $k = 0$.[§] Fuera del punto $k = 0$, se elimina la degeneración y el problema consiste en hallar las ramas de la relación de dispersión $\epsilon(k)$ cerca de este punto.

Se ha demostrado en § 59 que puede considerarse como una perturbación la separación del punto $k = k_0$ en el espacio k . En el caso presente carece de importancia la forma específica del operador de la perturbación a la energía en cada orden relativo a la pequeña cantidad $q = k - k_0$; es nuestro caso $k_0 = 0$ y por ello $q \equiv k$. Hasta el primer orden, las correcciones quedan determinadas por la ecuación secular formada a partir de los elementos de matriz (para transiciones entre estados que pertenecen al mismo nivel degenerado) de un operador que tiene la forma $k_i \hat{\gamma}_i$, en donde $\hat{\gamma}$ es cierto operador vectorial. En el caso actual, debido a que el grupo de simetría contiene un centro de inversión, todos los elementos de matriz de $\hat{\gamma}$ son ciertamente nulos, de modo que no hay ningún efecto de primer orden en k (cf. Parte 1, § 136). Hasta el segundo orden en k , las correcciones a la energía están determinadas por la ecuación secular formada con los elementos de matriz de un operador que tiene la forma

$$\hat{V} = \hat{\gamma}_{ik} k_i k_k, \quad (68.1)$$

[‡] Cuando se desprecia el spin del electrón, este problema es formalmente idéntico al del espectro de energía de los fótones en un cristal; ver parte 1, § 136.

[§] Para la notación correspondiente a los grupos puntuales ver MC, §§ 95 y 99

en donde $\hat{\gamma}_{ik}$ es un operador tensorial hermítico (simétrico en los subíndices i y k). En ellos se incluyen las correcciones procedentes de los términos lineales en \mathbf{k} del hamiltoniano en la teoría de perturbaciones de segundo orden y las correcciones procedentes de los términos cuadráticos en \mathbf{k} de la teoría de perturbaciones de primer orden. Los elementos de matriz del operador (68.1) incluyen ciertamente algunos que no son nulos, pero existen relaciones entre ellos debido a los requisitos de la simetría.

Cuando se considera su ley de transformación bajo las operaciones de la simetría, las funciones de onda que forman la base de la representación E_g pueden escogerse en la forma

$$\psi_1 \sim x^2 + \omega y^2 + \omega^2 z^2, \quad \psi_2 \sim x^2 + \omega^2 y^2 + \omega z^2,$$

en donde

$$\omega = e^{2\pi i/3}, \quad \omega^2 = \omega^*, \quad 1 + \omega + \omega^2 = 0,$$

y \sim significa «se transforma como». La rotación C_3 alrededor de una diagonal del cubo transforma las coordenadas según $x, y, z \rightarrow z, x, y$; las funciones ψ_1 y ψ_2 se transforman como puede verse según

$$C_3: \quad \psi_1 \rightarrow \omega \psi_1, \quad \psi_2 \rightarrow \omega^2 \psi_2.$$

La rotación C_4^x alrededor de una arista del cubo ($x, y, z \rightarrow x, -z, y$) transforma las funciones del modo siguiente;

$$C_4^x: \quad \psi_1 \rightarrow \psi_2, \quad \psi_2 \rightarrow \psi_1;$$

y así sucesivamente. Bajo la inversión, las coordenadas x, y, z cambian de signo; ψ_1 y ψ_2 no varían.

Con esta premisa podemos obtener fácilmente la conclusión de que todos los elementos de matriz de las componentes no diagonales $\hat{\gamma}_{ik}$ son cero y los elementos matriciales de las componentes diagonales se reducen a dos constantes reales independientes:

$$\langle 1 | \gamma_{xx} | 1 \rangle = \langle 2 | \gamma_{xx} | 2 \rangle = \langle 1 | \gamma_{yy} | 1 \rangle = \dots \equiv A,$$

$$\langle 1 | \gamma_{xx} | 2 \rangle = \langle 2 | \gamma_{xx} | 1 \rangle \equiv B,$$

$$\langle 1 | \gamma_{yy} | 2 \rangle = \omega B, \quad \langle 1 | \gamma_{zz} | 2 \rangle = \omega^2 B.$$

Los elementos de matriz del operador (68.1) son ahora

$$\langle 1 | V | 1 \rangle = \langle 2 | V | 2 \rangle = Ak^2,$$

$$\langle 1 | V | 2 \rangle = \langle 2 | V | 1 \rangle^* = B(k_x^2 + \omega k_y^2 + \omega^2 k_z^2).$$

Formando la ecuación secular mediante estos elementos de matriz y resolviéndola obtenemos dos ramas del espectro:

$$\varepsilon_{1,2}(k) - \varepsilon(0) = Ak^2 \pm B[k^4 - 3(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)]^{1/2}. \quad (68.2)$$

Se elimina la degeneración respecto a la separación del punto $\mathbf{k} = 0$ en cualquier dirección excepto la diagonal del cubo ($k_x = k_y = k_z$).†

Como segundo ejemplo, consideremos el espectro teniendo en cuenta el spin del electrón; los niveles energéticos corresponden entonces a representaciones biformes (espinores) del grupo de simetrías. Supongamos que el nivel tenga una degeneración en el punto $\mathbf{k} = 0$, que corresponda a la representación irreducible D'_u (o D'_g) del grupo O_h .‡

Las funciones base de esta representación pueden escogerse de modo que se transformen como las funciones propias ψ_m^j ($m = -j, \dots, j$) del momento angular $j = 3/2$.§ Esto nos permite utilizar el procedimiento siguiente, que simplifica considerablemente la resolución del problema (J. M. Luttinger 1956).

En el caso de una representación cuatridimensional, la matriz del operador (68.1) es 4×4 , con 16 elementos. Cualquier matriz de este tipo puede representarse como una combinación lineal de 16 matrices 4×4 linealmente independientes dadas, que tomaremos como las 15 matrices que comprenden $\hat{j}_x, \hat{j}_x^2, [\hat{j}_x, \hat{j}_y]_x, \hat{j}_x^3, [\hat{j}_x, \hat{j}_y^2 - \hat{j}_z^2]_+$ y las que se obtienen a partir de estas cinco mediante permutaciones cíclicas de los subíndices x, y, z junto con $[\hat{j}_x, [\hat{j}_y, \hat{j}_z]_+]_+ + \dots$ designa el anticomutador. En este caso $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$ son las matrices de las componentes cartesianas del momento angular $j = 3/2$, tomadas respecto a las cuatro funciones $\psi_m^{3/2}$. Por otra parte, con esta selección de las funciones base debemos admitir que los operadores $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$ se transforman bajo rotaciones y reflexiones como los componentes de un vector axial. Esto nos permite escribir el operador \hat{V} , cuadrático en k_x, k_y y k_z como una continuación de expresiones invariantes bajo todas las transformaciones del grupo O_h :

$$\begin{aligned} \hat{V} = & \beta_1 \mathbf{k}^2 + 4\beta_2 (k_x^2 \hat{j}_x^2 + k_y^2 \hat{j}_y^2 + k_z^2 \hat{j}_z^2) \\ & + \beta_3 (k_x k_y [\hat{j}_x, \hat{j}_y]_+ + k_y k_z [\hat{j}_y, \hat{j}_z]_+ + k_x k_z [\hat{j}_z, \hat{j}_x]_+), \end{aligned} \quad (68.3)$$

en donde $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ son constantes reales.

† Se obtiene el mismo resultado para la representación E_u (en el punto $\mathbf{k} = 0$). La relación de dispersión cerca de un punto dado es realmente siempre la misma para las representaciones que difieren sólo en una multiplicación por una representación cualquiera monodimensional del grupo (aquí $E_u = E_g \times A_{1u}$). Es evidente que en estos casos los elementos de matriz para las transiciones entre diferentes funciones base están en una relación biunívoca.

‡ Dicha situación se presenta para la parte inferior de la banda de huecos del diamante, silicio y germanio, que tienen todos ellos el mismo tipo de red.

§ En MC, § 99, problema, se ha visto que la representación irreducible $D^{(3/2)}$ del grupo completo de rotación permanece irreducible respecto al grupo O y es el mismo que su representación D' .

Los elementos de matriz del operador (68.3) respecto a las funciones

$$\psi_1 \sim \psi_{3/2}^{3/2}, \quad \psi_2 \sim \psi_{1/2}^{3/2}, \quad \psi_3 \sim \psi_{-1/2}^{3/2}, \quad \psi_4 \sim \psi_{-3/2}^{3/2}$$

se calculan ahora fácilmente a partir de los bien conocidos elementos de matriz del momento angular, dados en *MC* (29.7)-(29.10). El cálculo da

$$\left. \begin{aligned} V_{11} = V_{44} &= (\beta_1 + 3\beta_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\beta_1 + 9\beta_2)k_z^2, \\ V_{22} = V_{33} &= (\beta_1 + 7\beta_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\beta_1 + \beta_2)k_z^2, \\ V_{12} = -V_{34} &= \frac{1}{2}\sqrt{3}\beta_3 k_z(k_y + ik_x), \\ V_{13} = V_{24} &= 2\sqrt{3}\beta_2(k_y^2 - k_x^2) + \frac{1}{2}\sqrt{3}\beta_3 ik_x k_y, \\ V_{14} = V_{23} &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (68.4)$$

Puede simplificarse la construcción de la ecuación secular observando que el desdoblamiento del nivel ciertamente no puede ser completo; debe quedar una degeneración doble (Kramers). Esto significa que cada raíz $\lambda \equiv \varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(0)$ de la ecuación secular (cada valor de la matriz \hat{V}) es doble. Así pues, a cada valor propio λ le corresponderán dos conjuntos linealmente independientes de magnitudes ϕ_n ($n = 1, 2, 3, 4$), soluciones de las ecuaciones

$$\sum_n V_{nm} \phi_m = \lambda \phi_n. \quad (68.5)$$

Combinando estos dos conjuntos, podemos imponer una condición adicional sobre las ϕ_n , en particular haremos que se anule una de ellas, por ejemplo $\phi_4 = 0$. Entonces la ecuación (68.5) con $n = 4$ da

$$V_{41}\phi_1 + V_{42}\phi_2 + V_{43}\phi_3 = 0.$$

Sustituyendo ϕ_3 procedente de esta expresión en las ecuaciones con $n = 1$ y 2 , obtenemos dos ecuaciones homogéneas con dos incógnitas ϕ_1 y ϕ_2 :

$$\begin{pmatrix} V_{11} - V_{41}V_{13}/V_{43} & V_{12} - V_{42}V_{13}/V_{43} \\ V_{21} - V_{41}V_{23}/V_{43} & V_{22} - V_{42}V_{23}/V_{43} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix};$$

la ecuación con $n = 3$ no da nada nuevo. Así pues, el problema de los valores propios de la matriz 4×4 se reduce al problema correspondiente a una matriz 2×2 . Formando y resolviendo su ecuación secular, con el valor de V_{mn} de (68.4), se tiene

$$\lambda = \frac{1}{2}(V_{11} + V_{22}) \pm [\frac{1}{4}(V_{11} - V_{22})^2 + |V_{12}|^2 + |V_{13}|^2]^{1/2},$$

o finalmente

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) - \varepsilon(0) = Ak^2 \pm [Bk^4 + C(k_x^2k_y^2 + k_x^2k_z^2 + k_y^2k_z^2)]^{1/2}, \quad (68.6)$$

en donde

$$A = \beta_1 + 5\beta_2, \quad B = 16\beta_2^2, \quad C = 3(\frac{1}{4}\beta_3^2 - 16\beta_2^2)$$

(G. Dresselhaus, A. F. Kip y C. Kittel 1955). El nivel se desdobra al separarse del punto $\mathbf{k} = 0$ en cualquier dirección.[†]

Consideremos brevemente la forma de las ecuaciones que describen el comportamiento de las partículas cerca de la parte inferior degenerada de una banda en un campo magnético. Consideraremos un caso particular, el segundo de los considerados en esta sección, es decir el espectro (68.6).

La aplicación directa del hamiltoniano formado a partir de (68.6) mediante la regla (56.7) conduciría a serias dificultades debido a que el espectro no es analítico cerca de $\mathbf{k} = 0$. Pueden evitarse estas dificultades haciendo el cambio $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\mathbf{k}} = \mathbf{K} - e\hat{\mathbf{A}}/\hbar c$ no en (68.6) sino en el hamiltoniano matricial (68.3) (con simetrización respecto a los componentes de \mathbf{k} , con objeto de preservar la propiedad hermítica). Cada elemento de matriz del hamiltoniano se convierte entonces en un operador lineal diferencial que actúa no sólo sobre los índices de spin sino también sobre los argumentos de las funciones $\phi_n(\mathbf{K})$ en las ecuaciones (68.5); por tanto, éstas se transforman en un sistema de cuatro ecuaciones diferenciales lineales.

Para tener en cuenta el efecto del spin en la presencia de un campo magnético, debemos añadir al hamiltoniano (68.3) términos que dependan directamente de \mathbf{H} y que no estén determinados por consideraciones de invariancia «gauge». Como se supone que el campo es débil, los términos añadidos deben ser lineales en \mathbf{H} ; además debido a que se supone también que \mathbf{k} es pequeño, deben ser independientes de \mathbf{k} (cf. § 59). En el caso presente, la forma general de dichos términos, invariantes bajo todas las transformaciones de simetría del cristal, es

$$\beta_4 \mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{j}} + \beta_5 (H_x f_x^3 + H_y f_y^3 + H_z f_z^3). \quad (68.7)$$

Para concluir esta sección, podemos mencionar la situación interesante que aparece si una de las bandas que se encuentra en el punto de degeneración \mathbf{k}_0 es la banda de conducción y la otra es la banda de valencia. En dicho espectro el intervalo de energía prohibido es nulo; una cantidad infinitesimal de energía es suficiente para crear un electrón y un hueco con impulsos próximos a \mathbf{k}_0 . Dichos

[†] La aplicación de la teoría de perturbaciones a los estados que poseen solamente un nivel degenerado presupone que los intervalos $\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(0)$ en el desdoblamiento resultante son pequeños en comparación con las distancias de las bandas adyacentes, incluyendo aquellas que se desdoblán por la interacción spin-órbita.

cristales son en cierto sentido intermedios entre los aislantes y los metales. No existe ningún intervalo de energías prohibido, pero los estados de los electrones y huecos están separados excepto en un punto del espacio \mathbf{k} . Podemos decir que es un metal en el que la superficie de Fermi se ha contraído hasta un solo punto \mathbf{k}_0 . Para $T = 0$ dicho *semiconductor sin intervalo de energías prohibido o vacío*† no tiene portadores de carga, pero a bajas temperaturas su número aumenta según una ley potencial (no exponencial). La forma del espectro cerca del punto \mathbf{k}_0 no puede establecerse a partir sólo de argumentos de simetría; la interacción de Coulomb de los electrones y huecos produce una singularidad en los elementos de matriz de la perturbación en dicho punto.

† Un ejemplo es una modificación del estaño denominada *estaño gris*.

CAPÍTULO VII

MAGNETISMO

§ 69. Ecuación del movimiento de un momento magnético en un ferroimán (ferromagneto)

La estructura magnética de los cristales genera ramas específicas del espectro de energía. Antes de analizar estos espectros, recordemos algunas características de las intersecciones en cuerpos magnéticos.

La forma principal de interacción en las sustancias ferromagnéticas es la interacción de intercambio de los átomos, que establece la imanación espontánea. Una propiedad característica de esta interacción de la imanación relativa a la red: la interacción de intercambio es el resultado de la interacción electrostática de los electrones y de la simetría de la función de onda del sistema y no depende de la dirección del spin total.[†]

El sistema ferromagnético más sencillo es un aislante cuya red cristalina contiene átomos que poseen un momento magnético, siendo «ferromagnético» el signo de la interacción de intercambio, es decir, de tal forma que es energéticamente favorable la posición paralela de los momentos. El estado fundamental del sistema es entonces aquél en el que son paralelos todos los spines. Hablando con más precisión, en este estado la proyección del spin total del sistema en una cierta dirección tiene su mayor valor posible $\sum s_a$ (suma respecto a todos los átomos), siendo s_a el spin de un átomo. En efecto, el hamiltoniano de la interacción de intercambio \hat{H}_{int} se commuta con el operador $\hat{\mathbf{S}}$ del spin total y, por consiguiente, con su componente S_z , como se deduce del hecho de que H_{int} es independiente de la dirección de los spines y \mathbf{S} es el operador de rotación en el espacio de los spines. De aquí que el estado fundamental deba tener un valor definido de S_z y el valor máximo de S_z corresponde a la energía mínima. Entonces s_a y el componente s_z del spin de cada átomo tienen sus valores máximos, de modo que el momento magnético del estado fundamental es igual al valor «nominal» $\sum \mu_a$, en donde μ_a es el momento magnético de un átomo. Sin embargo, esta propiedad se ve destruida por interacciones más débiles (relativistas).

[†] Los resultados experimentales sobre los coeficientes giromagnéticos g , que son muy próximos a 2 en el caso de los ferromagnetos indican que el ferromagnetismo tiene su origen en el spin.

En casos más complejos, la imanación del cuerpo no es igual a su valor nominal. En particular, cuando la interacción no es ferromagnética entre todos los átomos, pueden formarse estructuras de dos subredes con imanación opuesta, cuyas imanaciones son diferentes y que, por consiguiente, no están compensadas por completo; las sustancias que tienen esta estructura se denominan *ferritas*, mientras que el caso de la compensación completa corresponde a los *antiferroimanes*.

Finalmente, en un metal ferromagnético no podemos considerar los spines de los átomos independientemente de los electrones de conducción, que no están nunca completamente imanadas ni siquiera a $T = 0$ (debido a la influencia de la degeneración de Fermi).

Como en un sistema macroscópico cualquiera, los estados débilmente excitados de un ferroimán pueden considerarse como un conjunto de excitaciones elementales, esto es, un gas de cuasipartículas. Las excitaciones elementales en una distribución ordenada de momentos magnéticos atómicos se denominan *magnones*. Como estamos considerando cuasipartículas en una red cristalina con simetría de traslación, los magnones tienen cuasiimpulsos definidos (que toman valores en una celda de la red reciproca) y no impulsos reales. En la descripción clásica, los magnones resultan ser *ondas de spin*, es decir, oscilaciones de los momentos magnéticos, que se propagan a través de la red. Los magnones obedecen a la estadística de Bose y los números grandes de ocupación de los estados de los magnones corresponden al caso límite clásico de las ondas de spin.

Si la longitud de onda de spin es grande en comparación con la constante a de la red, es decir, si los números de onda $k \ll 1/a$, la onda de spin puede estudiarse macroscópicamente; la relación de dispersión $\omega(k)$ de las ondas se expresa entonces en función de parámetros fenomenológicos (constantes del material) que aparecen en las ecuaciones macroscópicas del movimiento de los momentos magnéticos. Así pues, el espectro de los magnones $\epsilon = \hbar\omega(k)$ se expresa también en función de estos parámetros. Dicho método para definir el espectro de magnones es exactamente análogo a la definición del espectro de fonones de ondas largas en función de parámetros macroscópicos (módulos elásticos) que aparecen en las ecuaciones macroscópicas de las vibraciones en las ondas sonoras. Para llevar a cabo este programa, debemos obtener primero las ecuaciones relevantes del movimiento.[†]

Consideremos en primer lugar las interacciones de intercambio. Puesto que ahora estamos considerando los estados débilmente excitados de un ferroimán (y únicamente pueden obtenerse de forma general sus propiedades), debemos precisamente los movimientos «lentos» (frecuencia baja) de los momentos magnéticos. Estos movimientos son aquellos en que la dirección del momento magnético varía lentamente en el espacio, permaneciendo constante su módulo: la imanación de

[†] Los resultados siguientes de esta sección se deben a L. D. Landau y E. M. Lifshitz (1935). Son válidos para los ferromagnetos de «intercambio». No estudiaremos aquí lo que suele denominarse ferromagnetismo débil, en donde el momento ferromagnético se debe únicamente a las interacciones relativistas.

equilibrio queda fijada por la interacción de intercambio y, por ello, en su variación debe producirse un consumo de energía a cualquier longitud de onda (admitimos que el cuerpo está suficientemente lejos de su punto de Curie, en el que se hace cero la imanación espontánea). Por otra parte, resulta sin variación la energía cuando se hace girar el momento magnético del cuerpo como un todo; de aquí que una rotación de la imanación que no sea uniforme en todo el cuerpo exige una cantidad de energía que disminuye al aumentar la longitud de onda (es decir, las vibraciones de onda larga tienen una frecuencia menor). La ecuación correspondiente a la densidad del momento magnético (imanación) \mathbf{M} debe ser, por tanto, tal que se conserve $|\mathbf{M}|$:

$$\partial\mathbf{M}/\partial t = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M}, \quad (69.1)$$

siendo $\boldsymbol{\Omega}$ la velocidad angular de precesión del momento, que determinaremos a continuación. Escribiremos la ecuación del movimiento como una ecuación diferencial de primer orden en el tiempo, puesto que a bajas frecuencias pueden despreciarse las derivadas de orden superior.

Para determinar $\boldsymbol{\Omega}$ debemos tener en cuenta que a longitudes de onda largas y temperaturas bajas, la disipación de energía al variar la imanación es pequeña y puede despreciarse; se justificará esta hipótesis al final de § 70. Para determinar la forma que debe tener la condición de ausencia de la disipación, consideraremos los momentos magnéticos del imán como un parámetro independiente cuya distribución de equilibrio se encuentra haciendo mínima la energía libre. Llevaremos a cabo la operación de obtener el mínimo a temperatura constante, a volumen constante del cuerpo y a campo \mathbf{H} constante en todos los puntos del cuerpo; el potencial termodinámico respecto a estas variables en la energía libre \tilde{F} . † La variación $\delta\tilde{F}$ para un cambio infinitesimal de \mathbf{M} puede escribirse

$$\delta\tilde{F} = - \int \mathbf{H}_{\text{ef}} \cdot \delta\mathbf{M} dV, \quad (69.2)$$

con la notación \mathbf{H}_{ef} para el «campo efectivo» por analogía con la expresión para la energía del momento magnético en un campo magnético externo. En el equilibrio $\mathbf{H}_{\text{ef}} = 0$.

Se calcula la disipación de energía cuando varía la imanación con el tiempo mediante la derivada

$$Q = T \partial S / \partial t = - \partial R_{\min} / \partial t = - \partial \tilde{F} / \partial t,$$

† Ver EMC, § 36, en donde las magnitudes termodinámicas que se refieren al cuerpo como un todo se designan mediante letras. En el caso de una distribución inhomogénea, es más correcto hablar de la energía libre del cuerpo (para un volumen dado) y no del potencial termodinámico Φ . No nos ocuparemos de los efectos de estricción, es decir de las tensiones y deformaciones que aparecen en el cristal cuando varía la imanación.

en donde S es la entropía del cuerpo y R_{\min} el trabajo mínimo necesario para llevar el cuerpo a un estado de no equilibrio dado. Según (69.1) debemos tener

$$Q = \int \mathbf{H}_{\text{ef}} \cdot (\partial \mathbf{M} / \partial t) dV = \int \mathbf{H}_{\text{ef}} \cdot \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{M} dV. \quad (69.3)$$

De aquí se ve que en ausencia de disipación el vector $\boldsymbol{\Omega}$ debe ser paralelo al vector \mathbf{H}_{ef} , de modo que podemos poner $\boldsymbol{\Omega} = \text{constante} \times \mathbf{H}_{\text{ef}}$. La ecuación (69.1) se transforma entonces en

$$\dot{\mathbf{M}} = \text{constante} \times \mathbf{H}_{\text{ef}} \times \mathbf{M}; \quad (69.4)$$

más adelante se aclarará el significado y valor de la constante.

De acuerdo con la definición (69.2), la forma explícita de la derivada del campo efectivo se halla variando la energía libre del cuerpo. Esta energía es

$$\tilde{F} = \int \{f_0(M) + U_{\text{no-u}} - \mathbf{M} \cdot \mathbf{H} - H^2/8\pi\} dV; \quad (69.5)$$

ver *EMC*, § 36. De aquí que $f_0(M)$ sea la densidad de energía libre de un cuerpo con imanación uniforme a $H = 0$, que tiene en cuenta únicamente las interacciones de intercambio y, por consiguiente, es independiente de la dirección de \mathbf{M} ; $U_{\text{no-u}}$ es la densidad de energía de intercambio adicional debida a la variación lenta de dirección de \mathbf{M} a través del cuerpo con imanación no uniforme.

Los primeros términos del desarrollo de esta energía en potencias de las derivadas del momento \mathbf{M} respecto a las coordenadas son

$$U_{\text{no-u}} = \frac{1}{2} \alpha_{ik} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_k}; \quad (69.6)$$

esta forma (cuadrática en las derivadas) es definida positiva. La expresión (69.6) se construye de modo que sea independiente de la dirección absoluta de \mathbf{M} (de acuerdo con las propiedades de la interacción de intercambio). En cristales unínicos, el tensor simétrico α_{ik} de orden dos tiene componentes $\alpha_{xx} = \alpha_{yy} \equiv \alpha_1$, $\alpha_{zz} = \alpha_2$ (en donde el eje z es el eje de simetría del cristal); en cristales cúbicos, $\alpha_{ik} = \alpha \delta_{ik}$.

Puede estimarse el orden de magnitud de los coeficientes α_{ik} observando que la energía de no uniformidad relativa al volumen de una celda unidad de la red cristalina debería ser igual a los valores atómicos característicos de la energía de interacción de intercambio si la dirección del momento variase considerablemente a lo largo de distancias del orden de la constante de la red a . La energía de intercambio característica es igual, en orden de magnitud, a la temperatura de Curie, T_c (punto en el que desaparece el ferromagnetismo). A partir de la condición $T_c/a^3 \sim \alpha M^2/a^2$ se tiene

$$\alpha \sim T_c/aM^2. \quad (69.7)$$

Variando la integral (69.5) para valores dados de \mathbf{H} en cada punto del cuerpo, e integrando por partes en el segundo término se tiene

$$\delta\hat{F} = \int \left\{ f'_0(M) \mathbf{M}/M - \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{M}}{\partial x_i \partial x_k} - \mathbf{H} \right\} \cdot \delta \mathbf{M} dV.$$

De acuerdo con la definición (69.2), la expresión entre corchetes es $-\mathbf{H}_{ef}$. El primer término es paralelo a \mathbf{M} , pero desaparece al sustituirse en la ecuación de movimiento (69.4) y puede, por consiguiente, omitirse.† Así se halla

$$\mathbf{H}_{ef} = \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{M}}{\partial x_i \partial x_k} + \mathbf{H}. \quad (69.8)$$

Cuando únicamente se tienen en cuenta las interacciones de intercambio, con independencia de la dirección del momento magnético, en el caso de un cuerpo uniformemente imanado, la ecuación (69.4) debe reducirse a la ecuación del movimiento de un momento en precesión libre:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \frac{g|e|}{2mc} \mathbf{H} \times \mathbf{M},$$

en donde $e = -|e|$ y m son la carga y la masa del electrón y g el coeficiente giro-magnético de la sustancia ferromagnética (ferromagneto) (cf. *Campos*, § 45). Por otro lado, en el caso de imanación uniforme $\mathbf{H}_{ef} = \mathbf{H}$; de aquí se deduce que el coeficiente constante en (69.4) es $g|e|/2mc$ y, por tanto la ecuación del movimiento es

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \frac{g|e|}{2mc} \mathbf{H}_{ef} \times \mathbf{M}, \quad (69.9)$$

con \mathbf{H}_{ef} tomado de (69.8).

Para formar un sistema completo de ecuaciones debemos añadir la ecuación de Maxwell que relaciona el campo \mathbf{H} con la distribución de la imanación \mathbf{M} . Las ondas de spin, que se estudiarán en § 70, son ondas de baja frecuencia en el sentido de que $\omega \ll ck$. En estas condiciones, el campo es cuasiestacionario; las derivadas respecto al tiempo pueden despreciarse en las ecuaciones de Maxwell, que resultan así

$$\text{rot } \mathbf{H} = 0, \quad \text{div } \mathbf{B} = \text{div}(\mathbf{H} + 4\pi\mathbf{M}) = 0. \quad (69.10)$$

La cuestión que puede plantearse ahora consiste en la legitimidad de hacer variar la integral (69.5) respecto a \mathbf{M} con \mathbf{H} constante a pesar del hecho de que están relacionadas por la segunda ecuación (69.10). La respuesta es que, si hacemos $\mathbf{H} =$

† Pero entonces no es necesario que \mathbf{H}_{ef} sea cero en el equilibrio.

$= -\nabla\phi$ (a partir de la primera ecuación) y calculamos la variación de la integral respecto a ϕ , resulta cero por la segunda ecuación, de modo que la variación respecto a \mathbf{H} no realiza ninguna contribución a δF .

Si el cuerpo no está en un campo magnético externo, el campo en su interior se debe totalmente a la distribución de la imanación y en general es del mismo orden que \mathbf{M} . En este sentido, el término \mathbf{H} del campo efectivo (69.8) es un efecto relativista (los momentos magnéticos externos y, por consiguiente, la imanación espontánea \mathbf{M} están determinados por el magnetón de Bohr $\beta = |e|\hbar/2mc$, que tiene c en el denominador). En la aproximación de intercambio puro hasta ahora considerada ha de omitirse, por tanto, el segundo término de (69.8) y la ecuación del movimiento resulta

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = \frac{g|e|}{2mc} \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{M}}{\partial x_i \partial x_k} \times \mathbf{M}. \quad (69.11)$$

Esta ecuación no es lineal.

La ecuación (69.11) puede volverse a escribir como la ecuación de continuidad para el momento magnético:

$$\frac{\partial M_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{il}}{\partial x_l} = 0,$$

en donde el tensor del flujo de momento es

$$\Pi_{il} = \frac{g|e|}{2mc} \alpha_{ik} \left(\mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x_k} \right)_l.$$

Esto es lógico puesto que en la aproximación de intercambio se conserva el momento magnético total del cuerpo.

Consideremos ahora el hecho de que en un ferromagneto no existen únicamente las interacciones de intercambio sino también las interacciones relativistas considerablemente más débiles de los momentos angulares del electrón (spin-spin y spin-órbita). En la teoría macroscópica se describen mediante la energía anisotropa, cuya densidad U_{an} depende de la dirección del vector de imanación respecto a la red cristalina; estas interacciones determinan la dirección de equilibrio de la imanación espontánea del ferromagneto. Como ya se ha mencionado, las interacciones relativistas incluyen la de \mathbf{M} con el campo magnético \mathbf{H} .

En un cristal uniaxico, la energía de anisotropía tiene la forma

$$U_{an} = -\frac{1}{2}KM_z^2. \quad (69.12)$$

Si $K > 0$, la imanación de equilibrio está dirigida a lo largo del eje de simetría (eje z ; un ferromagneto del tipo «eje fácil»); si $K < 0$, la dirección de la imanación

espontánea está contenida en el plano xy (un ferromagneto del tipo «plano fácil»). En un cristal cúbico, la energía de anisotropía puede escribirse

$$U_{an} = (K'/M^2)(M_x^2M_y^2 + M_x^2M_z^2 + M_y^2M_z^2), \quad (69.13)$$

en donde los ejes x, y, z tienen las direcciones de los tres ejes cuaternarios de simetría (las aristas de las celdas cúbicas). Si $K' > 0$, el vector \mathbf{M} de equilibrio tiene su dirección coincidiendo con una de las aristas de las celdas cúbicas; si $K' < 0$, coincide con una de las diagonales espaciales de las celdas.[†]

Consideraremos el caso especial de un ferromagneto uniáxico. Sumando al integrando de (69.5) el término U_{an} (69.12), obtenemos al realizar la variación un término adicional $-KM_z\mathbf{v}\cdot\delta\mathbf{M}$, siendo \mathbf{v} un vector unidad a lo largo del eje de simetría del cristal. Así hallamos para el campo efectivo

$$\mathbf{H}_{ef} = \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{M}}{\partial x_i \partial x_k} + KM_z \mathbf{v} + \mathbf{H}. \quad (69.14)$$

Se ve fácilmente que aparte de este cambio del campo efectivo no existe ninguna otra alteración de la ecuación del movimiento (69.9) debida a la inclusión de los efectos relativistas: despreciar la disipación significa como antes que el segundo miembro de la ecuación del movimiento debe ser perpendicular a \mathbf{H}_{ef} , es decir, debe tener la forma $\mathbf{M}' \times \mathbf{H}_{ef}$, en donde \mathbf{M}' sólo puede diferir de \mathbf{M} en la inclusión de los efectos relativistas, que siempre son pequeños en comparación con la magnitud \mathbf{M} grande y, por tanto, carecen de importancia. Los términos relativistas en \mathbf{H}_{ef} se suman a una magnitud que es pequeña debida a que \mathbf{M} varía sólo lentamente a través del cuerpo; estos términos pueden resultar significativos a longitudes de onda suficientemente largas.

§ 70. Magnones en un ferromagneto. El espectro

Apliquemos las ecuaciones deducidas en § 69 a la propagación de ondas en las que la densidad del momento magnético realiza pequeñas oscilaciones, con un movimiento de precesión alrededor de su valor de equilibrio \mathbf{M}_0 . Consideraremos una muestra de un sólo dominio con \mathbf{M}_0 constante en todo su volumen y tomaremos únicamente el caso de longitudes de onda mucho menores que el tamaño de la muestra. El medio puede considerarse infinito.

[†] Las magnitudes adimensionales K y K' para diversas sustancias ferromagnéticas tienen valores en un margen amplio desde varias décimas a algunas decenas. El orden de magnitud del cociente de las interacciones relativa y de intercambio viene dado por $a^3 U_{an}/T_c$, que vale usualmente $10^{-4}\text{-}10^{-5}$.

En primer lugar tendremos en cuenta únicamente las interacciones de intercambio, es decir utilizaremos la ecuación (69.11). Hagamos $\mathbf{M} = \mathbf{M}_0 + \mathbf{m}$, siendo \mathbf{m} pequeño y linealicemos la ecuación omitiendo los términos de segundo orden en \mathbf{m} ; como $M = M_0$, en esta aproximación $\mathbf{m} \perp \mathbf{M}_0$. El resultado es

$$\dot{\mathbf{m}} = \frac{|e|}{mc} \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{m}}{\partial x_i \partial x_k} \times \mathbf{M}_0; \quad (70.1)$$

a partir de ahora tomaremos $g = 2$. En el caso de una dependencia de \mathbf{m} con el espacio y el tiempo en la forma $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$, se tiene

$$i\omega \mathbf{m} = (|e|/mc) \alpha k^2 \mathbf{m} \times \mathbf{M}_0, \quad (70.2)$$

en donde $\alpha = \alpha(\mathbf{n}) = \alpha_{ik} n_i n_k$ y \mathbf{n} es el vector unidad en la dirección del vector de onda \mathbf{k} . Desarrollando esta ecuación en sus componentes se tiene

$$\begin{aligned} i\omega m_x &= (|e|/mc) \alpha M k^2 m_y, \\ i\omega m_y &= -(|e|/mc) \alpha M k^2 m_x, \end{aligned}$$

teniendo el eje z la dirección de \mathbf{M}_0 . De aquí que la relación de dispersión para las ondas de spin sea†

$$\omega = (|e| M / mc) \alpha(\mathbf{n}) k^2. \quad (70.3)$$

Vemos que, de acuerdo con la discusión realizada al principio de § 69, la frecuencia en la aproximación de intercambio tiende a cero cuando $k \rightarrow 0$. El vector \mathbf{m} de la onda de spin rota en el plano xy con velocidad angular ω constante, permaneciendo su módulo constante.

En la descripción cuántica, la fórmula (70.3) determina el espectro de energía de los magnones ($\epsilon = \hbar\omega$):‡

$$\epsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M \alpha(\mathbf{n}) k^2. \quad (70.4)$$

En el formalismo de la segunda cuantización, se sustituyen las magnitudes macroscópicas que describen el ferromagneto por operadores expresados en función de los operadores de creación y aniquilación de magnones. Veremos cómo se realiza esto en la práctica para los magnones de (70.4).

Asignemos a la magnitud clásica \mathbf{M} un operador vector $\hat{\mathbf{M}}$ cuyos componentes satisfacen ciertas reglas de conmutación. Sea $\hat{\mathbf{S}}(\mathbf{r})\delta V$ el operador del spin total

† Utilizando una teoría microscópica F. Bloch (1930) obtuvo por primera vez una relación de dispersión cuadrática para las ondas de spin. La expresión de este espectro en función de parámetros macroscópicos fue dada por L. D. Landau y E. M. Lifshitz (1945).

‡ En todo este capítulo β designará el magnetón de Bohr, $\beta = |e| \hbar / 2mc$.

de los átomos en un elemento de volumen físicamente infinitesimal δV en el punto \mathbf{r} . Los operadores $\hat{\mathbf{S}}(\mathbf{r}_1)\delta V_1$ y $\hat{\mathbf{S}}(\mathbf{r}_2)\delta V_2$ que se relacionan con elementos diferentes δV_1 y δV_2 , se comutan entre sí, pero los componentes de uno de ellos y los mismos operadores $\hat{\mathbf{S}}(\mathbf{r})\delta V$ obedecen las reglas normales de conmutación correspondientes a los momentos angulares:

$$\hat{S}_x \delta V \cdot \hat{S}_y \delta V - \hat{S}_y \delta V \cdot \hat{S}_x \delta V = i\hat{S}_z \delta V,$$

o sea $\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i\hat{S}_z/\delta V$ (y análogamente para los demás conmutadores). En el límite cuando $\delta V \rightarrow 0$, estas reglas pueden escribirse para \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2

$$\hat{S}_x(\mathbf{r}_1) \hat{S}_y(\mathbf{r}_2) - \hat{S}_y(\mathbf{r}_2) \hat{S}_x(\mathbf{r}_1) = i\hat{S}_z(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Multiplicando a continuación esta ecuación por $4\beta^2$ y observando que el operador de imanación es $\hat{\mathbf{M}} = -2\beta\hat{\mathbf{S}}$, obtenemos

$$\hat{M}_x(\mathbf{r}_1) \hat{M}_y(\mathbf{r}_2) - \hat{M}_y(\mathbf{r}_2) \hat{M}_x(\mathbf{r}_1) = -2i\beta\hat{M}_z(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (70.5)$$

En el caso de ondas de spin en las que \mathbf{M} realiza pequeñas oscilaciones alrededor del eje z y en la primera aproximación respecto a las magnitudes pequeñas m_x y m_y , podemos sustituir el operador \hat{M}_z por el número $M_z \approx M$; entonces

$$\hat{m}_x(\mathbf{r}_1) \hat{m}_y(\mathbf{r}_2) - \hat{m}_y(\mathbf{r}_2) \hat{m}_x(\mathbf{r}_1) = -2i\beta M \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (70.6)$$

A partir de esta expresión es evidente que m_y y m_x son en este caso (independientemente de algunos factores constantes) los «impulsos y coordenadas generalizadas» canónicamente conjugadas, como ϕ y ϱ' en la cuantización de las ondas sonoras en un líquido (§ 24). Sin embargo, existe una diferencia esencial entre ambos casos. La regla de conmutación (24.7) para los operadores de fonones es exacta y no depende de que sean las oscilaciones pequeñas o no (es decir, no depende de que sean pequeños los números de ocupación de los estados de fonones). La regla (70.6) es aproximada y únicamente es válida en primera aproximación respecto a la pequeña magnitud \mathbf{m} .

Mediante la regla de conmutación (70.6) y la relación entre los operadores \hat{m}_x y \hat{m}_y , que corresponde a las ecuaciones lineales (70.1) podemos hallar expresiones correspondientes a estos operadores en función de los operadores de aniquilación y creación de magnones como se hizo en el caso de los fonones en § 24 (ver § 71, problema 4).

Volvamos al estudio del espectro de magnones y a la influencia que tiene sobre el mismo los efectos relativistas. Ahora resulta necesario tener en cuenta también el campo magnético \mathbf{H} que se obtiene como resultado de las oscilaciones de \mathbf{M} . Éste será del mismo orden de magnitud que \mathbf{m} ; lo llamaremos ahora \mathbf{h} .

Las ecuaciones de Maxwell (69.10) dan

$$\mathbf{k} \times \mathbf{h} = 0, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{h} = -4\pi \mathbf{k} \cdot \mathbf{m}.$$

A partir de ellas vemos que \mathbf{h} resulta paralelo al vector de ondas y vale

$$\mathbf{h} = -4\pi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{m}) \mathbf{n}. \quad (70.7)$$

Si se sustituye (70.7) en los dos últimos términos del integrando de (69.5) se llega a

$$-\mathbf{m} \cdot \mathbf{h} - h^2/8\pi = 2\pi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{m})^2; \quad (70.8)$$

se ha omitido ahora el término $\mathbf{M}_0 \mathbf{h}$ porque su integración en todo el volumen se transforma en una integral de superficie (puesto que \mathbf{h} es un campo potencial) y se anula. La parte (70.8) de la energía de anisotropía de una onda de spin se denomina a veces *parte magnetostática*.

Supongamos que el ferromagneto sea uniáxico y del tipo de «eje fácil», de modo que \mathbf{M}_0 sea paralelo al eje de simetría del cristal (eje z): $\mathbf{M}_0 = v \mathbf{M}$. Con vistas a las aplicaciones posteriores, consideraremos también la presencia de un campo magnético externo \mathbf{H} paralelo a la misma dirección v ; la muestra se considera cilíndrica con su eje a lo largo de v . Entonces el campo dentro del cuerpo es $\mathbf{H} = \mathbf{H} + \mathbf{h}$. La ecuación linealizada del movimiento, que se escribe después de multiplicar por h , es

$$-i\varepsilon \mathbf{m} = 2\beta\{(\alpha k^2 + K + \tilde{\chi}/M) \mathbf{v} \times \mathbf{m} - \mathbf{v} \times \mathbf{h}\}. \quad (70.9)$$

En el caso de un cristal uniáxico $\alpha = \alpha_1 \sin^2 \theta + \alpha_2 \cos^2 \theta$ en donde θ es el ángulo formado entre \mathbf{k} y \mathbf{v} .

Sustituyendo \mathbf{h} tomado de (70.7), escribamos la ecuación en sus componentes; es conveniente tomar el eje x en el plano que contiene las direcciones de v y \mathbf{n} . A partir de la condición de compatibilidad de las dos ecuaciones resultantes para m_x y m_y , se halla la relación de dispersión

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M [(\alpha k^2 + K + \tilde{\chi}/M)(\alpha k^2 + K + \tilde{\chi}/M + 4\pi \sin^2 \theta)]^{1/2}. \quad (70.10)$$

Debido al término en $\sin^2 \theta = k_z^2/k^2$, el desarrollo de $\varepsilon(\mathbf{k})$ en potencias de los componentes de \mathbf{k} no es una simple serie de potencias. Esto se debe al largo alcance de las interacciones magnéticas.

Para cristales cúbicos es válida una expresión de la forma (70.10), que ha sido deducida para un ferromagneto uniáxico (del tipo de «eje fácil»). Esto es consecuencia de que el cambio de la energía de anisotropía en el caso de desviaciones pequeñas del vector \mathbf{M} desde su dirección de equilibrio tiene en cualquier caso la misma forma. Por ejemplo, en un cristal cúbico con $K' > 0$, la variación δU_{an}

cuando \mathbf{M} se separa de la dirección de \mathbf{M}_0 , que coincide con la arista del cubo, depende únicamente del ángulo θ formado entre \mathbf{M} y \mathbf{M}_0 y vale $\delta U_{an} = K'M^2\theta^2$. Comparando este valor con la expresión $\delta U_{an} = \frac{1}{2}KM^2\theta^2$ correspondiente a un cristal uniáxico, vemos que, para pasar al caso de un cristal cúbico con $K' > 0$, únicamente necesitamos reemplazar K por $2K'$ en (70.10). Análogamente es fácil ver que, para pasar al caso de un cristal cúbico con $K' < 0$ (teniendo \mathbf{M}_0 la dirección de una diagonal espacial del cubo), debemos sustituir K por $4|K'|/3$. Además en un cristal cúbico $\alpha(\mathbf{n})$ se reduce a una constante. En el caso de un ferromagneto uniáxico del tipo «plano fácil» ($K < 0$) la situación es diferente: la variación δU_{an} cuando \mathbf{M} se desvía respecto a \mathbf{M}_0 depende tanto del ángulo polar como del azimut de la dirección de \mathbf{M} respecto a \mathbf{M}_0 ; por tanto, este caso requiere una consideración especial (ver problema).

El resultado (70.10) está relacionado únicamente con la parte inicial del espectro, en el que resulta permisible un tratamiento macroscópico porque $k \ll 1/a$. Cuando k es grande, pero todavía se satisface esta condición ($\alpha k^2 \gg 4\pi, K$), la expresión (70.10) se convierte en

$$\epsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M\alpha(\mathbf{n}) k^2 + 2\beta\tilde{\mathbf{h}}. \quad (70.11)$$

El primer término de esta expresión es el mismo que en la expresión de intercambio puro (70.4). El campo externo añade simplemente el término $2\beta\tilde{\mathbf{h}}$ a la energía del magnón. Por consiguiente, en esta aproximación, el magnón tiene una proyección de su momento sobre \mathbf{M}_0 igual a -2β . La excitación de cada magnón reduce el momento magnético total del cuerpo en 2β .

En el caso opuesto, cuando $\mathbf{k} \rightarrow 0$, la expresión (70.10) tiende a una magnitud no nula, que para $\tilde{\mathbf{h}} = 0$ vale

$$\epsilon(0) = 2\beta MK \left(1 + \frac{4\pi}{K} \operatorname{sen}^2 \theta\right)^{1/2}. \quad (70.12)$$

Así pues, la inclusión de la anisotropía magnética produce un intervalo vacío o prohibido de energía en el espectro de magnones. [La frecuencia correspondiente $\omega(0) = \epsilon(0)/\hbar$ se denomina *frecuencia de resonancia ferromagnética*]. Esto es natural, puesto que en presencia de anisotropía incluso una rotación del momento magnético como un todo (es decir, para $\mathbf{k} = 0$) exige una energía finita. Vemos que para \mathbf{k} pequeño los efectos relativistas, aunque pequeños, producen correcciones relativamente grandes al espectro.

El concepto de magnones como excitaciones elementales se aplica a estados del cuerpo débilmente excitados y, por tanto, a temperaturas bajas. De aquí que en las fórmulas relativas a magnones, deben tomarse para $T = 0$ los valores de todas las constantes del material (incluyendo la imanación M).

Volvamos ahora a la hipótesis realizada en § 69 de que es débil la disipación.

En la descripción cuántica, la disipación significa que el período de vida de los magnones es finito debido a que interactúan entre sí y con otras cuasipartículas.

Si consideramos en primer lugar la interacción entre magnones, debemos empezar por señalar que en la aproximación del intercambio es constante el número de magnones: cada magnón tiene la misma contribución -2β a M_z , y la interacción de intercambio conserva M_z . Por tanto, en esta aproximación sólo pueden producirse procesos de dispersión. Sin embargo, su probabilidad disminuye con la temperatura, debido simplemente a la disminución del número de elementos de dispersión, de modo que el decaimiento del intercambio tiende siempre a cero para $T = 0$. Veremos posteriormente (§ 72) que un estado con un magnón en la aproximación de intercambio es de hecho un estado estrictamente estacionario del sistema.[†]

Para $T = 0$ el decaimiento de los magnones se debe únicamente a su desintegración. Estos procesos pueden ocurrir solamente debido a las interacciones relativistas y, por tanto, su probabilidad es pequeña. Además, para k pequeño la probabilidad de desintegración se ve siempre disminuida por el pequeño valor de los pesos estadísticos (volúmenes de fase) de los estados finales del proceso.

El decaimiento de los magnones también se ve producido por su interacción con los fonones; en este caso la parte del hamiltoniano de la interacción de intercambio que depende de la deformación del cristal actúa como operador de perturbación. Para $T = 0$ es posible la creación de un fonón por un magnón, pero el cuasiimpulso del magnón debe ser suficientemente grande: la velocidad del magnón $\partial\varepsilon/\hbar\partial k$ debe superar a la velocidad del sonido (cf. la tercera nota a § 65). La probabilidad del proceso es pequeña, porque el peso estadístico del estado final es reducido.

Finalmente, en un metal ferromagnético puede siempre aparecer la excitación de un magnón de un electrón que esté debajo de la superficie de Fermi, debido a la interacción de intercambio con los electrones de conducción. Aquí, de nuevo, es pequeña la probabilidad del proceso a k pequeña, porque es también pequeño el peso estadístico de los estados finales.

PROBLEMA

Hallar el espectro de los magnones en un ferromagneto uniaxial del tipo «plano fácil» ($K < 0$).

SOLUCIÓN. La imanación de equilibrio M_0 está comprendida en el plano perpendicular al eje de simetría del cristal (eje z); tomaremos su dirección como eje x . La ecuación linearizada del movimiento del momento magnético en este caso la forma

$$-i\epsilon\mathbf{m} = 2\beta\{\alpha k^2 \mathbf{n}_x \times \mathbf{m} - |K| m_z \mathbf{n}_y - \mathbf{n}_x \times \mathbf{h}\},$$

[†] Puede señalarse también que la sección eficaz para la dispersión mutua de dos magnones en la aproximación de intercambio tiende a cero cuando disminuye su energía (ver § 73). Esto reduce además el decaimiento de los magnones a bajas temperaturas. A temperaturas suficientemente bajas, los efectos relativistas tienen importancia también para los procesos de dispersión.

en donde \mathbf{n}_x y \mathbf{n}_y son vectores unitarios a lo largo de los ejes coordenados y estando comprendido el vector \mathbf{m} dentro del plano yz , que es perpendicular a \mathbf{M}_0 . Sustituyendo \mathbf{h} procedente de (70.7), escribiendo la ecuación en sus componentes e igualando a cero el determinante del sistema resultante, obtenemos el espectro de magnones

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M[\alpha k^2(\alpha k^2 + |K|) + 4\pi \sin^2 \theta (\alpha k^2 + |K| \sin^2 \phi)]^{1/2},$$

en donde θ y ϕ son el ángulo polar y azimutal de la dirección de \mathbf{k} respecto a la de \mathbf{M}_0 , midiéndose el azimut desde el plano xz . Cuando $\alpha k^2 \gg 1$, volvemos al mismo espectro cuadrático (70.4) y cuando $k \rightarrow 0$ la energía de los magnones tiende a

$$\varepsilon(0) = 4(\pi|K|)^{1/2} \beta M |\sin \theta \sin \phi|,$$

que es nula cuando el vector \mathbf{k} está en el plano xz que contiene el eje de simetría y la imanación espontánea del cristal. Sin embargo, esta tendencia a la anulación es sólo aproximada: la inclusión en la energía de anisotropía de términos de orden superior produce anisotropía en el plano xy , y, por consiguiente, un intervalo prohibido de energía para todas las direcciones de \mathbf{k} .†

§ 71. Magnones en un ferromagneto. Magnitudes termodinámicas

Los magnones excitados en un ferromagneto tienen una cierta contribución en sus magnitudes termodinámicas. Los resultados obtenidos en § 70 nos permiten calcular esta contribución a temperaturas que son bajas en el sentido de que $T \ll T_c$. Efectivamente, en el equilibrio térmico a temperatura T , la mayoría de los magnones tienen energía $\varepsilon \sim T$. En el caso de un espectro cuadrático

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2\beta M \alpha(\mathbf{n}) k^2, \quad (71.1)$$

esto significa que a temperaturas $T \ll T_c$ los magnones se excitan con cuasiimpulsos $k \ll (T_c/\beta M \alpha)^{1/2}$. Utilizando la estimación (69.7) para α y estimando la imanación como $M \sim \beta/a^3$ (el momento magnético por celda unidad es del orden de un múltiplo pequeño de β), encontramos que $ak \ll 1$, es decir, la condición para que sean válidos los resultados de § 70.

Las partes debidas a los «magnones» de las magnitudes termodinámicas en un ferromagneto se calculan como las magnitudes termodinámicas de un gas de Bose ideal con potencial químico cero. Por ejemplo, la parte de magnones del potencial termodinámico Ω es

$$\Omega_{\text{mag}} = T \int \log(1 - e^{-\varepsilon/T}) V d^3k / (2\pi)^3; \quad (71.2)$$

† Puede recordarse (ver EMC, § 37) que el desarrollo de la energía de anisotropía en potencias de \mathbf{M} es realmente un desarrollo en función del cociente relativista v/c (y no se debe el pequeño valor de \mathbf{M} , es decir, a la proximidad al punto de Curie).

ver parte 1, (54.4). La contribución de los magnones a la energía interna es entonces†

$$\begin{aligned} E_{\text{mag}} &= \Omega_{\text{mag}} - T \partial \Omega_{\text{mag}} / \partial T \\ &= \int \frac{\epsilon}{e^{\epsilon/T} - 1} \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (71.3)$$

La contribución de los magnones a la imanación espontánea determina su dependencia con la temperatura. Se calcula como la derivada

$$M_{\text{mag}} \equiv M(T) - M(0) = -\frac{1}{V} \left[\frac{\partial \Omega_{\text{mag}}}{\partial \Phi} \right]_{\Phi \rightarrow 0}$$

respecto al campo magnético externo; cf. EMC, (31.4). Derivando la expresión (71.2) obtenemos

$$M_{\text{mag}} = - \int \left[\frac{\partial \epsilon}{\partial \Phi} \right]_{\Phi \rightarrow 0} \frac{1}{e^{\epsilon/T} - 1} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (71.4)$$

La derivada $- \partial \epsilon / \partial \Phi$ es el momento magnético intrínseco del magnón.

Calculemos las integrales (71.3) y (71.4) para temperaturas $T \gg 2\pi\beta M$;‡ entonces la expresión límite (71.1) puede utilizarse para el espectro de magnones. En vista de la rápida convergencia de las integrales, la integración puede extenderse a todo el espacio k en lugar de a la celda de la red recíproca. Considerando a α como constante (en el caso de cristales cúbicos) y sustituyendo $d^3 k$ por $4\pi k^2 dk$ se obtiene después de una sustitución evidente

$$\begin{aligned} E_{\text{mag}} &= \frac{VT^{5/2}}{4\pi^2 A^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1} \\ &= VT^{5/2} \Gamma(5/2) \zeta(5/2) / 4\pi^2 A^{3/2}, \end{aligned}$$

en donde designamos por brevedad a $2\beta M\alpha$ por A (de modo que $\epsilon = Ak^2$). § Para el calor específico $C_{\text{mag}} = \partial E_{\text{mag}} / \partial T$, de y por tanto

$$\begin{aligned} C_{\text{mag}} &= V \frac{5\Gamma(5/2)\zeta(5/2)}{8\pi^2 A^{3/2}} T^{3/2} \\ &= 0.113(T/A)^{3/2} V. \end{aligned} \quad (71.5)$$

† Con el potencial químico $\mu = 0$ (y, por tanto, también $\Phi = N\mu = 0$) tenemos $E = \Phi + TS - PV = TS + \Omega$; la entropía $S = -\partial \Omega / \partial T$. La expresión (71.3) podía haberse escrito también como es natural directamente sin utilizar (71.2).

‡ Para el valor típico $M = 2 \cdot 10^3$ G, esta condición da $T \gg 1$ °K.

§ Ver parte 1, § 58, respecto al cálculo de dichas integrales.

Esta expresión da únicamente la parte del calor específico correspondiente a los magnones; el calor específico del cristal contiene también la parte usual de los fonones.

Volviendo a la integral (71.4), sustituimos el valor -2β en el caso del momento magnético del magnón de acuerdo con (70.11). El resultado es, para $T \gg 2\pi\beta M$

$$M_{\text{mag}} = -\frac{\beta T^{3/2}}{2\pi^2 A^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{e^x - 1}, \quad (71.6)$$

de donde

$$\begin{aligned} M(T) &= M(0) - \beta T^{3/2} \Gamma(3/2) \zeta(3/2) / 2\pi^2 A^{3/2} \\ &= M(0) - 0.117\beta(T/A)^{3/2}; \end{aligned} \quad (71.7)$$

la contribución de los magnones es, como es natural, la totalidad de la variación de la imanación puesto que los fonones no llevan momento magnético. Así pues, la variación de la imanación espontánea en el intervalo de temperaturas $2\pi\beta M \ll T \ll T_c$ sigue la ley $T^{3/2}$ (F. Bloch 1930).

La presencia del intervalo prohibido (70.10) en el espectro de los magnones conduce a una dependencia exponencial de C_{mag} y M_{mag} respecto a T a temperaturas todavía más bajas: cuando $T \ll \beta KM$,

$$C_{\text{mag}}, M_{\text{mag}} \propto \exp(-2\beta KM/t). \quad (71.8)$$

La magnitud que aparece en el numerador del exponente es el menor valor del intervalo prohibido, que se alcanza a $\theta = 0$ y $\theta = \pi$; ver también el problema 1.

Si la imanación espontánea de un ferromagneto en el estado fundamental es igual al valor más grande posible (*nominal*), correspondiente al caso en que todos los momentos atómicos del cuerpo son paralelos, este valor resulta sin cambio por la aplicación de un campo magnético externo en esa dirección, es decir resulta nula la susceptibilidad χ en dicha dirección.

La inclusión de las interacciones relativistas reduce la imanación espontánea (a $T = 0$) en comparación con su valor de «intercambio» y origina la aparición de una susceptibilidad no nula (T. Holstein y H. Primakoff 1940). Aunque este efecto es muy pequeño su cálculo es de interés fundamental.

En los cálculos anteriores de la parte o contribución magnética de las magnitudes termodinámicas, hemos omitido la energía del punto cero de los «osciladores magnéticos» que no contribuyen a la dependencia con la temperatura de estas magnitudes. La energía del punto cero corresponde a los números de ocupación de los estados de magnón de $\frac{1}{2}$:

$$[E(0)]_{\text{mag}} = \int \frac{1}{2} \varepsilon(\mathbf{k}) V d^3k / (2\pi)^3.$$

De acuerdo con ello, la imanación del «punto cero» es

$$\mathbf{M}(0) = - \int \frac{1}{2} (\partial \epsilon / \partial \tilde{\mathbf{H}}) d^3 k / (2\pi)^3. \quad (71.9)$$

Esta integral diverge para k grande, es decir, está determinada principalmente por los magnones de longitud de onda corta ($ka \sim 1$), que no pueden tratarse macroscópicamente. Sin embargo, la variación de la imaginación bajo la influencia de efectos relativistas está determinada, como veremos, por la región de onda larga del espectro de los magnones y puede calcularse mediante las fórmulas deducidas en § 70.

Por sencillez, consideraremos un cristal cúbico y despreciaremos la constante de anisotropía, que en este caso es pequeña, es decir, escribiremos el espectro de magnones (70.10) en la forma

$$\epsilon(\mathbf{k}) = 2\beta[(bk^2 + \tilde{\mathbf{H}})(bk^2 + \tilde{\mathbf{H}} + 4\pi M \sin^2 \theta)]^{1/2}, \quad (71.10)$$

en donde $b = \alpha M$; en esta expresión, el término $4\pi M \sin^2 \theta$ que procede de la energía magnetostática corresponde a los efectos relativistas. La variación requerida δM de la imanación bajo la influencia de los efectos relativistas se halla restando de (71.9) una integral semejante con $\epsilon_{\text{int}}(\mathbf{k}) = 2\beta b k^2 + 2\beta \tilde{\mathbf{H}}$ en lugar de $\epsilon(\mathbf{k})$:

$$\delta M = - \frac{1}{2} \int \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{H}}} [\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_{\text{int}}(\mathbf{k})] \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (71.11)$$

Esta integral es convergente para valores grandes de \mathbf{k} .†

En el cálculo, es conveniente derivar primero respecto a M a b constante y se ha utilizado la notación b en (71.10) con este objeto. Una redistribución simple nos da

$$\frac{\partial \delta M}{\partial M} = - \frac{4\pi^2 \beta M}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{\sin^4 \theta \cdot 2\pi k^2 dk \cdot \sin \theta d\theta}{(bk^2 + \tilde{\mathbf{H}})^{1/2} (bk^2 + \tilde{\mathbf{H}} + 4\pi M \sin^2 \theta)^{3/2}}.$$

Puesto que la integración respecto a k converge, puede extenderse hasta ∞ .

La integral se evalúa fácilmente cuando $\tilde{\mathbf{H}} = 0$; entonces integrando respecto a M , obtenemos

$$\delta M = -\sqrt{\pi} \beta / 8\alpha^{3/2}. \quad (71.12)$$

† Para evitar malas interpretaciones, podemos señalar que la corrección a la energía del estado fundamental no puede determinarse de este modo: sin la derivación respecto a $\tilde{\mathbf{H}}$, la integral de $\epsilon - \epsilon_{\text{int}}$ es divergente cuando se utilizan las expresiones de longitud de onda larga para el espectro de los magnones.

Esta cantidad es muy pequeña: $\delta M/M \sim 10^{-6}$.

Si el campo externo es grande ($\mathfrak{H} \gg 4\pi M$), podemos despreciar el término $4\pi M \sin^2 \theta$ en el denominador del integrando. El resultado es entonces

$$\delta M = -2\pi\beta M^{1/2}/15\alpha^{3/2} \mathfrak{H}^{1/2}. \quad (71.13)$$

Cuando $\mathfrak{H} \rightarrow \infty$, δM tiende a cero, como debe ocurrir.

Para concluir podemos señalar que, si hubiésemos intentado investigar la dependencia de la imanación con la temperatura en un ferromagneto bidimensional mediante el mismo método que se ha utilizado en esta sección para el caso tridimensional, entonces deberíamos haber obtenido (en una aproximación puramente de intercambio) una integral con divergencia logarítmica en lugar de (71.6). Esto significa que la imanación espontánea en un sistema tridimensional con interacción de intercambio es realmente cero para todo valor de $T \neq 0$. Este resultado es análogo al obtenido en § 27 para un líquido de Bose bidimensional y en la parte 1, § 137, para un cristal bidimensional. Puesto que la energía del sistema es independiente de la dirección del momento magnético, la expresión correspondiente al mismo contiene únicamente las derivadas del vector \mathbf{M} ; esto a su vez conduce finalmente a la divergencia de las fluctuaciones (en el caso bidimensional) que destruye la imanación. La inclusión de las interacciones relativistas que dependen de la dirección de \mathbf{M} , estabiliza las fluctuaciones y hace posible la existencia de un ferromagneto bidimensional.

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Calcular las contribuciones de los magnones a las magnitudes termodinámicas a temperaturas $T \ll \epsilon(0)$.

SOLUCIÓN. Los magnones importantes son aquellos con cuasiimpulsos \mathbf{k} pequeños que se propagan en una dirección en donde es mínimo el intervalo prohibido, es decir cerca de $\theta = 0$ o $\theta = \pi$; estas dos direcciones dan contribuciones iguales. Por ejemplo, cuando θ es pequeño tenemos, con la exactitud necesaria,

$$\epsilon(\mathbf{k}) = 2\beta KM + Ak^2 + 4\pi\beta M\theta^2,$$

en donde $A = 2\beta M\alpha$ en el caso de cristales cúbicos y $A = 2\beta M\alpha_2$ en el caso de cristales uniaxicos del tipo de «eje fácil». La distribución de magnones a estas temperaturas puede tomarse como una distribución de Boltzmann (es decir, podemos despreciar la unidad en los denominadores de los integrandos) y puede sustituirse $\epsilon(\mathbf{k})$ por $\epsilon(0)$ en todos los coeficientes de los exponentiales. La integración respecto a k y a θ se extiende hasta el infinito; el resultado es

$$E_{\text{mag}} = V \frac{KT^{5/2}}{32\pi^{5/2} A^{3/2}} \exp\left(-\frac{2\beta KM}{T}\right), \quad M_{\text{mag}} = -\frac{E_{\text{mag}}}{V KM}.$$

Al calcular el calor específico, únicamente se necesita derivar el factor exponencial:

$$C_{\text{mag}} = (2\beta KM/T^2) E_{\text{mag}}.$$

PROBLEMA 2. Determinar la dependencia de la imanación con el campo externo cuando se cumplen las condiciones $\Phi \ll 4\pi M$, $T \ll \beta\Phi$.

SOLUCIÓN. En estas condiciones pueden despreciarse los términos relativistas y escribirse $\epsilon(\mathbf{k})$ en la forma (70.11). Derivando la expresión (71.4) se tiene

$$\frac{\partial M}{\partial \Phi} = \frac{4\beta^2}{T} \int \frac{e^{\epsilon/T}}{(e^{\epsilon/T}-1)^2} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}.$$

Los valores de importancia de \mathbf{k} en la integral son pequeños. De aquí que

$$\frac{\partial M}{\partial \Phi} \approx 4\beta^2 T \int \frac{1}{\epsilon^2} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{T}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{(\alpha k^2 M_0 + \Phi)^2};$$

tomemos $\alpha = \text{constante}$ y entonces M_0 es el valor de M para $\Phi = 0$. El resultado final es

$$\frac{\partial M}{\partial \Phi} = \frac{T}{8\pi(\alpha M_0)^{3/2} \Phi^{1/2}}.$$

Así pues, con estas condiciones, $M - M_0 \propto \Phi^{1/2}$.

PROBLEMA 3. Determinar la dependencia existente entre la imanación a $T = 0$ y un campo externo débil.

SOLUCIÓN. Derivando la integral (71.11), con $\epsilon(\mathbf{k})$ tomado de (71.10), con respecto a Φ , obtenemos

$$\frac{\partial M}{\partial \Phi} = \int \frac{4\pi^2 M_0^2 \beta \sin^4 \theta}{[(\alpha M_0 k^2 + 4\pi M_0 \sin^2 \theta + \Phi)(\alpha M_0 k^2 + \Phi)]^{3/2}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}.$$

Cuando $\Phi \rightarrow 0$, la integral respecto a dk diverge logarítmicamente para k pequeño. De aquí que podamos poner con exactitud logarítmica $k = 0$, $\Phi = 0$ en el primer factor del denominador y $\Phi = 0$ en el segundo factor, pero cortando la integral por debajo a $k^2 \sim \Phi/\alpha M_0$ y por encima a $k^2 \sim 4\pi/\alpha$. El resultado es

$$\frac{\partial M}{\partial \Phi} = \frac{\beta}{32 \sqrt{\pi} M_0 \alpha^{3/2}} \log \frac{4\pi M_0}{\Phi}.$$

En (71.10) se desprecia K . Cuando $\Phi \ll KM$, Φ se sustituye por KM_0 en el logaritmo.

PROBLEMA 4. En la aproximación de intercambio, determinar la función de correlación espacial de las fluctuaciones en la imanación a distancias $r \gg a$.

SOLUCIÓN. Los operadores \hat{m}_x y \hat{m}_y que satisfacen la regla de commutación (70.6) y que tienen la forma (en la representación de Schrödinger) en función de los operadores de aniquilación y destrucción

$$\hat{m}_x(\mathbf{r}) = (\beta M/V)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}),$$

$$\hat{m}_y(\mathbf{r}) = i(\beta M/V)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}).$$

Con estos operadores calculamos la función de correlación

$$\phi_{ik}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \langle \hat{m}_i(\mathbf{r}_1) \hat{m}_k(\mathbf{r}_2) + \hat{m}_k(\mathbf{r}_2) \hat{m}_i(\mathbf{r}_1) \rangle, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,$$

en donde los subíndices i y k toman los valores x e y . Puesto que únicamente los productos $\langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k^- \rangle = n_k$ y $\langle \hat{a}_k^- \hat{a}_k^+ \rangle = n_k + 1$ (en donde n_k son los números de ocupación de los estados de magnones) tienen elementos diagonales de matriz no nulos, se tiene

$$\phi_{ik}(\mathbf{r}) = \delta_{ik} \int 2\beta M (n_k + \frac{1}{2}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 k / (2\pi)^3.$$

El integrando da directamente el componente de Fourier de la función de correlación. Puede omitirse el término constante: corresponde a un término de función delta en $\phi_{ik}(\mathbf{r})$, mientras que todo el análisis que estamos realizando se refiere únicamente a distancias $r \gg a$. Así pues,

$$\phi_{ik}(\mathbf{k}) = 2\beta M n_k \delta_{ik} = 2\beta M [e^{\epsilon(\mathbf{k})/T} - 1]^{-1} \delta_{ik}.$$

En el límite clásico, cuando $\epsilon \ll T$, tenemos

$$\phi_{ik}(\mathbf{k}) = \delta_{ik} T / 2\alpha k^2.$$

En un ferromagneto cúbico, $\alpha = \text{constante}$, y

$$\phi_{ik}(\mathbf{r}) = \delta_{ik} T / 8\pi\alpha r, \quad r \gg (\beta M \alpha / T)^{1/2}.$$

§ 72. El hamiltoniano del spin

Para deducir la relación de dispersión para todos los valores del cuasiimpulso y no solamente en el límite de longitudes de onda largas, debemos hacer uso de modo natural de una información más detallada acerca de la estructura microscópica de un ferromagneto.

Consideremos un aislante compuesto por átomos con momento angular orbital nulo, pero spin S no nulo. Si no nos hemos de ocupar de los estados de elevada excitación que se obtienen como consecuencia de la excitación de las capas electrónicas de los átomos, podemos promediar el hamiltoniano del sistema respecto a las variables orbitales de los electrones de los átomos en sus estados fundamentales (estando los núcleos atómicos fijos a los nudos de la red). Esto da el hamiltoniano del spin del sistema, que contiene únicamente los operadores de los spines totales de los átomos.[†]

Si tenemos en cuenta precisamente la interacción de intercambio, que depende de las orientaciones relativas de los spines únicamente, deben aparecer en el hamiltoniano los operadores de los vectores de spin atómico como combinaciones esca-

[†] El procedimiento es análogo al de construcción del hamiltoniano de los átomos individuales que describe la estructura fina de los niveles atómicos; cf. MC, § 72.

lares. Tiene un considerable interés metodológico investigar un sistema descrito por el hamiltoniano simple

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{n}} J_{\mathbf{nm}} \hat{S}_{\mathbf{n}} \hat{S}_{\mathbf{m}}, \quad J_{\mathbf{nm}} = J(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m), \quad (72.1)$$

en donde la suma se extiende a todos los átomos; los subíndices «vectoriales» \mathbf{m} y \mathbf{n} (con componentes enteros) señalan las posiciones de los nudos de la red y \mathbf{r}_n son sus vectores de posición. Los números $J_{\mathbf{nm}}$ se denominan *integrales de intercambio*; cf. MC, § 62, problemas.† Haciendo una suma independiente respecto a \mathbf{m} y \mathbf{n} , cada par de átomos aparece dos veces en la suma (72.1) y como es natural $J_{\mathbf{nm}} = J_{\mathbf{mn}}$.

En (72.1) se suponen que todos los átomos magnéticos de la red son iguales (uno en cada celda unidad). Sin embargo, la hipótesis básica que subyace bajo este hamiltoniano es que los átomos de la red están suficientemente alejados entre sí. La integral de intercambio está determinada por el «solapamiento» de las funciones de onda de los dos átomos y disminuye muy rápidamente con la distancia entre ellos (exponencialmente). En el caso de un sistema de átomos elevados, podemos admitir por tanto una interacción por pares y entonces (72.1) no contiene términos con productos de operadores de spin de más de dos átomos. Podemos suponer con la misma exactitud que la interacción de intercambio entre dos átomos se realiza a través de un sólo par de electrones, uno de cada átomo. Entonces el operador de interacción se forma bilinealmente a partir de los operadores de spin electrónico y, después de promediar respecto a los estados de los átomos, bilinealmente respecto a los spines atómicos (C. Herring 1966).§

Un sistema descrito por el hamiltoniano (72.1) es ferromagnético si las integrales de intercambio $J_{\mathbf{mn}} > 0$. Determinemos la energía del estado fundamental de dicho sistema y supongamos que se encuentra también presente un campo magnético \mathfrak{H} externo, sumando a (72.1) el operador

$$\hat{V} = -2\beta \mathfrak{H} \sum_{\mathbf{m}} S_{\mathbf{m}z}, \quad (72.2)$$

de modo que el eje z se escoge paralelo al campo. Los operadores $\sum S_{\mathbf{m}z}$ de la proyección del spin total del sistema se conmuta tanto con H_{int} como con \hat{V} ; los estados del sistema pueden clasificarse, por tanto, mediante los valores propios de esta magnitud.

En el caso ferromagnético, el estado fundamental corresponde al valor más grande posible NS de la proyección del spin total, siendo N el número de átomos

† La descripción de la interacción de intercambio mediante el hamiltoniano de spin se debe a P. A. M. Dirac (1929). El hamiltoniano (72.1) fue introducido por J. H. van Vleck (1931) y suele denominarse *hamiltoniano de Heisenberg*, porque corresponde a un modelo de ferromagneto que fue estudiado principalmente por Heisenberg.

§ En estas condiciones, la suma de (72.1) debe tomarse como es natural únicamente sobre pares de átomos adyacentes. Sin embargo, esto no simplifica las fórmulas y, por tanto, no se indicará explícitamente.

del sistema; como es natural, este resultado es independiente de la presencia de un campo externo, que simplemente distingue la dirección del eje.

Sea χ_0 la función de onda de spin normalizada del estado fundamental. El valor máximo NS de la proyección del spin total puede conseguirse únicamente si la proyección del spin de cada átomo tiene también su valor máximo S . De aquí que χ_0 sea una función propia de cada uno de los operadores S_{nz} :

$$\hat{S}_{nz}\chi_0 = S\chi_0. \quad (72.3)$$

En lo que sigue necesitaremos los operadores $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$, que obedecen las reglas de commutación

$$\hat{S}_+\hat{S}_- - \hat{S}_-\hat{S}_+ = 2\hat{S}_z, \quad \hat{S}_z\hat{S}_\pm - \hat{S}_\pm\hat{S}_z = \pm\hat{S}_\pm; \quad (72.4)$$

ver *MC*, (26.12). Sus elementos de matriz son

$$\langle S_z | S_+ | S_z - 1 \rangle = \langle S_z - 1 | S_- | S_z \rangle = \sqrt{(S+S_z)(S-S_z+1)}; \quad (72.5)$$

ver *MC*, (27.12). El operador \hat{S}_+ hace incrementar en una unidad el valor del componente S_z y \hat{S}_- lo hace disminuir en una unidad. Escribamos también

$$\hat{S}_m\hat{S}_n = \hat{S}_{mz}\hat{S}_{nz} + \frac{1}{2}(\hat{S}_{m+}\hat{S}_{n-} + \hat{S}_{m-}\hat{S}_{n+})$$

y

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{m \neq n} J_{mn} (\hat{S}_{mz}\hat{S}_{nz} + \hat{S}_{m-}\hat{S}_{n+}) - 2\beta\hbar \sum_m \hat{S}_{mz}, \quad (72.6)$$

utilizando la simetría $J_{mn} = J_{nm}$ y la commutatividad de los operadores que pertenecen a átomos diferentes.

Puesto que los operadores \hat{S}_{n+} tienen elementos de matriz únicamente para transiciones con incremento de los números S_z , tenemos para el estado con los valores máximos de estos números

$$\hat{S}_{n+}\chi_0 = 0, \quad (72.7)$$

como se ve también a partir de las expresiones explícitas para los elementos de matriz (72.5). De aquí que, cuando el hamiltoniano (72.6) actúa sobre la función de onda χ_0 , el resultado es

$$\hat{H}\chi_0 = \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{m \neq n} J_{mn} S^2 - 2\beta\hbar NS \right\} \chi_0.$$

La expresión entre corchetes es la energía E_0 del estado fundamental. Sustituyendo la suma respecto a \mathbf{m} y \mathbf{n} por la suma respecto a \mathbf{m} y a $\mathbf{q} = \mathbf{n} - \mathbf{m}$, podemos escribir finalmente

$$E_0 = -\frac{1}{2}NS^2 \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} - 2\beta SN\tilde{\mathcal{S}}. \quad (72.8)$$

El momento magnético total del sistema en este estado es $2\beta SN$.

El siguiente estado del sistema, según el orden de proyección del spin total decreciente, corresponde al valor $NS - 1$ de este último y a la excitación de un magnón con momento magnético -2β . Este valor de la proyección del spin total se presenta para un estado con función de onda

$$(2S)^{-1/2} \hat{S}_{\mathbf{n}-} \chi_0, \quad (72.9)$$

en la cual el efecto del operador $\hat{S}_{\mathbf{n}-}$ reduce en una unidad la proyección del spin de un átomo.† Sin embargo, esta función no es una función propia del hamiltoniano del sistema; todavía no tiene en cuenta la simetría de traslación de la red. La función propia del hamiltoniano debe construirse como una combinación lineal de las funciones (72.9) con todos los valores de \mathbf{n} . Razonamientos semejantes a los que dieron en § 55 las funciones de Bloch para un electrón en un campo periódico demuestran que para tener en cuenta correctamente la simetría de traslación, esta combinación lineal debe tener la forma

$$\chi_{\mathbf{k}} = (2NS)^{-1/2} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{n}}} \hat{S}_{\mathbf{n}-} \chi_0; \quad (72.10)$$

el factor $N^{-1/2}$ es para la normalización. El vector constante \mathbf{k} es precisamente el cuasiimpulso del magnón.

La energía $\varepsilon(\mathbf{k})$ del magnón es la diferencia $E_{\mathbf{k}} - E_0$ entre las energías de los estados excitado y fundamental del sistema. De aquí que

$$(\hat{H} - E_0) \chi_{\mathbf{k}} = \varepsilon(\mathbf{k}) \chi_{\mathbf{k}}.$$

Sustituyendo en el primer miembro la expresión (72.10) y sustituyendo $E_0 \chi_0$ en lugar de $\hat{H} \chi_0$, obtenemos

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \chi_{\mathbf{k}} = (2NS)^{-1/2} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{n}}} (\hat{H} \hat{S}_{\mathbf{n}-} - \hat{S}_{\mathbf{n}-} \hat{H}) \chi_0. \quad (72.11)$$

La normalización de la función (72.9) se verifica fácilmente observando que

$$\begin{aligned} (\hat{S}_{\mathbf{n}-} \chi_0)^* (\hat{S}_{\mathbf{n}-} \chi_0) &= \chi_0^* \hat{S}_{\mathbf{n}-}^+ \hat{S}_{\mathbf{n}-} \chi_0 \\ &\equiv \langle S | S_{\mathbf{n}+} S_{\mathbf{n}-} | S \rangle \\ &= \langle S | S_{\mathbf{n}+} | S-1 \rangle \langle S-1 | S_{\mathbf{n}-} | S \rangle \\ &= 2S. \end{aligned}$$

Aquí se calcula el conmutador fácilmente escribiendo \hat{H} en la forma (72.6) y utilizando las reglas de commutación (72.4). Teniendo en cuenta de nuevo la simetría de los coeficientes J_{mn} , se tiene

$$\hat{H}\hat{S}_{n-} - \hat{S}_{n-}\hat{H} = \sum_m' J_{mn}(\hat{S}_{mz}\hat{S}_{n-} - \hat{S}_{nz}\hat{S}_{m-}) + 2\beta\delta\hat{S}_{n-}. \quad (72.12)$$

Finalmente, sustituyendo esta expresión en (72.11), utilizando (72.3) y pasando a la suma respecto a $\mathbf{q} = \mathbf{n} - \mathbf{m}$, tenemos

$$\epsilon(\mathbf{k}) \chi_{\mathbf{k}} = \left\{ S \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} (1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{q}}}) + 2\beta\delta \right\} \chi_{\mathbf{k}}.$$

La expresión entre corchetes es la energía del magnón buscada. La parte imaginaria de la expresión bajo el signo de suma, al ser una función impar de $\mathbf{r}_{\mathbf{q}}$, da cero al realizar la suma y el resultado es

$$\epsilon(\mathbf{k}) = S \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} (1 - \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{q}}) + 2\beta\delta \quad (72.13)$$

(F. Bloch 1930).

Esta fórmula da la relación de dispersión exacta para los magnones en un sistema descrito por el hamiltoniano (72.1). Como es natural en el límite de \mathbf{k} pequeño se transforma en la relación cuadrática

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} Sk_i k_k \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} x_{\mathbf{q}i} x_{\mathbf{q}k} + 2\beta\delta. \quad (72.14)$$

El punto de Curie del sistema en cuestión se encuentra a una temperatura $T_c \sim J$ y por ello a temperaturas $T \gg J$ el sistema es ciertamente paramagnético. A dichas temperaturas podemos, como primera aproximación, despreciar conjuntamente la interacción entre átomos. En esta aproximación, la susceptibilidad magnética del sistema será la misma que la de un gas ideal de átomos con spin S , a saber

$$\chi = \frac{N}{V} \frac{4\beta^2 S(S+1)}{3T} \quad (72.15)$$

(ver Parte 1, § 52); la susceptibilidad es por unidad de volumen. Esta expresión es el primer término del desarrollo de la función $\chi(T)$ en potencias de $1/T$. Los términos siguientes dependen de la interacción de los átomos; determinaremos el primero de estos términos.

Se define la susceptibilidad (en un campo cero) como la derivada $\chi = \partial M / \partial \delta$ cuando $\delta \rightarrow 0$ y se calcula la imanación como la derivada de la energía libre: $V M = -\partial F / \partial \delta$. Para resolver el problema necesitamos calcular F hasta los términos en $1/T^2$.

Empezaremos a partir de la fórmula $F = -T \log Z$, en donde Z es la función de partición

$$\begin{aligned} Z &= \sum_n e^{-E_n/T} \\ &\approx \sum_n \left(1 - \frac{E_n}{T} + \frac{E_n^2}{2T^2} - \frac{E_n^3}{6T^3} \right); \end{aligned}$$

la suma se extiende a todos los niveles energéticos del sistema.[†] El número total de niveles del espectro del sistema es finito e igual al número de combinaciones posibles de orientaciones de los spines atómicos respecto a la red. Cada spin tiene $2S + 1$ orientaciones diferentes; por tanto, dicho número es $(2S + 1)^N$. Indicando con una barra la media aritmética, podemos escribir

$$Z = (2S+1)^N \left[1 - \frac{1}{T} \bar{E} + \frac{1}{2T^2} \bar{E}^2 - \frac{1}{6T^3} \bar{E}^3 \right].$$

El valor medio $\bar{E}^m = \text{tr } \hat{H}^m / (2S + 1)^N$. De acuerdo con una propiedad bien conocida, puede calcularse la tarea del operador con cualquier conjunto completo de funciones de onda; escogemos aquellas que corresponden a todas las combinaciones posibles de orientaciones de los spines atómicos. Entonces la operación de promediar se reduce a un promediado independiente de cada spin sobre sus direcciones, y $\bar{E} = 0$. Tomando a continuación el logaritmo de Z y desarrollando de nuevo en potencias de $1/T$, tenemos con la misma exactitud

$$F = -TN \log (2S+1) - \frac{1}{2T} \bar{E}^2 + \frac{1}{6T^2} \bar{E}^3. \quad (72.16)$$

En esta expresión únicamente los términos que contienen \mathfrak{H}^2 contribuyen a la susceptibilidad. Omitiendo todos los demás términos y observando que las potencias impares de los componentes de spin dan cero al promediar se tiene

$$F = -\frac{(2\beta\mathfrak{H})^2}{2T} \sum_{\mathbf{n}} \bar{S}_{\mathbf{n}z}^2 - \frac{(2\beta\mathfrak{H})^2}{2T^2} \cdot \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{m}} 2J_{mn} (\bar{S}_{\mathbf{n}} \bar{S}_{\mathbf{n}z}) (\bar{S}_{\mathbf{m}} \bar{S}_{\mathbf{m}z}).$$

Los valores medios son

$$\bar{S}_{\mathbf{n}z} \bar{S}_{\mathbf{n}x} = \bar{S}_{\mathbf{n}z} \bar{S}_{\mathbf{n}y} = 0, \quad \bar{S}_{\mathbf{n}z}^2 = \frac{1}{3} S(S+1).$$

[†] El cálculo siguiente de la energía libre corresponde a la continuación hasta el término siguiente del desarrollo realizado en la Parte 1, § 73.

Así pues,

$$F = -\frac{2}{3T} \beta^2 \hbar^2 N S(S+1) - \frac{2}{9} \beta^2 \hbar^2 N S^2 (S+1)^2 \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}},$$

y de aquí tenemos finalmente para la susceptibilidad

$$\chi = \frac{4\beta^2 S(S+1)N}{3TV} \left[1 + \frac{S(S+1)}{3T} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}} \right]. \quad (72.17)$$

Debe señalarse que el signo del término de corrección del corchete depende del signo de la integral de intercambio.

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Hallar la parte magnética del calor específico de un sistema descrito por el hamiltoniano (72.1) a temperaturas $T \gg J$.

SOLUCIÓN. El primer término del desarrollo del calor específico en potencias de $1/T$ procede del término $-\overline{E^2}/2T$ de la energía libre (72.16). Promediando mediante el mismo método el cuadrado del hamiltoniano (72.1) se obtiene

$$\begin{aligned} \overline{E^2} &= \frac{1}{4} \cdot 2 \sum_{\mathbf{m} \neq \mathbf{n}} J_{\mathbf{mn}}^2 \overline{S_{\mathbf{m}i} S_{\mathbf{m}k}} \overline{S_{\mathbf{n}i} S_{\mathbf{n}k}} \\ &= 3 \cdot \frac{S^2(S+1)^2}{9} \cdot \frac{1}{2} N \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}}^2, \end{aligned}$$

puesto que $\overline{S_i S_k} = \frac{1}{3} S(S+1) \delta_{ik}$. El calor específico es entonces

$$C_{\text{mag}} = \frac{NS^2(S+1)^2}{6T^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} J_{\mathbf{q}}^2,$$

de acuerdo con Parte 1, (73.4).

PROBLEMA 2. Despreciando la interacción entre spines, calcular la imanación de una muestra paramagnética (paramagneto) con cualquier relación existente entre $\beta \hbar$ y T .

SOLUCIÓN. La función de partición (para un spin en el campo) es

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_z=-s}^s \exp(-2\beta \hbar S_z/T) \\ &= \frac{\operatorname{senh} 2\beta \hbar (S + \frac{1}{2})/T}{\operatorname{senh} \beta \hbar/T}. \end{aligned}$$

Un cálculo de la energía libre, seguido de la derivación respecto a Φ , da la imanación

$$\begin{aligned} M &= \frac{N}{V} T \frac{\partial}{\partial \Phi} \log Z \\ &= \frac{2\beta N}{V} \left\{ \left(S + \frac{1}{2} \right) \coth \frac{2\beta\Phi(S+\frac{1}{2})}{T} - \frac{1}{2} \coth \frac{\beta\Phi}{T} \right\} \end{aligned}$$

(L. Brillouin 1927). Cuando $\beta\Phi \ll T$, esta expresión se reduce a (72.15). En el límite opuesto, cuando $\beta\Phi \gg T$, la imanación tiende a su valor nominal de acuerdo con

$$M = \frac{2\beta NS}{V} \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{2\beta\Phi}{T} \right) \right\}.$$

§ 73. Interacciones de los magnones

Tiene un considerable interés metodológico el problema de la contribución de la interacción de los magnones a la parte magnética de las magnitudes termodinámicas de un ferromagneto. Los cálculos realizados en § 71 se basaron en un gas ideal de magnones no interactivos. Consideremos este problema para un sistema descrito por el hamiltoniano con intercambio de spin (72.1).

Si tenemos prevista la determinación únicamente de la contribución del orden más bajo de la pequeña relación T/T_c , sólo es necesario considerar la interacción por pares de magnones. Esto significa que hemos de considerar dos estados de magnones del sistema en los que la proyección del spin total sea $NS = 2$.

Esto corresponde a las funciones de onda

$$\begin{aligned} \chi_{nn} &= [4S(2S-1)]^{-1/2} \hat{S}_n \cdot \hat{S}_{n-} \chi_0, \\ \chi_{mn} &= (2S)^{-1} \hat{S}_m \cdot \hat{S}_{n-} \chi_0, \quad m \neq n; \end{aligned} \quad (73.1)$$

puesto que los operadores de átomos diferentes se comutan, $\chi_{nm} = \chi_{mn}$. † Se normalizan las funciones (73.1) mediante la condición $\chi_{mn}^* \chi_{mn} = 1$, como se comprueba fácilmente desarrollando el producto del mismo modo que se hizo para verificar la normalización de (72.9). Puede utilizarse el mismo procedimiento para demostrar que las diferentes funciones χ_{mn} son mutuamente ortogonales.

Las funciones (73.1) no son ellas mismas funciones propias del hamiltoniano. Las funciones de onda de los estados estacionarios de dos magnones del sistema deben ser ciertamente combinaciones lineales de las funciones χ_{mn} , que escribiremos en la forma

$$\chi = \sum_{m \neq n} \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{mn} \chi_{mn} + \sum_n \psi_{nn} \chi_{nn} \quad (73.2)$$

† Si el spin $S = \frac{1}{2}$, la aplicación repetida dos veces del mismo operador \hat{S}_n a la función del estado fundamental χ_0 da cero. Por consiguiente, en este caso todas las funciones «diagonales» $\chi_{nn} \equiv 0$.

(puesto que χ_{mn} y χ_{nm} son iguales, debemos tomar también $\psi_{mn} \equiv \psi_{nm}$). El conjunto de coeficientes ψ_{nm} forma la función de onda en la representación en la que las variables independientes son los números que señalan los átomos en la red. El factor $1/\sqrt{2}$ de la primera suma en (73.2) se incluye de modo que el módulo al cuadrado $|\chi|^2$ sea igual a la suma $\sum |\psi_{mn}|^2$ en la que cada uno de los distintos ψ_{mn} aparece sólo una vez.

El mismo método que se utilizó para deducir la ecuación (72.11) para las funciones de onda de los estados estacionarios de un magnón muestra que las funciones (73.2) deben satisfacer una ecuación semejante:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}\chi = & \sum_{m \neq n} \frac{\psi_{mn}}{2^{3/2}S} [\hat{H}, \hat{S}_{m-} \hat{S}_{n-}] \chi_0 \\ & + \sum_n \frac{\psi_{nn}}{2[S(2S-1)]^{1/2}} [\hat{H}, \hat{S}_{n-} \hat{S}_{n-}] \chi_0,\end{aligned}\quad (73.3)$$

en donde ahora $\mathcal{E} = E - E_0$ es la energía de los dos magnones que interaccionan y los corchetes $[]$ designan al conmutador.

Para desarrollar los conmutadores del segundo miembro de (73.3), observaremos que

$$[\hat{H}, \hat{S}_{m-} \hat{S}_{n-}] \equiv [\hat{H}, \hat{S}_{m-}] \hat{S}_{n-} + \hat{S}_{m-} [\hat{H}, \hat{S}_{n-}],$$

y utilizaremos las expresiones (72.12) para los conmutadores $[\hat{H}, \hat{S}_{n-}]$. Entonces teniendo en cuenta las reglas de conmutación (72.4), hagamos una transposición de los operadores \hat{S}_z hasta la posición extrema de la derecha, en donde, al actuar sobre la función χ_0 , la multiplican por S . El resultado es

$$\begin{aligned}[\hat{H}, \hat{S}_{m-} \hat{S}_{n-}] \chi_0 = & S \sum_l \{ J_{ml} (\hat{S}_{m-} - \hat{S}_{l-}) \hat{S}_{n-} + J_{nl} (\hat{S}_{n-} - \hat{S}_{l-}) \hat{S}_{m-} \} \chi_0 \\ & + \delta_{mn} \sum_l J_{nl} \hat{S}_{n-} \hat{S}_{l-} \chi_0 - J_{mn} \hat{S}_{m-} \hat{S}_{n-} \chi_0 + 4\beta \hbar \hat{S}_{m-} \hat{S}_{n-} \chi_0;\end{aligned}\quad (73.4)$$

para simplificar las fórmulas no se han indicado las limitaciones impuestas a las variables de sumación. Las sumas se realizan sobre todos los valores de l , estando implicado el que todos los términos «diagonales» $J_{ll} = 0$.

Las etapas restantes consisten en sustituir (73.4) en (73.3) e igualar los coeficientes de las funciones semejantes χ_{mn} en ambos miembros de la ecuación. Los cálculos son laboriosos pero elementales. Conducen al siguiente sistema de ecuaciones para las ψ_{mn} :

$$\begin{aligned}(2JS - \mathcal{E}) \psi_{mn} = & S \sum_l (J_{lm} \psi_{ln} + J_{ln} \psi_{lm}) + J_{mn} \psi_{mn} \\ & - A_S [J_{mn} (\psi_{mm} + \psi_{nn}) + 2\delta_{mn} \sum_l J_{lm} \psi_{lm}],\end{aligned}\quad (73.5)$$

en donde

$$A_S = S \left[1 - \left(\frac{2S-1}{2S} \right)^{1/2} \right]$$

y J designa la suma $\sum J_{nl}$ que es obviamente independiente del subíndice n .†

En esta ecuación, pasemos de la representación de las coordenadas (en donde las variables independientes son las coordenadas r_n, r_m de los átomos) a la representación de los impulsos, poniendo

$$\psi_{mn} = \frac{1}{N} e^{i\mathbf{K} \cdot (r_m + r_n)/2} \sum_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{K}, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (r_m - r_n)}. \quad (73.6)$$

El vector \mathbf{K} juega el papel del cuasiimpulso total de los dos magnones y \mathbf{k} el del cuasiimpulso de su movimiento relativo; la suma se realiza sobre los N valores discretos de \mathbf{k} admisibles para una red con volumen Nv (en donde N es el número de átomos en la red y v el volumen de la celda unidad). Lo mismo que las ψ_{mn} , las integrales de intercambio han de representarse también en la forma de serie de Fourier:

$$\left. \begin{aligned} J_{mn} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (r_m - r_n)} J(\mathbf{k}), \\ J(\mathbf{k}) &= \sum_n J_{0n} e^{i\mathbf{k} \cdot (r_0 - r_n)}; \end{aligned} \right\} \quad (73.7)$$

como $J_{nm} = J_{mn}$, tenemos $J(\mathbf{k}) = J(-\mathbf{k})$.

Omitiendo los pasos intermedios que son directos, pasaremos inmediatamente al resultado final deducido a partir de (73.5):

$$\begin{aligned} & [\epsilon(\frac{1}{2}\mathbf{K} + \mathbf{k}) + \epsilon(\frac{1}{2}\mathbf{K} - \mathbf{k}) - \mathcal{E}] \psi(\mathbf{K}, \mathbf{k}) \\ & + \int U(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') \psi(\mathbf{K}, \mathbf{k}') V d^3 k' / (2\pi)^3 = 0, \end{aligned} \quad (73.8)$$

en donde

$$\begin{aligned} NU(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') &= A_S [J(\frac{1}{2}\mathbf{K} + \mathbf{k}) + J(\frac{1}{2}\mathbf{K} - \mathbf{k}) + J(\frac{1}{2}\mathbf{K} + \mathbf{k}') + J(\frac{1}{2}\mathbf{K} - \mathbf{k}')] \\ & - \frac{1}{2} [J(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + J(\mathbf{k} + \mathbf{k}')], \end{aligned} \quad (73.9)$$

y $\epsilon(\mathbf{k})$ es la energía de un magnón, determinada mediante (72.13); se sustituye la suma respecto a \mathbf{k}' por la integración sobre una celda de la red recíproca.

† Estas ecuaciones son también válidas para el spin $S = \frac{1}{2}$, cuando son arbitrarias todas las ψ_{nn} . Debe señalarse que para $S = \frac{1}{2}$ todas las magnitudes «diagonales» ψ_{nn} desaparecen de las ecuaciones con $m \neq n$. Las ecuaciones con $m = n$ se consideran en este caso como simplemente no existentes.

Así pues, el problema exacto [para el hamiltoniano (72.1)] de los estados de dos magnones del sistema se reduce a la resolución de una ecuación exactamente semejante a la ecuación de Schrödinger para un sistema de dos partículas en la representación de los impulsos; cf. MC, (130.4). Las funciones $\varepsilon(\mathbf{k})$ juegan el papel de las energías de las partículas y el kernel $U(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$ de la ecuación integral el del elemento de matriz de la energía U de su interacción correspondiente a una transición (dispersión o scattering) desde estados con impulsos $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ a estados con impulsos $\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2$, en donde

$$\mathbf{k}_1 = \frac{1}{2}\mathbf{K} + \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}_2 = \frac{1}{2}\mathbf{K} - \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}'_1 = \frac{1}{2}\mathbf{K} + \mathbf{k}', \quad \mathbf{k}'_2 = \frac{1}{2}\mathbf{K} - \mathbf{k}'.$$

Entonces $U(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$ se escribe de forma adecuada como

$$\begin{aligned} NU(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) &= A_S[J(\mathbf{k}_1) + J(\mathbf{k}_2) + J(\mathbf{k}'_1) + J(\mathbf{k}'_2)] \\ &\quad - \frac{1}{2}[J(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) + J(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_2)]. \end{aligned} \quad (73.10)$$

En el caso general, la ecuación (73.8) junto con (73.9) es muy complicada. Calcularemos únicamente la corrección a las magnitudes termodinámicas cuando $S \gg 1$. La simplicidad de este caso se debe al hecho de que la energía de los magnones $\varepsilon(\mathbf{k})$ es proporcional a S y la interacción U de los mismos es independiente de S ; para $S \gg 1$, el coeficiente de (73.9) es $A_s \approx \frac{1}{4}$. De aquí que pueda considerar a U como una pequeña perturbación y precisamente el valor medio de U da la corrección Ω_{int} (de la interacción entre magnones) al potencial termodinámico Ω . Tomando el «elemento diagonal de la matriz»

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{2N}[J(\mathbf{k}_1) + J(\mathbf{k}_2) - J(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - J(0)], \quad (73.11)$$

promediamos respecto a un estado con cuasiimpulsos dados de los magnones. El promediado estadístico respecto a la distribución de equilibrio de los magnones se lleva a cabo entonces mediante integración:

$$\Omega_{\text{int}} = \int n(\mathbf{k}_1) n(\mathbf{k}_2) U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \frac{V^2 d^3 k_1 d^3 k_2}{(2\pi)^6}, \quad (73.12)$$

en donde $n(\mathbf{k}) = [\exp \varepsilon(\mathbf{k})/T - 1]^{-1}$ es la función de distribución de Bose.

A temperaturas bajas, la integral está regida por el margen de valores pequeños de \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 y de acuerdo con ello, todos los $\varepsilon(\mathbf{k})$ y $J(\mathbf{k})$ han de desarrollarse en potencias de \mathbf{k} . Entonces $\varepsilon(\mathbf{k})$ viene dada por la expresión cuadrática (72.14). Como $J(\mathbf{k})$ es una función par de \mathbf{k} , los primeros términos de su desarrollo son también cuadráticos:

$$J(\mathbf{k}) \approx J(0) + a_{ik} k_i k_k.$$

Entonces

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{N} a_{ik} k_{1i} k_{2k}.$$

Cuando se sustituye en (73.12) esta expresión, que es una función impar de \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 , la integral es cero como resultado del promediado sobre las direcciones de \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 .

Por consiguiente, en el desarrollo de $J(\mathbf{k})$ hemos de tener en cuenta los términos de cuarto orden y entonces en la integral (73.12) la función $U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ es una forma de cuarto grado en la cual los términos cuadráticos en \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 tienen una contribución no nula a la integral. Debido a la rápida convergencia, la integración puede extenderse a todo el espacio \mathbf{k} . Vemos entonces, haciendo el cambio de variables $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}}/\sqrt{T}$, que la dependencia de Ω_{int} con T y \hbar tiene la forma

$$\Omega_{\text{int}} = VT^5 f(\hbar/T), \quad (73.13)$$

siendo finitos $f(0)$ y $f'(0)$. De aquí se deduce que el término de corrección de la imanación es

$$M_{\text{int}} = -\frac{1}{V} \left[\frac{\partial \Omega_{\text{int}}}{\partial \hbar} \right]_{\hbar=0} = \text{constante} \times T^4. \quad (73.14)$$

El término de corrección del calor específico tiene la misma dependencia.[†]

Vemos que la interacción de magnones conduce a correcciones de las magnitudes termodinámicas únicamente en un grado de aproximación más elevado respecto a T/T_c . Los términos principales de la imanación y de la parte magnética del calor específico son proporcionales a $T^{3/2}$. Entre estas correcciones y las que aparecen originadas por Ω_{int} existen otras correcciones proporcionales a $T^{5/2}$ y $T^{7/2}$, que provienen de los siguientes términos del desarrollo de la energía de los magnones $\epsilon(\mathbf{k})$ en potencias de \mathbf{k}^2 .

Mediante las ecuaciones deducidas anteriormente podemos considerar también la cuestión de los estados ligados de dos magnones. Estos estados aparecen como valores propios discretos (para un \mathbf{K} dado) de la ecuación (73.8). Como funciones de la variable \mathbf{K} , estos valores propios $\mathcal{E}(\mathbf{K})$ forman nuevas ramas de excitaciones elementales del sistema. Sin embargo, el análisis demuestra que dichos estados sólo existen para valores de \mathbf{K} bastante grandes y, por tanto, nunca pueden influir sobre las magnitudes termodinámicas de un ferromagneto a bajas temperaturas.[‡]

[†] Estos resultados fueron obtenidos en primer lugar (en el caso general de spin arbitrario) por F. J. Dyson (1956). En la deducción de (73.5) dada aquí hemos seguido principalmente a R. J. Boyd y J. Callaway (1965).

[‡] Ver M. Wortis, *Physical Review* 132, 85, 1963. La red considerada es tridimensional. En una y dos dimensiones, existen estados ligados de magnones para todos los valores de \mathbf{k} .

PROBLEMA

Admitiendo que $S \gg 1$, hallar los términos de corrección debidos a la interacción de magnones en la imanación y en el calor específico para el caso de una red cúbica en la cual las integrales de intercambio son cero excepto en el caso de pares de átomos que son adyacentes (a lo largo de ejes cúbicos).

SOLUCIÓN. Cada átomo tiene seis vecinos inmediatos. A partir de la definición (73.7) encontramos

$$J(\mathbf{k}) = 2J_0(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a),$$

en donde J_0 es la integral de intercambio para un par de átomos adyacentes y a la longitud de una arista de una celda cúbica. Para \mathbf{k} pequeños

$$J(\mathbf{k}) \approx J_0[2 - a^2 k^2 + \frac{1}{12} a^4 (k_x^4 + k_y^4 + k_z^4)].$$

De aquí que

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{a^7 J_0}{4V} (k_{1x}^2 k_{2x}^2 + k_{1y}^2 k_{2y}^2 + k_{1z}^2 k_{2z}^2);$$

se omiten los términos que son funciones impares de \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 . La energía del magnón es, de acuerdo con (72.14),

$$\epsilon(\mathbf{k}) = SJ_0 a^2 k^2 + 2\beta\delta.$$

El cálculo de la integral (73.12) da los resultados

$$\begin{aligned} \frac{M_{\text{int}}}{M} &= -\frac{3\pi\zeta(3/2)\zeta(5/2)}{2S^2} \left(\frac{T}{4\pi SJ_0}\right)^4, \\ C_{\text{int}} &= \frac{15\pi\zeta^2(5/2)N}{S} \left(\frac{T}{4\pi SJ_0}\right)^4, \end{aligned}$$

en donde ζ indica la función zeta.

§ 74. Magnones en un antiferromagneto

Las sustancias antiferromagnéticas (antiferromagnetos) tienen la característica de que los momentos magnéticos de todos los electrones en cada celda unidad de la red cristalina se compensan unos a otros (en el estado de equilibrio en ausencia de un campo magnético). Estrictamente hablando, la densidad de momentos magnéticos se distribuye a través de todo el volumen de la celda. Sin embargo, en los cristales aislantes antiferromagnéticos, podemos suponer con buena exactitud que esta densidad está prácticamente localizada en los átomos individuales, pudiendo asignarse a cada uno de ellos un cierto momento magnético. Estos momentos,

periódicamente repetidos en todas las celdas, forman las *subredes magnéticas* del antiferromagneto.

Los diversos antiferromagnets tienen una estructura que varía grandemente de unos a otros. Estudiaremos la cuestión de su espectro de energía magnética en el ejemplo típico de un cristal con dos átomos magnéticos en puntos equivalentes de cada celda unidad (es decir, en puntos que se intercambian entre sí mediante ciertas transformaciones de simetría del cristal). Las densidades de los momentos magnéticos medios de las subredes formadas por estos átomos se designarán por \mathbf{M}_1 y \mathbf{M}_2 y utilizaremos los dos vectores

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2, \quad \mathbf{L} = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2. \quad (74.1)$$

En el estado fundamental del antiferromagneto $\mathbf{M} = 0$ y $\mathbf{L} \neq 0$, mientras que para un ferromagneto $\mathbf{M} \neq 0$ y $\mathbf{L} = 0$. Debemos resaltar una diferencia fundamental entre los estados fundamentales en los dos casos. En la aproximación de intercambio, en el estado fundamental del ferromagneto, los componentes de spin de todos los átomos magnéticos tienen valores $S_z = S$ definidos (lo más grande posible) correspondientes al valor nominal de la imanación \mathbf{M} . En el estado fundamental del antiferromagneto, las imanaciones de las subredes ciertamente no pueden tener sus valores nominales, puesto que las proyecciones totales de los spins de cada subred no se conservan por separado (ni siguiera en la aproximación de intercambio) y, por tanto, no tienen valores definidos (en un estado estacionario). Por tanto, los componentes de spin de los átomos individuales tampoco tienen valores definidos.

La forma de las «ecuaciones del movimiento» macroscópicas de los vectores \mathbf{L} y \mathbf{M} se establece de modo semejante al de un ferromagneto (§ 69). La condición para la ausencia de disipación conduce al requisito de que, debido a las ecuaciones del movimiento,

$$-\frac{d\tilde{F}}{dt} = \int \left\{ \mathbf{H}_L \cdot \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial t} + \mathbf{H}_M \cdot \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \right\} dV = 0, \quad (74.2)$$

en donde los «campos efectivos» \mathbf{H}_L y \mathbf{H}_M están determinados por la expresión

$$\delta\tilde{F} = - \int (\mathbf{H}_L \cdot \delta\mathbf{L} + \mathbf{H}_M \cdot \delta\mathbf{M}) dV \quad (74.3)$$

que nos da el cambio de la energía libre cuando se varían \mathbf{L} y \mathbf{M} ; en el equilibrio $\mathbf{H}_L = \mathbf{H}_M = 0$.

En la aproximación del intercambio, las ecuaciones buscadas deben ser invariantes bajo la rotación simultánea de todos los momentos magnéticos respecto a la red del cristal. Esto implica no solamente la equivalencia cristalográfica de las posiciones de los dos átomos magnéticos en la celda, sino también la invariancia

frente al intercambio de \mathbf{M}_1 y \mathbf{M}_2 , es decir, frente a la transformación $\mathbf{L} \rightarrow -\mathbf{L}$, $\mathbf{M} \rightarrow \mathbf{M}$. Debido a que la energía libre no se ve afectada por esta transformación, tenemos también $\mathbf{H}_L \rightarrow -\mathbf{H}_L$, $\mathbf{H}_M \rightarrow \mathbf{H}_M$.

Considerando las pequeñas oscilaciones de los momentos magnéticos, pongamos $\mathbf{L} = \mathbf{L}_0 + \mathbf{l}$, $\mathbf{M} \equiv \mathbf{m}$, en donde \mathbf{l} y \mathbf{m} son cantidades pequeñas. En la aproximación lineal, las ecuaciones del movimiento que satisfacen las condiciones establecidas son

$$\frac{\partial \mathbf{l}}{\partial t} = \gamma \mathbf{H}_M \times \mathbf{v}, \quad \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = \gamma \mathbf{H}_L \times \mathbf{v}, \quad (74.4)$$

en donde \mathbf{v} es un vector unidad en la dirección de equilibrio del vector \mathbf{L}_0 ; la transformación $\mathbf{L} \rightarrow -\mathbf{L}$ implica que $\mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}$. Ahora hemos utilizado el hecho de que \mathbf{H}_L y \mathbf{H}_M , que son cero en el equilibrio, son ellas mismas lineales en \mathbf{l} y \mathbf{m} y que \mathbf{v} es el único vector constante disponible. Por analogía con § 69, debe escribirse el coeficiente γ como $\gamma = (g | e | / 2mc) L_0$, pero a diferencia del caso ferromagnético tenemos ahora $g \neq 2$ aunque se desprecien los efectos relativistas. En el caso de oscilaciones monocromáticas $\partial \mathbf{l} / \partial t = -i \omega \mathbf{l}$, etc., y los vectores \mathbf{l} y \mathbf{m} definidos por (74.4) son entonces perpendiculares a \mathbf{v} . En la aproximación considerada, esto significa que el vector \mathbf{L} tiene un movimiento de precesión alrededor de la dirección de \mathbf{v} con un valor constante $\mathbf{L} \approx \mathbf{L}_0$.

Para determinar los campos efectivos \mathbf{H}_L y \mathbf{H}_M , debemos establecer la forma de la energía libre del cristal. Los términos que se necesitan son los de segundo orden en las magnitudes pequeñas \mathbf{l} y \mathbf{m} o, en el caso de términos que contengan derivadas de estas magnitudes respecto a las coordenadas, los que no sean superiores al segundo orden en el número de ondas de las oscilaciones, cuya longitud de onda se supone grande en comparación con la constante de la red (como en § 70). En la aproximación de intercambio la energía libre debe ser invariante frente a las rotaciones simultáneas todos los momentos magnéticos y también frente a un cambio de signo de \mathbf{L} . Una expresión que satisface todas las condiciones establecidas es

$$F_{\text{int}} = \int \left\{ \frac{1}{2} a \mathbf{m}^2 + \frac{1}{2} b \left(\mathbf{m} \cdot \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial z} - \mathbf{l} \cdot \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial z} \right) + \frac{1}{2} \alpha_{ik} \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial x_k} \right\} dV, \quad (74.5)$$

en donde puede tomarse el eje z paralelo a \mathbf{v} , de modo que un cambio en el signo de \mathbf{v} implica un cambio del signo de z . El coeficiente $a > 0$, de acuerdo con el hecho de que \mathbf{m} se anula en el equilibrio. El término \mathbf{l}^2 está ahora ausente, puesto que implicaría una dependencia entre la energía y la dirección del vector $\mathbf{L} = \mathbf{L}_0 + \mathbf{l}$ en el cristal, cosa que no ocurre en la aproximación de intercambio. El término que contiene la suma $\mathbf{m} \cdot \partial \mathbf{l} / \partial z + \mathbf{l} \partial \mathbf{m} / \partial z$ se reduce a su derivada total y se anulará al integrar respecto al volumen total. Finalmente, no es necesario considerar los

términos cuadráticos en las derivadas $\partial\mathbf{m}/\partial x_i$, puesto que ciertamente son pequeños en comparación con los términos en \mathbf{m}^2 .

Haciendo variar la integral (74.5) (e integrando por partes), obtenemos

$$\mathbf{H}_L = b \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial z} + \alpha_{ik} \frac{\partial^2 \mathbf{l}}{\partial x_i \partial x_k}, \quad \mathbf{H}_M = -a\mathbf{m} - b \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial z}. \quad (74.6)$$

En el caso de una onda de spin monocromática plana, las ecuaciones de movimiento dan ahora

$$\left. \begin{aligned} -i\omega \mathbf{l} &= -\gamma a \mathbf{m} \times \mathbf{v} - ik_z \gamma b \mathbf{l} \times \mathbf{v}, \\ -i\omega \mathbf{m} &= ik_z \gamma b \mathbf{m} \times \mathbf{v} - \gamma \alpha(\mathbf{n}) k^2 \mathbf{l} \times \mathbf{v}, \end{aligned} \right\} \quad (74.7)$$

en donde nuevamente (como en § 70) $\alpha(\mathbf{n}) = \alpha_{ik} n_i n_k$ y \mathbf{n} es un vector unidad en la diferencia de \mathbf{k} . Multiplicando vectorialmente la primera ecuación por \mathbf{v} se tiene

$$\gamma a \mathbf{m} = -i\omega \mathbf{l} \times \mathbf{v} - ik_z \gamma b \mathbf{l}, \quad (74.8)$$

y la sustitución de esta expresión en la segunda ecuación conduce directamente a la siguiente relación de dispersión para ondas de spin:

$$\omega = \gamma k [\alpha(\mathbf{n}) - b^2 (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^2]^{1/2}. \quad (74.9)$$

Así pues, la frecuencia de las ondas de spin, y también la energía de los magnones $\epsilon = \hbar\omega$, en un antiferromagneto en la aproximación de intercambio es proporcional a k y no a k^2 como en los ferromagnetos.[†]

Las ecuaciones (74.7) establecen una relación biunívoca entre \mathbf{l} y \mathbf{m} pero los dos componentes de \mathbf{l} en el plano perpendicular a \mathbf{v} permanecen siendo arbitrarios. Esto significa que las ondas de spin en el antiferromagneto considerado tienen dos direcciones de polarización independientes.

Para tener en cuenta la anisotropía magnética, debemos hacer alguna hipótesis más específica que las de simetría del cristal. Supongamos que éste es uniaxico y que la dirección de equilibrio de \mathbf{L} es paralela al eje de simetría.[‡]

Se ha visto a partir de (74.8) que el vector \mathbf{m} de la onda de spin es pequeño en comparación con \mathbf{l} , conteniendo una potencia extra del pequeño vector de onda \mathbf{k} . Del mismo modo el campo efectivo $H_M \gg H_L$. Por esta razón, basta considerar

[†] Esta relación de dispersión para los antiferromagnetos fue deducida en primer lugar por L. Hulthén (1936). La deducción con el empleo del tratamiento macroscópico de la imanación de las subredes fue dada por M. I. Kaganov y V. M. Tsukernik (1958).

[‡] Este tipo incluye el antiferromagneto FeCO_3 , con una red romboédrica (clase cristalina D_{3d}) y dos iones de hierro en la celda unidad. Los momentos magnéticos de estos iones tienen sentidos opuestos a lo largo del eje de simetría ternario (eje z).

la anisotropía debida al vector \mathbf{l} . Con las hipótesis realizadas, la densidad de esta energía es

$$U_{\text{an}} = \frac{1}{2} K \mathbf{l}^2, \quad (74.10)$$

en donde $K > 0$. Cuando se toma en cuenta esta densidad, existe un término adicional $-K\mathbf{l}$ en el campo efectivo \mathbf{H}_L , el cual vale entonces para una onda plana

$$\mathbf{H}_L = ik_z b \mathbf{m} - [\alpha(n)k^2 + K] \mathbf{l}. \quad (74.11)$$

De aquí vemos que, teniendo en cuenta la anisotropía, se obtiene la relación de dispersión de la onda de spin a partir de (74.9) añadiendo K a αk^2 . El resultado es que, cuando $k \rightarrow 0$, la energía del magnón no tiende a cero sino al valor finito

$$\varepsilon(0) = \hbar\gamma\sqrt{aK} \quad (74.12)$$

(C. Kittel 1951). La frecuencia $\omega(0) = \varepsilon(0)/\hbar$ se denomina *frecuencia de resonancia antiferromagnética*. Debe señalarse que el intervalo prohibido del espectro es proporcional a la raíz cuadrada de la constante de anisotropía y no a la propia constante como en (70.12). Como el pequeño valor de los efectos relativistas se expresan por el pequeño valor relativo de la constante de anisotropía, vemos que en general estos efectos son más importantes en un antiferromagneto que en un ferromagneto.

La contribución de los magnones a la energía interna de un antiferromagneto se calcula mediante (71.3). En el intervalo de temperaturas $\varepsilon(0) \ll T \ll T_N$ (siendo T_N el punto de Néel, temperatura a la cual desaparece el antiferromagnetismo) podemos utilizar el espectro (74.9). En un cristal uniaxico

$$\omega = \gamma a^{1/2} [\alpha_1(k_x^2 + k_y^2) + \alpha'_2 k_z^2]^{1/2}, \quad \alpha'_2 = \alpha_2 - b^2/a.$$

El cálculo de la integral (71.3) da el resultado siguiente para la contribución de los magnones al calor específico:

$$C_{\text{mag}} = V \frac{4\pi^2 T^3}{15\gamma^3 a^{3/2} (\alpha'_2 \alpha_1^2)^{1/2} \hbar^3}. \quad (74.13)$$

A temperaturas $T \ll \varepsilon(0)$, por otra parte, la contribución de los magnones a las magnitudes termodinámicas es exponencialmente pequeña.

CAPÍTULO VIII

FLUCTUACIONES ELECTROMAGNÉTICAS

§ 75. Función de Green de un fotón en un medio material

Pasando ahora al estudio de las propiedades estadísticas de un campo electromagnético en medios materiales, recordemos primero el significado de los promedios de las magnitudes electromagnéticas en la electrodinámica macroscópica.

Si empezamos, para mayor claridad, con un punto de vista clásico, podemos distinguir la operación de promediar respecto a un volumen físicamente infinitesimal con una distribución dada de todas las partículas en él, seguida del promedio del resultado respecto al movimiento de las partículas. En las ecuaciones de Maxwell de la electrodinámica macroscópica intervienen magnitudes totalmente promediadas. Sin embargo, al considerar las fluctuaciones del campo nos debemos ocupar de las oscilaciones temporales de magnitudes promediadas únicamente sobre volúmenes físicamente infinitesimales.

Desde el punto de vista cuántico, podemos naturalmente hablar de la operación de promediar únicamente para el operador de una magnitud física y no para la propia magnitud; la segunda etapa consiste en hallar el valor medio de este operador mediante el empleo de las probabilidades mecánico-cuánticas. Ha de entenderse que los operadores que aparecen en este capítulo promediarán únicamente en el primer sentido.

Las propiedades estadísticas de la radiación electromagnética en un medio material se describen mediante la función de Green de un fotón en el medio. En el caso de los fotones, se sustituyen los operadores ψ por los operadores de los potenciales del campo electromagnético. Se definen las funciones de Green en función de estos operadores del mismo modo que se realizó en el caso de las partículas en función de los operadores ψ .

Los potenciales de campo forman un 4-vector $A^\mu = (A^0, \mathbf{A})$, en donde $A^0 \equiv \phi$ es el potencial escalar y \mathbf{A} el potencial vector. La selección de estos potenciales no es única en la electrodinámica clásica; permite una transformación «gauge», que no influye sobre ninguna magnitud observable (ver *Campos*, § 18). En correspondencia, en electrodinámica cuántica existe una no-unicidad semejante a la hora

de seleccionar los operadores de campo y, por tanto, en la definición de las funciones de Green del fotón. Utilizaremos la «gauge» en la que resulta cero el potencial escalar:

$$A^0 \equiv \phi = 0, \quad (75.1)$$

de modo que el campo queda determinado únicamente por el vector potencial. Esta transformación resulta normalmente conveniente para los problemas en los que interviene la interacción del campo electromagnético con partículas no relativistas, como en el caso de un campo en medios materiales ordinarios.

En esta transformación, la función de Green es un tensor tridimensional de orden dos,

$$D_{ik}(X_1, X_2) = i\langle T\hat{A}_i(X_1)\hat{A}_k(X_2)\rangle, \quad (75.2)$$

en donde $i, k = x, y, z$ son los subíndices vectoriales tridimensionales y el corchete angular indica [como en (36.1)] la operación de promediar respecto a la distribución de Gibbs para un sistema compuesto por el medio y la radiación presente en él en el equilibrio; como los fotones son bosones, no existe ningún cambio de signo del producto cuando se intercambian los operadores \hat{A}_i , \hat{A}_k mediante el operador cronológico. Además, los operadores \hat{A}_i son autoconjungados (puesto que el fotón es una partícula estrictamente neutra); por consiguiente, no se ha hecho ninguna distribución entre \hat{A}_i y \hat{A}_i^\dagger en (75.2).†

El concepto básico en la construcción de todas las funciones de Green de los fotones no debe ser, sin embargo, la expresión (75.2) sino la función de Green retardada, definida por

$$iD_{ik}^R(X_1, X_2) = \begin{cases} \langle \hat{A}_i(X_1)\hat{A}_k(X_2) - \hat{A}_k(X_2)\hat{A}_i(X_1) \rangle, & t_1 > t_2, \\ 0 & t_1 < t_2; \end{cases} \quad (75.3)$$

el signo menos entre los dos términos del interior del corchete angular corresponde a la definición (36.19) para la estadística de Bose.

En el caso de un sistema cerrado, la función de Green depende de los tiempos t_1 y t_2 únicamente a través de su diferencia $t = t_1 - t_2$. Las coordenadas \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 en el caso general de un medio inhomogéneo aparecen independientemente en la

† En el caso general de una transformación «gauge» arbitraria de los potenciales, la función de Green de los fotones en un 4-tensor $D_{\mu\nu}$; en la transformación (75.1), $D_{00} = 0$, $D_{0i} = 0$. Las propiedades tensoriales y de la transformación generales de la función de Green de los fotones en física estadística son las mismas que en la electrodinámica cuántica de un campo en el vacío. La definición (75.2) difiere en signo de la utilizada en TCR. Aquí se ha escogido el que corresponde a la definición de las funciones de Green de los demás bosones, incluyendo fonones.

función de Green: $D_{ik}^R(t; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. De acuerdo con ello el desarrollo de Fourier se realizará sólo respecto al tiempo, siendo sus componentes

$$D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int_0^\infty e^{i\omega t} D_{ik}^R(t; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) dt. \quad (75.4)$$

Al considerar magnitudes promediadas en volúmenes físicamente infinitesimales nos restringimos nosotros mismos a considerar únicamente la parte de la radiación de longitud de onda larga, en donde los números de onda de los fotones satisfacen a la condición

$$ka \ll 1, \quad (75.5)$$

en donde a designa las distancias interatómicas del medio. En este margen de frecuencias, la función de Green de los fotones puede expresarse en función de otras características macroscópicas del medio, la permitividad $\epsilon(\omega)$ y la permeabilidad $\mu(\omega)$.

Para ello escribamos el operador de interacción del campo electromagnético con el medio

$$\hat{\mathcal{V}} = -\frac{1}{c} \int \hat{\mathbf{j}} \cdot \hat{\mathbf{A}} d^3x, \quad (75.6)$$

en donde $\hat{\mathbf{j}}$ es el operador de densidad de corriente eléctrica debida a las partículas del medio.† Si se hace aparecer dentro del medio una corriente «externa» clásica existe un operador de interacción correspondiente

$$\hat{\mathcal{V}} = -\frac{1}{c} \int \mathbf{j}(t, \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{A}} d^3x. \quad (75.7)$$

Esta expresión nos permite establecer una conexión con la teoría general de la respuesta de un sistema macroscópico a una interacción externa.

En esta teoría (ver Parte 1, § 125) aparece un conjunto discreto de magnitudes $x_a (a = 1, 2, \dots)$ que describen el comportamiento del sistema bajo la acción de ciertas interacciones externas. Estas interacciones se describen mediante fuerzas

† Ver TCR, §53 (en donde la corriente se designaba como $e\mathbf{j}$, es decir, se excluye de la definición de i la carga unidad e). El operador (75.6) supone el empleo de la expresión relativista para el operador de corriente. En los problemas no relativistas, podemos despreciar en los operadores ψ (a partir de los cuales se construye el operador de corriente) las partes debidas a las frecuencias negativas, es decir a las antipartículas. Esto significa, en particular, despreciar las correcciones radiativas que alteran la función de Green de los fotones en el vacío debido a los pares virtuales electrón-positrón. Estas correcciones son despreciables a longitudes de onda $\lambda \gg \hbar/mc$, condición que ciertamente se ve satisfecha en el intervalo (75.5).

«perturbadoras» $f_a(t)$ tales que el operador de la energía de interacción tiene la forma

$$\hat{V} = - \sum_a f_a \hat{x}_a,$$

en donde \hat{x}_a son los operadores de las magnitudes x_a . Los valores medios $\bar{x}_a(t)$ que aparecen debido a la perturbación son funcionales lineales de las fuerzas $f_a(t)$. Por lo que se refiere a las componentes de Fourier de estas magnitudes, esta relación se escribe como

$$\bar{x}_{a\omega} = \sum_b \alpha_{ab}(\omega) f_{b\omega}$$

(supongamos que $\bar{x}_a = 0$ en ausencia de la perturbación). Los coeficientes α_{ab} de estas relaciones se denominan *susceptibilidades generalizadas* del sistema. Si las dos magnitudes x_a y x_b se comportan del mismo modo frente a la inversión de tiempo y el cuerpo no es *magnetoactivo* (no tiene estructura magnética y no está dentro de un campo magnético), los α_{ab} son simétricos respecto a sus subíndices

Ahora nos hemos de ocupar de las magnitudes f_a y x_a que son funciones de las coordenadas \mathbf{r} de un punto del cuerpo y, por ello, tiene distribuciones. En este caso, ha de escribirse la expresión para \hat{V} como

$$\hat{V} = - \sum_a \int f_a(t, \mathbf{r}) \hat{x}_a(t, \mathbf{r}) d^3x, \quad (75.8)$$

y la relación entre los valores medios \bar{x}_a y las fuerzas f_a es

$$\bar{x}_{a\omega}(\mathbf{r}) = \sum_b \int \alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') f_{b\omega}(\mathbf{r}') d^3x'. \quad (75.9)$$

Las susceptibilidades generalizadas resultan ahora funciones de las coordenadas de los puntos del cuerpo y su simetría se expresa como

$$\alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \alpha_{ba}(\omega; \mathbf{r}', \mathbf{r}). \quad (75.10)$$

De acuerdo con la fórmula de Kubo [ver Parte 1, (126.9)] las susceptibilidades pueden expresarse en función de los valores medios de los comutadores de los operadores de Heisenberg $\hat{x}_a(t, \mathbf{r})$:

$$\alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle \hat{x}_a(t, \mathbf{r}) \hat{x}_b(0, \mathbf{r}') - \hat{x}_b(0, \mathbf{r}') \hat{x}_a(t, \mathbf{r}) \rangle dt. \quad (75.11)$$

A continuación consideraremos los componentes del vector densidad de corriente \mathbf{j} como las «fuerzas» f_a . Entonces se ve comparando (75.7) y (75.8) que las

magnitudes correspondientes x_a son las componentes del potencial vector \mathbf{A}/c de campo. Si comparamos (75.11) con las definiciones (75.3), (75.4) veremos que las susceptibilidades generalizadas $\alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ son las mismas que los componentes del tensor $-D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')/\hbar c^2$. Mediante (75.10) esto nos da inmediatamente (en medios no magnetoactivos)

$$D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = D_{ki}^R(\omega; \mathbf{r}', \mathbf{r}). \quad (75.12)$$

Las relaciones (75.9) se transforman en

$$\bar{\mathbf{A}}_{i\omega}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\hbar c} \int D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') j_{k\omega}(\mathbf{r}') d^3x'. \quad (75.13)$$

El valor medio $\bar{\mathbf{A}}$ coincide con el potencial vector del campo electromagnético macroscópico (totalmente promediado; ver al principio de esta sección); desde ahora se omitirá la barra sobre $\bar{\mathbf{A}}$ y las demás magnitudes macroscópicas. Utilizaremos ahora el hecho de que el campo macroscópico debido a la corriente clásica \mathbf{j} satisface la ecuación de Maxwell

$$\text{rot } \mathbf{H}_\omega = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_\omega - \frac{i\omega}{c} \mathbf{D}_\omega,$$

siendo \mathbf{D} la inducción eléctrica; en el caso general de un medio anisótropo, \mathbf{D}_ω está relacionado con el campo \mathbf{E}_ω mediante $D_{i\omega} = \epsilon_{ik}(\omega) E_{k\omega}$; si el medio es inhomogéneo, el tensor de permitividad es también una función de las coordenadas, $\epsilon_{ik}(\omega, \mathbf{r})$.

En la transformación escogida para los potenciales (75.1) tenemos

$$\mathbf{B}_\omega = \text{rot } \mathbf{A}_\omega, \quad \mathbf{E}_\omega = i\omega \mathbf{A}_\omega/c, \quad (75.14)$$

en donde \mathbf{B} es la inducción magnética, relacionada con el campo \mathbf{H} por $B_{i\omega} = \mu_{ik} H_{k\omega}$.† Por consiguiente, el potencial satisface la ecuación‡

$$[\text{rot}_{im} (\mu^{-1}_{mn} \text{rot}_{nk}) - (\omega^2/c^2) \epsilon_{ik}] A_{k\omega} = 4\pi j_{i\omega}/c.$$

Sustituyendo \mathbf{A}_ω en la forma (75.13), vemos que la función D_{ik}^R debe satisfacer la ecuación

$$[\text{rot}_{im} (\mu^{-1}_{mn} \text{rot}_{nl}) - (\omega^2/c^2) \epsilon_{il}] D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi \hbar \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (75.15)$$

† En electrodinámica macroscópica el valor medio del campo eléctrico microscópico se designa normalmente por \mathbf{E} y el valor medio del campo magnético por \mathbf{B} , que recibe el nombre de inducción magnética.

‡ De ahora en adelante utilizaremos la notación $\text{rot}_{il} = e_{ikl} \partial/\partial x_k$, siendo e_{ikl} el pseudotensor antisimétrico unidad; $(\text{rot } \mathbf{A})_l = \text{rot}_{il} A_l$.

Esta ecuación es considerablemente más sencilla en el caso de que los medios sean isótropos (en cada elemento de volumen), en donde los tensores ϵ_{ik} y μ_{ik} se reducen a escalares. La permeabilidad es normalmente próxima a la unidad y tomaremos $\mu = 1$ en el resto de esta sección. Poniendo $\epsilon_{ik} = \epsilon\delta_{ik}$ y $\mu_{ik} = \delta_{ik}$ se obtiene la ecuación

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta - \delta_{il} \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega; \mathbf{r}) \right] D_{lk}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\hbar\delta_{ik}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (75.16)$$

Así pues, el cálculo de la función de Green retardada para un medio inhomogéneo exige la resolución de una determinada ecuación diferencial (I. E. Dzyaloshinskii y L. P. Pitaevskii 1959).†

En las interfasas entre medios diferentes, los componentes del tensor D_{ik}^R deben satisfacer ciertas condiciones. En la ecuación (75.16), la segunda variable \mathbf{r}' y el segundo subíndice k no intervienen en las operaciones algebraicas y de derivación del tensor D_{ik}^R , es decir actúan sólo como parámetros. De aquí que las condiciones límites o de contorno hayan de imponerse únicamente respecto a las coordenadas \mathbf{r} para la función $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ considerada como un vector con el subíndice l . Estas condiciones corresponden al requisito de que los componentes tangenciales de \mathbf{E} y \mathbf{H} sean continuos, según nos dice la electrodinámica macroscópica.‡ Puesto que $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}/c$, el papel del vector \mathbf{E} lo juega aquí la derivada $-(1/c)\partial D_{ik}^R(t; \mathbf{r}, \mathbf{r}')/\partial t$ o, en componentes de Fourier,

$$i(\omega/c)D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (75.17)$$

Análogamente el papel del vector \mathbf{H} (que es el mismo que \mathbf{B} cuando $\mu = 1$) lo juega

$$\text{rot}_l D_{ik}(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (75.18)$$

En el caso de un medio infinito especialmente homogéneo, la función D_{ik}^R depende únicamente de la diferencia $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Cuando se trata de los componentes del desarrollo de Fourier respecto a esta diferencia, la ecuación diferencial (75.16) se convierte en un sistema de ecuaciones algebraicas

$$\frac{1}{4\pi\hbar} \left[k_i k_l - \delta_{il} k^2 + \delta_{il} \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \right] D_{lk}^R(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ik}. \quad (75.19)$$

† La función D_{ik}^R es la función de Green de las ecuaciones de Maxwell en el sentido familiar de la física matemática, es decir la solución de las ecuaciones de campo con una fuente o foco particular, que satisfacen la condición de retardo. La función avanzada D_{ik}^A satisface la misma ecuación con ϵ^* en lugar de ϵ .

‡ En este caso las condiciones de contorno correspondientes a los componentes normales de \mathbf{B} y \mathbf{D} no dan nada nuevo, debido a que en un campo que varía con el tiempo como $e^{-i\omega t}$, las ecuaciones $\text{rot } \mathbf{E} = i\omega \mathbf{B}/c$ y $\text{rot } \mathbf{H} = -i\omega \mathbf{D}/c$ implican las ecuaciones $\text{div } \mathbf{D} = 0$ y $\text{div } \mathbf{B} = 0$.

Su solución es

$$D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) = \frac{4\pi\hbar}{\omega^2\varepsilon(\omega)/c^2 - k^2} \left[\delta_{ik} - \frac{c^2 k_i k_k}{\omega^2 \varepsilon(\omega)} \right], \quad (75.20)$$

De acuerdo con (36.21), la función de Green D_{ik} para un medio homogéneo se expresa en términos de la función retardada D_{ik}^R mediante

$$D_{ik}(\omega, \mathbf{k}) = \operatorname{re} D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) + i \coth(\hbar\omega/2T) \operatorname{im} D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}). \quad (75.21)$$

Cuando $T \rightarrow 0$, esta expresión se reduce a

$$D_{ik}(\omega, \mathbf{k}) = \operatorname{re} D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) + i \operatorname{signo} \omega \cdot \operatorname{im} D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}). \quad (75.22)$$

La función D_{ik}^R viene dada por (75.20); puesto que $\operatorname{re} \varepsilon(\omega)$ es una función par de ω , e $\operatorname{im} \varepsilon(\omega)$ es función impar, se tiene a $T = 0$

$$D_{ik}(\omega, \mathbf{k}) = D_{ik}^R(|\omega|, \mathbf{k}). \quad (75.23)$$

En el vacío, $\varepsilon(\omega) = 1$. Como en cualquier medio material $\operatorname{im} \varepsilon(\omega) > 0$ cuando $\omega > 0$, el vacío corresponde al límite $\varepsilon \rightarrow 1 + i0$. La expresión resultante es

$$D_{ik}^{(0)}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{4\pi\hbar}{\omega^2/c^2 - k^2 + i0} \left(\delta_{ik} - \frac{c^2 k_i k_k}{\omega^2} \right),$$

de acuerdo con el resultado conocido de la electrodinámica cuántica (ver TCR, § 77).

§ 76. Fluctuaciones del campo electromagnético

Como ya se mencionó al principio de § 75, para el estudio de las fluctuaciones del campo electromagnético nos hemos de ocupar de las oscilaciones a lo largo del tiempo de magnitudes promediadas únicamente respecto a elementos de volumen físicamente infinitesimales (y no sobre el movimiento de las partículas en su interior). Los operadores cuánticos de estas magnitudes han de tomarse en el mismo sentido.

Las fórmulas básicas de la teoría de las fluctuaciones electromagnéticas pueden escribirse a continuación directamente a partir de las fórmulas generales del teorema de fluctuación-disipación (Parte 1, § 125). En el caso de un conjunto discreto

de magnitudes fluctuantes x_a , la distribución espectral de las fluctuaciones se expresa en función de las susceptibilidades generalizadas $\alpha_{ab}(\omega)$ por

$$(x_a x_b)_\omega = \frac{1}{2} i \hbar (\alpha_{ba}^* - \alpha_{ab}) \coth(\hbar\omega/2T),$$

en donde $(x_a x_b)_\omega$ es un componente del desarrollo de Fourier respecto al tiempo de la función de correlación

$$\phi_{ab}(t) = \frac{1}{2} \langle \hat{x}_a(t) \hat{x}_b(0) + \hat{x}_b(0) \hat{x}_a(t) \rangle,$$

y $\hat{x}_a(t)$ son los operadores de Heisenberg de las magnitudes x_a . Para magnitudes con distribución $x_a(\mathbf{r})$ (funciones de las coordenadas del punto del cuerpo), esta fórmula se reduce a

$$(x_a^{(1)} x_b^{(2)})_\omega = \frac{1}{2} i \hbar \coth(\hbar\omega/2T) [\alpha_{ba}^*(\omega; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) - \alpha_{ab}(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)], \quad (76.1)$$

en donde los superíndices (1) y (2) indican que los valores se toman en los puntos \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 .

En § 75 se ha demostrado que, si las magnitudes x_a son los componentes del potencial vector $\mathbf{A}(\mathbf{r})/c$, las susceptibilidades generalizadas correspondientes son los componentes del tensor $-D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)/\hbar c^2$. Por tanto, se halla inmediatamente

$$(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_\omega = \frac{1}{2} i \coth(\hbar\omega/2T) \{ D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - [D_{ki}^R(\omega; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)]^* \}. \quad (76.2)$$

Las funciones espectrales de las fluctuaciones del campo se encuentran fácilmente a partir de (76.2). Sea $\phi_{ik}^A(t_1, \mathbf{r}_1; t_2, \mathbf{r}_2)$ la función de correlación de las fluctuaciones del potencial vector; la expresión (76.2) es el componente del desarrollo de Fourier de esta función respecto a $t = t_1 - t_2$. Puesto que el campo eléctrico $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}/c$, la función correspondiente para los componentes de \mathbf{E} es

$$\phi_{ik}^E = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t_1 \partial t_2} \phi_{ik}^A = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \phi_{ik}^A,$$

o, en componentes de Fourier,

$$(E_i^{(1)} E_k^{(2)})_\omega = (\omega^2/c^2) (A_i^{(1)} A_k^{(2)})_\omega. \quad (76.3)$$

Análogamente, como $B = \text{rot } \mathbf{A}$, tenemos

$$(B_i^{(1)} B_k^{(2)})_\omega = \text{rot}_{il}^{(1)} \text{rot}_{km}^{(2)} (A_l^{(1)} A_m^{(2)})_\omega, \quad (76.4)$$

$$(E_i^{(1)} B_k^{(2)})_\omega = (i\omega/c) \text{rot}_{km}^{(2)} (A_i^{(1)} A_m^{(2)})_\omega. \quad (76.5)$$

Expresando las funciones de correlación de las fluctuaciones electromagnéticas en función de la función de Green retardada, las fórmulas (76.2)-(76.5) reducen su cálculo a la resolución de la ecuación diferencial (75.15) o (75.16) con las condiciones de contorno apropiadas en las intercaras especificadas.[†]

A partir de ahora supondremos que el medio es no magnetoactivo. Entonces la función D_{ik}^R tiene la propiedad de simetría (75.12), y (76.2) se transforma en

$$(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_{\omega} = -\coth(\hbar\omega/2T) \operatorname{im} D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (76.6)$$

Debe señalarse que la expresión (76.6) es real y, por tanto, también lo son (76.3) y (76.4), mientras que (76.5) es imaginaria. Esto significa que las funciones de correlación temporal entre los componentes de \mathbf{E} y entre los de \mathbf{B} son funciones pares del tiempo $t = t_1 - t_2$ (como debe suceder cuando se trata de una correlación entre magnitudes que son ambas pares o impares frente a la inversión temporal). Pero la función de correlación temporal de los componentes de \mathbf{E} con los de \mathbf{B} es una función impar del tiempo (como debe suceder cuando se trata de dos magnitudes una de las cuales es par y la otra impar frente a la inversión temporal). De aquí se deduce que los valores de \mathbf{E} y \mathbf{B} en un instante dado cualquiera no están correlacionados (una función impar de t es cero cuando $t = 0$). Junto con la función de correlación, los valores medios de cualquier expresión bilineal en \mathbf{E} y \mathbf{B} (tomadas en el mismo instante), por ejemplo el vector de Poynting, son nulos. Esto es realmente evidente ya que en un cuerpo en equilibrio térmico e invariante frente a la inversión temporal no puede existir ningún tipo de flujo interno macroscópico de energía.

§ 77. Fluctuaciones electromagnéticas en un medio infinito

En un medio homogéneo infinito, las funciones $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ dependen únicamente de la diferencia $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ y son funciones pares de \mathbf{r} ; la ecuación (75.15) contiene únicamente derivadas segundas respecto a las coordenadas, de modo que $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r})$ y $D_{ik}^R(\omega; -\mathbf{r})$ satisfacen la misma ecuación. Tomando los componentes de Fourier respecto a \mathbf{r} en ambos miembros de (76.2) se tiene

$$(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_{\omega k} = \frac{1}{2} i \coth(\hbar\omega/2T) \{D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) - [D_{ki}^R(\omega, \mathbf{k})]^*\}. \quad (77.1)$$

En el caso de medios no magnetoactivos, con (75.12), esta expresión se convierte en

$$(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_{\omega k} = -\coth(\hbar\omega/2T) \operatorname{im} D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}). \quad (77.2)$$

[†] La teoría de las fluctuaciones electromagnéticas fue desarrollada en otra forma por S. M. Rytov (1953) y en forma equivalente a (76.2)-(76.5) por M. L. Levin y S. M. Rytov (1967).

En un medio isótropo no magnético ($\mu = 1$), la función $D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k})$ viene dada por (75.20). El problema de hallar la función de correlación espacial de las fluctuaciones se reduce al cálculo de la integral

$$D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}) = \int D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3k / (2\pi)^3. \quad (77.3)$$

La integración se efectúa mediante las fórmulas

$$\begin{aligned} \int \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{k^2 + \varepsilon^2} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} &= \frac{e^{-\varepsilon r}}{4\pi r}, \\ \int \frac{k_i k_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{k^2 + \varepsilon^2} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} &= -\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \frac{e^{-\varepsilon r}}{4\pi r}, \end{aligned} \quad (77.4)$$

la primera de las cuales se obtiene tomando los componentes de Fourier de la ecuación conocida

$$(\Delta - \varepsilon^2) \frac{e^{-\varepsilon r}}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}), \quad (77.5)$$

y la segunda derivando la primera. El resultado es

$$D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}) = -\hbar \left\{ \delta_{ik} \frac{c^2}{\omega^2 \varepsilon} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \right\} \frac{1}{r} \exp \left(-\frac{\omega r}{c} \sqrt{-\varepsilon} \right), \quad (77.6)$$

en donde $r = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ y $\sqrt{-\varepsilon}$ ha de tomarse con el signo que haga re $\sqrt{-\varepsilon} > 0$; en el caso del vacío debemos poner $\varepsilon = 1$, $\sqrt{-\varepsilon} = -i$ (ver más adelante).

De aquí que, utilizando (76.6) y (76.3), tenemos inmediatamente

$$(E_i^{(1)} E_k^{(2)})_\omega = \hbar \coth \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{im} \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\varepsilon\omega^2}{c^2} \delta_{ik} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \right] \frac{1}{r} \exp \left(-\frac{\omega r}{c} \sqrt{-\varepsilon} \right) \right\} \quad (77.7)$$

(S. M. Rytov 1953). Contrayendo esta expresión respecto a los subíndices i y k y utilizando la fórmula (77.5), obtenemos

$$(\mathbf{E}^{(1)} \cdot \mathbf{E}^{(2)})_\omega = 2\hbar \coth \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{im} \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\varepsilon\omega^2}{c^2 r} \exp \left(-\frac{\omega r}{c} \sqrt{-\varepsilon} \right) + 2\pi\delta(\mathbf{r}) \right] \right\}. \quad (77.8)$$

Análogamente, un cálculo a partir de (76.4) da unas expresiones para las funciones de correlación del campo magnético que difieren de (77.7) y (77.8) por la ausencia del factor $1/\varepsilon$ delante del corchete; el término de función delta en (77.8) carece entonces de parte imaginaria y no aparece en el resultado.

La presencia de la parte imaginaria de ϵ en las expresiones (77.7) y (77.8) muestra claramente la relación existente entre las fluctuaciones electromagnéticas y la absorción del medio. Pero si en estas expresiones tomamos el límite $\epsilon \rightarrow 0$, obtenemos resultados no nulos. Esto se relaciona con el orden que se sigue para tomar los dos límites, el de un medio infinito e im ϵ cero. Como en un medio infinito un valor arbitrariamente pequeño de im ϵ acaba originando finalmente absorción, el orden que hemos seguido al tomar los límites, nos da un resultado que corresponde a un medio físicamente transparente en el que, como en cualquier medio real, existe todavía cierta absorción.

Por ejemplo, tomemos estos límites en (77.8). Para ello, observemos que en el caso de un pequeño valor positivo de im ϵ (con $\omega > 0$)

$$\sqrt{-\epsilon} \approx -i\sqrt{\text{re } \epsilon} \cdot \left(1 + i\frac{\text{im } \epsilon}{2 \text{re } \epsilon}\right)$$

(utilizando la condición de que $\text{re } \sqrt{-\epsilon} > 0$). De aquí que en el límite cuando $\text{im } \epsilon \rightarrow 0$, obtenemos

$$(\mathbf{E}^{(1)} \cdot \mathbf{E}^{(2)})_\omega = \frac{1}{n^2} (\mathbf{H}^{(1)} \cdot \mathbf{H}^{(2)})_\omega = \frac{2\omega^2 \hbar}{c^2 r} \sin \frac{\omega n r}{c} \coth \frac{\hbar \omega}{2T}, \quad (77.9)$$

en donde $n = \sqrt{\epsilon}$ es el índice de refracción real. Como el término de la función delta no está presente, esta expresión sigue siendo finita aun cuando coincidan los puntos \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 :

$$(\mathbf{E}^2)_\omega = \frac{1}{n^2} (\mathbf{H}^2)_\omega = \frac{2\omega^3 \hbar n}{c^3} \coth \frac{\hbar \omega}{2T}. \quad (77.10)$$

También podría hacerse el paso al límite de un medio transparente en un punto anterior del cálculo, a saber, en la función de Green. Como el signo de im $\epsilon(\omega)$ es el mismo que el de ω , vemos que en este límite la función (75.20) se convierte en

$$D_{ik}^R(\omega, \mathbf{k}) = \frac{4\pi\hbar}{\omega^2 n^2 / c^2 - k^2 + i0 \cdot \text{signo } \omega} \left[\delta_{ik} - \frac{c^2 k_i k_k}{\omega^2 n^2} \right]. \quad (77.11)$$

La parte imaginaria de esta función depende únicamente del modo de evitar los polos $\omega = \pm ck/n$; separándola mediante (8.11) y sustituyendo en (77.2) se tiene

$$(E_i^{(1)} E_k^{(2)})_{\omega k} = \frac{2\pi^2 \hbar}{k} \left(\frac{\omega^2}{c^2} \delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{n^2} \right) \left\{ \delta \left(\frac{n\omega}{c} - k \right) - \delta \left(\frac{n\omega}{c} + k \right) \right\} \coth \frac{\hbar \omega}{2T}. \quad (77.12)$$

Los argumentos de las funciones delta en esta expresión tienen un significado físico simple: muestran que las fluctuaciones del campo con un valor dado de \mathbf{k}

se propagan en el espacio con velocidad c/n , igual a la de propagación de las ondas electromagnéticas en el mismo medio. La transformación inversa de Fourier de (77.12) conduce de nuevo a (77.7), como es natural.

La energía del campo electromagnético fluctuante en un medio transparente (con $\mu = 1$) en el intervalo espectral $d\omega$ es, por unidad de volumen del espacio,

$$\frac{1}{8\pi} \left[2(\mathbf{E}^2)_\omega \frac{d(\omega\varepsilon)}{d\omega} + 2(\mathbf{H}^2)_\omega \right] \frac{d\omega}{2\pi};$$

ver *EMC*, § 61.† La sustitución de (77.10) da fácilmente

$$\left[\frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right] \frac{\omega^2 n^2}{\pi^2 c^3} \frac{d(n\omega)}{d\omega} d\omega. \quad (77.13)$$

El primer término del corchete se debe a las oscilaciones del punto cero del campo; el segundo da la energía de la radiación electromagnética en equilibrio termodinámico con el medio transparente, es decir la energía de la *radiación del cuerpo negro*. Podía haberse obtenido esta parte de la fórmula también sin considerar las fluctuaciones, mediante una generalización de la fórmula de Planck correspondiente a la radiación del cuerpo negro en el vacío. De acuerdo con esta fórmula, la energía de la radiación del cuerpo negro por unidad de volumen en el intervalo d^3k de los vectores de onda es

$$\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \cdot \frac{2d^3k}{(2\pi)^3};$$

el factor 2 tiene en cuenta las dos direcciones de polarización. En correspondencia, para obtener la densidad de energía espectral debemos sustituir d^3k por $4\pi k^2 dk$ y además $k = \omega/c$. Para pasar del vacío a un medio transparente, es suficiente escribir $k = n\omega/c$, es decir

$$k^2 dk = k^2 (dk/d\omega) d\omega = \frac{\omega^2 n^2}{c^3} \frac{d(n\omega)}{d\omega} d\omega$$

que da el resultado buscado.

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Hallar las fluctuaciones del campo electromagnético a una distancia grande de un cuerpo incluido en un medio transparente rarificado con el que está en equilibrio térmico; la longitud de onda de la radiación y la distancia desde el cuerpo hasta el punto considerado son

† Se encuentra la energía total integrando respecto a ω desde 0 hasta ∞ ; los factores 2 que aparecen en el corchete se deben a que, según nuestra definición de las fluctuaciones espirales de las fluctuaciones, se obtiene el valor medio $\langle x^2 \rangle$ integrando $(x^2)_\omega$ respecto a $\omega/2\pi$ desde $-\infty$ hasta ∞ (ver Parte 1, (122.6)].

grandes en comparación con el propio tamaño del cuerpo. El cuerpo tiene una polarizabilidad eléctrica anisótropa $\alpha_{ik}(\omega)$.

SOLUCIÓN. El medio transparente rarificado se considera como el vacío. Las fluctuaciones buscadas están determinadas por el cambio en la función de Green del vacío por la presencia del cuerpo; este cambio es pequeño (a distancias grandes). Para calcular este cambio, empecemos a partir de una analogía en la que la función del vacío $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (para un subíndice k dado) puede formalmente considerarse como el campo eléctrico $E_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ en el punto \mathbf{r} debido a una fuente o foco situado en el punto \mathbf{r}' . Esta analogía se basa en el hecho de que el campo $E_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, como su potencial $A_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, satisface para $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ una ecuación semejante a $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, que es la (75.16) con $\epsilon = 1$. Supongamos que el cuerpo está en el punto $\mathbf{r} = 0$. El campo

$$E_i(0, \mathbf{r}') = D_{ik}^R(\omega; 0, \mathbf{r}') \equiv D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}'),$$

en donde $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r})$ es la función de Green en el vacío en ausencia del cuerpo [dada por (77.6) con $\epsilon = 1$], polariza el cuerpo y crea así en el punto $\mathbf{r} = 0$ un momento dipolar $d_i = \alpha_{il} D_{ik}^R(\omega; 0, \mathbf{r}')$.

El campo creado en el giro por este momento dipolar en el punto \mathbf{r} da el cambio requerido $\delta D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$. De acuerdo con una fórmula de la electrodinámica (ver *Campos*, § 72), el campo creado en el punto \mathbf{r} por el momento dipolar \mathbf{d} (que varía con el tiempo como $e^{-i\omega t}$) es

$$E_i = d_i \left[\frac{\omega^2}{c^2} \delta_{ii} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i} \right] \frac{e^{i\omega r/c}}{r},$$

en donde la distancia r ha de ser grande únicamente en comparación con el tamaño del cuerpo y no con la longitud de onda. Esta expresión puede escribirse

$$E_i = -\frac{\omega^2}{\hbar c^2} D_{ii}^R(\omega; \mathbf{r}) d_i$$

[la función $D_{ii}^R(\omega; \mathbf{r})$ es par en \mathbf{r}]. Con el valor del momento dipolar dado anteriormente, podemos escribir, por tanto,

$$\delta D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -(\omega^2/\hbar c^2) D_{ii}^R(\omega; \mathbf{r}) \alpha_{im} D_{mk}^R(\omega; \mathbf{r}').$$

Se encuentran a continuación las funciones de correlación de las fluctuaciones requeridas a partir de las fórmulas generales (76.3)-(76.6) con δD_{ik}^R en lugar de D_{ki}^R . El resultado final es

$$\delta(A_i^{(1)} A_k^{(2)})_\omega = \frac{2\omega^2}{\hbar c^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{i\omega/T} - 1} \right\} \operatorname{im} [D_{ii}^R(\omega; \mathbf{r}_1) \alpha_{im} D_{mk}^R(\omega; \mathbf{r}_2)]. \quad (1)$$

El cuerpo está en $\mathbf{r} = 0$; \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 son dos puntos remotos respecto a él. Existe una contribución a las fluctuaciones no sólo procedente de la parte imaginaria de la polarizabilidad sino también de su parte real; esta última puede considerarse como el resultado de la dispersión por el cuerpo de la radiación del cuerpo negro que ocupa el medio transparente.

PROBLEMA 2. Igual que el problema 1, pero referido al caso de un cuerpo con polarizabilidad magnética $\alpha_{ik}(\omega)$.†

SOLUCIÓN. En este caso consideraremos a $\operatorname{rot}_{il} D_{kl}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ como el campo magnético $H_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ creado en el punto \mathbf{r} por una fuente o foco situado en el punto \mathbf{r}' ; el campo H_i no satisface a una

† La presencia de una polarizabilidad magnética no significa necesariamente que el cuerpo esté constituido por un material magnético; por ejemplo, podemos considerar el desplazamiento del campo magnético del cuerpo debido al efecto skin.

ecuación de la misma forma que la que cumple D_{ik}^R , pero si lo hace su potencial A_i . Este campo imana el cuerpo, creando en $\mathbf{r} = 0$ un momento magnético

$$\mathbf{m}_i = -\alpha_{ii} \operatorname{rot}'_{im} D_{mk}^R(\omega; 0, \mathbf{r}');$$

la derivación respecto a \mathbf{r} se sustituye por otra respecto a \mathbf{r}' , utilizando el hecho de que D_{mk}^R depende únicamente de la diferencia $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. El cambio requerido en la función de Green es igual al potencial vector del campo magnético creado por este momento magnético en el punto \mathbf{r} :

$$A_i = \operatorname{rot}_{ii} \left[\frac{1}{r} m_i e^{i\omega r/c} \right];$$

ver *Campos*, § 72, problema 1. Así pues,

$$\delta D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\left(\operatorname{rot}_{ii} \frac{e^{i\omega r/c}}{r} \right) \alpha_{im} \operatorname{rot}'_{mn} D_{nk}^R(\omega; 0, \mathbf{r}').$$

Finalmente, sustituyendo D_{nk}^R de (77.6) se tiene

$$\delta D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hbar \left(\operatorname{rot}_{ii} \frac{e^{i\omega r/c}}{r} \right) \alpha_{im} \operatorname{rot}'_{mk} \frac{e^{i\omega r'/c}}{r'}, \quad (2)$$

utilizando el hecho de que $\operatorname{rot}_{mn} \nabla_n = e_{mkn} \nabla_k \nabla_n \equiv 0$.

PROBLEMA 3. Determinar las fluctuaciones del campo electromagnético en las condiciones del problema 1, pero suponiendo que la temperatura del medio es mucho menor que la del cuerpo.

SOLUCIÓN. El campo calculado en el problema 1 se descompone de forma natural, de acuerdo con los dos términos que hay dentro de los corchetes en (1), en las fluctuaciones del punto cero y en la radiación térmica del cuerpo negro. Esta última se compone a su vez de dos partes, la radiación térmica del propio cuerpo y el campo que se obtiene de la dispersión de la radiación del cuerpo negro por el cuerpo. Si la temperatura del medio es baja, no aparece la segunda parte. Al resolver el problema, calcularemos esta parte separadamente y luego la restaremos de (1). Sea $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}^{(0)} + \mathbf{A}^{(s)}$, en donde $\mathbf{A}^{(0)}$ es el campo fluctuante en ausencia del cuerpo y $\mathbf{A}^{(s)}$ es el campo dispersado por el cuerpo. A distancias grandes, en donde $\mathbf{A}^{(s)}$ es pequeño, podemos despreciar los términos cuadráticos en $\mathbf{A}^{(s)}$ cuando calculemos $\delta(A_{il}, A_{k2})_\omega$. Por consiguiente, la contribución de la dispersión es

$$\delta^{(s)}(A_{il} A_{k2})_\omega \approx (A_{i1}^{(0)} A_{k2}^{(0)})_\omega + (A_{i1}^{(0)} A_{k2}^{(s)})_\omega = (A_{i1}^{(0)} A_{k2}^{(0)})_\omega + (A_{k2}^{(0)} A_{i1}^{(0)})^*.$$

El campo dispersado viene dado de nuevo por la fórmula que aparece en *Campos*, § 72, pero ahora ha de tomarse el momento dipolar simplemente como el inducido por la radiación del cuerpo negro, $d_i = \alpha_{ik} A_k^{(0)}(0)$. Utilizando otra vez la función de Green en el vacío en ausencia del cuerpo, tenemos

$$A_i^{(s)}(\mathbf{r}_1) = -\frac{\omega^2}{\hbar c^2} D_{ii}^R(\omega; \mathbf{r}_1) \alpha_{im}(\omega) A_m^{(0)}(0),$$

de modo que

$$(A_{i1}^{(0)} A_{k2}^{(0)})_\omega = -\frac{\omega^2}{\hbar c^2} D_{ii}^R(\omega; \mathbf{r}_1) \alpha_{im}(A_m^{(0)}(0) A_k^{(0)}(\mathbf{r}_2))_\omega.$$

Se toma una vez más la función de correlación $(A_{m1}^{(0)} A_{k2}^{(0)})_\omega$ de (76.2). Como únicamente estamos interesados en la radiación térmica, han de omitirse las oscilaciones del punto cero de esta fórmula, con el cambio

$$\frac{1}{2} \coth \frac{\hbar\omega}{2T} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} + \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1}.$$

El resultado para la contribución de la radiación dispersada del cuerpo negro a la función de correlación es

$$\delta^{(r)}(A_{i1} A_{k2})_\omega = \frac{2\omega^2}{\hbar c^2(e^{\hbar\omega/T} - 1)} [D_{ii}^R(\omega; \mathbf{r}_1) \alpha_{im} \operatorname{im} D_{mk}^R(\omega; \mathbf{r}_2) + D_{ki}^{R*}(\omega; \mathbf{r}_2) \alpha_{im}^* \operatorname{im} D_{mi}^R(\omega; \mathbf{r}_1)]. \quad (3)$$

Finalmente, con objeto de hallar el campo fluctuante en un medio frío, debemos restar (3) de (1). Una sencilla redistribución haciendo uso de la simetría de los tensores D_{ik} y α_{ik} da

$$\delta^{(r)}(A_{i1} A_{k2})_\omega = \frac{2\omega^2}{\hbar c^2(e^{\hbar\omega/T} - 1)} D_{ii}^R(\omega; \mathbf{r}_1) [\operatorname{im} \alpha_{im}(\omega)] D_{mk}^{R*}(\omega; \mathbf{r}_2), \quad (4)$$

en donde T es la temperatura del cuerpo. Únicamente se ha omitido ahora el término térmico; permanece sin variar el término de la oscilación del punto cero en (1). Debe señalarse que la expresión (4) correspondiente a la radiación térmica del cuerpo depende únicamente de la parte imaginaria de la polarizabilidad. El flujo de energía calculado a partir de (4) no es nulo; da la intensidad de la radiación térmica que desde el cuerpo caliente pasa al medio frío que lo rodea.

§ 78. Fluctuaciones de corriente en circuitos lineales

Otra aplicación interesante del teorema de fluctuación-disipación es el problema de las fluctuaciones de corriente en los circuitos lineales, estudiado en primer lugar por H. Nyquist (1928).

Las fluctuaciones de corriente son oscilaciones eléctricas libres en el conductor (es decir, aparecen en ausencia de cualquier f.e.m. aplicada externamente). En un circuito lineal cerrado las oscilaciones de mayor interés son, como es lógico aquellas en las que fluye en el conductor una corriente total J no nula. En lo que sigue supondremos que es válida la condición para que se establezca la condición de estado cuasi-estacionario: las dimensiones del circuito son pequeñas en comparación con la longitud de onda $\lambda \sim c/\omega$. Entonces la corriente total J es la misma en todos los puntos del circuito y es una función solamente del tiempo.

Puede tomarse esta corriente J como la magnitud $x(t)$ que aparece en la formulación general del teorema de fluctuación-disipación (Parte 1, § 124). Con objeto de encontrar el significado de la susceptibilidad generalizada correspondiente α , supongamos que actúa sobre el circuito una f.e.m. \mathcal{E} externa. Entonces la disipación de energía por unidad de tiempo en el circuito es $Q = J\mathcal{E}$. Si comparamos con la expresión $Q = -\dot{x}\mathcal{f}$, que sirve para definir la «fuerza» \mathcal{f} [ver Parte 1, (123.10)], se ve que $f = -\mathcal{E}$, o en los componentes de Fourier $\mathcal{E}_\omega = i\omega f_\omega$. Por otro lado,

la corriente y la f.e.m. en un circuito lineal están relacionadas por $\mathcal{E}_\omega = Z(\omega)J_\omega$, en donde $Z(\omega)$ es la impedancia del circuito. Por tanto, tenemos

$$J_\omega = \mathcal{E}_\omega/Z = i\omega f_\omega/Z,$$

y al comparar con la definición de la susceptibilidad generalizada en la relación $(\tilde{x})_\omega = \alpha(\omega)f$ nos da $\alpha(\omega) = i\omega/Z(\omega)$. La parte imaginaria de α es

$$\operatorname{im} \alpha = \operatorname{im}(i\omega/Z) = (\omega/|Z|^2)R(\omega),$$

en donde $R = \operatorname{re} Z$.

De acuerdo con el teorema de fluctuación-disipación,

$$(x^2)_\omega = \hbar \coth(\hbar\omega/2T) \cdot \operatorname{im} \alpha(\omega),$$

encontramos ahora para la función espectral de las fluctuaciones de corriente

$$(J^2)_\omega = [\hbar\omega/|Z(\omega)|^2] R(\omega) \coth(\hbar\omega/2T). \quad (78.1)$$

Puede ponerse esta fórmula en otra forma considerando las fluctuaciones de corriente como el resultado de la acción de la f.e.m. «aleatoria» $\mathcal{E}_\omega = ZJ_\omega$. Esto da

$$(\mathcal{E}^2)_\omega = \hbar\omega R(\omega) \coth(\hbar\omega/2T). \quad (78.2)$$

En el caso clásico ($\hbar\omega \ll T$).

$$(\mathcal{E}^2)_\omega = 2TR(\omega). \quad (78.3)$$

Debemos insistir de nuevo que estas fórmulas son totalmente independientes de la naturaleza de los fenómenos responsables de la dispersión en la resistencia del circuito.

§ 79. Función de Green de la temperatura de un fotón en un medio

Se construye la función de Green de la temperatura de un fotón en un medio a partir de los operadores de Matsubara de los potenciales del campo electromagnético del mismo modo que se determina la función de Green del tiempo a partir de los operadores de Heisenberg:

$$\mathcal{D}_{ik} = -\langle T_\tau \hat{A}_i^M(\tau_1, \mathbf{r}_1) \hat{A}_k^M(\tau_2, \mathbf{r}_2) \rangle. \quad (79.1)$$

Ahora hemos aplicado el hecho de que los operadores de Matsubara \hat{A}^M y \hat{A}^M [definidos como en (37.1)] son iguales, puesto que los operadores de Schrödinger del campo son hermíticos. Sin embargo, estos operadores no son ellos mismos hermíticos, a diferencia de los operadores de Heisenberg. Como el parámetro τ es real tenemos

$$[\hat{A}^M(\tau, \mathbf{r})]^+ = [e^{\tau\hat{H}'/\hbar}\hat{A}(\mathbf{r}) e^{-\tau\hat{H}'/\hbar}]^+ = e^{-\tau\hat{H}'/\hbar}\hat{A}(\mathbf{r}) e^{\tau\hat{H}'/\hbar},$$

o sea

$$[\hat{A}^M(\tau, \mathbf{r})]^+ = \hat{A}^M(-\tau, \mathbf{r}).$$

Como la función (79.1) depende únicamente de la diferencia $\tau = \tau_1 - \tau_2$ (cf. 37) podemos escribir (tomando, por ejemplo, $\tau > 0$)

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{ik}(\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= -\langle \hat{A}_i^M(\tau, \mathbf{r}_1) \hat{A}_k^M(0, \mathbf{r}_2) \rangle, \\ \mathcal{D}_{ik}(-\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= -\langle \hat{A}_k^M(\tau, \mathbf{r}_2) \hat{A}_i^M(0, \mathbf{r}_1) \rangle.\end{aligned}$$

La comparación de ambas expresiones muestra que

$$\mathcal{D}_{ik}(-\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{D}_{ki}(\tau; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (79.2)$$

La función \mathcal{D}_{ik} puede desarrollarse en serie de Fourier de la variable τ :

$$\mathcal{D}_{ik}(\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = T \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-i\zeta_s \tau}, \quad (79.3)$$

en donde las «frecuencias» ζ_s toman valores tales que $\hbar\zeta_s = 2\pi sT$ [debido a que los fotones obedecen a la estadística de Bose; ver (37.8)]. En el caso de los componentes de este desarrollo, (79.2) da la relación correspondiente

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{D}_{ki}(-\zeta_s; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (79.4)$$

De acuerdo con la relación general (37.12), estos componentes están relacionados con la función de Green retardada por

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = D_{ik}^R(i\zeta_s; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

para ζ_s positiva. En § 75 se ha demostrado que pueden considerarse en cierto sentido a las funciones $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ como las susceptibilidades generalizadas que aparecen en la teoría general de la respuesta de un sistema macroscópico a una interacción externa. De aquí se deduce la propiedad de simetría de estas funciones

(en el caso de medios no magnetoactivos) expresada por la ecuación (75.12); debido a la relación existente entre D_{ik}^R y \mathcal{D}_{ik} , esta última tiene una propiedad semejante,

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{D}_{ki}(\zeta_s; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (79.5)$$

A partir de esta ecuación conjuntamente con (79.4) se deduce ahora que las funciones $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ son funciones pares de la variable discreta ζ_s , de modo que para todos sus valores (positivos y negativos) tenemos

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = D_{ik}^R(i|\zeta_s|; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (79.6)$$

Además la función $D_{ik}^R(\omega; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, como cualquier susceptibilidad generalizada, es real sobre el eje imaginario positivo (ver Parte 1, § 123); por tanto, se deduce de (79.6) que la función $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ es real para todos los valores de ζ_s . Finalmente, se deduce de estas propiedades que la función original $\mathcal{D}_{ik}(\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ es real y una función par de τ :

$$\mathcal{D}_{ik}(\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{D}_{ik}(-\tau; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (79.7)$$

La relación (79.6) entre la función de Green de la temperatura y la función de Green retardada nos permite escribir inmediatamente a continuación la ecuación diferencial que debe ser satisfecha por la función \mathcal{D}_{ik} en un medio inhomogéneo; para ello es suficiente sustituir ω por $i|\zeta_s|$ en la ecuación (75.15) o (75.16). Por ejemplo, con un medio isótropo no magnetoactivo que tenga $\mu = 1$, se halla la ecuación

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta + \frac{\zeta_s^2}{c^2} \varepsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}) \delta_{il} \right] \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\hbar \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (79.8)$$

En el caso de un medio homogéneo infinito, la función $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ se desarrolla como una integral de Fourier respecto a la diferencia $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Los componentes de este desarrollo satisfacen las ecuaciones algebraicas

$$\frac{1}{4\pi\hbar} \left[k_i k_l - \delta_{il} k^2 - \delta_{il} \frac{\zeta_s^2}{c^2} \varepsilon(i|\zeta_s|) \right] \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s, \mathbf{k}) = \delta_{ik}, \quad (79.9)$$

y vienen dados por†

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s, \mathbf{k}) = -\frac{4\pi\hbar}{\zeta_s^2 \varepsilon(i|\zeta_s|)/c^2 + k^2} \left[\delta_{ik} + \frac{c^2 k_i k_k}{\zeta_s^2 \varepsilon(i|\zeta_s|)} \right]. \quad (79.10)$$

† En las aplicaciones prácticas (cf. § 80), la función \mathcal{D}_{ik} aparece siempre como un producto con ζ_s^2 y esto elimina la divergencia a $\zeta_s = 0$.

Como la función $D_{ik}(\zeta_s, \mathbf{k})$ se expresa (en el margen de longitudes de onda largas $ka \ll 1$) en función de $\epsilon(\omega)$, la técnica diagramática para su cálculo se convierte en una técnica para el cálculo de la permitividad del medio. Esta última magnitud tiene un significado diagramático definido, que ahora aclararemos.

Representaremos la función exacta \mathcal{D} por una línea de trazos gruesa y la función del vacío $\mathcal{D}^{(0)}$ por otra delgada:[†]

$$\text{--- --- ---} = \mathcal{D}_{ik} \times 2 \quad \text{--- --- ---} = -\mathcal{D}_{ik}^{(0)} \times 2 \quad (79.11)$$

El conjunto completo de diagramas que representan la función \mathcal{D} puede expresarse como una serie de modo totalmente análogo a la serie (14.3) para la función G :

$$\text{--- --- ---} = \text{--- --- ---} + \text{--- } \circ \text{--- --- ---} + \text{--- } \circ \text{--- } \circ \text{--- --- ---} + \dots, \quad (79.12)$$

en donde un círculo equivale al conjunto de bloques de diagramas que no corresponden a dos partes unidas únicamente por una línea a trazos; este conjunto se designará por $-\mathcal{P}_{ik}/4\pi$. La función \mathcal{P}_{ik} (análoga a la parte de autoenergía de la función de Green de las partículas) se denomina el *operador de polarización*.

La ecuación diagramática (79.12) es equivalente a

$$\text{--- --- ---} = \text{--- --- ---} + \text{--- } \circ \text{--- --- ---}; \quad (79.13)$$

cf. la deducción de (14.4) a partir de (14.3). En forma analítica, es

$$\mathcal{D}_{ik} = \mathcal{D}_{ik}^{(0)} + \mathcal{D}_{il}^{(0)} (\mathcal{D}_{lm}/4\pi) \mathcal{D}_{mk}, \quad (79.14)$$

en donde todos los factores son funciones de los mismos argumentos ζ_s y \mathbf{k} . Multiplicando esta ecuación por la derecha por el tensor inverso \mathcal{D}^{-1} y por la izquierda por $[\mathcal{D}^{(0)}]^{-1}$, podemos volverla a escribir como

$$\mathcal{D}^{-1}_{ik} = [\mathcal{D}^{(0)}]^{-1}_{ik} - \mathcal{P}_{ik}/4\pi. \quad (79.15)$$

Finalmente, despejando \mathcal{D}_{ik}^{-1} del primer miembro de la ecuación (79.9) y obteniendo una expresión semejante con $\epsilon = 1$ a partir de $[\mathcal{D}^{(0)}]_{ik}^{-1}$ se tiene

$$\mathcal{P}_{ik}(\zeta_s, \mathbf{k}) = (\zeta_s^2/\hbar c^2)[\epsilon(i|\zeta_s|) - 1] \delta_{ik}, \quad (79.16)$$

que determina el significado diagramático de la función $\epsilon(\omega) - 1$ en un conjunto discreto de puntos sobre el eje ω imaginario positivo. La continuación analítica

[†] El empleo de líneas a trazos para designar a las funciones \mathcal{D} no puede producir ninguna confusión aquí, puesto que en esta sección y en la siguiente no aparece explícitamente la energía de interacción de pares de las partículas en el medio (que fue la magnitud que utilizó esta notación previamente).

de $\epsilon(i|\zeta_s|)$ a la totalidad del semiplano superior debe tener en cuenta, en principio, los hechos de que $\epsilon(\omega)$ no puede tener ninguna singularidad en este semiplano y que $\epsilon(\omega) \rightarrow 1$ cuando $|\omega| \rightarrow \infty$.^f

En un medio inhomogéneo, el operador de polarización es, como \mathcal{D}_{ik} , una función de las coordenadas de dos puntos. Repitiendo la deducción en la representación de las coordenadas, obtenemos en lugar de (79.14)

$$\mathcal{D}_{ik}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{D}_{ik}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \frac{1}{4\pi} \int \mathcal{D}_{il}^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) \mathcal{P}_{lm}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) \mathcal{D}_{mk}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_2) d^3x_3 d^3x_4;$$

por brevedad se omite el argumento ζ_s . Aplicando el operador

$$\frac{\partial^2}{\partial x_{1n} \partial x_{1l}} - \delta_{nl} \Delta_1 + (\zeta_s^2/c^2) \delta_{nl}$$

a la izquierda de esta ecuación y observando que $D^{(0)}$ satisface la ecuación (79.8) con $\epsilon = 1$, obtenemos

$$\int \mathcal{P}_{il}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') \mathcal{D}_{ik}(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2) d^3x' = [\epsilon(\mathbf{r}_1) - 1] (\zeta_s^2/\hbar c^2) \mathcal{D}_{ik}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

de aquí que

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\zeta_s^2/\hbar c^2) \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) [\epsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}_1) - 1]. \quad (79.17)$$

La estructura del medio condensado (y de aquí sus propiedades dieléctricas) está determinada por las fuerzas que actúan entre sus partículas a distancias del orden de las dimensiones atómicas a . A estas distancias (si las velocidades de la partícula no son relativistas) podemos despreciar el retardo de las interacciones, que únicamente resultan de importancia en el caso de los componentes de onda larga ($ka \ll 1$) del campo. Es decir, al calcular el operador de polarización podemos despreciar la parte del campo de onda larga. Sin embargo, en los diagramas correspondientes a la propia función de Green \mathcal{D}_{ik} aparece el campo de onda larga únicamente a través de las líneas a trazos delgadas a la derecha de (79.12).

Como es natural el tensor tridimensional \mathcal{P}_{ik} considerado en esta sección es únicamente la parte espacial del 4-tensor de polarización $\mathcal{P}_{\mu\nu}$. Debemos resaltar, para evitar malas interpretaciones, que su componente temporal \mathcal{P}_{00} y sus componentes mixtos \mathcal{P}_{0i} no son nulos. Además, como en la electrodinámica cuántica,

^f En un medio anisótropo debemos escribir

$$\mathcal{P}_{ik}(\zeta_s, \mathbf{k}) = (\zeta_s^2/\hbar c^2) [\epsilon_{ik}(i|\zeta_s|) - \delta_{ik}].$$

En esta forma, la expresión sigue siendo válida cuando existe dispersión espacial y ϵ_{ik} depende tanto del vector de onda como de la frecuencia.

este 4-tensor es independiente de la transformación «gauge» de los potenciales. En la teoría no relativista es evidente la invariancia de esta transformación a partir de la posibilidad que acabamos de mencionar de calcular el operador de polarización con las fuerzas no retardadas únicamente, que son independientes de la transformación del campo de onda larga.

Pueden hallarse los componentes \mathcal{P}_{00} y \mathcal{P}_{0i} a partir de la condición para que sea transverso el 4-tensor: $\mathcal{P}_{\mu\nu}k^\mu = 0$, en donde $k^\mu = (i\zeta_s, \mathbf{k})$ es el 4-vector de onda:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{P}_{00} &= -(\mathbf{k}^2/\hbar c^2)[\epsilon(i|\zeta_s|) - 1], \\ \mathcal{P}_{0i} &= (i\zeta_s k_i/\hbar c^2)[\epsilon(i|\zeta_s|) - 1]. \end{aligned} \right\} \quad (79.18)$$

§ 80. Tensor de tensiones de van der Waals

Aunque la estructura de los cuerpos condensados está determinada esencialmente (como se señaló al final de § 79) por las fuerzas que actúan entre sus partículas a distancias atómicas, una definida contribución a las magnitudes termodinámicas del cuerpo (a su energía libre, por ejemplo) procede también de las *fuerzas de van der Waals* que actúan entre los átomos a distancias que son grandes en comparación con las distancias atómicas a . En el caso de átomos libres, la energía de esta interacción disminuye con las distancias crecientes según la ley r^{-6} (ver MC § 89) y según r^{-7} cuando tienen importancia los efectos retardadores (ver TCF, § 83). Naturalmente, en un medio condensado las fuerzas de van der Waals no se reducen a una interacción entre pares separados de átomos. Sin embargo, como su margen de acción es grande en comparación con las distancias interatómicas podemos utilizar un enfoque macroscópico al problema de su influencia sobre las propiedades termodinámicas del cuerpo.

En la teoría macroscópica, la interacción de van der Waals en un medio material se considera transportada mediante un campo electromagnético de longitud de onda larga (E. M. Lifshitz 1954); este concepto incluye no sólo las fluctuaciones térmicas sino también las oscilaciones del punto cero del campo. Una propiedad importante de la contribución de esta interacción a la energía libre es que no es aditiva; no es simplemente proporcional al volumen de los cuerpos sino que depende también de parámetros que caracterizan su forma y configuración. Esta falta de aditividad, que resulta del largo alcance de las fuerzas de van der Waals, es la propiedad que distingue su contribución a la energía libre de la parte aditiva que es mucho mayor. En la descripción macroscópica esta propiedad surge a partir de hecho de que cualquier cambio en las propiedades eléctricas del medio en alguna región produce un cambio, de acuerdo con las ecuaciones de Maxwell, en el campo fluctuante incluso en el exterior de dicha región. Como es natural, en la práctica, los efectos de no aditividad son apreciables únicamente cuando las dimensiones características son suficientemente pequeñas (aunque todavía grandes en compara-

ción con las dimensiones atómicas) por ejemplo, en películas delgadas o en cuerpos separados por un espacio vacío estrecho.

En el cálculo de la contribución de las fluctuaciones electromagnéticas a la energía libre, las longitudes de onda de importancia en cada caso son del orden de las dimensiones características de la inhomogeneidad del medio (espesor de la película, anchura del intervalo vacío, etc.). En la teoría macroscópica es esta la razón para la disminución de las fuerzas de van der Waals según una ley potencial; si fuesen importantes las fluctuaciones con cierta longitud de onda λ_0 fija, esto daría una disminución exponencial, con exponente $\sim r/\lambda_0$. Como las dimensiones características y, por tanto, las longitudes de onda características de las fluctuaciones, son mucho mayores que las dimensiones atómicas, pueden expresarse enteramente todas las propiedades de estas fluctuaciones y su contribución a la energía libre en función de la permitividad compleja de los cuerpos.

Nuestro objetivo será el cálculo de las fuerzas macroscópicas que actúan en un medio inhomogéneo.[†] Como primera etapa del cálculo, determinaremos el cambio en la energía libre debido a una pequeña variación de su permitividad; se despreciarán las propiedades magnéticas del material (la permeabilidad $\mu = 1$). Se supondrá que la variación de ϵ se debe a una pequeña variación $\delta\hat{H}$ en el hamiltoniano del sistema. De aquí que el cambio o variación de la energía libre sea

$$\delta F = \langle \delta\hat{H} \rangle, \quad (80.1)$$

en donde se toma el valor medio (a temperatura y volumen del sistema dados) respecto a la distribución de Gibbs con el hamiltoniano sin perturbar \hat{H} . Sustituiremos este último en la forma[‡]

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{lw}, \quad \hat{V}_{lw} = - \int \mathbf{j} \cdot \hat{\mathbf{A}} d^3x, \quad (80.2)$$

en donde \hat{V}_{lw} describe la interacción de las partículas con el campo electromagnético de onda larga y se incluye en \hat{H}_0 todas las demás interacciones junto con los términos correspondientes a las partículas libres y a los fotones. Estrictamente hablando, debería considerarse la integral en (80.2) cortada a un número de ondas $k_0 \ll 1/a$, pero el parámetro de corte no aparece en el resultado final. El operador $\hat{\mathbf{A}}$ es el operador del potencial vector del campo de onda larga; es importante que el operador $\delta\hat{H}$ responsable de la variación de la permitividad no contenga a $\hat{\mathbf{A}}$, puesto que la permitividad está determinada únicamente por la interacción de las partículas a distancias atómicas.

Pasemos ahora en (80.1) a los operadores de Matsubara en lo que podemos llamar la representación de onda larga de la interacción: en esta representación

[†] La teoría que damos a continuación se debe a I. E. Dzyaloshinskii y L. P. Pitaevskii (1959).

[‡] En esta sección hacemos $\hbar = 1$, $c = 1$.

la dependencia entre los operadores y τ está determinada por todos los términos del hamiltoniano exento \hat{V}_{lw} . Por el mismo método que utilizamos al deducir (38.7) se tiene

$$\left. \begin{aligned} \delta F &= \frac{1}{\langle \hat{\sigma} \rangle_0} \langle T_\tau \delta \hat{H}^M \hat{\sigma} \rangle_0, \\ \hat{\sigma} &= T_\tau \exp \int_0^{1/T} \int \mathbf{j}^M \cdot \hat{\mathbf{A}}^M d^3x d\tau, \end{aligned} \right\} \quad (80.3)$$

en donde $\langle \dots \rangle_0$ indica el promediar respecto a la distribución de Gibbs con el hamiltoniano \hat{H}_0 . De acuerdo con el significado de la representación escogida, se definen los operadores de Matsubara como

$$\hat{\mathbf{A}}^M(\tau, \mathbf{r}) = \exp(\tau \hat{H}_0) \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \exp(-\tau \hat{H}_0), \quad (80.4)$$

y análogamente para $\delta \hat{H}^M$ y para los operadores ψ a partir de los que se construye el operador de la corriente de partículas $\hat{\mathbf{j}}^M$.[†] Como \hat{H}_0 no contiene la interacción de los fotones de longitud de onda larga con ninguna otra cosa, $\hat{\mathbf{A}}^M$ es el mismo que el operador (de Matsubara) del campo de fotones libres; en el caso de los operadores ψ de las partículas esto no es así, como es natural, puesto que \hat{H}_0 incluye la interacción entre partículas.

Siguiendo los principios generales de construcción de la técnica diagramática, desarrollemos el exponencial de (80.3) en potencias de \hat{V}_{lw} .[†] En cada término del desarrollo se promedia el producto de los operadores de campo libre $\hat{\mathbf{A}}^M$ del modo usual como contracciones de pares, utilizando el teorema de Wicks. El término de orden cero del desarrollo que no contiene $\hat{\mathbf{A}}^M$, da δF_0 , que es la variación de la energía libre sin tener en cuenta las fluctuaciones de onda larga. El término siguiente, lineal en $\hat{\mathbf{A}}^M$, da cero al promediar. En el término cuadrático respecto al campo, la contracción de dos operadores $\langle \hat{A}_i^M \hat{A}_k^M \rangle$ da $\mathcal{D}_{ik}^{(0)}$, la función de Green del fotón libre; este término puede representarse por el diagrama

$$\delta F^{(2)} = \frac{1}{2} \cdot \text{Diagrama} \quad (80.5)$$

con el factor numérico $1/2!$, que aparece en el desarrollo del exponencial, indicado separadamente. La línea a trazos delgada indica la función $\mathcal{D}^{(0)}$ y el círculo sombreado el resultado del promedio de los demás factores. No daremos ahora la forma explícita de esta última magnitud; el único punto de importancia es que vale exactamente

[†] Para simplificar la notación se omite el subíndice 0 que debería ir unido a los operadores en esta representación.

[†] Es suficiente mostrar el desarrollo del numerador en la expresión correspondiente a δF . Como es normal, el papel del factor $\langle \hat{\sigma} \rangle_0$ en el denominador consiste en excluir precisamente los diagramas que se separan en dos o más partes desconectadas.

tamente $\delta\mathcal{P}_{ik}/4\pi$ siendo $\delta\mathcal{P}_{ik}$ la variación del operador de polarización cuando el hamiltoniano del sistema varía en $\delta\hat{H}$. Esto se ve fácilmente considerando análogamente la variación de la función \mathcal{D} . En la misma representación de los operadores esta función es

$$\mathcal{D}_{ik}(\tau_1, \mathbf{r}_1; \tau_2, \mathbf{r}_2) = -\frac{1}{\langle \hat{\sigma} \rangle_0} \langle T_\tau \hat{A}_i^M(\tau_1, \mathbf{r}_1) \hat{A}_k^M(\tau_2, \mathbf{r}_2) \hat{\sigma} \rangle_0,$$

en donde ahora

$$\hat{\sigma} = T_\tau \exp \int_0^{1/T} (-\hat{V}_{lw}^M - \delta\hat{H}^M) d\tau;$$

la «interacción» incluye a $\delta\hat{H}$ lo mismo que a \hat{V}_{lw} . La variación requerida $\delta\mathcal{D}_{ik}$ viene dada por el término lineal del desarrollo de esta expresión en potencias de $\delta\hat{H}^M$,

$$\delta\mathcal{D}_{ik} = \frac{1}{\langle \hat{\sigma} \rangle_0} \left\langle T_\tau \int \delta\hat{H} d\tau \cdot \hat{A}_i^M(\tau_1, \mathbf{r}_1) \hat{A}_k^M(\tau_2, \mathbf{r}_2) \exp \int \hat{\mathbf{j}}^M \cdot \hat{\mathbf{A}}^M d^3x d\tau \right\rangle_0. \quad (80.6)$$

En el desarrollo del exponencial restante en potencias de \hat{V}_{lw} ha de omitirse el término de orden cero, como corresponde a un diagrama separado (la contracción $\langle \hat{A}_i^M \hat{A}_k^M \rangle$ se separa de los demás factores, que no contienen las variables \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2). El término de primer orden contiene un número impar de operadores A y da cero al promediar. Finalmente, el término de segundo orden da en $\delta\mathcal{D}_{ik}$ una expresión representada por el diagrama

$$\delta\mathcal{D}_{ik}^{(2)} = \text{---} \bullet \text{---} \quad (80.7)$$

con el mismo círculo que en (80.5); ahora no aparece el factor $\frac{1}{2}$ porque existen dos modos de contraer los operadores «internos» A procedentes de los operadores \hat{V}_{lw} con los «externos» \hat{A}_i^M y \hat{A}_k^M . Por otra parte, a partir de la definición del operador de polarización, la función de Green en la aproximación considerada viene dada por la suma

$$\mathcal{D}_{ik} = \text{---} + \text{---} \circ \text{---},$$

en donde el círculo blanco representa el operador de polarización $\mathcal{P}_{ik}/4\pi$. La variación de esta función da, por tanto, el diagrama (80.7) con $\delta\mathcal{P}_{ik}/4\pi$ como círculo sombreado.

Todos los términos siguientes del desarrollo de (80.3) son correcciones de diversos órdenes a la línea a trazos y al círculo del diagrama (80.5). Estas correcciones

convierten la línea a trazos en la función exacta \mathcal{D}_{ik} . Las correcciones de onda larga de $\delta\mathcal{P}_{ik}$ son pequeñas, como ya hemos analizado, de modo que podemos tomar inmediatamente a $\delta\mathcal{P}_{ik}$ como si fuese la variación exacta del operador de polarización.

En forma analítica este resultado se escribe (después de pasar al desarrollo de Fourier respecto a la variable τ)[†] en la forma

$$\delta F = \delta F_0 - \frac{1}{2} \sum_{s=-\infty}^{\infty} T \int \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{1}{4\pi} \delta\mathcal{P}_{ki}(\zeta_s; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) d^3x_1 d^3x_2. \quad (80.8)$$

De acuerdo con (79.17) se expresa la variación del operador de polarización (en un medio isótropo) en función de la variación de la permitividad:

$$\delta\mathcal{P}_{ki}(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \zeta_s^2 \delta_{ki} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta\varepsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}_1);$$

la función delta elimina aquí una de las integraciones de (80.8). Teniendo también en cuenta el hecho de que \mathcal{D}_{ik} es una función par de ζ_s , podemos volver a escribir (80.8) como

$$\delta F = \delta F_0 - \frac{T}{4\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \int \zeta_s^2 \mathcal{D}_{ll}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \delta\varepsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}) d^3x, \quad (80.9)$$

en donde la suma se toma únicamente respecto a los valores positivos de s ; el signo prima indica que el término con $s = 0$ tiene un factor extra $\frac{1}{2}$. Este término es finito puesto que el factor ζ_s^2 anula la divergencia de \mathcal{D}_{ll} para $\zeta_s = 0$.

Para escribir otras fórmulas adicionales, será conveniente introducir otras dos funciones más

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{D}_{ik}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -\zeta_s^2 \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}'), \\ \mathcal{D}_{ik}^H(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \text{rot}_{il} \text{rot}'_{km} \mathcal{D}_{lm}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}'), \end{aligned} \right\} \quad (80.10)$$

construidas de modo análogo a (76.3) y (76.4). Entonces puede escribirse δF

$$\delta F = \delta F_0 + \frac{T}{4\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \int \mathcal{D}_{ll}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \delta\varepsilon(i|\zeta_s|, \mathbf{r}) d^3x. \quad (80.11)$$

Utilicemos a continuación (80.11) para determinar las fuerzas que actúan en un medio inhomogéneo. Ya se ha supuesto la isotropía del medio; supondremos

[†] No daremos la regla general para determinar el signo de los diagramas del tipo (80.5) (sin líneas externas libres). En el caso actual, se encuentra fácilmente el signo escribiendo explícitamente los términos correspondientes de los desarrollos en (80.3) y (80.6). Realmente basta señalar que este término en (80.3) contiene una contracción de un par de operadores A y en (80.6) dos pares; puesto que la contracción de un par de $-\mathcal{D}_{ik}$, los diagramas (80.5) y (80.7) tienen signos opuestos y esto conduce al signo menos de (80.8).

ahora que es un líquido, de modo que el cambio de estado en cada punto (a una temperatura dada) sólo puede deberse a una variación de la densidad ϱ .

Imaginemos que se somete al medio a una deformación isoterma pequeña con desplazamiento $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. La correspondiente variación de su energía libre es

$$\delta F = - \int \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \, d^3x, \quad (80.12)$$

en donde \mathbf{f} es la densidad de volumen de las fuerzas que actúan sobre el medio. Por otra parte, puede determinarse la misma variación a partir de (80.11) expresando las variaciones δF_0 y $\delta \varepsilon$ en función del mismo vector de desplazamiento. Sea $P_0(\varrho, T)$ la presión sin tener en cuenta las correcciones de van der Waals para unos valores dados de ϱ y T ; la correspondiente densidad de volumen de las fuerzas es $\mathbf{f}_0 = -\nabla P_0$, de modo que

$$\delta F_0 = \int \mathbf{u} \cdot \nabla P_0 \, d^3x.$$

A continuación, se relaciona el cambio de densidad con el vector de desplazamiento mediante la ecuación de continuidad $\delta \varrho = -\operatorname{div}(\varrho \mathbf{u})$. Por tanto, la variación de la permitividad resulta ser

$$\delta \varepsilon = (\partial \varepsilon / \partial \varrho) \delta \varrho = -(\partial \varepsilon / \partial \varrho) \operatorname{div}(\varrho \mathbf{u}).$$

Sustituyendo esta expresión en (80.11), integrando por partes respecto al volumen total del cuerpo y comparando luego la expresión resultante para δF con (80.12) se encuentra

$$\mathbf{f} = -\nabla P_0 - \frac{T}{4\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \varrho \operatorname{grad} \left[\mathcal{D}_H^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \frac{\partial \varepsilon}{\partial \varrho} \right]. \quad (80.13)$$

Esta fórmula nos permite en particular determinar de una vez la corrección al potencial químico del cuerpo. Para ello, escribamos la condición del equilibrio mecánico $\mathbf{f} = 0$ y hagamos uso del hecho de que a temperatura constante

$$dP_0(\varrho, T) = (\varrho/m) d\mu_0(\varrho, T),$$

en donde $\mu_0(\varrho, T)$ es el potencial químico sin perturbar del cuerpo (siendo m la masa de una partícula). Entonces la condición se reduce a $\varrho \nabla \mu = 0$, en donde

$$\mu = \mu_0(\varrho, T) + \frac{mT}{4\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \mathcal{D}_H^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \frac{\partial \varepsilon}{\partial \varrho}. \quad (80.14)$$

Por otro lado, la condición para el equilibrio mecánico de cualquier cuerpo inhomogéneo es que el potencial químico debe ser constante en todo el cuerpo; por consiguiente, resulta claro que (80.14) da este potencial.

La descripción más completa de las fuerzas que actúan en un medio viene dada por el tensor de tensiones σ_{ik} , que está relacionado con los componentes del vector \mathbf{f} por

$$f_i = \partial\sigma_{ik}/\partial x_k. \quad (80.15)$$

Para expresar (80.13) de este modo, escribámosla de nuevo en la forma

$$\begin{aligned} f_i &= -\frac{\partial P_0}{\partial x_i} + \frac{T}{4\pi} \sum' \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\epsilon(\mathbf{r}) - \varrho \frac{\partial \epsilon}{\partial \varrho} \right) \mathcal{D}_{ll}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \right\} \\ &\quad - \frac{T}{4\pi} \sum' \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{D}_{ll}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}); \end{aligned}$$

por brevedad, no se han escrito los argumentos ζ_s en las fórmulas intermedias. Los dos primeros términos tienen ya la forma requerida. El tercer término puede escribirse en la forma

$$-\frac{T}{4\pi} \sum' \left\{ \epsilon(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial x_i} + \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x'_i} \right\} \mathcal{D}_{ll}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}'),$$

separando las derivaciones respecto a los dos argumentos de la función $\mathcal{D}_{ll}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ y poniendo $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ al final del cálculo. Para este cálculo se hace uso de las ecuaciones [ver (79.8)]

$$\begin{aligned} \hat{A}_{il} \mathcal{D}_{lk}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -4\pi \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ \hat{A}'_{il} \mathcal{D}_{kl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -4\pi \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \end{aligned}$$

en donde

$$\hat{A}_{il} = \zeta_s^2 \epsilon(\mathbf{r}) \delta_{il} + \text{rot}_{im} \text{rot}_{ml} = \zeta_s^2 \epsilon(\mathbf{r}) \delta_{il} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta$$

La ecuación resultante es (con $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$)

$$\epsilon \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{D}_{ll}^E = 2 \frac{\partial}{\partial x_k} [\epsilon \mathcal{D}_{ik}^E + \mathcal{D}_{ik}^H] - \frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{D}_{ll}^H$$

y la expresión final para el tensor de tensiones es

$$\begin{aligned} \sigma_{ik} = -P_0 \delta_{ik} - \frac{T}{2\pi} \sum_{s=0}^{\infty} \left\{ -\frac{1}{2} \delta_{ik} \left[\epsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) - \varrho \frac{\partial \epsilon(i\zeta_s, \mathbf{r})}{\partial \varrho} \right] \times \right. \\ \times \mathcal{D}_{ik}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) + \epsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) \mathcal{D}_{ik}^E(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \\ \left. - \frac{1}{2} \delta_{ik} \mathcal{D}_{ik}^H(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) + \mathcal{D}_{ik}^H(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \right\}. \end{aligned} \quad (80.16)$$

Sin embargo, las fórmulas obtenidas no tienen todavía un significado físico directo. La razón es que la función $\mathcal{D}_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ tiende a infinito como $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ cuando $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$, como se ve fácilmente mediante la ecuación (79.8). Esta divergencia surge de la contribución de los números de onda grandes ($k \sim 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$) y se debe únicamente a la falta de validez de la ecuación (79.8) para $k \gtrsim a$. Puede evitarse esta dificultad no haciendo ningún corte explícito a k grande. Observemos que las fluctuaciones de longitud de onda corta no tienen ninguna conexión con los efectos que estamos considerando, que se deben a la inhomogeneidad del medio. Su contribución a las magnitudes termodinámicas en cualquier punto dado en el cuerpo es la misma para un medio homogéneo que para otro que sea inhomogéneo pero que tenga el mismo valor de $\epsilon(\mathbf{r})$ en ese punto. Para dar a las fórmulas un significado definido que sea de hecho independiente de la naturaleza del corte, debemos por tanto restar apropiadamente. La función de Green $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r})$ ha de tomarse como el límite de la diferencia

$$\lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \{ \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') - \bar{\mathcal{D}}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') \}, \quad (80.17)$$

en donde $\bar{\mathcal{D}}_{ik}$ es la función de Green de un medio infinito homogéneo auxiliar cuya permitividad sea la misma que la del medio real en el punto \mathbf{r} dado; este límite no es divergente. Para evitar ulteriores complicaciones de las fórmulas las dejaremos en la forma anterior y consideraremos que \mathcal{D}_{ik} designa la diferencia (80.17). Aquí $P_0(\varrho, T)$ es la presión en un medio homogéneo infinito para valores dados de ϱ y T .

Tanto en la fórmula (80.16) como en la ecuación (79.8) que determina la función de Green \mathcal{D}_{ik} , las propiedades del medio aparecen sólo a través de $\epsilon(i\zeta)$, la permitividad en forma de función de la frecuencia imaginaria. En este contexto puede recordarse que la función tiene una relación simple con la parte imaginaria de la permitividad para frecuencias reales:

$$\epsilon(i\zeta) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega \operatorname{im} \epsilon(\omega)}{\omega^2 + \zeta^2} d\omega \quad (80.18)$$

(ver *EMC*, § 62). Por consiguiente, podemos decir que la única característica macroscópica que determina las fuerzas de van der Waals en un medio material es finalmente la parte imaginaria de la permitividad.

La fórmula (80.16) tiene exactamente la misma forma que la expresión conocida en electrodinámica macroscópica para el tensor de tensiones de Maxwell en un campo electromagnético constante, sustituyendo las combinaciones cuadráticas de los componentes de \mathbf{E} y \mathbf{H} por las funciones correspondientes $-\mathcal{D}_{ik}^E$ y $-\mathcal{D}_{ik}^H$. Sin embargo, esta analogía no es muy profunda: no significa que en el caso de un campo electromagnético variable como éste exista una expresión general para el tensor de tensiones en un medio absorbente, que contenga solamente la permitividad como una característica del medio. En el caso presente no tenemos ningún campo electromagnético arbitrario sino el campo fluctuante intrínseco de equilibrio termodinámico en el medio.

§ 81. Fuerzas de la interacción molecular entre cuerpos sólidos. Fórmula general

Aplicemos las fórmulas generales deducidas en § 80 para calcular las fuerzas de interacción entre sólidos cuyas superficies están muy próximas entre sí, a una distancia que sólo debe satisfacer la condición de que sea grande en comparación con las distancias interatómicas en los cuerpos. Esto nos permite considerar el problema macroscópicamente, considerando los cuerpos como medios continuos y cuya interacción es debida al campo electromagnético fluctuante. Las fluctuaciones importantes son aquellas cuyas longitudes de onda son del orden de las dimensiones características del problema, a saber la anchura del espacio vacío entre ambos cuerpos.[†]

Los subíndices 1 y 2 indicarán las magnitudes que pertenecen a los dos cuerpos y 3 designará a las relativas al espacio vacío entre ellos (fig. 17). Este espacio se

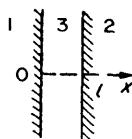


FIG. 17.

supondrá que es plano-paralelo, con el eje x perpendicular a su plano, de modo que las superficies de los cuerpos 1 y 2 son los planos $x = 0$ y $x = l$, siendo l la anchura del espacio vacío. La fuerza F que actúa sobre el área unidad de la super-

[†] Los resultados de esta sección se deben a E. M. Lifshitz (1954) igual que los de § 82.

ficie del cuerpo 2, por ejemplo, se calcula como el flujo del impulso que entra en el cuerpo a través de esta superficie. El flujo viene dado por los componentes σ_{xx} del tensor de tensiones electromagnético en el espacio vacío, tomado en $x = l$. En el vacío $\epsilon = 1$ y la expresión correspondiente a σ_{xx} tomada de (80.16) se convierte en‡

$$F = \sigma_{xx}(l) = \frac{T}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \{ \mathcal{D}_{yy}^E(\zeta_n; l, l) + \mathcal{D}_{zz}^E(\zeta_n; l, l) - \mathcal{D}_{xx}^E(\zeta_n; l, l) \\ + \mathcal{D}_{yy}^H(\zeta_n; l, l) + \mathcal{D}_{zz}^H(\zeta_n; l, l) - \mathcal{D}_{xx}^H(\zeta_n; l, l) \}; \quad (81.1)$$

en esta sección el subíndice de sumación se designará por n .

Como el problema es homogéneo en las direcciones y y z , las funciones $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dependen únicamente de las diferencias $y - y'$ y $z - z'$ [los argumentos $y - y'$ y $z - z'$ no se han escrito en (81.1)]; $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_n, \mathbf{q}; x, x')$ son los componentes de Fourier respecto a estas variables. Entonces

$$\mathcal{D}_{ik}(\zeta_n; \mathbf{r}, \mathbf{r}) = \int \mathcal{D}_{ik}(\zeta_n, \mathbf{q}; x, x') d^2q/(2\pi)^2. \quad (81.2)$$

En el caso de las funciones $\mathcal{D}_{ik}(\zeta_n, \mathbf{q}; x, x')$, las ecuaciones (79.8) se convierten en (con el eje y paralelo al vector \mathbf{q})

$$\left(w^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \mathcal{D}_{zz}(x, x') = -4\pi\delta(x - x'), \\ \left(w^2 - q^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \mathcal{D}_{yy}(x, x') + iq \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{xy}(x, x') = -4\pi\delta(x - x'), \\ w^2 \mathcal{D}_{xy}(x, x') + iq d\mathcal{D}_{yy}(x, x')/dx = 0, \\ w^2 \mathcal{D}_{xx}(x, x') + iq d\mathcal{D}_{yx}(x, x')/dx = -4\pi\delta(x - x'),$$

en donde $w = (\epsilon\zeta_n^2 + q^2)^{1/2}$, $\epsilon = \epsilon(i\zeta_n)$ y x' actúa como parámetro; los componentes $\mathcal{D}_{xz} = \mathcal{D}_{yz} = 0$, puesto que se demuestra que las ecuaciones para ellos son homogéneas. La solución de este sistema se reduce al de las dos ecuaciones

$$\left(w^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \mathcal{D}_{zz}(x, x') = -4\pi\delta(x - x'), \quad (81.3)$$

$$\left(w^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) \mathcal{D}_{yy}(x, x') = -\frac{4\pi w^2}{\epsilon\zeta_n^2} \delta(x - x'), \quad (81.4)$$

‡ En los cálculos intermedios hacemos $\hbar = 1$, $c = 1$.

y \mathcal{D}_{xy} y \mathcal{D}_{xx} se determinan entonces como

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{D}_{xy}(x, x') &= -\frac{iq}{w^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yy}(x, x'), \\ \mathcal{D}_{xx}(x, x') &= -\frac{iq}{w^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yx}(x, x') - \frac{4\pi}{w^2} \delta(x - x'). \end{aligned} \right\} \quad (81.5)$$

Aquí debemos tener en cuenta que, a partir de (79.5),

$$\mathcal{D}_{yx}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{D}_{xy}(\mathbf{r}', \mathbf{r}), \text{ y por consiguiente } \mathcal{D}_{yx}(\mathbf{q}; x, x') = \mathcal{D}_{xy}(-\mathbf{q}; x', x).$$

Las condiciones de contorno que corresponden a la continuidad de los componentes tangenciales de los campos eléctricos y magnéticos, tienen en cuenta las continuidades de las magnitudes \mathcal{D}_{yk}^E , \mathcal{D}_{zk}^E , \mathcal{D}_{yk}^H , \mathcal{D}_{zk}^H o, lo que es equivalente, de las magnitudes

$$\mathcal{D}_{yk}, \quad \mathcal{D}_{zk}, \quad \operatorname{rot}_{yl} \mathcal{D}_{lk}, \quad \operatorname{rot}_{zl} \mathcal{D}_{lk}.$$

Utilizando la primera ecuación (81.5), vemos que las magnitudes siguientes deben ser continuas en el contorno:

$$\mathcal{D}_{zz}, \quad \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{zz}, \quad \mathcal{D}_{yy}, \quad \frac{\varepsilon}{w^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yy}. \quad (81.6)$$

Como deseamos calcular el tensor de tensiones únicamente en la región del intervalo vacío, podemos tomar inmediatamente $0 < x' < l$. En el margen $0 < x < l$ las funciones \mathcal{D}_{yy} y \mathcal{D}_{zz} están determinadas por las ecuaciones (81.3), (81.4) con $\varepsilon = 1$, $w = w_3 = (\zeta_n^2 + q^2)^{1/2}$. En las regiones 1 ($x < 0$) y 2 ($x > l$) satisfacen las mismas ecuaciones con cero en el segundo miembro (puesto que ahora $x \neq x'$) y sustituyendo ε , w por ε_1 , w_1 y ε_2 , w_2 , respectivamente.

La sustracción necesaria de acuerdo con (80.17) consiste en restar a todas las funciones \mathcal{D}_{ik} en la región del espacio vacío sus valores para $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$. Por tanto, en particular podemos omitir inmediatamente el segundo término del segundo miembro de la segunda ecuación (81.5), de modo que en dicha región

$$\mathcal{D}_{xy} = -\frac{iq}{w_3^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yy}, \quad \mathcal{D}_{xx} = -\frac{iq}{w_3^2} \frac{d}{dx} \mathcal{D}_{yx}. \quad (81.7)$$

Antes de resolver estas ecuaciones, debemos hacer un ulterior comentario: la solución general de las ecuaciones (81.3) y (81.4) es $f^-(x - x') + f^+(x + x')$. Utilizando estas ecuaciones junto con (81.7) y la definición de las funciones \mathcal{D}_{ki}^E

y \mathcal{D}_{ik}^H podemos demostrar que las partes de las funciones de Green que dependen de $x + x'$ no contribuyen a la expresión (81.1) para la fuerza. No insistiremos más en este punto ahora, puesto que ya resulta evidente a partir de consideraciones físicas: poniendo $x = x'$ en una solución de la forma $f^+(x + x')$, obtendríamos un flujo del impulso en el espacio vacío que variaría con las coordenadas, lo cual está en contradicción con la ley de conservación del impulso. Por tanto, de ahora en adelante únicamente incluiremos las expresiones correspondientes a las partes \mathcal{D}_{ik}^- de las funciones de Green que no dependan de $x + x'$.

Determinemos ahora la función \mathcal{D}_{zz} . Satisface las ecuaciones

$$\left. \begin{aligned} (w_1^2 - d^2/dx^2) \mathcal{D}_{zz}(x, x') &= 0, & x < 0, \\ (w_2^2 - d^2/dx^2) \mathcal{D}_{zz}(x, x') &= 0, & x > l, \\ (w_3^2 - d^2/dx^2) \mathcal{D}_{zz}(x, x') &= -4\pi\delta(x - x'), & 0 < x < l. \end{aligned} \right\} \quad (81.8)$$

De aquí que encontramos

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{zz} &= Ae^{w_1 x}, & x < 0; & \mathcal{D}_{zz} = Be^{-w_2 x}, & x > l; \\ \mathcal{D}_{zz} &= C_1 e^{w_3 x} + C_2 e^{-w_3 x} - (2\pi/w_3) e^{-w_3 |x-x'|}, & 0 < x < l. \end{aligned}$$

En la última expresión hemos utilizado el hecho de que, de acuerdo con la tercera ecuación (81.8), la derivada $d\mathcal{D}_{zz}/dx$ tiene una discontinuidad de 4π en $x = x'$. Determinando A , B , C_1 y C_2 (que son funciones de x') mediante las condiciones de contorno de que sean continuas \mathcal{D}_{zz} y $d\mathcal{D}_{zz}/dx$, obtenemos

$$\mathcal{D}_{zz}^- = \frac{4\pi}{w_3 \Delta} \cosh w_3(x - x') - \frac{2\pi}{w_3} e^{-w_3 |x - x'|}, \quad 0 < x < l,$$

en donde

$$\Delta = 1 - e^{2w_3 l} \frac{(w_1 + w_3)(w_2 + w_3)}{(w_1 - w_3)(w_2 - w_3)}.$$

Restando el valor de \mathcal{D}_{zz}^- para $w_1 = w_2 = w_3$ (y $1/\Delta = 0$), tenemos finalmente

$$\mathcal{D}_{zz}^- = \frac{4\pi}{w_3 \Delta} \cosh w_3(x - x').$$

Análogamente, resolviendo la ecuación para \mathcal{D}_{yy} , obtenemos (después de la resta)

$$\mathcal{D}_{yy}^- = \frac{4\pi w_3}{\xi_n^2 \Delta_1} \cosh w_3(x - x'),$$

$$\Delta_1 = 1 - e^{2w_3 l} \frac{(\varepsilon_1 w_3 + w_1)(\varepsilon_2 w_3 + w_2)}{(\varepsilon_1 w_3 - w_1)(\varepsilon_2 w_3 - w_2)}$$

y, utilizando (81.7),

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{xy}^- &= \mathcal{D}_{yx}^- = -(4\pi iq/\zeta_n^2 \Delta_1) \operatorname{senh} w_3(x-x'), \\ \mathcal{D}_{xx}^- &= -(4\pi q^2/\zeta_n^2 w_3 \Delta_1) \cosh w_3(x-x').\end{aligned}$$

A continuación, calculando las funciones \mathcal{D}_{ik}^E y \mathcal{D}_{ik}^H y transformándolas luego de acuerdo con (81.2) y sustituyendo en (81.1), se tiene

$$F(l) = -\frac{T}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} w_3 \left(\frac{1}{\Delta} + \frac{1}{\Delta_1} \right) q dq.$$

Finalmente, pasando a una nueva variable de integración p con $q = \zeta_n \sqrt{p^2 - 1}$ y volviendo a las unidades ordinarias, tenemos como expresión para la fuerza F ejercida sobre el área unidad de cada uno de los cuerpos separados por un espacio vacío de anchura l

$$\begin{aligned}F(l) &= \frac{T}{\pi c^3} \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n^3 \int_1^{\infty} p^2 \left\{ \left[\frac{(s_1+p)(s_2+p)}{(s_1-p)(s_2-p)} \exp \left(\frac{2p\zeta_n l}{c} \right) - 1 \right]^{-1} \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{(s_1+p\varepsilon_1)(s_2+p\varepsilon_2)}{(s_1-p\varepsilon_1)(s_2-p\varepsilon_2)} \exp \left(\frac{2p\zeta_n l}{c} \right) - 1 \right]^{-1} \right\} dp, \quad (81.9)\end{aligned}$$

en donde $s_1 = \sqrt{\varepsilon_1 - 1 + p^2}$, $s^2 = \sqrt{\varepsilon_2 - 1 + p^2}$, $\zeta_n = 2\pi n T / \hbar$, siendo ε_1 y ε_2 funciones de la frecuencia imaginaria $\omega = i\zeta_n$; debe recordarse en este contexto que $\epsilon(i\zeta)$ es una magnitud real y positiva que disminuye monótonamente a partir de su valor electrostático ε_0 para $\zeta = 0$ hasta 1 para $\zeta = \infty$.[†] Los valores positivos de F corresponden a la atracción entre los cuerpos. El integrando de cada término de la suma (81.9) es positivo y para unos p y ζ_n dados cualesquiera disminuye monótonamente cuando l aumenta.[‡] De aquí que $F > 0$ y $dF/dl < 0$, es decir los cuerpos (separados por un espacio vacío) se atraen entre sí con una fuerza que disminuye monótonamente al aumentar la distancia.

La fórmula general (81.9) es muy complicada. Sin embargo, puede simplificarse considerablemente considerando que la influencia de la temperatura sobre la fuerza de interacción suele carecer de importancia.[§] La razón consiste en que debido a los

[†] Se ha deducido la fórmula (81.9) bajo la hipótesis de que ambos cuerpos son isótropos. Por consiguiente, su aplicación a los cristales depende de que despreciamos la anisotropía de su permitividad. Aunque esto resulta legítimo en la mayoría de los casos, la anisotropía de los cuerpos produce en general un efecto específico, a saber, un par que tiende a hacer girar los cuerpos, uno respecto al otro.

[‡] Esto puede verse fácilmente observando que para $s = \sqrt{\varepsilon - 1 + p^2}$ (y $p \geq 1$) tenemos las desigualdades $\varepsilon p > s > p$ cuando $\varepsilon > 1$.

[§] Al hablar de la influencia de la temperatura no nos estamos refiriendo a la debida simplemente a la dependencia con la temperatura de la propia permitividad.

exponentiales de los integrandos en (81.9), únicamente son importantes en la suma aquellos términos que tienen $\zeta_n \sim c/l$ o $n \sim ch/lT$. En el caso en que $lT/ch \ll 1$, los valores de n que tienen importancia son, por tanto grandes y en (81.9) podemos pasar de la suma a la integración respecto a $dn = \hbar d\zeta / 2\pi T$. Entonces desaparece la temperatura de la fórmula y el resultado es

$$F(l) = \frac{\hbar}{2\pi^2 c^3} \int_0^\infty \int_1^\infty p^2 \zeta^3 \left\{ \left[\frac{(s_1+p)(s_2+p)}{(s_1-p)(s_2-p)} \exp\left(\frac{2p\zeta l}{c}\right) - 1 \right]^{-1} + \left[\frac{(s_1+p\varepsilon_1)(s_2+p\varepsilon_2)}{(s_1-p\varepsilon_1)(s_2-p\varepsilon_2)} \exp\left(\frac{2p\zeta l}{c}\right) - 1 \right]^{-1} \right\} dp d\zeta. \quad (81.10)$$

De acuerdo con el análisis anterior, esto es válido para distancias $l \ll ch/T$ e incluso a temperaturas ordinarias, las distancias que nos afectan valen alrededor de 10^{-4} cm.

La fórmula (81.10) puede simplificarse considerablemente en dos casos límites.

§ 82. Fuerzas de integración molecular entre cuerpos sólidos. Casos límites

Consideremos primero el caso límite de distancias «pequeñas», entendiéndose que las distancias son pequeñas en comparación con las longitudes de onda características λ_0 del espectro de absorción de los cuerpos que nos ocupan. Las temperaturas que pueden estar cuestionadas en el caso de cuerpos condensados son siempre pequeñas en comparación con los valores de $\hbar\omega_0$ de importancia aquí (por ejemplo, en el espectro visible) y, por tanto, siempre se satisface la desigualdad $lT/ch \ll 1$.

Debido al factor exponencial del denominador del integrando, el intervalo que tiene importancia en la integración respecto a p es aquél en el que $p\zeta l/c \sim 1$. Aquí $p \gg 1$ y, por consiguiente, podemos poner $s_1 \approx s_2 \approx p$ al determinar el término principal de la integral. En esta aproximación, el primer término entre corchetes de (81.10) es cero. El segundo término, con una nueva variable de integración $x = 2p\zeta l/c$, da

$$F(l) = \frac{\hbar}{16\pi^2 l^3} \int_0^\infty \int_0^\infty x^2 \left[\frac{(\varepsilon_1+1)(\varepsilon_2+1)}{(\varepsilon_1-1)(\varepsilon_2-1)} e^x - 1 \right]^{-1} dx d\zeta; \quad (82.1)$$

en esta aproximación se sustituye el límite inferior de la integración respecto a x por cero.[†]

En este caso la fuerza es inversamente proporcional al cubo de la distancia de acuerdo con el comportamiento usual de las fuerzas de van der Waals entre dos átomos; ver la nota siguiente. Las funciones $\varepsilon(i\zeta) - 1$ disminuyen monótonamente cuando ζ aumenta y tiende a cero. De aquí que los valores de ζ más allá de un cierto ζ_0 dejen de contribuir de modo significativo a la integral; la condición para que l sea pequeño significa que debemos tener $l \ll c/\zeta_0$.

Veremos ahora cómo puede realizarse el paso desde la fórmula macroscópica (82.1) a la interacción de los átomos individuales en el vacío. Para ello, supongamos formalmente que ambos cuerpos son suficientemente poco densos. Macroscópicamente esto significa que sus permitividades son casi la unidad, es decir, que $\varepsilon_1 - 1$ y $\varepsilon_2 - 1$ son pequeños. A partir de (82.1) tenemos con la exactitud necesaria

$$\begin{aligned} F &= \frac{\hbar}{64\pi^2 l^3} \int_0^\infty \int_0^\infty x^2 e^{-x} (\varepsilon_1 - 1)(\varepsilon_2 - 1) dx d\zeta \\ &= \frac{\hbar}{32\pi^2 l^3} \int_0^\infty [\varepsilon_1(i\zeta) - 1][\varepsilon_2(i\zeta) - 1] d\zeta. \end{aligned}$$

Expresando $\varepsilon(i\zeta)$ en función de $\text{im } \varepsilon(\omega)$ sobre el eje ω real, mediante (80.18), obtenemos

$$\begin{aligned} F &= \frac{\hbar}{8\pi^4 l^3} \int_0^\infty \int \int \frac{\omega_1 \omega_2 \text{im } \varepsilon_1(\omega_1) \text{im } \varepsilon_2(\omega_2)}{(\omega_1^2 + \zeta^2)(\omega_2^2 + \zeta^2)} d\zeta d\omega_1 d\omega_2 \\ &= \frac{\hbar}{16\pi^3 l^3} \int_0^\infty \int \frac{\text{im } \varepsilon_1(\omega_1) \text{im } \varepsilon_2(\omega_2)}{\omega_1 + \omega_2} d\omega_1 d\omega_2. \end{aligned} \quad (82.2)$$

[†] Una integral de la forma

$$\frac{1}{2} a \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{ae^x - 1}$$

varía sólo ligeramente, de 1 a 1,2, cuando a varía desde ∞ hasta 1. Por tanto, podemos escribir (82.1), con suficiente exactitud en la práctica, como

$$F = \frac{\hbar \bar{\omega}}{8\pi^2 l^3}, \quad \bar{\omega} = \int_0^\infty \frac{[\varepsilon_1(i\zeta) - 1][\varepsilon_2(i\zeta) - 1]}{[\varepsilon_1(i\zeta) + 1][\varepsilon_2(i\zeta) + 1]} d\zeta.$$

La magnitud $\bar{\omega}$ actúa como una frecuencia que caracteriza los espectros de absorción de los dos cuerpos.

Esta fuerza corresponde a una interacción de átomos con energía

$$U(r) = -\frac{3\hbar}{8\pi^4 n_1 n_2 r^6} \iint \frac{\text{im } \varepsilon_1(\omega_1) \text{im } \varepsilon_2(\omega_2)}{\omega_1 + \omega_2} d\omega_1 d\omega_2, \quad (82.3)$$

en donde r es la distancia entre los átomos; n_1, n_2 son las densidades numéricas de los átomos en los dos cuerpos.[†] Esta fórmula concuerda con la de London de la mecánica cuántica, que se deduce aplicando la teoría de perturbaciones ordinaria a la interacción dipolar de dos átomos (ver *MC*, § 89, problema). Al hacer la comparación, debe recordarse que la parte imaginaria de $\varepsilon(\omega)$ está relacionada con la densidadpectral de «intensidades del oscilador» $f(\omega)$ por

$$\omega \text{im } \varepsilon(\omega) = (2\pi^2 e^2/m) n f(\omega),$$

en donde e y m son la carga y la masa del electrón; ver *EMC*, § 62. Las intensidades del oscilador se expresan del modo normal en función de los cuadrados de los elementos matriciales de los momentos dipolares de los átomos; ver *MC*, (149.10).

Volvamos ahora al caso opuesto de distancias «grandes», $l \gg \lambda_0$. Sin embargo, supondremos que las distancias no son todavía tan grandes que se viole la desigualdad $lT/\hbar c \ll 1$.

En (81.10) utilicemos de nuevo ahora una nueva variable de integración $x = 2pl\zeta/c$, pero dejemos que sea p y no ζ la segunda variable. Entonces ε_1 y ε_2 son funciones de $i\zeta = ixc/2pl$. Teniendo en cuenta el factor e^x en los denominadores del integrando, los valores de importancia de x en la integral respecto a x son ~ 1 y como $p \geq 1$ el argumento de ε para l grande es casi cero a través de todo el intervalo de valores de interés de las variables. De acuerdo con ello podemos sustituir ε_1 y ε_2 simplemente por sus valores para $\zeta = 0$, es decir, las permitividades electrostáticas ε_{10} y ε_{20} . Así pues, tenemos finalmente

$$F = \left. \frac{\hbar c}{32\pi^2 l^4} \int_0^\infty \int_1^\infty \frac{x^3}{p^2} \left\{ \left[\frac{(s_{10}+p)(s_{20}+p)}{(s_{10}-p)(s_{20}-p)} e^x - 1 \right]^{-1} + \left[\frac{(s_{10}+p\varepsilon_{10})(s_{20}+p\varepsilon_{20})}{(s_{10}-p\varepsilon_{10})(s_{20}-p\varepsilon_{20})} e^x - 1 \right]^{-1} \right\} dp dx, \quad \right\} \quad (82.4)$$

$$s_{10} = \sqrt{\varepsilon_{10} - 1 + p^2}, \quad s_{20} = \sqrt{\varepsilon_{20} - 1 + p^2}.$$

[†] Si la energía potencial de la interacción de los átomos 1 y 2 es $U(r) = -ar^{-6}$, la energía total de las interacciones pares de todos los átomos en dos semiespacios separados por una anchura de espacio vacío l es $U_{\text{total}} = -arn_1 n_2 / 12l^3$. La fuerza es $F = dU_{\text{total}}/dl = arn_1 n_2 / 6l^3$. Esta es la correspondencia entre (82.2) y (82.3).

La ley de disminución con la distancia como l^{-4} corresponde aquí a la disminución de las fuerzas de van der Waals entre dos átomos cuando se tienen en cuenta los retardos (ver más adelante).

La fórmula (82.4) se reduce a una expresión muy simple cuando ambos cuerpos son metálicos. En el caso de los metales, $\epsilon(i\zeta) \rightarrow \infty$ cuando $\zeta \rightarrow 0$ y, por tanto, podemos tomar $\epsilon_0 = \infty$. Poniendo $\epsilon_{10} = \epsilon_{20} = \infty$, obtenemos

$$F = \frac{\hbar c}{16\pi^2 l^4} \int_0^\infty \int_1^\infty \frac{x^3 dp dz}{p^2(e^x - 1)} = \frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{l^4} \quad (82.5)$$

(H. G. B. Casimir 1948). Esta fuerza es independiente de la naturaleza de los metales, propiedad que no es válida a distancias pequeñas, en donde la fuerza de interacción depende del comportamiento de la función $\epsilon(i\zeta)$ para todos los valores de ζ y no sólo para $\zeta = 0$.

La figura 18 muestra un gráfico de la función $\phi_{ii}(\epsilon_0)$ que da la fuerza atractiva entre dos aislantes idénticos ($\epsilon_{10} = \epsilon_{20} \equiv \epsilon_0$); la fórmula (82.4) se escribe como

$$F = \frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{l^4} \left(\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 1} \right)^2 \phi_{ii}(\epsilon_0). \quad (82.6)$$

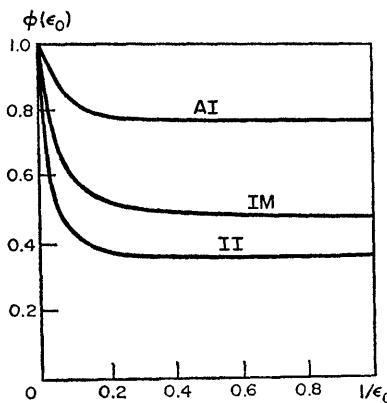


FIG. 18.

El mismo diagrama muestra la función $\phi_{im}(\zeta_0)$, que da la fuerza atractiva en el caso de un aislante y un metal ($\epsilon_{10} = \epsilon_0$, $\epsilon_{20} = \infty$), a partir de la fórmula†

$$F = \frac{\pi^2}{240} \frac{\hbar c}{l^4} \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 1} \phi_{im}(\epsilon_0). \quad (82.7)$$

† Cuando $\epsilon \rightarrow 1$, las funciones ϕ_{ii} y ϕ_{in} tienden a 0,35 y 0,46 respectivamente, que corresponden a las formas límites de (82.8) y (1) en el problema. Cuando $\epsilon \rightarrow \infty$, ambas funciones tienden a la unidad y corresponden a (82.5).

En (82.4) hagamos la transición a la interacción de los átomos individuales, como hicimos antes para la fórmula (82.1). Para $\varepsilon_0 - 1$ pequeño, tenemos

$$s_0 - p \approx (\varepsilon_0 - 1)/2p, \quad s_0 - pe_0 \approx (\varepsilon_0 - 1)(-p + \frac{1}{2}p^{-1}),$$

y la integral (82.4) se reduce a

$$F = \frac{\hbar c}{32\pi^2 l^4} (\varepsilon_{10} - 1)(\varepsilon_{20} - 1) \int_0^\infty x^3 e^{-x} dx \int_1^\infty \frac{1 - 2p^2 + 2p^4}{8p^6} dp,$$

de aquí que

$$F = \frac{\hbar c}{l^4} \frac{23}{640\pi^2} (\varepsilon_{10} - 1)(\varepsilon_{20} - 1). \quad (82.8)$$

Esta fuerza corresponde a la interacción de dos átomos con energía

$$U(r) = -\frac{23\hbar c}{4\pi r^7} \alpha_1 \alpha_2, \quad (82.9)$$

en donde α_1 y α_2 son las polarizabilidades estáticas de los átomos ($\varepsilon_0 = 1 + 4\pi n\alpha$). La fórmula (82.9) concuerda con el resultado que se obtiene en electrodinámica cuántica para la atracción de dos átomos a distancias suficientemente grandes, cuando empiezan a tener importancia los efectos del retardo (ver TCR, § 85).

Finalmente, consideremos distancias tan grandes que $lT/\hbar c \gg 1$, que es la desigualdad opuesta a la requerida para que sea despreciable el efecto de la temperatura. En este caso únicamente es necesario retener el primer término de la suma (81.9), pero no podemos hacer inmediatamente $n = 0$ en este término puesto que existe una indeterminación: el factor ζ_n^3 es cero, pero la integral respecto a p diverge. Puede evitarse esta dificultad utilizando al principio en lugar de p una nueva variable de integración $x = 2p\zeta_n l/c$ (de modo que desaparece el factor ζ_n^3). Poniendo entonces $\zeta_n = 0$, se obtiene

$$F = \frac{T}{16\pi l^3} \int_0^\infty x^2 \left[\frac{(\varepsilon_{10} + 1)(\varepsilon_{20} + 1)}{(\varepsilon_{10} - 1)(\varepsilon_{20} - 1)} e^x - 1 \right]^{-1} dx. \quad (82.10)$$

Así pues, a distancias suficientemente grandes la disminución de la fuerza atractiva resulta más lenta y vuelve a ser del tipo de la ley l^{-3} , pero con un coeficiente que depende de la temperatura; todos los términos siguientes de la suma en (81.9) disminuyen exponencialmente al aumentar l . La condición $lT/\hbar c \gg 1$ es esencial-

mente la condición de comportamiento clásico ($\hbar\omega \ll T$, en donde $\omega \sim l/c$). Por consiguiente, resulta natural que en la expresión (82.10) no aparezca \hbar .†

PROBLEMA

Hallar la ley de interacción de un átomo con una pared metálica a distancias «grandes».

SOLUCIÓN. La interacción de un átomo aislado con un cuerpo condensado puede hallarse considerando únicamente uno de los cuerpos (denominado 2, por ejemplo) como un medio de muy baja densidad. Considerando a $\epsilon_{20} - 1$ como pequeño y poniendo $\epsilon_{10} = \infty$, obtenemos a partir de (82.4)

$$F = \frac{\hbar c(\epsilon_{20} - 1)}{32\pi^2 l^4} \int_0^\infty x^3 e^{-x} dx \int_1^\infty \frac{dp}{2p^2} = \frac{3\hbar c(\epsilon_{20} - 1)}{32\pi^2 l^4}. \quad (1)$$

Si la energía de interacción átomo-pared es $U = -aL^{-4}$ (siendo L la distancia que separa el átomo de la pared), la energía de interacción de los átomos en un semiespacio separado de la pared por un intervalo vacío l es $U_{\text{tot}} = -an/3l^3$ y la fuerza $F = dU_{\text{tot}}/dl = an/l^4$. Así pues, el valor hallado para F corresponde a la atracción de un átomo aislado hacia la pared con la energía

$$U(L) = -3\alpha_2 \hbar c / 8\pi L^4 \quad (2)$$

(H. B. G. Casimir y D. Polder 1948).

En el caso de la interacción de un átomo con una pared aislante, el mismo método da

$$U(L) = -\frac{3\hbar c \alpha_2}{8\pi L^4} \frac{\epsilon_{10} - 1}{\epsilon_{10} + 1} \phi_{at}(\epsilon_{10})$$

con la función ϕ_{at} que se muestra gráficamente en la figura 18. Cuando $\epsilon_{10} \rightarrow 1$ esta función tiende al valor $23/30 = 0,77$, correspondiente a (82.8).

§ 83. Comportamiento asintótico de la función de correlación en un líquido

Las fluctuaciones electromagnéticas de longitud de onda larga conducen también a ciertas propiedades específicas de la función de correlación de las fluctuaciones de densidad en un líquido homogéneo.

Se determina la función de correlación $v(r)$ (ver Parte 1, § 116) en función del valor medio del producto de las fluctuaciones de la densidad numérica de partículas n en dos puntos del espacio por

$$\langle \delta n(\mathbf{r}_1) \delta n(\mathbf{r}_2) \rangle = \bar{n}\delta(\mathbf{r}) + \bar{n}v(r), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (83.1)$$

† Pueden generalizarse las fórmulas obtenidas en §§ 81 y 82 para incluir el caso en el que el intervalo vacío entre los sólidos está lleno con un líquido y el caso de una película líquida delgada sobre una superficie sólida; ver I. E. Dzyaloshinskii, E. M. Lifshitz y L. P. Pitaevskii, *Soviet Physics Uspekhi* 4, 153, 1961 (= *Advances in Physics* 10, 165, 1961).

La función de correlación $v(r)$ está relacionada con la interacción entre partículas y su comportamiento asintótico a distancias grandes está determinado por la parte de van der Waals de largo alcance de esta interacción. De aquí que $v(r)$, como las fuerzas de van der Waals, disminuya proporcionalmente a una potencia inversa de la distancia (J. E. Enderby, T. Gaskell y N. H. March 1965).

Naturalmente esto influye también sobre las propiedades de los componentes de Fourier de la función de correlación $v(k) \equiv v(k)$. Si las únicas fuerzas que actúan entre las partículas del líquido tuvieran un alcance del orden de las dimensiones atómicas a , $v(r)$ disminuiría exponencialmente al aumentar la distancia, siendo el exponente $\sim r/a$ [†]. En función de los componentes de Fourier esto significa que $v(k)$ sería una función regular de ka y podría desarrollarse en potencias pares de ka cuando $ka \ll 1$. Sin embargo, las fuerzas de largo alcance originan la presencia en $v(k)$ de un término $v_1(k)$ que varía considerablemente incluso en el intervalo $k \sim 1/\lambda_0$ (no $k \sim 1/a$), en donde $\lambda_0 (\gg a)$ indica la longitud de onda característica del espectro del líquido. En el intervalo $ka \ll 1$, el parámetro $k\lambda_0$ puede ser pequeño o grande; la función $v_1(k)$ tiene una singularidad en este intervalo.

Para calcular la función de correlación, utilicemos su relación con la segunda derivada variacional de la energía libre del cuerpo respecto a su densidad. Por definición, esta derivada es la función $\phi(r)$ que aparece en la expresión

$$\delta F = \frac{1}{2} \int \phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \delta n(\mathbf{r}_1) \delta n(\mathbf{r}_2) d^3x_1 d^3x_2 \quad (83.2)$$

para la variación de la energía libre debida a las fluctuaciones de densidad (a una temperatura dada). El componente de Fourier $\phi(k) \equiv \phi(k)$ de esta función está relacionado con la función $v(k)$ buscada por

$$v(k) = \frac{T}{\bar{n}\phi(k)} - 1; \quad (83.3)$$

ver Parte 1, (116.14). Debemos resaltar que esta fórmula admite que las fluctuaciones son clásicas para lo cual es necesario que $\hbar\omega \ll T$, siendo ω la frecuencia de las oscilaciones con número de onda k . Con $\omega \sim ku$ (en donde u es la velocidad de sonido en el líquido) se llega a la condición

$$\hbar ku \ll T, \quad (83.4)$$

correspondiente a distancias $r \gg \hbar u/T$.

[†] El líquido que estamos considerando está a una temperatura $T \sim \Theta$, en donde $\Theta \sim \hbar u/a$ es la «temperatura de Debye» del líquido, y lejos del punto crítico. Cerca de este último el radio de correlación aumenta indefinidamente (ver Parte 1, §§ 152, 153). También aumenta a temperaturas bajas y para $T \ll \Theta$ es del orden de $\hbar u/T$ (ver § 87, más adelante).

La parte «regular» de la función $\phi(k)$, debida a las fuerzas de corto alcance, puede desarrollarse en potencias de k ; tomando (cuando $ka \ll 1$) únicamente el primer término del desarrollo y designándolo con b , podemos escribir

$$\phi(k) \approx b + \phi_1(k), \quad (83.5)$$

en donde $\phi_1(k)$ es la parte «singular» que tiene ahora interés.† Como las fuerzas de van der Waals son relativamente débiles, $\phi_1(k) \ll b$ y por ello el resultado de sustituir (83.5) en (83.3) puede ponerse en la forma

$$v(k) = \frac{T}{\bar{n}b} - 1 - \frac{T}{\bar{n}b^2} \phi_1(k). \quad (83.6)$$

Como $v(k)$ y $\phi_1(k)$ están relacionadas linealmente, la función $v(r)$ a distancias grandes es simplemente

$$v(r) = -(T/\bar{n}b^2) \phi_1(r). \quad (83.7)$$

El primer término (independiente de k) de (83.6) corresponde a una función de las coordenadas constante $\times \delta(\mathbf{r})$ debido a las fuerzas de corto alcance (si se considera despreciable su rango de acción).

Para determinar $\phi_1(r)$, partiremos de la fórmula (80.11) para la variación de la energía libre. Haciendo en ella

$$\delta\varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) = \frac{\partial\varepsilon(i\zeta_s)}{\partial\bar{n}} \delta n(\mathbf{r}), \quad (83.8)$$

vemos que la expresión

$$-\frac{T}{4\pi\hbar c^2} \sum_{s=0}^{\infty} \zeta_s^2 \mathcal{D}_{ll}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \frac{\partial\varepsilon(i\zeta_s)}{\partial\bar{n}}$$

es la primera derivada variacional de la energía libre respecto a la densidad. Para la segunda derivación debemos a su vez variar esta expresión, obteniéndose‡

$$-\frac{T}{4\pi\hbar c^2} \sum_{s=0}^{\infty} \zeta_s^2 \delta \mathcal{D}_{ll}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}) \frac{\partial\varepsilon(i\zeta_s)}{\partial\bar{n}}. \quad (83.9)$$

† Se expresa la constante b en función de las magnitudes termodinámicas correspondientes al líquido mediante $b = (1/\bar{n})(\delta P/\delta\bar{n})_T$; ver Parte 1, § 152.

‡ Únicamente se varía la función \mathcal{D}_{ll} . La variación de ε conduciría a un término de la forma constante $\times \delta(\mathbf{r})$ en $\phi(\mathbf{r})$, que no se relaciona con las fuerzas de largo alcance.

La propia función \mathcal{D} satisface la ecuación (79.8):

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta + \frac{\zeta_s^2}{c^2} \varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) \delta_{il} \right] \mathcal{D}_{lk}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\hbar \delta_{ik} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (83.10)$$

y su variación da la ecuación para la variación de \mathcal{D} :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_l} - \delta_{il} \Delta + \frac{\zeta_s^2}{c^2} \varepsilon(i\zeta_s) \delta_{il} \right] \delta \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\zeta_s^2}{c^2} \delta \varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}) \mathcal{D}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (83.11)$$

Puede escribirse la solución de (83.11) observando que, según (83.10), la función «sin perturbar» \mathcal{D}_{ik} es la función de Green de esta ecuación; de aquí que

$$\delta \mathcal{D}_{ik}(\zeta_s; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\zeta_s^2}{4\pi\hbar c^2} \int \delta \varepsilon(i\zeta_s, \mathbf{r}'') \mathcal{D}_{lk}(\zeta_s; \mathbf{r}'', \mathbf{r}') \mathcal{D}_{li}(\zeta_s; \mathbf{r}'', \mathbf{r}) d^3x'';$$

aquí hemos utilizado también el hecho de que $D_{ii}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') = D_{ii}(\mathbf{r}'', \mathbf{r})$. Finalmente, sustituyendo (83.8) y el resultado de (83.9), obtenemos la segunda derivada variacional

$$\phi_1(\mathbf{r}) = -\frac{T}{(4\pi\hbar c^2)^2} \sum_{s=0}^{\infty} \zeta_s^4 \left[\frac{\partial \varepsilon(i\zeta_s)}{\partial \bar{n}} \right]^2 \mathcal{D}_{lm}^2(\zeta_s; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (83.12)$$

con $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Esta fórmula, junto con (83.7), da la expresión general buscada para la función de correlación $v(r)$ cuando $r \gg \hbar u/T$ (M. P. Kemoklidze y L. P. Pi-taevskiĭ 1970).

La condición (83.4) ya admitida previamente para los números de onda es equivalente a $r \gg \hbar u/T$ para las distancias. Si, simultáneamente con esta condición, restringimos el margen de valores de r mediante un límite superior también:

$$\hbar c/T \gg r \gg \hbar u/T, \quad (83.13)$$

entonces tienen importancia en la suma valores grandes de s y puede reemplazarse la suma respecto a «frecuencias» discretas $\zeta_s = 2\pi Ts/\hbar$ por la integración respecto a $ds = \hbar d\zeta/2\pi T$:

$$v(r) = \frac{T}{\bar{n} b^2 \hbar c^4} \int_0^{\infty} \left[\frac{1}{4\pi} \frac{\partial \varepsilon(i\zeta)}{\partial \bar{n}} \right]^2 \zeta^4 \mathcal{D}_{lm}^2(\zeta; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{d\zeta}{2\pi}. \quad (83.14)$$

Se obtiene la función \mathcal{D}_{lm} a partir de (77.6) con la sustitución $\omega \rightarrow i\zeta$. Llevando a cabo la derivación y elevando al cuadrado, tenemos

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{D}_{lm}^2 &= \frac{2\hbar^2}{r^2} e^{-2w} \left(1 + \frac{2}{w} + \frac{5}{w^2} + \frac{6}{w^3} + \frac{3}{w^4} \right), \\ w &= r\zeta \sqrt{\epsilon(i\zeta)}/c. \end{aligned} \right\} \quad (83.15)$$

La sustitución de (83.15) en (83.14) da una expresión bastante complicada, pero resulta más sencilla en dos casos límites.

En el caso de distancias «pequeñas» ($r \ll \lambda_0$; cf. § 81) el intervalo de importancia en la integral es $\zeta \sim c/\lambda_0$; entonces $r\zeta/c \ll 1$, de modo que podemos sustituir el factor exponencial de (83.15) por la unidad y conservar únicamente el último término del paréntesis. Se tiene entonces

$$v(r) = \frac{A}{r^6}, \quad A = \frac{3\hbar T}{16\pi^3 \bar{n} b^2} \int_0^\infty \left[\frac{\partial \epsilon(i\zeta)}{\partial \bar{n}} \right]^2 \frac{d\zeta}{\epsilon^2(i\zeta)}, \quad r \ll \lambda_0. \quad (83.16)$$

La transformada de Fourier de esta función es †

$$v(k) = \pi^2 A k^3 / 12, \quad k\lambda_0 \gg 1. \quad (83.17)$$

En el caso opuesto de distancias «grandes» ($r \gg \lambda_0$) el intervalo de importancia en la integral es $\zeta \sim c/r \ll c/\lambda_0 \sim \omega_0$. Por consiguiente, podemos sustituir $\epsilon(i\zeta)$ por su valor electrostático ϵ_0 y sacar $(\partial \epsilon_0 / \partial n)^2$ fuera del signo integral en (83.14). La integración es entonces elemental (y todos los términos de (83.15) realizan contribuciones del mismo orden de magnitud). El resultado es

$$v(r) = B/r^7, \quad B = \frac{23\hbar c T}{64\pi^3 \epsilon_0^{3/2} \bar{n} b^2} \left(\frac{\partial \epsilon_0}{\partial \bar{n}} \right)^2, \quad r \gg \lambda_0. \quad (83.18)$$

La transformada de Fourier de esta función es

$$v(k) = -(\pi/30) B k^4 \log k\lambda_0, \quad k\lambda_0 \ll 1. \quad (83.19)$$

† Mediante la integración directa en coordenadas esféricas polares en el espacio k , obtenemos

$$I_\nu \equiv \lim_{\lambda \rightarrow +0} \int e^{ik \cdot r - \lambda k} k^\nu \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = - \frac{\Gamma(\nu+2) \sin \frac{1}{2}\pi\nu}{2\pi^2 r^{\nu+3}}.$$

La integral que se necesita para verificar (83.17) es I_3 . La integral necesaria para comprobar (83.19) es $dI_\nu/d\nu$ con $\nu = 4$.

§ 84. Expresión del operador para la permitividad

En esta sección deduciremos una expresión útil para la permitividad de un medio en función del conmutador del operador densidad de carga (P. Nozières y D. Piñes 1958). Esta fórmula es análoga a la de Kubo, teniendo en cuenta la naturaleza específica del campo electromagnético.

Consideraremos un medio homogéneo que posea una dispersión de la permitividad, tanto espacial como temporal. Esto significa que la inducción $\mathbf{D}(t, \mathbf{r})$ depende de los valores del campo $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$, no sólo en los instantes anteriores, sino también de los demás puntos del espacio. Dicha dependencia puede representarse con toda generalidad como

$$D_i(t, \mathbf{r}) = E_i(t, \mathbf{r}) + \int_0^\infty \int f_{ik}(\tau, \mathbf{r}') E_k(t-\tau, \mathbf{r}-\mathbf{r}') d^3x' d\tau. \quad (84.1)$$

En el caso de un campo monocromático en el que \mathbf{E} y $\mathbf{D} \propto \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$, esta relación se reduce a

$$D_i = \varepsilon_{ik}(\omega, \mathbf{k}) E_k, \quad (84.2)$$

en donde

$$\varepsilon_{ik}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ik} + \int_0^\infty \int f_{ik}(\tau, \mathbf{r}') e^{i(\omega\tau - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}')} d^3x' d\tau. \quad (84.3)$$

Consideraremos únicamente el caso en el que el medio es no sólo homogéneo sino también isótropo y sin ninguna actividad óptica natural. Entonces la permitividad sigue siendo un tensor, pero que sólo contiene el vector \mathbf{k} . La forma general de dicho tensor es

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon_l(\omega, \mathbf{k}) \frac{k_i k_k}{k^2} + \varepsilon_t(\omega, \mathbf{k}) \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right). \quad (84.4)$$

Las funciones escalares ε_l y ε_t se denominan respectivamente *permittividad longitudinal* y *permittividad transversal*. Si \mathbf{E} es un campo potencial, $\mathbf{E} = -\nabla \phi$, entonces en el caso de una onda plana es paralelo al vector de onda ($\mathbf{E} = -i\mathbf{k}\phi$) y entonces $\mathbf{D} = \varepsilon_l \mathbf{E}$. Si el campo es solenoideal ($\operatorname{div} \mathbf{E} = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0$), \mathbf{E} es perpendicular al vector de onda y entonces $\mathbf{D} = \varepsilon_t \mathbf{E}$.

Con esta descripción de las propiedades del medio, carece de significado (cf. EMC, § 83) el dividir la densidad de corriente microscópica media $\bar{\rho}\mathbf{v}$ (siendo ρ la densidad de carga) en dos partes $\partial\mathbf{P}/\partial t$ y $c \operatorname{rot} \mathbf{M}$, siendo \mathbf{P} la polarización eléctrica y \mathbf{M} la imanación del medio. Las ecuaciones de Maxwell son

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t},$$

sin la introducción del vector \mathbf{H} del mismo modo que la inducción magnética \mathbf{B} que es el campo magnético microscópico medio. Todos los términos que se obtienen como resultado de promediar las corrientes microscópicas se suponen que han sido incluidos en la definición $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$, $\bar{\rho}\mathbf{v} = \partial\mathbf{P}/\partial t$.

La permitividad longitudinal es importante en las aplicaciones y deduciremos una expresión para el operador correspondiente. Este puede hallarse considerando la respuesta del sistema a un campo eléctrico potencial externo $\mathbf{E}_{ex} = -\nabla\phi_{ex}$ (es decir generado por fuentes externas al sistema).

El operador de la interacción del sistema con este campo es

$$\hat{V} = \int \hat{\rho}(t, \mathbf{r}) \phi_{ex}(t, \mathbf{r}) d^3x, \quad (84.5)$$

en donde $\hat{\rho}(t, \mathbf{r})$ es el operador de densidad de carga del sistema. Comparando esta expresión con la fórmula general (75.8) y considerando a ϕ_{ex} como una «fuerza generalizada» f , se encuentra inmediatamente a partir de las fórmulas (75.9)-(75.11) que los componentes de Fourier respecto al tiempo de la densidad de carga media son

$$\bar{\rho}_\omega(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \int e^{i\omega t} \langle \hat{\rho}(t, \mathbf{r}) \hat{\rho}(0, \mathbf{r}') - \hat{\rho}(0, \mathbf{r}') \hat{\rho}(t, \mathbf{r}) \rangle \phi_\omega^{\text{ex}}(\mathbf{r}') d^3x' dt.$$

Pasando también a los componentes espaciales de Fourier y utilizando el hecho de que, puesto que el sistema es homogéneo, el valor medio del conmutador depende únicamente de $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, obtenemos

$$\bar{\rho}_{\omega\mathbf{k}} = \alpha(\omega, \mathbf{k}) \phi_{\omega\mathbf{k}}^{\text{ex}}, \quad (84.6)$$

en donde

$$\alpha(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty \int e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle \hat{\rho}(t, \mathbf{r}) \hat{\rho}(0, 0) - \hat{\rho}(0, 0) \hat{\rho}(t, \mathbf{r}) \rangle d^3x dt. \quad (84.7)$$

La densidad de carga media está relacionada con el vector de polarización del medio por $\bar{\rho} = -\text{div } \mathbf{P}$ (ver *EMC*, § 6). De aquí que, para los componentes de Fourier,

$$\bar{\rho}_{\omega\mathbf{k}} = -i\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\omega\mathbf{k}} = -i(\epsilon_l - 1) \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_{\omega\mathbf{k}} / 4\pi.$$

Por otra parte, $\Delta\phi_{ex} = -4\pi\varrho_{ex}$, en donde ϱ_{ex} es la densidad de las cargas que crean el campo externo; la inducción \mathbf{D} está relacionada con esta densidad de carga por $\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi\varrho_{ex}$. A partir de estas dos ecuaciones hallamos

$$\phi_{\omega\mathbf{k}}^{\text{ex}} = (4\pi/k^2) \varrho_{\omega\mathbf{k}}^{\text{ex}} = (ie_I/k^2) \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_{\omega\mathbf{k}}.$$

Finalmente, sustituyendo estas expresiones en (84.6) obtenemos la expresión buscada para la permitividad longitudinal:

$$\frac{1}{\varepsilon_I(\omega, \mathbf{k})} = 1 + \frac{4\pi}{k^2} \alpha(\omega, \mathbf{k}). \quad (84.8)$$

En (84.7) estrictamente hablando debería tomarse $\hat{\varrho}(t, \mathbf{r})$ como el operador de densidad de carga de todas las partículas del sistema, tanto electrones como núcleos. Sin embargo, normalmente los electrones son los que realizan la contribución principal a la permitividad a través del importante intervalo de valores de ω y \mathbf{k} ; por consiguiente, podemos tomar a $\hat{\varrho}$ como $e(\hat{n} - \bar{n})$, en donde \hat{n} es el operador densidad de electrones y \bar{n} su valor medio.

Las fórmulas (84.7) y (84.8) pueden transformarse adicionalmente expresándolas en función de los elementos de matriz de los componentes de Fourier del operador ϱ . Para ello, primero volvemos a escribir (84.7) como

$$\alpha(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{i}{\hbar V} \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle \hat{\varrho}_{\mathbf{k}}(t) \hat{\varrho}_{-\mathbf{k}}(0) - \hat{\varrho}_{-\mathbf{k}}(0) \hat{\varrho}_{\mathbf{k}}(t) \rangle dt, \quad (84.9)$$

en donde V es el volumen del sistema. Los elementos de matriz del operador de Heisenberg $\hat{\varrho}_{\mathbf{k}}(t)$ se expresan en función de los del operador de Schrödinger mediante

$$(\varrho_{\mathbf{k}}(t))_{mn} = e^{i\omega_{mn}t} (\varrho_{\mathbf{k}})_{mn}.$$

Desarrollando el producto de operadores mediante la regla de multiplicación de matrices e integrando de acuerdo con (31.21), tenemos finalmente

$$\frac{1}{\varepsilon_I(\omega, \mathbf{k})} = 1 + \frac{4}{\hbar k^2 V} \sum_n |(\varrho_{\mathbf{k}})_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i0} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i0} \right\}, \quad (84.10)$$

en donde el subíndice 0 se refiere al estado determinado para el que se busca la permitividad.

§ 85. Un plasma degenerado

Consideraremos un plasma totalmente ionizado en el que los iones forman un

gas clásico (Boltzmann) y el componente electrónico es degenerado. Para ello la temperatura debe satisfacer las condiciones $\mu_i \ll T \lesssim \mu_e$, es decir

$$\hbar^2 n^{2/3} / m_i \ll T \lesssim \hbar^2 n^{2/3} / m_e, \quad (85.1)$$

en donde μ_e y μ_i son los potenciales químicos de los electrones y de los iones del plasma, m_e y m_i las masas del electrón y del ion y n la densidad numérica de partículas; al obtener valores estimados no haremos distinciones entre n_e y n_i . También supondremos que el plasma es casi ideal. Para que esto sea así, la energía de la interacción de Coulomb entre dos partículas cuya distancia es $l \sim n^{-1/3}$ debe ser pequeña en comparación con su energía cinética media ε . En el caso de los iones $\varepsilon \sim T$ y en el caso de los electrones $\varepsilon \sim \mu_e \sim n^{2/3} \hbar^2 / m_e$. De aquí que tengamos las condiciones

$$m_e e^2 / \hbar^2 \ll n^{1/3} \ll T/e^2. \quad (85.2)$$

Se ha demostrado en la Parte 1, § 80, que con estas condiciones la fuente principal de correcciones de las magnitudes termodinámicas del plasma (en comparación con sus valores como si fuese un gas ideal) es la interacción de intercambio de los electrones; la energía de esta interacción (por unidad de volumen del plasma) es $\sim e^2 / n^{4/3}$. La corrección de la correlación (la principal en un plasma clásico) es pequeña en un plasma degenerado, en la relación $\eta^{1/2}$ respecto a la corrección del intercambio, en donde $\eta = m_e e^2 / \hbar^2 n^{1/3} \ll 1$. Sin embargo, su cálculo para un plasma degenerado es de interés metodológico y proporciona una ilustración instructiva del empleo de la técnica diagramática.

El operador de interacción de Coulomb de las partículas del plasma es

$$\hat{V} = \frac{1}{2} e^2 \sum_{a, b} \int \hat{\Psi}_{ax}^+ \hat{\Psi}_{bx}^+ \frac{z_a z_b}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\Psi}_{bx}^- \hat{\Psi}_{ax}^- d^3 x d^3 x', \quad (85.3)$$

en donde los subíndices a y b indican las diferentes clases de partículas (electrones y diversos iones); $z_a e$ es la carga de una partícula (en los electrones, $z_e = -1$). Tomando los operadores ψ en la representación de Matsubara, obtenemos el operador de interacción de esta representación. Se emplea entonces la técnica diagramática para calcular el valor medio $\langle \hat{V} \rangle$ (respecto a la distribución de Gibbs) de la manera usual pasando a la representación de la interacción para los operadores de Matsubara; la serie resultante de la teoría de perturbaciones es un desarrollo de $\langle \hat{V} \rangle$ en potencias de e^2 .

La expresión (85.3) no contiene variables «libres» (es decir variables respecto a las cuales no haya integración). En la técnica diagramática esto se expresa por el hecho de que los términos de la serie de la teoría de perturbaciones correspondiente

a $\langle \hat{V} \rangle$ están representados por diagramas que no poseen líneas externas libres. Las líneas a trazos de estos diagramas, con 4-impulsos $Q = (\zeta_s, \mathbf{q})$, estarán asociadas arbitrariamente con factores†

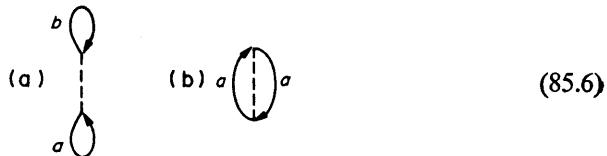
$$-\phi(\mathbf{q}) = -4\pi/q^2 \quad (85.4)$$

(que son independientes de ζ), es decir, los componentes de Fourier del potencial $\phi(\mathbf{r})$ del campo de una carga unidad con signo menos. Las líneas continuas deben marcarse ahora, junto con el 4-impulso $P = (\zeta_s, \mathbf{p})$, con un subíndice adicional a que indique el tipo de partícula y cada una de estas líneas se asocia con un factor $-G_{aa\beta}^{(0)}(P)$, que es la función de Green de las partículas libres a con signo negativo. Las líneas continuas del diagrama forman lazos cerrados, conteniendo cada uno de ellos secciones con el mismo a . Cada vértice del diagrama (punto de intersección de la línea a trazos con las líneas continuas del tipo a) se asocia con el factor adicional $z_a e$. Cada bucle de fermión contribuye con un factor extra de -1 . Los diagramas construidos con arreglo a estas reglas dan términos del desarrollo de

$$-(2/V)\langle \hat{V} \rangle. \quad (85.5)$$

El factor V del denominador es el volumen del sistema. Este factor surge debido a que el integrando de cada término de la serie depende únicamente de las diferencias de las coordenadas y , por tanto, una de las integraciones respecto a d^3x da simplemente el volumen V . El signo menos de (85.5) es el resultado de la determinación de las líneas a trazos mediante la regla (85.4), es decir, con el signo menos delante de $\phi(\mathbf{q})$. El factor 2 es consecuencia de tomar el factor $\frac{1}{2}$ en el primer miembro de (85.3).

En la teoría de perturbaciones de primer orden estos diagramas son de dos clases:

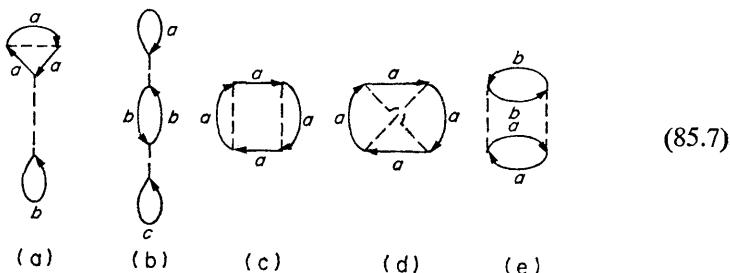


con todos los posibles a y b . Los de la forma (85.6a) proceden de contracciones de operadores ψ tomadas en el mismo punto del espacio. Estos diagramas corresponden a la interacción de Coulomb directa de las partículas a y b distribuidas uniformemente en el espacio; sus contribuciones se anulan por compensación al sumar respecto a todos los pares a, b porque el plasma es eléctricamente neutro. Aparecen los diagramas de la forma (85.6b) a partir de las contracciones de los operadores

† En el resto de esta sección pondremos $\hbar = 1$, $c = 1$ y $e (> 0)$ designará la carga unidad.

ψ con argumentos diferentes y corresponden a la interacción de intercambio de las partículas de un solo tipo a . El cálculo de este diagrama conduce al resultado ya obtenido en la Parte 1, § 80.

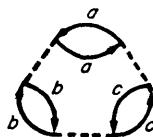
En el orden siguiente, aparecen diagramas de las siguientes clases:



Los diagramas (85.7a, b) son correcciones a (85.6a) y por la misma razón se anulan al sumar respecto a todo a, b, c . Los diagramas (85.7c, d) son pequeñas correcciones a la energía de interacción de intercambio y, por ello, carecen de interés ahora.

El diagrama (85.7e) es «grande de modo anómalo» debido a que la integral correspondiente diverge. Esta divergencia se produce debido a que son iguales los impulsos \mathbf{q} de las dos líneas a trazos del diagrama (como es evidente a partir de la conservación del impulso en los vértices). De aquí que el diagrama contenga la integral $\int d^3q/q^4$, que diverge como $1/q$ cuando \mathbf{q} es pequeño.

En las aproximaciones siguientes aparecerán (lo mismo que en los diagramas de corrección) nuevos diagramas «anillos» con una divergencia incluso aún más intensa. Por ejemplo, el diagrama de tercer orden



con tres líneas a trazos que poseen el mismo impulso \mathbf{q} contiene la integral $\int q^{-6}d^3q$ que diverge como q^{-3} . En general, el diagrama en anillo de orden n , formado por n lazos continuos unidos por n líneas a trazos, diverge como $q^{-(2n-3)}$.

La suma de la secuencia infinita de diagramas anillo conduce, como veremos, a un corte efectivo de las divergencias a valores de q del orden de magnitud de e ; de aquí que todos estos diagramas juntos dan una contribución a $\langle \hat{V} \rangle$ que es del

orden de magnitud de $(e^2)^n/e^{2n-3} = e^3$. Se representa gráficamente esta contribución mediante la suma (sobre los diversos tipos de partículas) de los diagramas esqueleto

$$\Sigma_{a,b} \quad (85.8)$$

en donde la línea de trazos gruesa representa la suma del conjunto infinito de diagramas lineales

$$\Sigma_{a,b,\dots} \quad (85.9)$$

con diversos números de bucles continuos.

Mientras que la línea a trazos delgada representa el potencial ϕ del campo de Coulomb de una carga aislada, la gruesa representa el potencial (que designaremos por Φ) del campo perturbado por la polarización del plasma que le rodea. Por consiguiente, la contribución total da la parte requerida de la correlación de la energía de interacción media del plasma.

Utilicemos la notación $-\frac{\Phi}{4\pi} = \sum_a \text{círculo}_a \equiv \text{círculo}$ para la suma de bucles continuos sencillos de todos los tipos de partículas y designaremos gráficamente esta magnitud mediante un círculo en blanco:

$$-\frac{\Phi}{4\pi} = \sum_a \text{círculo}_a \equiv \text{círculo} \quad (85.10)$$

El argumento ζ_s de esta función toma valores «pares» $\zeta_s = 2s\pi T$, cualquiera que sea la estadística obedecida por las partículas a : según la ley de conservación de las frecuencias en el vértice, este argumento es igual a la diferencia de las frecuencias de las dos líneas continuas, que es «par» tanto para los términos «pares» como para los «impares».

Con la notación (85.10), se representa la suma (85.8) mediante un diagrama esqueleto

$$-\frac{2<\bar{v}>_{\text{cor}}}{v} = \text{círculo} \quad (85.11)$$

La propia línea a trazos gruesa satisface la ecuación diagramática

$$\text{dashed line} = \text{dashed line} + \text{solid line with circle} - \text{dashed line} \quad (85.12)$$

que es exactamente análoga a (14.4) y (79.13). En forma analítica, esta ecuación es

$$-\Phi(\zeta_s, \mathbf{q}) = -\phi(\mathbf{q}) - \phi(\mathbf{q}) \frac{\mathcal{D}(\zeta_s, \mathbf{q})}{4\pi} \Phi(\zeta_s, \mathbf{q}),$$

de aquí que

$$\Phi(\zeta_s, \mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q^2 - \mathcal{D}(\zeta_s, \mathbf{q})}. \quad (85.13)$$

Es interesante considerar estas fórmulas desde un punto de vista ligeramente diferente, con objeto de establecer la conexión con los diagramas de § 79. Puede considerarse la interacción de Coulomb entre cargas como el resultado del intercambio de fotones virtuales. Sin embargo, ahora es más conveniente utilizar no la transformación (75.1) sino la correspondiente a Coulomb (ver TCR, § 77) en la que $-D_{00}$ es el componente de Fourier del potencial de Coulomb. La parte espacial D_{ik} de esta transformación describe el retardo y la interacción magnética que puede despreciarse en un plasma no relativista. Por tanto, podemos suponer que las líneas a trazos en (85.11) corresponden al \mathcal{D}_{00} de Matsubara y que la función \mathcal{P} es precisamente el componente \mathcal{P}_{00} del operador de polarización. De acuerdo con (79.18) podemos escribir, por tanto,

$$\mathcal{D}(\zeta_s, \mathbf{q}) = -q^2[\varepsilon_l(i|\zeta_s|, \mathbf{q}) - 1];$$

es fácil ver que la permitividad longitudinal ε_l aparece en (79.18) cuando existe dispersión espacial. Sustituyendo esta expresión en (85.13), se tiene

$$\Phi(\zeta_s, \mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q^2\varepsilon_l(i|\zeta_s|, \mathbf{q})}, \quad (85.14)$$

es decir el componente de Fourier del potencial de una carga unidad del medio, como debería ser.

Desarrollando el diagrama (85.11) mediante las reglas generales de la técnica de Matsubara, encontramos

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \rangle_{\text{cor}} &= -\frac{1}{2} VT \sum_s \int \frac{\mathcal{D}^2(\zeta_s, \mathbf{q})}{(4\pi)^2} \phi(\mathbf{q}) \Phi(\zeta_s, \mathbf{q}) \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \\ &= -\frac{1}{2} VT \sum_s \int \frac{\mathcal{D}^2(\zeta_s, \mathbf{q})}{q^2[q^2 - \mathcal{D}(\zeta_s, \mathbf{q})]} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (85.15)$$

Veremos posteriormente que el término con $s = 0$ es el más importante de la suma y que la integral correspondiente viene regida por la región de \mathbf{q} pequeño. De aquí

que, al calcular (85.15), sea en la práctica suficiente conocer el valor límite de $\mathcal{P}(0, \mathbf{q})$ cuando $\mathbf{q} \rightarrow 0$. Se determina fácilmente este valor a partir de consideraciones físicas sencillas sin necesidad de ningún cálculo directo de los diagramas (85.10).

Cuando $\zeta_s = 0$, la función $\Phi(0, \mathbf{q})$ es la transformada de Fourier del potencial $\Phi(r)$ del campo electrostático de una carga unidad en el plasma. El potencial $\phi(r)$ sin perturbar satisface la ecuación de Poisson con una función delta en el segundo miembro: $\Delta\phi = -4\pi\delta(\mathbf{r})$. La ecuación correspondiente al potencial Φ perturbado por la polarización del plasma se encuentra añadiendo en el segundo miembro la variación $\delta\varrho$ de la densidad de carga en el plasma causada por el propio campo:

$$\Delta\Phi = -4\pi[\delta(\mathbf{r}) + \delta\varrho]. \quad (85.16)$$

Por otra parte, cuando $\mathbf{q} \rightarrow 0$ tenemos un campo que varía sólo lentamente a través del volumen del plasma. En dicho campo la condición de equilibrio termodinámico se escribe en la forma:

$$\mu_a + ez_a\Phi = \text{constante} = \mu_a^{(0)}, \quad (85.17)$$

en donde μ_a es el potencial químico de las partículas del tipo a y $\mu_a^{(0)}$ su valor en ausencia del campo. A partir de esta condición encontramos para la variación de la densidad de partículas n_a

$$\delta\mu_a = (\partial\mu_a/\partial n_a)_{T,V} \delta n_a = -ez_a\Phi$$

y de aquí para la variación de la densidad de carga

$$\delta\varrho = \sum_a ez_a \delta n_a = - \sum_a (ez_a)^2 (\partial n_a / \partial \mu_a)_{T,V} \Phi.$$

Sustituyendo esta expresión en (85.16), obtenemos la ecuación

$$\Delta\Phi - \kappa^2\Phi = -4\pi\delta(\mathbf{r}), \quad (85.18)$$

con

$$\kappa^2 = 4\pi e^2 \sum_a z_a^2 (\partial n_a / \partial \mu_a)_{T,V}. \quad (85.19)$$

Se ve en (85.18) que $1/\kappa$ es el radio de Debye del apantallamiento del campo en el plasma (cf. Parte 1, § 78). Finalmente, tomando el componente de Fourier de cada miembro de (85.18), se tiene

$$\Phi(\mathbf{q}) = 4\pi/(q^2 + \kappa^2),$$

y comparando esta expresión con (85.13) se tiene

$$[\mathcal{D}(0, \mathbf{q})]_{\mathbf{q} \rightarrow 0} = -\varkappa^2. \quad (85.20)$$

Integrando a continuación con este valor de \mathcal{P} , tenemos

$$\langle \hat{\mathcal{V}} \rangle_{\text{cor}} = -\frac{VT\varkappa^4}{2(2\pi)^3} \int \frac{4\pi q^2 dq}{q^2(q^2 + \varkappa^2)} = -\frac{VT\varkappa^3}{8\pi}. \quad (85.21)$$

En primer lugar, observemos que la integral converge en el límite inferior y que el intervalo de integración más importante es $q \sim \varkappa$. En el caso del componente iónico no degenerado del plasma, $\partial n_i / \partial \mu_i = n_i/T$; en el caso de los electrones, $\partial n_e / \partial \mu_e \sim \sim n_e/\mu_e$. Se ve fácilmente que, a partir de las condiciones (85.2), $\varkappa \leq n^{1/3}$ y así $q \ll n^{1/3}$, es decir, $1/q$ es grande en comparación con las distancias entre las partículas. Esto justifica el empleo de la condición de equilibrio (85.17). Para justificar el que se desprecien todos los términos de la suma de (85.15) excepto aquél en el que $s = 0$, señalemos que según (85.14) se describe la polarización del plasma a frecuencias no nulas mediante la permitividad $\epsilon_i(\omega, \mathbf{q})$. De acuerdo con la fórmula asintótica conocida para frecuencias elevadas, $\epsilon_i(\omega) \approx 1 - 4\pi n_e e^2/m_e \omega^2$ y, por tanto,

$$\epsilon_i(i|\zeta_s|) = 1 + 4\pi n_e e^2/m_e \zeta_s^2;$$

ver EMC, § 59. A partir de las condiciones (85.1), (85.2), todas las frecuencias no nulas $\zeta_s = 2s\pi T \gg (n_e e^2/m_e)^{1/2}$ y para ellas podemos considerar $\epsilon(i|\zeta_s|) = 1$, es decir, el plasma no está polarizado y \mathcal{P} es pequeño.

La fórmula (85.21) se expresa en función de las variables termodinámicas T , V y μ_a . De aquí que el potencial termodinámico Ω del plasma pueda hallarse directamente integrando la ecuación

$$(\partial \Omega / \partial e^2)_{T, V, \mu_a} = \langle \hat{\mathcal{V}} \rangle / e^2; \quad (85.22)$$

ver Parte 1, (80.4). El resultado para la parte de correlaciones de Ω es (en unidades ordinarias)

$$\Omega_{\text{cor}} = -\frac{VT\varkappa^3}{12\pi} = -\frac{2\sqrt{\pi}VT e^3}{3} \left[\sum_a z_a^2 \left(\frac{\partial n_a}{\partial \mu_a} \right)_{V, T} \right]^{3/2} \quad (85.23)$$

(A. A. Vedenov 1959). De acuerdo con el teorema general de los incrementos pequeños, la misma fórmula expresada en función de otras variables termodinámicas da la corrección que hay que hacer a los demás potenciales termodinámicos.

En el caso de un plasma no degenerado, todas las derivadas $\partial n_a / \partial \mu_a = n_a / T$ y (85.23) se reduce entonces a

$$F_{\text{cor}} = -\frac{2\sqrt{\pi}Ve^3}{3\sqrt{T}} \left(\sum_a z_a^2 n_a \right)^{3/2} \quad (85.24)$$

para la corrección a la energía libre, igual que en la Parte 1 (78.12).

Por la fuerte degeneración de los electrones en un plasma ($T \ll \mu_e$), la derivada $\partial n_e / \partial \mu_e \sim n_e / \mu_e \ll n_e / T$. En la suma respecto a a en (85.23) podemos despreciar el término electrónico y volver a (85.24) con la diferencia de que la suma se realiza solamente respecto a las diversas clases de iones del plasma. Así pues, con intensa degeneración los electrones carecen de influencia sobre la longitud de apantallamiento o sobre la parte de correlaciones de las magnitudes termodinámicas del plasma.

CAPÍTULO IX

FLUCTUACIONES HIDRODINÁMICAS

§ 86. Factor de forma dinámico de un líquido

La función de correlación de las fluctuaciones de densidad, estudiada en la Parte 1, § 116, es un caso particular de una función más general que relaciona las fluctuaciones no sólo en diferentes puntos del espacio sino también en instantes distintos. En la teoría clásica, se define esta función como el valor medio

$$\bar{n}\sigma(t; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \delta n(t_1, \mathbf{r}_1) \delta n(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle, \quad (86.1)$$

en donde $t = t_1 - t_2$; se saca fuera de la definición de σ el factor $\bar{n} = N/V$, densidad numérica media de partículas. En el caso de un medio homogéneo e isotropo (un líquido o un gas) la función (86.1) depende de \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 únicamente a través de la distancia $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ entre los dos puntos y así se admitirá en adelante.

En la teoría cuántica, se define la función correspondiente mediante el producto simetrizado de los operadores de densidad (de Heisenberg) dependientes del tiempo como

$$\bar{n}\tilde{\sigma}(t, r) = \frac{1}{2} \langle \delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1) \delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2) + \delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2) \delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1) \rangle, \quad (86.2)$$

de acuerdo con la definición general, como en la Parte 1, (118.4). Sin embargo, existen ciertas ventajas en el caso presente si se utiliza la definición asimétrica

$$\bar{n}\sigma(t, r) = \langle \delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1) \delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (86.3)$$

para la cual retendremos la notación $\sigma(t, r)$.[†] A diferencia de $\tilde{\sigma}(t, r)$, $\sigma(t, r)$ no es una función par de t ; es evidente que

$$\tilde{\sigma}(t, r) = \frac{1}{2} [\sigma(t, r) + \sigma(-t, r)]. \quad (86.4)$$

[†] Esta función es la que resulta de una magnitud observable directamente, por ejemplo, en la dispersión inelástica de neutrones en un líquido (ver problema).

La transformada de Fourier de la función $\sigma(t, r)$ respecto al tiempo y a las coordenadas,

$$\sigma(\omega, \mathbf{k}) \equiv \sigma(\omega, k) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \sigma(t, r) dt d^3x \quad (86.5)$$

se denomina el *factor de forma dinámico* del medio. Como $\sigma(t, r)$ es isótropa, el factor de forma depende únicamente del valor del vector de onda. Se deduce de (86.4) que la transformada de Fourier de $\tilde{\sigma}(t, r)$ es

$$\tilde{\sigma}(\omega, k) = \frac{1}{2} [\sigma(\omega, k) + \sigma(-\omega, k)]. \quad (86.6)$$

Mediante (86.1) se determina la correlación puramente espacial de las fluctuaciones de densidad de los líquidos haciendo $t = 0$: $\sigma(r) = \sigma(t = 0, r) = \tilde{\sigma}(t = 0, r)$. Esta función está relacionada con $v(r)$ definida en la Parte 1 (§ 116) y ya utilizada en § 83 a través de la expresión $\sigma(r) = v(r) + \delta(\mathbf{r})$; las transformadas de Fourier son de tal forma que $\sigma(k) = v(k) + 1$. La función $\sigma(k)$ o $v(k)$ se denomina *factor de forma estático* del líquido. Las funciones $\sigma(\omega, k)$ y $\sigma(k)$ están relacionadas mediante la fórmula integral

$$\sigma(k) = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\omega, k) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \right]_{t=0} = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (86.7)$$

El operador de densidad (independiente del tiempo) de Schrödinger viene dado por la suma

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a), \quad (86.8)$$

extendida a todas las partículas del medio; las coordenadas \mathbf{r}_a de las partículas actúan como parámetros; cf. (24.4). Necesitaremos los componentes del desarrollo de Fourier de este operador respecto a las coordenadas:

$$\begin{aligned} \hat{n}_{\mathbf{k}} &= \int \hat{n}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3x \\ &= \sum_a e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_a}. \end{aligned} \quad (86.9)$$

Se realiza el paso al operador dependiente del tiempo (Heisenberg) mediante la regla general

$$\hat{n}(t, \mathbf{r}) = \exp(i\hat{H}t/\hbar) \hat{n}(\mathbf{r}) \exp(-i\hat{H}t/\hbar), \quad (86.10)$$

siendo \hat{H} el hamiltoniano del sistema. Este operador puede representarse mediante las expresiones (86.8) y (86.9) sustituyendo \mathbf{r}_a por $\hat{\mathbf{r}}_a(t)$, que es el operador de Heisenberg de las coordenadas de las partículas.

De acuerdo con los principios básicos de la física estadística, la operación de promediar $\langle \dots \rangle$ puede interpretarse de diversas maneras, de acuerdo con las variables termodinámicas con que se deseé expresar el resultado. Por ejemplo, si se define la función σ para una energía total y un número de partículas del sistema dados, el promedio se realiza respecto a un estado estacionario definido (estado m), es decir, a partir del elemento diagonal de la matriz apropiado. En el caso de un sistema homogéneo (un líquido), la dependencia existente entre los elementos de matriz del operador $\delta\hat{n}(t, \mathbf{r})$ y el tiempo y las coordenadas viene dada por

$$\langle m | \delta\hat{n}(t, \mathbf{r}) | l \rangle = \langle m | \delta\hat{n}(0) | l \rangle \exp [i(\omega_{ml}t - \mathbf{k}_{ml} \cdot \mathbf{r})], \quad (86.11)$$

expresión que es exactamente análoga a (8.4); el segundo miembro contiene el elemento de matriz del operador de Schrödinger $\delta\hat{n}(\mathbf{r})$ tomado en $\mathbf{r} = 0$. Utilizando esta fórmula, podemos escribir

$$\begin{aligned} \bar{n}\sigma(t, \mathbf{r}) &= \sum_l \langle m | \delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1) | l \rangle \langle l | \delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2) | m \rangle \\ &= \sum_l |\langle m | \delta\hat{n}(0) | l \rangle|^2 \exp [i(\omega_{ml}t - \mathbf{k}_{ml} \cdot \mathbf{r})]. \end{aligned}$$

La transformada de Fourier de esta función es

$$\bar{n}\sigma(\omega, \mathbf{k}) = (2\pi)^4 \sum_l |\langle m | \delta\hat{n}(0) | l \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{lm}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{lm}). \quad (86.12)$$

En estas fórmulas la suma se realiza sobre todos los estados del sistema con un número dado de partículas N_m , puesto que el operador $\delta\hat{n}$ no afecta a este número.

Sin embargo, si deseamos expresar el factor de forma en función de la temperatura y del potencial químico del líquido, la expresión (86.12) debe promediarse también respecto a la distribución de Gibbs:

$$\bar{n}\sigma(\omega, \mathbf{k}) = (2\pi)^4 \sum_{l,m} \exp \left(\frac{E_l - E_m - \mu N_m}{T} \right) |\langle m | \delta\hat{n}(0) | l \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{lm}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{lm}); \quad (86.13)$$

en cada término de la suma $N_l = N_m$. Con una fórmula semejante para $\sigma(-\omega, -\mathbf{k}) \equiv \sigma(\omega, \mathbf{k})$, intercambiando los subíndices de suma l y m y poniendo en el factor exponencial $E_l = E_m + \hbar\omega_{lm} = E_m + \hbar\omega$ (debido a la función delta), se tiene

$$\sigma(-\omega, \mathbf{k}) = \sigma(\omega, \mathbf{k}) e^{-\hbar\omega/T} \quad (86.14)$$

y luego, según (86.6),

$$\tilde{\sigma}(\omega, k) = \frac{1}{2} (1 + e^{-\hbar\omega/T}) \sigma(\omega, k). \quad (86.15)$$

Se deduce de (86.13) u (86.12) que $\sigma(\omega, k) \geq 0$ para todos los valores de los argumentos. A partir de (86.14) tenemos a temperatura cero

$$\sigma(\omega, k) = 0 \quad \text{para } \omega < 0, \quad T = 0. \quad (86.16)$$

En el límite macroscópico (N y $V \rightarrow \infty$ para un cociente fijo N/V) la «empalizada» de funciones delta de (86.13) se suaviza pasando a ser una función continua, pero los picos de las funciones delta en $\sigma(\omega, k)$ siguen persistiendo para los valores $\omega = \omega(k)$ que corresponden a excitaciones elementales sin decaimiento, como se deduce mediante razonamientos semejantes a los dados en § 8. No obstante, estos picos aparecen únicamente en el caso de excitaciones sin variación en el número de partículas.[†]

Veremos a continuación cómo puede relacionarse el factor de forma de un líquido con las magnitudes que aparecen en la formulación general del teorema de fluctuación-disipación (D. Pines y P. Nozières 1958).

Supongamos que cada partícula del líquido está sometida a un campo externo que le da una energía potencial $U(t, \mathbf{r})$. Entonces el operador de perturbación que actúa sobre la totalidad del líquido es

$$\hat{V}(t) = \int \hat{n}(t, \mathbf{r}) U(t, \mathbf{r}) d^3x. \quad (86.17)$$

Realizando un desarrollo de Fourier respecto al tiempo de todas las magnitudes que se ven en esta expresión, podemos representar la respuesta del sistema, es decir el valor medio de la variación de la densidad producida por la perturbación, como

$$\bar{n}(\omega, \mathbf{r}_1) = - \int \alpha(\omega, |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) U(\omega, \mathbf{r}_2) d^3x_2, \quad (86.18)$$

en donde la función $\alpha(\omega, r)$ se comporta como una susceptibilidad generalizada. El componente de Fourier temporal de la función de correlación $\sigma(t, r)$ es, en la notación del teorema de fluctuación-disipación,

$$\bar{n}\tilde{\sigma}(\omega, r) = (\delta n(\mathbf{r}_1) \delta n(\mathbf{r}_2))_\omega, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

[†] Por ejemplo, en un líquido de Fermi $\sigma(\omega, k)$ tiene una singularidad en función delta para $\omega = ku_0$ (siendo u_0 la velocidad del sonido cero) pero no posee aquellas singularidades que corresponden a la rama de fermiones del espectro: ver § 91.

De acuerdo con dicho teorema, esta función se expresa en función de la susceptibilidad generalizada por

$$\bar{n}\tilde{\sigma}(\omega, r) = \hbar \coth (\hbar\omega/2T) \operatorname{im} \alpha(\omega, r). \quad (86.19)$$

Una fórmula semejante da el componente de Fourier de las coordenadas $\tilde{\sigma}(\omega, k)$ en función de $\alpha(\omega, k)$ y entonces a partir de (86.15) se encuentra el factor de forma dinámico

$$\bar{n}\sigma(\omega, k) = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\hbar\omega/T}} \operatorname{im} \alpha(\omega, k). \quad (86.20)$$

La importancia de estas fórmulas se debe principalmente al hecho de que establecen una relación entre el factor de forma dinámico y una función con propiedades analíticas generales conocidas (respecto a la variable ω); por lo que se refiere a la función $\alpha(\omega, k)$ estas propiedades se describen en la Parte 1, § 123. También nos permiten el empleo, al calcular el factor de forma, de la fórmula general [cf. (75.11)]

$$\alpha(\omega, k) = \frac{i}{\hbar} \int \int_0^\infty e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle \hat{n}(t, \mathbf{r}) \hat{n}(0, 0) - \hat{n}(0, 0) \hat{n}(t, \mathbf{r}) \rangle dt d^3x. \quad (86.21)$$

Expresando los operadores de densidad en función de los operadores ψ ($n = \hat{\psi}^+ \hat{\psi}$), podemos escribir esta expresión como una función de Green de dos partículas, que puede calcularse mediante la técnica diagramática.

PROBLEMA

Expresar en función del factor de forma dinámico la probabilidad de la dispersión inelástica de neutrones lentos en un líquido compuesto por átomos idénticos (G. Placzek 1952).

SOLUCIÓN. De acuerdo con el método del pseudopotencial (ver MC, § 151), puede describirse la dispersión de neutrones lentos como el resultado de la interacción con una energía potencial

$$U(\mathbf{r}) = (2\pi^2 \hbar/M) a \hat{n}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

en donde $\hat{n}(\mathbf{r})$ es el operador de densidad (86.8), M es la masa reducida del átomo y del neutrón y a es la longitud de dispersión de los neutrones lentos por un solo átomo, es decir, el límite de la amplitud de dispersión con signo menos. La probabilidad de transición desde un estado inicial i del sistema líquido + neutrón hasta un estado final f en un intervalo $d\nu_f$ es

$$dw_{fi} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} U_{fi}(t) dt \right|^2 d\nu_f; \quad (2)$$

ver MC, (40.5). En el caso de elementos de matriz no diagonales U_{fi} en (1), puede escribirse $\delta\hat{n}$ en lugar de \hat{n} . La función de onda del estado inicial del neutrón (con impulso \mathbf{p} y energía ϵ) está normalizada a una partícula en el volumen V y la del estado final (impulso \mathbf{p}' y energía ϵ') mediante la función delta de $\mathbf{p}/2\pi$. Entonces $dv_f = d^3p'/(2\pi\hbar)^3$ y el elemento de matriz de la perturbación es

$$U_{fi}(t) = \frac{2\pi\hbar^2 a}{M\sqrt{V}} \int \delta n_f(t, \mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} d^3x,$$

en donde $\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$, $\hbar\omega = \epsilon - \epsilon'$ y $\delta n_f(t, \mathbf{r})$ es el elemento de matriz respecto a las funciones de onda del líquido. Sustituimos esta expresión en dw_{fi} y sumemos la probabilidad de transición respecto a todos los estados finales posibles del líquido. El módulo al cuadrado de la integral se escribe como una integral doble (respecto a $dt dt' d^3x d^3x'$) y nos aprovechamos de que

$$\begin{aligned} \sum_i \delta n_f(t, \mathbf{r}) \delta n_f(t', \mathbf{r}')^* &= \sum_i \delta n_g(t', \mathbf{r}') \delta n_f(t, \mathbf{r}) \\ &= \langle i | \delta\hat{n}(t', \mathbf{r}') \delta\hat{n}(t, \mathbf{r}) | i \rangle \\ &= \bar{n}\sigma(t' - t, \mathbf{r}' - \mathbf{r}); \end{aligned}$$

σ se expresa como una función de la energía total del líquido en el estado i . La integración respecto a $d(t' - t)d^3(x' - x)$ da $\sigma(\omega, k)$ y una integración posterior (por ejemplo, respecto a $dt d^3x$) da el volumen V y el intervalo total t , precisamente. Omitiendo el factor i , obtenemos para la probabilidad de dispersión por unidad de tiempo

$$w = \frac{4\pi^2\hbar^2}{M^2} \bar{n}a^2\sigma'(\omega, k) \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (3)$$

Esta expresión sigue siendo válida, como es natural, después de promediirla respecto a la distribución de Gibbs, es decir, cuando el factor de forma se expresa en función de la temperatura.

La propiedad (86.16) del factor de forma, cuando se aplica a la dispersión de neutrones, expresa el hecho de que a $T = 0$ el líquido sólo puede ganar energía y no perderla. La relación (86.14) expresa el principio de balance detallado, puesto que los procesos de dispersión con transferencias de energía e impulso (ω, \mathbf{k}) y $(-\omega, -\mathbf{k})$ son inversos entre sí.

§ 87. Reglas de la suma para los factores de forma

El factor de forma dinámico satisface ciertas relaciones integrales (respecto a las frecuencias ω) denominadas *reglas de la suma*.

La deducción de una de ellas se basa en las reglas de conmutación entre los operadores $\hat{n}_k(t)$ y $\hat{n}_{k'}(t)$. El conmutador de los operadores de Heisenberg tomados en el mismo instante es igual al de los operadores de Schrödinger \hat{n}_k y $\hat{n}_{k'}$. El operador \hat{n}_k está determinado por (86.9) y el conmutador buscado es

$$\hat{n}_k \hat{n}_k^\dagger - \hat{n}_k^\dagger \hat{n}_k = -(i\hbar/m) k^2 N, \quad (87.1)$$

siendo m la masa de una partícula del líquido.†

† El cálculo de este conmutador es el mismo que el cálculo que se siguió en MC, § 149, para deducir la regla de la suma (149.5); se sustituye aquí el número de electrones Z por el número total de partículas del líquido N .

Empecemos con la expresión correspondiente al componente del desarrollo de Fourier de la función $\sigma(t, r)$ respecto a las coordenadas únicamente:

$$\bar{n}\sigma(t, k) = \int e^{-ik \cdot (r_1 - r_2)} \langle \delta\hat{n}(t_1, r_1) \delta\hat{n}(t_2, r_2) \rangle d^3(x_1 - x_2).$$

Como el integrando sólo depende de $r_1 - r_2$, sustituimos la integración respecto a $d^3(x_1 - x_2)$ por otra respecto a $d^3x_1 d^3x_2 / V$; llevando a cabo esta integración dentro del promedio, obtenemos

$$\sigma(t, k) = (1/N) \langle \delta\hat{n}_k(t_1) \delta\hat{n}_{-k}(t_2) \rangle. \quad (87.2)$$

Calculemos la derivada $\partial\sigma(t, k)/\partial t$ en $t = 0$. Como $\sigma(t, k)$ depende únicamente de la diferencia $t = t_1 - t_2$,

$$\frac{\partial\sigma(t, k)}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\sigma}{\partial t_1} - \frac{\partial\sigma}{\partial t_2} \right)$$

y, después de la sustitución de (87.2),

$$\partial\sigma(t, k)/\partial t = (1/2N) \langle \delta\hat{n}_k(t_1) \delta\hat{n}_{-k}(t_2) - \delta\hat{n}_k(t_1) \delta\hat{n}_{-k}(t_2) \rangle.$$

Cada uno de los dos términos indicados aquí dependen únicamente del valor absoluto del vector k y, por consiguiente podemos sustituir k por $-k$ en el segundo término. Entonces poniendo $t_1 = t_2$ y observando que $\hat{n}_{-k} = \hat{n}_k^+$, se ve que la diferencia entre corchetes angulares es igual al comutador (87.1). De aquí que

$$[\partial\sigma(t, k)/\partial t]_{t=0} = -(i\hbar/2m)k^2.$$

Por otra parte, expresando $\sigma(t, k)$ como una integral de Fourier respecto a las frecuencias, tenemos

$$[\partial\sigma(t, k)/\partial t]_{t=0} = \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi} \right]_{t=0} = -i \int_{-\infty}^{\infty} \omega \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi}.$$

La comparación entre las dos expresiones correspondientes a la derivada nos da la relación buscada

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (87.3)$$

(G. Placzek 1952). Debe resaltarse que esta expresión resulta válida para todo valor de k . Cuando se toma el límite clásico ($\hbar \rightarrow 0$) de esta expresión, debe escribirse la integral del primer miembro como

$$\int_0^\infty \omega [\sigma(\omega, k) - \sigma(-\omega, k)] \frac{d\omega}{2\pi}$$

y debemos poner, de acuerdo con (86.14),

$$\sigma(\omega, k) - \sigma(-\omega, k) \approx (\hbar\omega/T) \sigma(\omega, k).$$

Entonces se elimina el factor \hbar en cada miembro, quedando

$$\int_0^\infty \omega^2 \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi} = Tk^2/2m.$$

Podemos aplicar la fórmula (87.3) a un líquido de Bose a $T = 0$ y considerar el intervalo de valores pequeños de k . Cuando $k \rightarrow 0$, la contribución principal a la integral procede del pico de la función delta del factor de forma $\sigma(\omega, k)$, que aparece en (86.13) debido a las transiciones que crean un fonón; como en el estado fundamental del líquido no existen fonones, tampoco existen transiciones que aniquilen un fonón a $T = 0$. Este término tiene la forma $A\delta(\omega - uk)$, en donde $\hbar uk$ es la energía del fonón (u es la velocidad del sonido). Sustituyéndolo en lugar de $\sigma(\omega, k)$ en (87.3), encontramos el valor del coeficiente A con el resultado

$$\sigma(\omega, k) = (\pi\hbar k/mu) \delta(\omega - uk). \quad (87.4)$$

La integración de esta expresión de acuerdo con la fórmula (86.7) da el factor de forma estático

$$\sigma(k) = \hbar k/2mu \quad (87.5)$$

(R. P. Feynman 1954).† Como esta fórmula está relacionada con el margen de valores pequeños de k , su transformada de Fourier da la expresión asintótica para la función de correlación a r grande:

$$v(r) = -\hbar/2\pi^2 mur^4; \quad (87.6)$$

† La fórmula (87.5), escrita en la forma $\sigma(k) = \hbar^2 k^2 / 2me(k)$, en donde $e(k)$ es la energía de la cuasipartícula, es estrictamente válida únicamente cuando $k \rightarrow 0$. Cuando k aumenta, existen contribuciones de importancia creciente a $\sigma(k)$ a partir de transiciones que crean diversas cuasipartículas. Si, no obstante, se desprecia esta contribución podemos suponer que la fórmula da la relación entre el factor de forma y la energía de las cuasipartículas en un líquido de Bose. El máximo de σ a $k \sim 1/a$ (en donde a es la distancia interatómica del líquido) corresponde al mínimo de los «rotones» en la curva de $e(k)$.

esta expresión puede comprobarse mediante la integral dada en la última nota a § 83. A $T = 0$, la fórmula (87.6) es válida a distancias arbitrariamente grandes. A temperaturas bajas pero finitas, es válida hasta distancias $r \sim \hbar u/T$, en donde las fluctuaciones cesan de ser puramente cuánticas. A distancias todavía mayores, la fórmula (87.6) se sustituye por una disminución exponencial (si se desprecia la contribución de las fuerzas de van der Waals; ver § 83).†

Puede obtenerse otra regla de la suma a partir de la relación establecida en § 86 entre el factor de forma y una susceptibilidad generalizada $\alpha(\omega, k)$. Esta relación se da en (86.20), que para $T = 0$ (y $\omega > 0$) se convierte en

$$\bar{n}\sigma(\omega, k) = 2\hbar \operatorname{im} \alpha(\omega, k). \quad (87.7)$$

De acuerdo con las fórmulas de Kramers-Kronig [ver Parte 1, (123.15)],

$$\operatorname{re} \alpha(\omega, k) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{im} \alpha(\omega', k)}{\omega' - \omega} d\omega'.$$

Poniendo aquí $\omega = 0$ y observando que $\alpha(0, k)$ es real,‡ se tiene

$$\alpha(0, k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{1}{\omega} \operatorname{im} \alpha(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (87.8)$$

En el límite $k \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \alpha(0, k \rightarrow 0) &= (\partial \bar{n} / \partial \mu)_{T=0} \\ &= \bar{n} (\partial \bar{n} / \partial P)_{T=0}. \end{aligned} \quad (87.9)$$

En efecto, en un campo débil estático U que varía lentamente en el espacio, la condición de equilibrio es $\mu + U = \text{constante}$, de modo que la aplicación del campo externo es equivalente a variar el potencial químico en $-U$. En el límite $k \rightarrow 0$, por consiguiente, tenemos según (86.18).

$$\begin{aligned} \delta \bar{n} &= -(\partial \bar{n} / \partial \mu) U \\ &\approx -U \int \alpha(0, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d^3(x_1 - x_2) \\ &= -U \alpha(0, k = 0), \end{aligned}$$

de donde se deduce (87.9).

† La función de correlación (87.6) es negativa (lo que corresponde a la repulsión entre partículas), a diferencia de lo que ocurre en un gas ideal de Bose, que es positiva (ver Parte 1, § 117). En conexión con esto puede recordarse (§ 25) que en el gas de Bose ligeramente no ideal el espectro de energía únicamente tiene la forma de fonones a $k \ll mu/\hbar$ (con $\hbar/mu \gg a$). Las distancias correspondientes $r \sim 1/k \gg \hbar/mu$, de modo que en la transición a un gas ideal ($u \rightarrow 0$) el margen de aplicabilidad de (87.6) se desplaza hacia el infinito.

‡ La magnitud $\alpha(\omega = 0, \mathbf{r})$ es real debido a las propiedades generales de la susceptibilidad generalizada. Entonces la componente de Fourier $\alpha(\omega = 0, \mathbf{k})$ es real porque $\alpha(\omega, \mathbf{r})$ es una función par de \mathbf{r} .

Así pues, combinando las fórmulas (87.7)-(87.9), encontramos la siguiente regla de la suma para el factor de forma de un líquido a $T = 0$:

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_0^\infty \sigma(\omega, k \rightarrow 0) \frac{d\omega}{\omega} = \frac{\partial \tilde{n}}{\partial P} \quad (87.10)$$

(D. Pines y P. Nozières 1958).

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Hallar la función de correlación $v(r)$ en un líquido de Bose a distancias $r \gtrsim \hbar u/T$ y temperaturas $T \ll T_\lambda$.

SOLUCIÓN. Se determina la función de correlación buscada mediante el factor de forma para $k \sim 1/r \gtrsim T/\hbar u \ll 1/a$, en cuyo intervalo el líquido tiene un espectro de energía de fonones. Cuando $T \neq 0$, $\sigma(\omega, k)$ contiene un término en $\delta(\omega + ku)$ correspondiente a la absorción de fonones, lo mismo que otro en $\delta(\omega - ku)$ correspondiente a la emisión de fonones. Pueden hallarse los coeficientes de estos términos a partir de (86.14) y (87.3):

$$\sigma(\omega, k) = \frac{\pi\hbar k}{mu} [1 - e^{-\hbar ku/T}]^{-1} \{ \delta(\omega - ku) + e^{-\hbar ku/T} \delta(\omega + ku) \}. \quad (1)$$

Integrando esta expresión tenemos

$$\sigma(k) = \frac{\hbar k}{2mu} \coth \frac{\hbar ku}{2T} \quad (2)$$

y de aquí

$$\begin{aligned} v(r) &= \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sigma(k) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \\ &= \frac{\hbar}{8\pi^2 i m u r} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i k r} k^2 \coth \frac{\hbar k u}{2T} dk. \end{aligned}$$

Completoando el contorno de integración respecto a k mediante una semicircunferencia infinita en el semiplano complejo de k complejo, reducimos la integral a una suma de residuos en los polos (que caen sobre el eje imaginario). Para valores de $r \gg \hbar u/T$, la contribución principal a la integral procede del residuo en el polo $\hbar k u / 2T = i\pi$:

$$v(r) = -\frac{2\pi T^3}{mu^4 \hbar^2 r} \exp\left(-\frac{2\pi Tr}{\hbar u}\right). \quad (3)$$

Con la condición $aT/\hbar u \ll 1$, la longitud de decaimiento característica para la función $v(r)$ es mucho mayor que las distancias interatómicas sobre las que se realiza el decaimiento y que se deben a la interacción directa entre átomos. En la fórmula (3) interviene \hbar de modo esencial y la correlación descrita por esta fórmula es, por tanto, un efecto cuántico. En su deducción se ha despreciado la contribución debida a las fuerzas de van der Waals. Se deduce a partir de los resultados de § 83 que esta contribución sigue una ley potencial y predomina a distancias suficientemente grandes. Las distancias a las que se sustituye (3) por (83.16) dependen de la relación específica entre

los coeficientes, pero a temperaturas suficientemente bajas siempre existe un intervalo en que es aplicable la fórmula (3), puesto que en el límite de este intervalo con $r \sim \hbar u/T$, de acuerdo con (3) $\nu \propto T^4$ y de acuerdo con (83.16) $\nu \propto T^7$.

PROBLEMA 2. Hallar la forma límite (a distancias grandes) de la función de correlación para las fluctuaciones de la función de onda del condensado en un superfluído de Bose (P. C. Hohenberg y P. C. Martin 1965).

SOLUCIÓN. En el límite de ondas largas, las fluctuaciones más intensas son las de la función de onda del condensado Φ , puesto que en ella interviene únicamente la energía relativamente pequeña del movimiento superfluído macroscópico. La contribución correspondiente al potencial termodinámico total Ω del líquido (en un volumen V con T y μ dados) es

$$\delta\Omega = \int \frac{1}{2} \varrho_s v_s^2 dV = \frac{\hbar \varrho_s}{2m^2} \int (\nabla \Phi)^2 dV.$$

Expresando $\delta\Phi$ como una serie de Fourier

$$\delta\Phi = \sum_{\mathbf{k}} \delta\Phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \delta\Phi_{-\mathbf{k}} = \delta\Phi_{\mathbf{k}}^*,$$

obtenemos

$$\delta\Omega = \frac{\hbar^2}{2m^2} \varrho_s V \sum_{\mathbf{k}} k^2 |\delta\Phi_{\mathbf{k}}|^2$$

y de aquí las fluctuaciones cuadráticas medias

$$\langle |\delta\Phi_{\mathbf{k}}|^2 \rangle = T m^2 / V \hbar^2 \varrho_s k^2; \quad (4)$$

los cálculos son totalmente análogos a los desarrollados en la Parte 1, § 146. La contribución de estas fluctuaciones a la función de correlación

$$G(r) = \langle \delta\Xi(0) \delta\Xi(r) \rangle$$

es

$$G(r) \approx n_0 \langle \delta\Phi(0) \delta\Phi(r) \rangle T n_0 m^2 / 4\pi \hbar^2 \varrho_s r.$$

Así pues $G(r)$ disminuye según una ley de potencias a distancias grandes. La contribución procedente de fluctuaciones en la densidad del condensado n_0 disminuye exponencialmente allí. Las dos contribuciones son comparables a $r \sim r_c$; a distancias $r \ll r_c$, siguen conjuntamente (a temperaturas cercanas al punto λ) la ley

$$G(r) \propto r^{-(1+\zeta)}, \quad (6)$$

en donde ζ es el índice crítico apropiado. Puede definirse el radio de correlación r_c como la distancia a la cual se sustituye la forma asintótica (5) por (6):

$$r_c^\zeta \propto \varrho_s / n_0.$$

Con los índices críticos β y ν , que describen la dependencia de n_0 y r_e con la temperatura de acuerdo con (28.1) y (28.3), se encuentra que

$$\varrho_s \propto (T_\lambda - T)^{2\beta - \nu\zeta}.$$

Con las relaciones conocidas existentes entre los índices críticos α , β , ν , ζ (ver Parte 1, §§148, 149), podemos ver fácilmente que este resultado concuerda con (28.4).

§ 88. Fluctuaciones hidrodinámicas

En las secciones precedentes, hemos considerado las fluctuaciones de densidad en un líquido para frecuencias ω y vectores de onda \mathbf{k} cualesquiera. Como es natural en este caso no podía hallarse la forma general de la función de correlación. Sin embargo, esto puede hacerse en el límite hidrodinámico, en donde es grande la longitud de onda de las fluctuaciones en comparación con las dimensiones microscópicas características (distancias interatómicas en un líquido, recorrido libre medio en un gas).

El cálculo de las funciones de correlación instantáneas de la densidad, temperatura, velocidad, etc., de un líquido en reposo no exige ningún estudio especial: estas fluctuaciones (en el límite clásico o no cuántico) se describen mediante las fórmulas termodinámicas usuales, que son válidas para cualquier medio en equilibrio termodinámico. Las correlaciones entre fluctuaciones en el mismo instante en puntos diferentes del espacio se propagan a distancias del orden de las distancias interatómicas (despreciamos aquí las fuerzas de van der Waals de largo alcance, pero débiles). Pero, en hidrodinámica, estas distancias se consideran como infinitesimales. Por tanto, en el límite hidrodinámico las fluctuaciones en el mismo instante en puntos diferentes están sin correlacionar. Esta afirmación se deduce formalmente de la aditividad de una magnitud termodinámica, el trabajo mínimo R_{\min} necesario para producir la fluctuación. Como la probabilidad de la fluctuación es proporcional a $\exp(-R_{\min}/T)$, representando R_{\min} en forma de una suma de términos que pertenecen a diversos volúmenes físicamente infinitesimales vemos que las probabilidades de las fluctuaciones en estos volúmenes son independientes unas de otras.

Utilizando esta independencia, podemos volver a escribir inmediatamente las fórmulas conocidas (ver Parte 1, §112) para las fluctuaciones de las magnitudes termodinámicas en un punto dado del espacio como fórmulas para las funciones de correlación. Por ejemplo, a partir de la fórmula $\langle(\delta T)^2\rangle = T^2/\varrho c_v V$ para las fluctuaciones de temperatura en el volumen V (en donde ϱ es la densidad y c_v el calor específico por unidad de masa del medio) escribimos en primer lugar

$$\langle\delta T(\mathbf{r}_a)\delta T(\mathbf{r}_b)\rangle = (T^2/\varrho c_v V_a) \delta_{ab},$$

en donde las fluctuaciones se relacionan con los dos volúmenes pequeños V_a y V_b . Entonces cuando los volúmenes tienden a cero, obtenemos†

$$\langle \delta T(\mathbf{r}_1) \delta T(\mathbf{r}_2) \rangle = (T^2/\varrho c_v) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (88.1)$$

Análogamente, tenemos las siguientes fórmulas para las fluctuaciones de las demás magnitudes termodinámicas:

$$\langle \delta \varrho(\mathbf{r}_1) \delta \varrho(\mathbf{r}_2) \rangle = \varrho T (\partial \varrho / \partial P)_T \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (88.2)$$

$$\begin{aligned} \langle \delta P(\mathbf{r}_1) \delta P(\mathbf{r}_2) \rangle &= \varrho T (\partial P / \partial \varrho)_S \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &= \varrho T u^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (88.3)$$

$$\langle \delta s(\mathbf{r}_1) \delta s(\mathbf{r}_2) \rangle = (c_p / \varrho) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (88.4)$$

siendo P la presión y s la entropía por unidad de masa del medio; las fluctuaciones de las parejas ϱ , T y P , s son independientes. También podemos escribir una fórmula para las fluctuaciones de la velocidad macroscópica \mathbf{v} del líquido (que es cero en el equilibrio):

$$\langle \delta v_i(\mathbf{r}_1) \delta v_k(\mathbf{r}_2) \rangle = (T / \varrho) \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (88.5)$$

Un problema que es específico de la hidrodinámica es el de las correlaciones temporales de las fluctuaciones, como es el caso de las fluctuaciones en un líquido móvil. La solución de estos problemas requiere la consideración de procesos disipativos (viscosidad y conducción térmica) en el líquido.

La construcción de una teoría general de los fenómenos de fluctuación en hidrodinámica exige establecer las «ecuaciones de movimiento» correspondientes a las magnitudes fluctuantes. Esto puede realizarse sumando los términos apropiados a las ecuaciones hidrodinámicas (L. D. Landau y E. M. Lifshitz 1957).

Las ecuaciones de la hidrodinámica, escritas en la forma

$$\partial \varrho / \partial t + \operatorname{div}(\varrho \mathbf{v}) = 0, \quad (88.6)$$

$$\varrho \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} + \varrho \mathbf{v}_k \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial x_k} = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma'_{ik}}{\partial x_k}, \quad (88.7)$$

$$\varrho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla s \right) = \frac{1}{2} \sigma'_{ik} \left(\frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial x_i} \right) - \operatorname{div} \mathbf{q}, \quad (88.8)$$

† Estas fórmulas y las siguientes correspondientes a las correlaciones de un solo instante en los gases son válidas para fluctuaciones con longitudes de onda largas únicamente en comparación con las distancias intermoleculares pero no necesariamente con el recorrido libre medio. Sin embargo, esta última condición es requerida para las funciones de correlación en tiempos diferentes en la aproximación hidrodinámica (puesto que el mecanismo microscópico de propagación de las perturbaciones en los gases está determinado por el recorrido libre medio de las partículas).

sin ninguna forma específica del tensor de tensiones σ'_{ik} y del vector de flujo térmico \mathbf{q} , expresan simplemente la conservación de la masa, del impulso y de la energía. Por tanto, en esta forma son válidas para cualquier movimiento, incluyendo las variaciones debidas a las fluctuaciones en el estado del líquido. Entonces han de interpretarse ϱ , P , \mathbf{v}, \dots como la suma de los valores de ϱ_0 , P_0 , \mathbf{v}_0, \dots del movimiento básico más sus fluctuaciones $\delta\varrho$, δP , $\delta\mathbf{v}, \dots$ (como es natural, las ecuaciones podrán linearizarse siempre respecto a estas últimas).

Las expresiones usuales para el tensor de tensiones y el flujo térmico los relacionan respectivamente con los gradientes de velocidad y con el gradiente de temperatura. Cuando en un líquido existen fluctuaciones, aparecen también tensiones locales y flujos térmicos espontáneos desconectados de estos gradientes; designaremos a estas magnitudes «aleatorias» por s_{ik} y \mathbf{g} . Entonces

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{v} \right) + \zeta \delta_{ik} \operatorname{div} \mathbf{v} + s_{ik}, \quad (88.9)$$

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T + \mathbf{g}, \quad (88.10)$$

en donde η y ζ son los coeficientes de viscosidad y κ , la conductividad térmica.

El problema consiste ahora en establecer las propiedades de s_{ik} y \mathbf{g} considerando sus funciones de correlación. Por sencillez, se darán los razonamientos para el caso normal en hidrodinámica, el de fluctuaciones no cuánticas; esto significa que se supone que las frecuencias de las fluctuaciones satisfacen la condición $\hbar\omega \ll T$. Se supone también que las viscosidades y la conductividad térmica son no dispersivas, es decir, son independientes de la frecuencia de la fluctuación.

En la teoría general de las fluctuaciones dada en la Parte 1, §§ 119-122, se considera una secuencia discreta de magnitudes fluctuantes x_1, x_2, x_3, \dots , mientras que aquí tenemos una secuencia continua, que son los valores de ϱ, P, \dots , en cada punto del líquido. Se evita esta dificultad, por otra parte sin importancia, dividiendo el volumen del cuerpo en porciones pequeñas pero finitas ΔV y considerando ciertos valores medios de estas magnitudes en cada porción; el paso a elementos de volumen infinitesimales se hace en la fórmula final.

Consideraremos las fórmulas (88.9) y (88.10) como las ecuaciones

$$\dot{x}_a = - \sum_b \gamma_{ab} X_b + y_b \quad (88.11)$$

de la teoría general de las fluctuaciones cuasiestacionarias; ver Parte 1, (122.20). Las magnitudes \dot{x}_a se toman como los componentes del tensor σ'_{ik} y del vector \mathbf{q} en cada punto ΔV . Entonces las magnitudes y_a son s_{ik} y \mathbf{g} :

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_a &\rightarrow \sigma'_{ik}, q_i, \\ y_a &\rightarrow s_{ik}, g_i. \end{aligned} \right\} \quad (88.12)$$

El significado de las magnitudes termodinámicamente conjugadas X_a se determina mediante la fórmula que nos da la variación respecto al tiempo de la entropía total S del líquido. Así se halla del modo usual (cf. MF, § 49) a partir de (88.8)-(88.10)

$$\dot{S} = \int \left\{ \frac{\sigma'_{ik}}{2T} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) - \frac{\mathbf{q} \cdot \nabla T}{T^2} \right\} dV. \quad (88.13)$$

Sustituyendo esta integral por una suma respecto a las porciones ΔV y comparando luego con la expresión

$$\dot{S} = - \sum_a \dot{x}_a X_a,$$

se halla que

$$X_a \rightarrow - \frac{1}{2T} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) \Delta V, \quad \frac{1}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_i} \Delta V. \quad (88.14)$$

Ahora resulta ya sencillo hallar los coeficientes γ_{ab} , que dan inmediatamente las correlaciones según

$$\langle y_a(t_1) y_b(t_2) \rangle = (\gamma_{ab} + \gamma_{ba}) \delta(t_1 - t_2); \quad (88.15)$$

ver Parte 1, (122.21a).

En primer lugar, obtenemos que en las fórmulas (88.9) y (88.10) no existen términos que relacionen σ'_{ik} con el gradiente de temperatura, o \mathbf{q} con los gradientes de velocidad. Esto significa que los coeficientes correspondientes $\gamma_{ab} = 0$ y a partir de (88.15)

$$\langle s_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1) g_l(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle = 0, \quad (88.16)$$

es decir, los valores de s_{ik} y \mathbf{g} están sin correlacionar.

A continuación vemos que los coeficientes que relacionan los valores de q_i con los de $(\Delta V/T^2)\partial T/\partial x_i$, son cero, si estas magnitudes se toman en porciones diferentes de ΔV y son $\gamma_{ik} = \kappa T^2 \delta_{ik}/\Delta V$ si se toman en el mismo ΔV . Con estos valores de γ_{ab} , obtenemos según (88.15) y después de tomar el límite $\Delta V \rightarrow 0$,

$$\langle g_i(t_1, \mathbf{r}_1) g_k(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle = 2\kappa T^2 \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2). \quad (88.17)$$

Análogamente obtenemos las fórmulas para las funciones de correlación del tensor de tensiones aleatorias:

$$\langle s_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1) s_{lm}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle = 2T[\eta(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}) + (\zeta - \frac{2}{3}\eta)\delta_{ik}\delta_{lm}] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2). \quad (88.18)$$

En principio, las fórmulas (88.16)-(88.18) resuelven este problema de calcular las fluctuaciones hidrodinámicas en un caso particular cualquiera. El procedimiento de resolución es el siguiente. Considerando a s_{ik} y \mathbf{g} como funciones dadas de las coordenadas y del tiempo, resolvamos formalmente las ecuaciones linealizadas (88.6)-(88.8) para $\delta\varrho, \delta\mathbf{v}, \dots$, con las condiciones de contorno hidrodinámicas necesarias. Esto nos da las magnitudes expresadas como funcionales lineales de s_{ik} y \mathbf{g} . En correspondencia, se expresa cualquier magnitud cuadrática en $\delta\varrho, \delta\mathbf{v}, \dots$, mediante los funcionales cuadráticos de s_{ik} y \mathbf{g} y luego se calculan los valores medios mediante (88.16)-(88.18); las magnitudes auxiliares s_{ik} y \mathbf{g} no aparecen en el resultado.

También podemos escribir las fórmulas (88.16)-(88.18) en los componentes de Fourier respecto a la frecuencia y lo haremos de tal forma que las generalice al caso de las fluctuaciones cuánticas. De acuerdo con las reglas generales del teorema de fluctuación-disipación, se obtiene dicha generalización incluyendo un factor extra $(\hbar\omega/2T) \coth(\hbar\omega/2T)$ (que es la unidad en el límite clásico $\hbar\omega \ll T$). En presencia de dispersión de la viscosidad y de la conductividad térmica, las magnitudes η, ζ y κ son funciones complejas de la frecuencia; en las fórmulas para las fluctuaciones, se reemplazan por las partes reales de dichas funciones:

$$(s_{ik}^{(1)} g_l^{(2)})_\omega = 0, \quad (88.19)$$

$$(g_i^{(1)} g_k^{(2)})_\omega = \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hbar\omega T \coth(\hbar\omega/2T) \operatorname{re} \kappa(\omega), \quad (88.20)$$

$$\begin{aligned} (s_{ik}^{(1)} s_{lm}^{(2)})_\omega &= \hbar\omega \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \coth(\hbar\omega/2T) \times \\ &\times [(\delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{lm}) \operatorname{re} \eta(\omega) + \delta_{ik}\delta_{lm} \operatorname{re} \zeta(\omega)]. \end{aligned} \quad (88.21)$$

§ 89. Fluctuaciones hidrodinámicas en un medio infinito

En esta sección consideraremos las fluctuaciones hidrodinámicas en un líquido infinito en reposo. Como es natural este problema puede resolverse mediante el método dado en § 88. Sin embargo, utilizaremos aquí otro método diferente y así daremos un ejemplo de otro procedimiento alternativo de resolver problemas de fluctuaciones hidrodinámicas.

Este otro método emplea la teoría general de las fluctuaciones cuasiestacionarias en su etapa previa, antes de la introducción de las fuerzas aleatorias. Las fórmulas generales de interés son las siguientes (ver Parte 1, § 122).

Sean

$$\dot{x}_a = - \sum_q \lambda_{ab} x_b \quad (89.1)$$

las «ecuaciones del movimiento» macroscópicas para el conjunto de magnitudes $x_a(t)$ que describen el estado de no equilibrio del sistema (en el equilibrio, todas las $x_a = 0$). Estas ecuaciones son válidas si las x_a son grandes en comparación con sus fluctuaciones medias (pero también tan pequeñas que puedan linearizarse las ecuaciones del movimiento). Podemos decir entonces que se satisfacen ecuaciones semejantes (cuando $t > 0$) por las funciones de correlación de las fluctuaciones:

$$\frac{d}{dt} \langle x_a(t) x_c(0) \rangle = - \sum_b \lambda_{ab} \langle x_b(t) x_c(0) \rangle, \quad t > 0. \quad (89.2)$$

Se forma la condición inicial para estas expresiones mediante las ecuaciones

$$[\langle x_a(t) x_c(0) \rangle]_{t=+0} = \langle x_a x_c \rangle, \quad (89.3)$$

en donde $\langle x_a x_c \rangle$ es la función de correlación de un solo instante que se supone conocida. En el intervalo $t < 0$, las funciones de correlación se continúan mediante la regla

$$\langle x_a(t) x_c(0) \rangle = \pm \langle x_a(-t) x_c(0) \rangle, \quad (89.4)$$

relacionándose el signo superior con el caso en el que x_a y x_c sean ambos pares o ambos impares bajo la inversión temporal y el signo inferior cuando uno sea par y el otro impar. Se obtiene la solución de la ecuación (89.2) con la condición (89.3) mediante la transformación de Fourier unilateral: multiplicando la ecuación por $e^{i\omega t}$ e integrando respecto a t desde 0 hasta ∞ (con integración por partes en el primer miembro) obtenemos las ecuaciones

$$-i\omega (x_a x_c)_\omega^{(+)} = - \sum_b \lambda_{ab} (x_b x_c)_\omega^{(+)} + \langle x_a x_c \rangle \quad (89.5)$$

para las magnitudes (funciones de la frecuencia)

$$(x_a x_b)_\omega^{(+)} = \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle x_a(t) x_b(0) \rangle dt. \quad (89.6)$$

Los componentes de Fourier ordinarios de la función de correlación se expresan en función de las magnitudes (89.6) mediante

$$\begin{aligned} (x_a x_b)_\omega &= \int_{-\infty}^\infty e^{i\omega t} \langle x_a(t) x_b(0) \rangle dt \\ &= (x_a x_b)_\omega^{(+)} \pm [(x_a x_b)_\omega^{(+)}]^* \\ &= (x_a x_b)_\omega^{(+)} + (x_b x_a)_{-\omega}^{(+)}, \end{aligned} \quad (89.7)$$

en donde los signos \pm corresponden a los de (89.4).

Volviendo al problema indicado de las fluctuaciones en un líquido en reposo. linearicemos en primer lugar las ecuaciones hidrodinámicas (88.6)-(88.8) con σ_{ik} y \mathbf{q} tomados de (88.9) y (88.10) (sin los términos finales). Poniendo $\varrho = \varrho_0 + \delta\varrho$, $\mathbf{v} = \delta\mathbf{v}, \dots$ y omitiendo los términos no lineales se tiene

$$\frac{\partial \delta\varrho}{\partial t} + \varrho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (89.8)$$

$$\varrho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \delta P + \eta \Delta \mathbf{v} + (\zeta + \frac{1}{3}\eta) \nabla \operatorname{div} \mathbf{v}, \quad (89.9)$$

$$\frac{\partial \delta s}{\partial t} = \frac{\kappa}{\varrho T} \Delta \delta T; \quad (89.10)$$

después de la linearización se omite el subíndice 0 en las magnitudes constantes. En las ecuaciones (89.8)-(89.10) será conveniente dividir la velocidad en las partes potencial («longitudinal») y rotacional («transversa») $\mathbf{v}^{(l)}$ y $\mathbf{v}^{(t)}$ definidas por

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^{(l)} + \mathbf{v}^{(t)}, \quad (89.11)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v}^{(t)} = 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{v}^{(l)} = 0.$$

En (89.8) sólo aparece la velocidad longitudinal:

$$\frac{\partial \delta\varrho}{\partial t} + \varrho \operatorname{div} \mathbf{v}^{(l)} = 0, \quad (89.12)$$

y (89.9) se separa en las dos ecuaciones

$$\frac{\partial \mathbf{v}^{(t)}}{\partial t} = \frac{\eta}{\varrho} \Delta \mathbf{v}^{(t)}, \quad (89.13)$$

$$\varrho \frac{\partial \mathbf{v}^{(l)}}{\partial t} = -\nabla \delta P + \left(\zeta + \frac{4}{3}\eta \right) \nabla \operatorname{div} \mathbf{v}^{(l)}. \quad (89.14)$$

La ecuación para las velocidades transversales es independiente de la otra ecuación. De acuerdo con ello, tenemos también una sola ecuación para la función de correlación de sus fluctuaciones:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle v_i^{(t)}(t, \mathbf{r}) v_k^{(t)}(0, 0) \rangle - \nu \Delta \langle v_i^{(t)}(t, \mathbf{r}) v_k^{(t)}(0, 0) \rangle = 0, \quad (89.15)$$

en donde $\nu = \eta/\varrho$ es la viscosidad cinemática. Tomando la transformada de Fourier de una sola parte, obtenemos

$$-\imath\omega(v_i^{(t)}(\mathbf{r}) v_k^{(t)}(0))_{\omega}^{(+)} - \nu \Delta(v_i^{(t)}(\mathbf{r}) v_k^{(t)}(0))_{\omega}^{(+)} = \langle v_i^{(t)}(\mathbf{r}) v_k^{(t)}(0) \rangle,$$

en donde el segundo miembro es la función de correlación unilateral; o bien con las componentes de Fourier respecto a las coordenadas

$$(v_i^{(t)} v_k^{(t)})_{\omega\mathbf{k}} = (v_i^{(t)} v_k^{(t)})_{\mathbf{k}} / (\nu k^2 - \imath\omega).$$

La función de correlación instantánea de las fluctuaciones de la velocidad viene dada por (88.5); pasando a los componentes de Fourier y separando la parte transversal, tenemos

$$(v_i^{(t)} v_k^{(t)})_{\mathbf{k}} = (T/\varrho)(\delta_{ik} - k_i k_k/k^2). \quad (89.16)$$

Sustituyendo en la fórmula precedente, tenemos finalmente†

$$(v_i^{(t)} v_k^{(t)})_{\omega\mathbf{k}} = 2 \operatorname{re} (v_i^{(t)} v_k^{(t)})_{\omega\mathbf{k}}^{(+)} = \frac{2T}{\varrho} \left(\delta_{ik} - \frac{k_i k_k}{k^2} \right) \frac{\nu k^2}{\omega^2 + \nu^2 k^4}. \quad (89.17)$$

Para las demás variables tenemos un sistema de ecuaciones acopladas (89.10), (89.12), (89.14). Sin embargo, éste resulta más simple en los casos límites de frecuencias altas y bajas. La razón consiste en que las perturbaciones de la velocidad longitudinal y de la presión se propagan en el líquido con la velocidad del sonido u y las de la entropía de acuerdo con la ecuación de la conducción térmica. El último mecanismo exige un tiempo $\sim 1/\chi k^2$ para la propagación de la perturbación a una distancia $\sim 1/k$ (en donde $\chi = \kappa/\varrho c_p$ es la conductividad termométrica del medio). De aquí que, en el caso de frecuencias que satisfacen la condición (con un valor dado del número de ondas)

$$\chi k^2 \ll \omega \sim ku, \quad (89.18)$$

podemos suponer que únicamente $\mathbf{v}^{(t)}$ y P fluctúan a entropía constante. Por otra parte si

$$\chi k^2 \sim \omega \ll ku, \quad (89.19)$$

existen fluctuaciones isobáricas de la entropía.‡

† Es fácil ver que, al integrar (89.17) respecto a $\omega/2\pi$, volvemos a la función de correlación de un solo instante, como era de esperar.

‡ La desigualdad $\chi k^2 \ll ku$ se satisface siempre en la región hidrodinámica. Por ejemplo, en los gases $u \sim v_T$ y $\chi \sim v_T l$ en donde v_T es la velocidad térmica media de las partículas y l su recorrido libre medio. De aquí que la desigualdad $\chi k \ll u$ sea equivalente a la condición necesaria $kl \ll 1$.

Consideremos en primer lugar el intervalo de alta frecuencia (89.18) y determinemos las fluctuaciones de presión, por ejemplo.

La ecuación (89.14) escrita para las funciones de correlación, tiene la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{v}^{(l)}(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle &= -\operatorname{grad} \langle \delta P(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle + \\ &+ \left(\zeta + \frac{4}{3} \eta \right) \operatorname{grad} \operatorname{div} \langle \mathbf{v}^{(l)}(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle, \end{aligned}$$

y la condición inicial para la misma es la anulación de la correlación instantánea de $\mathbf{v}^{(l)}$ y δP . Con una transformación de Fourier unilateral respecto al tiempo y una transformación completa respecto a las coordenadas, tenemos a partir de aquí

$$-i\omega \varrho \langle \mathbf{v}^{(l)} \delta P \rangle_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} = -i\mathbf{k} (\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} - \left(\zeta + \frac{4}{3} \eta \right) \mathbf{k} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}^{(l)} \delta P)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)}. \quad (89.20)$$

A continuación en la ecuación (89.12) escribamos

$$\delta \varrho = \left(\frac{\partial \varrho}{\partial P} \right)_s \delta P + \left(\frac{\partial \varrho}{\partial s} \right)_P \delta s = \frac{1}{u^2} \delta P - \varrho^2 \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s \delta s,$$

y $\partial \delta s / \partial t$ se expresa mediante (89.10) en la forma

$$\frac{\partial \delta s}{\partial t} = \frac{\chi}{\varrho T} \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s \Delta \delta P;$$

el término en $\Delta \delta s$ a la derecha se desprecia en comparación con $\partial \delta s / \partial t$, puesto que $\chi k^2 \ll \omega$. Esto conduce a la ecuación

$$\frac{1}{u^2} \frac{\partial \delta P}{\partial t} - \frac{\chi \varrho}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s^2 \Delta \delta P + \varrho \operatorname{div} \mathbf{v}^{(l)} = 0.$$

La ecuación correspondiente para las funciones de correlación se obtiene de nuevo sustituyendo δP y $\mathbf{v}^{(l)}$ por $\langle \delta P(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle$ y $\langle \mathbf{v}^{(l)}(t, \mathbf{r}) \delta P(0, 0) \rangle$ respectivamente; la condición inicial es (88.3). Despues de las transformaciones de Fourier, esta ecuación se convierte en

$$\left[-\frac{i\omega}{u^2} + \frac{k^2 \chi \varrho}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s^2 \right] (\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} + i\varrho (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}^{(l)} \delta P)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} = \varrho T. \quad (89.21)$$

A partir de las dos ecuaciones (89.20) y (89.21) podemos hallar

$$(\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}} = 2 \operatorname{re} (\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}}^{(+)} = 2 \operatorname{re} \frac{k^2 \varrho T u^4 (i + 2\gamma_T \omega / u k^2)}{\omega (\omega^2 - k^2 u^2 + 2i\omega u \gamma)} , \quad (89.22)$$

en donde

$$\gamma = \frac{k^2}{2\varrho u} \left[\zeta + \frac{4}{3}\eta + \frac{xu^2\varrho^2}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_s^2 \right] \quad (89.23)$$

es el coeficiente de absorción del sonido en el medio (ver *MF*, § 77) y γ_T es la parte del mismo debido a la conducción térmica. El resultado final para frecuencias cercanas a los valores $\omega = \pm ku$, en donde las fluctuaciones son especialmente grandes, es

$$(\delta P^2)_{\omega k} = \varrho Tu^3\gamma / [(\omega \mp ku)^2 + u^2\gamma^2]. \quad (89.24)$$

Esta fórmula es válida cuando $|\omega \mp ku| < uy$.†

En el margen de bajas frecuencias resulta suficiente (89.19), como ya se ha mencionado para considerar las fluctuaciones de entropía, despreciando las de presión. Esto significa que en (89.10) podemos poner

$$\delta T \approx (\partial T / \partial s)_P \delta s = (T/c_p) \delta s,$$

tomándose el calor específico c_p por unidad de masa. Por consiguiente, la función de correlación requerida satisface una ecuación del mismo tipo que (89.15) y la condición inicial es (88.4). El resultado es

$$(\delta s^2)_{\omega k} = \frac{2c_p}{\varrho} \frac{\chi k^2}{\omega^2 + \chi^2 k^4}. \quad (89.25)$$

PROBLEMAS

PROBLEMA 1. Hallar la función de correlación de las fluctuaciones del número de partículas de soluto en una disolución débil.

SOLUCIÓN. La densidad numérica n de partículas de soluto satisface la ecuación de difusión

$$\partial n / \partial t = D \Delta n,$$

siendo D el coeficiente de difusión. En una disolución débil, los valores simultáneos de la densidad en puntos diferentes están sin correlacionar (como no existe ninguna correlación instantánea en el caso de la densidad de un gas ideal); por tanto la función de correlación es

$$\langle \delta n(r_1) \delta n(r_2) \rangle = \bar{n} \delta(r_1 - r_2).$$

† Puede recordarse (ver *MF*, § 77) que el coeficiente de absorción hidrodinámico del sonido es siempre pequeño en los gases (se deduce necesariamente la desigualdad $\gamma \ll k$ de la condición $kI \ll 1$) y es pequeña en los líquidos en donde no existe ninguna dispersión significativa del sonido.

Análogamente a (89.25) tenemos

$$(\delta n^2)_{\omega \mathbf{k}} = 2\bar{n}k^2D/(\omega^2 + k^4D^2).$$

Aquí se desprecia la difusión térmica y, por consiguiente, pueden considerarse las fluctuaciones de n independientemente de las de la temperatura.

PROBLEMA 2. Hallar la función de correlación de las fluctuaciones de la presión en un líquido que tenga una segunda viscosidad grande y dispersiva $\zeta(\omega)$ (debido a una relajación lenta de un cierto parámetro).

SOLUCIÓN. La presencia de procesos de relajación lentos produce una segunda viscosidad de la forma

$$\zeta(\omega) = \frac{\tau\rho}{1-i\omega\tau} (u_\infty^2 - u_0^2),$$

en donde τ es el tiempo de relajación, u_0 la velocidad de equilibrio del sonido y u_∞ la velocidad del sonido para un valor constante del parámetro de relajación; ver *MF*, § 78. Las ecuaciones (89.20) y (89.21) y, por tanto, (89.22) son válidas también en presencia de dispersión. Poniendo $\zeta = \zeta(\omega)$ y despreciando los términos que surgen de η y α , se obtiene después de algunos cálculos

$$(\delta P^2)_{\omega \mathbf{k}} = \frac{2T\tau\rho u^4(u_\infty^2 - u_0^2)}{(u_0^2 - \omega^2/k^2)^2 + \omega^2\tau^2(u_\infty^2 - \omega^2/k^2)^2}.$$

§ 90. Expresiones de los operadores para los coeficientes de transporte

Las fórmulas (88.20) y (88.21) pueden examinarse de modo diferente si se leen de «derecha a izquierda», es decir, considerándolas como expresiones para la conductividad térmica y la viscosidad. Las funciones de correlación del primer miembro pueden expresarse entonces, de acuerdo con su definición, en función de los operadores de ciertas magnitudes que poseen significado microscópico; obtendremos por tanto, los coeficientes de transporte del líquido expresándolos en función de estos operadores.

Primeramente debemos señalar que la ausencia de cualquier tipo de correlación entre las fluctuaciones de los flujos de energía e impulso «aleatorios» en puntos diferentes del espacio (la función delta $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ en (88.20) y (88.21)) es una consecuencia de la aproximación hidrodinámica, que sólo es válida para valores pequeños del vector de onda. Con objeto de expresar explícitamente esta condición, escribamos las fórmulas en los componentes de Fourier respecto a las coordenadas espaciales [lo que equivale a sustituir los factores $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ por la unidad] y tomemos el límite $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Por ejemplo, la fórmula (88.20) contraída respecto a los subíndices i y k ,

$$(g^{(1)} \cdot g^{(2)})_\omega = 3\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hbar\omega T \coth(\hbar\omega/2T) \cdot \operatorname{re} \alpha(\omega),$$

se escribe como

$$\operatorname{re} \chi(\omega) = \frac{1}{3\hbar\omega T} \operatorname{tgh} \frac{\hbar\omega}{2T} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} (g^2)_{\omega\mathbf{k}}. \quad (90.1)$$

Es fácil ver que en esta fórmula podemos sustituir el flujo térmico «aleatorio» g por el flujo de energía total, que denominaremos \mathbf{Q} . Este último, como sabemos de la hidrodinámica, se compone del flujo de energía convectivo y del flujo térmico \mathbf{q} :

$$\mathbf{Q} = (\frac{1}{2} v^2 + w) \rho \mathbf{v} + \mathbf{q} \approx \rho w \mathbf{v} - \chi \nabla T + \mathbf{g}, \quad (90.2)$$

en donde w es la entalpía por unidad de masa del líquido; en la última expresión, omitimos el término que contiene una potencia superior de la velocidad de fluctuación v . Sin embargo, para valores pequeños de \mathbf{k} , las fluctuaciones de las magnitudes físicas reales v , T , ρ , etc., contienen una potencia extra de \mathbf{k} en comparación con las de los flujos aleatorios y, por consiguiente, las fluctuaciones de \mathbf{g} son las mismas que las de \mathbf{Q} en el límite $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Esto resulta inmediatamente evidente a partir del hecho de que los flujos \mathbf{g} y s_{ik} aparecen en la ecuación del movimiento (88.6)-(88.8) de las fluctuaciones hidrodinámicas únicamente como derivadas espaciales, pero las magnitudes físicas mencionadas aparecen también como derivadas temporales; cuando se toman los componentes de Fourier, estas últimas magnitudes son por tanto de orden k/ω respecto a las primeras.

A diferencia de \mathbf{g} , el flujo de energía total \mathbf{Q} tiene un significado mecánico directo y corresponde a un operador mecanicocuántico definido $\hat{\mathbf{Q}}(t, \mathbf{r})$ que se puede expresar en función de los operadores de las variables dinámicas de las partículas del medio. Con la definición de las funciones de correlación en función de los operadores (de Heisenberg) de las magnitudes correspondientes, llegamos así a la fórmula

$$\begin{aligned} \operatorname{re} \chi(\omega) &= \frac{1}{6\hbar\omega T} \operatorname{tgh} \frac{\hbar\omega}{2T} \times \\ &\times \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \int e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle \hat{\mathbf{Q}}(t, \mathbf{r}) \hat{\mathbf{Q}}(0, 0) + \hat{\mathbf{Q}}(0, 0) \hat{\mathbf{Q}}(t, \mathbf{r}) \rangle dt d^3x \quad (90.3) \end{aligned}$$

(M. S. Green 1954).

Sin embargo, se obtiene una representación más útil de la función $\chi(\omega)$ mediante una fórmula que expresa la función de correlación en función del conmutador de los operadores correspondientes.

Si $x_a(r)$ y $x_b(r)$ son dos magnitudes fluctuantes (iguales a cero en el equilibrio y comportándose del mismo modo frente a la inversión temporal) puede escribirse su función de correlación temporal, de acuerdo con (76.1) y (75.11), como

$$(x_a^{(1)} x_b^{(2)})_\omega = \coth \frac{\hbar\omega}{2T} \cdot \operatorname{re} \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle [\hat{x}_a(t, \mathbf{r}_1), \hat{x}_b(0, \mathbf{r}_2)] \rangle dt,$$

en donde [...] designa el comutador. Pasando al desarrollo de Fourier respecto a las coordenadas $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, obtenemos

$$(x_a x_b)_{\omega k} = \coth \frac{\hbar\omega}{2T} \cdot \operatorname{re} \int_0^\infty \int e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle [\hat{x}_a(t, \mathbf{r}), \hat{x}_b(0, 0)] \rangle dt d^3x. \quad (90.4)$$

Aplicando esta fórmula a la función de correlación $(Q^2)_{\omega k}$ y sustituyendo en (90.1) tenemos

$$\operatorname{re} \kappa(\omega) = \frac{1}{3\omega T} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \operatorname{re} \int_0^\infty \int e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle [\hat{Q}(t, \mathbf{r}), \hat{Q}(0, 0)] \rangle dt d^3x.$$

Los dos miembros de esta ecuación contienen las partes reales de las funciones de ω que tienden a cero cuando $\omega \rightarrow \infty$ y carecen de singularidades en el semiplano superior de la variable compleja ω . Si las partes reales de dichas funciones son iguales sobre el eje real de ω , se deduce que las propias funciones son iguales y llegamos a la fórmula final

$$\kappa(\omega) = -\frac{1}{3\omega T} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \int_0^\infty \int e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle [\hat{Q}(t, \mathbf{r}), \hat{Q}(0, 0)] \rangle dt d^3x. \quad (90.5)$$

Con objeto de deducir el valor estático de la conductividad térmica, debemos tomar también el límite $\omega \rightarrow 0$.

Análogamente, puede transformarse la fórmula (88.21) en una expresión de operadores para los coeficientes de viscosidad.

Si utilizamos el flujo del impulso total $\sigma_{ik} = -P\delta_{ik} + \sigma'_{ik}$ [con σ'_{ik} tomada de (88.9)] entonces en el límite $\mathbf{k} \rightarrow 0$ resultan cero las fluctuaciones de todos los términos excepto s_{ik} y así en este límite podemos sustituir la función de correlación $(s_{ik}s_{lm})_{\omega k}$ por $(\sigma_{ik}\sigma_{lm})_{\omega k}$. El resultado es

$$\begin{aligned} \eta(\omega) & \left(\delta_{ll}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl} - \frac{2}{3} \delta_{ik}\delta_{lm} \right) + \zeta(\omega) \delta_{ik}\delta_{lm} \\ & = \frac{1}{\omega} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \int_0^\infty \int e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \langle [\hat{\sigma}_{ik}(t, \mathbf{r}), \hat{\sigma}_{lm}(0, 0)] \rangle dt d^3x, \end{aligned} \quad (90.6)$$

en donde $\hat{\sigma}_{ik}(t, \mathbf{r})$ es el operador de densidad del flujo del impulso (H. Mori 1958). Contrayendo esta ecuación respecto a los pares de subíndices i, k y l, m o i, l y k, m obtenemos expresiones separadas para 9ζ o para $10\eta + 3\zeta$ respectivamente.

§ 91. Factor de forma dinámica de un líquido de Fermi

Las fórmulas (87.4)-(87.6) para el factor de forma a $T = 0$ no son aplicables a un líquido de Fermi puesto que su deducción supone la existencia (para ω y \mathbf{k} pequeñas) de la rama de fonones únicamente del espectro de excitaciones elementales. La teoría hidrodinámica de las fluctuaciones desarrollada en §§ 88 y 89 es también inaplicable a un líquido de Fermi. Ella exige el que se cumpla el requisito de que $kl \ll 1$ (siendo l el recorrido libre medio de la cuasipartícula), que ciertamente no se satisface en un líquido de Fermi, puesto que $l \propto T^{-2}$ y tiende a infinito cuando $T \rightarrow 0$. De aquí que deba utilizarse la ecuación de transporte para calcular el factor de forma de un líquido de Fermi.

Ahora resulta conveniente partir de las ecuaciones (86.17)-(86.20) que dan la relación existente entre el factor de forma y la susceptibilidad generalizada respecto a la acción de un campo $U(t, \mathbf{r})$ sobre el líquido. En componentes de Fourier también respecto a las coordenadas, la definición (86.18) se reduce a

$$\delta\bar{n}(\omega, \mathbf{k}) = -\alpha(\omega, \mathbf{k}) U_{\omega\mathbf{k}}. \quad (91.1)$$

Consideraremos únicamente el caso $T = 0$. Entonces el factor de forma dinámico se expresa en función de $\alpha(\omega, \mathbf{k})$ por

$$\bar{n}\sigma(\omega, \mathbf{k}) = \begin{cases} 2\hbar \operatorname{im} \alpha(\omega, \mathbf{k}), & \omega > 0, \\ 0, & \omega < 0. \end{cases} \quad (91.2)$$

Se calcula la densidad de la perturbación $\delta\bar{n}(\omega, \mathbf{k})$ mediante la ecuación de transporte, en donde puede despreciarse la integral de colisión (cuando $T \rightarrow 0$). Estos cálculos de los realizados para el sonido cero en § 4 únicamente en la adición del término

$$U(t, \mathbf{r}) = U_{\omega\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

en la energía de la cuasipartícula. En correspondencia, la derivada $\partial\varepsilon/\partial\mathbf{r}$ (4.3) contiene un término adicional $\partial U/\partial\mathbf{r} = i\mathbf{k}U$ y a la izquierda de la ecuación de transporte (4.8) existe un término

$$-i\mathbf{k}U \cdot \partial n_0 / \partial \mathbf{p} = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}U\delta(\varepsilon - \varepsilon_F).$$

Se busca la solución de la ecuación de transporte en la forma

$$\left. \begin{aligned} \delta n(\mathbf{p}) &= \delta n_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \\ \delta n_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{p}) &= -\delta(\epsilon - \epsilon_F) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* p_F} \chi(\mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \mathbf{p}/p. \end{aligned} \right\} \quad (91.3)$$

Este es el componente de Fourier de la perturbación de la distribución de los impulsos de las cuasipartículas. La variación requerida en la densidad del número total de cuasipartículas (densidad numérica de partículas reales) viene dada por la integral

$$\delta \bar{n}(\omega, \mathbf{k}) = \int \delta n_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{p}) \cdot 2 d^3 p / (2\pi\hbar)^3 = -\frac{1}{2\hbar} \int \chi(\mathbf{n}) \frac{do}{4\pi} \cdot U_{\omega\mathbf{k}}.$$

La definición de la función $\chi(\mathbf{n})$ en (91.3) difiere de la correspondiente a $v(\mathbf{n})$ en (4.9) por lo que se refiere a la normalización: aquí se escoge de modo que la fórmula (91.2) se reduzca a

$$\bar{n}\sigma(\omega, \mathbf{k}) = \text{im} \int \chi(\mathbf{n}) do / 4\pi, \quad \omega > 0. \quad (91.4)$$

Para el propio $\chi(\mathbf{n})$ tenemos la ecuación

$$(\omega - v_F \mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \chi(\mathbf{n}) - v_F \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} \int F(\vartheta) \chi(\mathbf{n}') do' / 4\pi = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{n} \cdot 2p_F^2 / \pi^2 \hbar^2, \quad (91.5)$$

que difiere del segundo miembro de (4.11).

La ecuación (91.5) no contiene explícitamente magnitudes imaginarias. La presencia de una parte imaginaria de su solución $\chi(\mathbf{n})$ se debe, por tanto, únicamente al paso alrededor de los polos en las integrales que surgen durante el proceso de resolución. La regla para estos pasos depende del requisito de que el campo $U \propto e^{-i\omega t}$ aplicado al sistema se aplica adiabáticamente desde $t = -\infty$ hacia adelante; con este objeto debe reemplazarse su frecuencia ω por $\omega + i0$.

La forma específica de la solución depende de la forma de la función de interacción de las cuasipartículas $F(\vartheta)$. Ilustraremos el proceso de resolución y las propiedades resultantes en el ejemplo más sencillo en el que $F \equiv F_0$, una constante.

En este caso, la solución de la ecuación (91.5) tiene la forma

$$\chi(\mathbf{n}) = C v_F \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} / (v_F \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} - \omega - i0), \quad (91.6)$$

siendo C una constante. Se determina esta constante sustituyendo (91.6) de nuevo en (91.5), lo que nos da

$$C(1 + I) = 2m^* p_F / \pi^2 \hbar^2, \quad (91.7)$$

en donde

$$I = \int \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}' v_F}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}' v_F - \omega - i0} \cdot \frac{d\omega'}{4\pi}.$$

El integrando depende únicamente del ángulo existente entre \mathbf{n}' y \mathbf{k} , de modo que una sustitución evidente da

$$I(s) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{x - s - i0} = 1 - \frac{1}{2} s \log \left| \frac{s+1}{s-1} \right| + \begin{cases} \frac{1}{2} i s \pi, & s < 1, \\ 0, & s > 1, \end{cases} \quad (91.8)$$

en donde $s = \omega/kv_F$; la parte imaginaria de la integral se determina mediante la regla (8.11).

Sustituyendo la función $\chi(\mathbf{n})$ de (91.6)-(91.8) en (91.4) obtenemos el factor de forma dinámico

$$\bar{n}\sigma(\omega, k) = \frac{2m^* p_F}{\pi^2 \hbar^2} \operatorname{im} \frac{I(s)}{1 + F_0 I(s)} \quad (91.9)$$

(A. A. Abrikosov y I. M. Khalatnikov 1958). De acuerdo con (91.8) resulta no nula para $s < 1$, es decir para todo $\omega < kv_F$.

Si $F_0 > 0$, puede propagarse el sonido cero en un líquido de Fermi con una velocidad u_0 determinada por (4.15):

$$1 + F_0 I(s_0) = 0, \quad s_0 = u_0/v_F.$$

En el caso de valores de s próximos a s_0 , la expresión (91.9) se reduce a

$$\text{constante} \times \operatorname{im} 1/(s - s_0);$$

de acuerdo con el comentario realizado antes, $s = \omega/kv_F$ ha de tomarse como $s + i0$. Esto significa que $\sigma(\omega, k)$ contiene también un término en función delta que tiene la forma constante $\times \delta(s - s_0)$ o sea

$$\sigma(\omega, k) = \text{constante} \times k\delta(\omega - ku_0). \quad (91.10)$$

Este término es la contribución al factor de forma procedente de la rama del sonido cero del espectro de energía del líquido de Fermi; es exactamente análoga a la contribución de los fonones (87.4) al factor de forma de un líquido de Bose.

La existencia de dicho término no depende, como es natural, de la hipótesis de que F sea constante; es una propiedad general de un líquido de Fermi en el que puede propagarse el sonido cero. Únicamente el valor del coeficiente constante

en (91.10) depende de la ley de interacción de las cuasipartículas. La ecuación (91.5), con cero en el segundo miembro, es la ecuación del sonido cero; por tanto, la solución de la ecuación inhomogénea tiene un polo en $\omega/k = u_0$.

Resulta evidente a partir de la forma de (91.5) que su solución depende de los parámetros ω y k únicamente a través de su cociente ω/k . Por consiguiente, el factor de forma dinámico será también una función de este cociente. El factor de forma estático

$$\sigma(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi}$$

tendrá en consecuencia la forma

$$\sigma(k) = \text{constante} \times k. \quad (91.11)$$

Esto significa que la función de correlación espacial de un solo instante de las fluctuaciones de densidad a $T = 0$ en un líquido de Fermi obedece a la ley $v(r) \propto r^{-4}$, como en un líquido de Bose.

Finalmente, podemos señalar que el factor de forma dinámico de un gas ideal de Fermi se obtiene a partir de (91.9) tomando el límite $F_0 \rightarrow 0$:

$$\sigma(\omega, k) = m^2 \omega / \pi \hbar^2 \bar{n} k, \quad 0 < \omega < k v_F.$$

El factor de forma estático es entonces

$$\sigma(k) = \int_0^{k v_F} \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{p_F^2 k}{(2\pi\hbar)^2 \bar{n}},$$

de acuerdo con el resultado de la Parte 1, § 117, problema 1.

ÍNDICE ALFABÉTICO

- Aislante sólido, espectro electrónico, 320.
Aleación superconductora, 252.
Anillo vórtices, 133.
Antiferromán, 334.
Antiferromagneto, estado fundamental, 364.
—, magnón, 363.
Autoenergía, función, 63, 147.
- Banda conducción, 321.
— energía, número, 262.
— valencia, 321.
BCS, modelo, 202.
Bohr, magnetón, 338.
Boltzmann, energía libre gas, 102.
—, fórmula, 324.
Bose-Einstein, condensado, 120.
—, fórmula distribución, 100.
—, líquido cuántico, excitaciones elementales, 99.
—, —, función Green, 138.
—, —, técnica diagramática, 145.
Boson, hamiltoniano sistema, 114.
Broglie, longitud onda, 17.
- Calor específico, término corrección, 362.
Campo crítico inferior, 222.
— — superior, 222.
— efectivo, 364.
— electromagnético, fluctuaciones, 375.
— —, operador interacción, 371.
— periódico, electrón, 261.
Ciclotrón, masa, 278.
Círculo lineal, fluctuaciones corriente, 383.
Condensado Bose-Einstein, 120.
—, función onda, 119.
Commutación, regla, 341.
Cooper, efecto, 179, 255.
- Corriente normal, 202.
— superconductividad, 202.
Cristal cúbico, energía anisotropía, 339.
—, estructura magnética, 333.
— uníaxico, energía anisotropía, 338.
Cuantización cuasiclásica, regla, 302.
Cuanto flujo magnético, 207.
Cuasiimpulso cinético, 276.
— electrón, 263.
— generalizado, 273.
Cuasipartícula, 1.
—, desintegración, 152.
—, flujo, 10.
—, función interacción, 9.
—, masa efectiva, 7.
—, potencial químico, 8.
—, relación dispersión, 43.
Cuerpo negro, radiación, 380.
— no magnetoactivo, 372.
— sólido, fuerzas interacción molecular, 397, 402.
- Debye, frecuencia, 314.
Densidad carga media, 413.
— —, operador, 413.
— condensado - temperatura, relación, 124.
— corriente, 123.
— —, operador, 111.
— — superconductividad, 208.
—, función correlación instantánea, 434.
— momento magnético, 335.
— numérica electrones superconductores, 203.
— — partículas reales, 448.
— perturbación, 447.
— superfluida, comportamiento, 127.
Desintegración cuasiparticulas, 152.

- Diagrama esqueleto, 64.
 — peligroso, 74.
 —, técnica, 54.
- Dispersión, relación, 1, 167.
- Dominio magnético, 311.
- Dyson, ecuación, 70.
- Ecuación movimiento, 276, 435.
 — — macroscópica, 364.
- Electrón Bloch, simetría traslación funciones onda, 289.
 — conducción, 294.
 — fonón, interacción, 311.
 — libre, función Green, 313.
 — red, tensor masa efectiva, 284.
 — semiconductor, 323.
 — superconductor, densidad numérica, 203.
- Electrones red, efecto campo externo 271.
- Energía anisotropía, cristal uniáxico, 338.
 —, disipación, 335.
 — electrón conducción, 321.
 — interna, contribución magnones, 346.
 —, intervalos vacíos, 262.
 — libre cristal, 365.
 — magnón, 354, 366.
- Entalpía unidad masa líquido, 445.
- Entropía, 181.
 —, fluctuación isobárica, 441.
- Esfera Fermi, 2.
- Espectro, 339.
 — electrónico aislantes sólidos, 320.
 — — cerca punto degeneración, 326.
 — energía, determinación a partir función Green, 39.
 — — magnón, 340.
 — Fermi, 2.
 — magnones, 334.
 —, propiedades, 157.
- Estado mezcla, estructura, 225.
 — mixto o mezcla, 222.
- Excitaciones elementales, 1, 8.
- Excítón, 320.
 — Frenkel, 322.
- Excítón Wannier-Mott, 322.
- Factor forma dinámico medio, 424.
 — — estático líquido, 424.
 — —, reglas suma, 428.
- Fase conductora y normal, tensión superficial frontera, 215.
- Fermi, esfera, 2.
 —, espectro, 2.
- , excitaciones elementales en líquido cuántico, 1.
- , líquido. Distribución impulsos partículas, 47.
 —, —. Estados ligados partícula-hueco, 80.
 —, —. Factor forma dinámica, 447.
 —, — normal, 1-31.
 —, —. Ondas spin, 22.
- , — Susceptibilidad magnética, 13.
- , superficie tipo hueco, 8, 295.
- , velocidad cuasipartícula superficie, 7.
- Ferrita, 334.
- Ferromagneto, 337.
 —, coeficiente giromagnético, 337.
 — estado fundamental, 364.
 —, magnones, 339, 345.
 — uniáxico, 339.
- Feynman, diagrama, 57.
- Filamento vórtices, 226.
 — — cuantizados, 129-137.
- Fluctuación campo, funciones espectrales, 376.
 — corriente, función espectral, 384.
 — densidad, función correlación, 423.
 — disipación, teorema, 375, 427.
 — electromagnética, fórmulas básicas teoría, 375.
 — — medio infinito, 377.
 —, funciones correlación, 439.
 — hidrodinámica, 423, 434.
 — — medio infinito, 438.
 — isobárica entropía, 441.
 —, trabajo mínimo necesario, 434.
- Flujo magnético,, cuántico, 207.
- Fonón, coeficiente decaimiento, 156.
 —, función Green, 312.
 — líquido, 109.
- Fotón, función Green en medio material, 369.
- Fourier, componentes, 413.
- Frecuencia Debye, 314, 317.
 — resonancia antiferromagnética, 367.
 — — ferromagnética, 343.
- Frenkel, excitón, 322.
- Fuerza integración moléculas entre cuerpos sólidos, 397, 402.
 — van der Waals, 389.
- Función correlación, 407.
 — —, componentes Fourier ordinarios, 439.
 — Green anómalas, 141.

- Función vértice, 67.
 — — pequeñas transferencias impulso, 73.
- Gas Bose casi ideal degenerado, 114.
 — — — —, filamento vórtices, 136.
 — Fermi casi ideal, función Green, 91.
 — — ideal, función Green, 45.
 — — superfluido, 186.
 — — — —, funciones Green temperatura, 198.
 — superfluido, funciones Green, 191.
- Ginzburg-Landau, ecuaciones, 208, 212.
 — — — —, parámetro, 213.
- Green, función, 36.
 — — avanzada, 167.
 — — — —, dos partículas, 66.
 — — — —, fotón en medio material, 369.
 — — — —. Identidades para derivadas, 83.
 — — — —, medio infinito homogéneo, 396.
 — — — — retardada, 165.
 — — — — sistema macroscópico, 33.
 — — — — temperatura de un fotón en un medio, 384.
 — — — — temporal, 171.
 — — — — funciones anómalas, 141.
- Haas-van Alphen, efecto, 303.
- Hamilton, ecuaciones, 16.
- Hamiltoniano efectivo, 235.
 —, función propia, 289.
 — Heisenberg, 352.
 — sistema partículas interactivas, 35.
 — spin, 351.
- Hankel, función, 229.
- Heisenberg, hamiltoniano, 352.
 —, operadores, 34, 372.
- Helio II, 107.
 — líquido, relación dispersión excitaciones elementales, 101.
- Hidrodinámica, ecuaciones, 435.
- Huecos, semiconductor, 323.
- Imanación espontánea, contribución magnones, 346.
 —, teoría oscilaciones, 310.
 —, término corrección, 362.
- Impulso límite - densidad, deducción relación, 88.
- Índice refracción real, 379.
- Integral colisión, 15.
 — intercambio, 352.
- Intensidad oscilador, 404.
- Interacción electrón-fonón, 311.
 — magnones, 358.
 —, representación, 50.
 — — onda larga, 390.
- Josephson, efecto, 238.
- Kernel, 75.
- Kramers-Kronig, relación, 167.
- Kubo, fórmula, 372.
- Landau, amortiguamiento, 19.
 —, niveles, 303.
 —, sub-bandas, 282.
 —, teoría, 21, 88, 179, 208.
- Larmor, frecuencia, 272.
- Línea externa, 60.
 — interna, 60.
 — vórtices, 130.
- Líquido Bose, funciones Green, 138.
 — —, técnica diagramática, 145.
 — —, comportamiento asintótico función correlación, 407.
 — — electrones metal, regla cuantización cuasiclásica, 302.
 — — entalpía unidad masa, 445.
 — — factor forma dinámico, 423.
 — — — — estático, 424.
 — — Fermi, factor forma dinámico, 447.
 — — fonón, 109.
 — — infinito reposo, fluctuación hidrodinámica, 438.
 — — velocidad sonido, 99.
- London, profundidad penetración, 205.
 —, superconductor, 206.
- Longitud coherencia, 185.
 — onda spin, 334.
 — scattering, 25.
- Luttinger, teorema, 296.
- Macdonald, función, 229.
- Magnetón Bohr, 338.
- Magnitud fluctuante, ecuaciones movimiento, 435.
 — termodinámica, cálculo a partir función Green, 49.
- Magnon, 334.
 — antiferromagneto, 363.
 —, decaimiento, 344.
 —, energía, 354, 366.

- Magnón, espectro, 334.
 —, — energía, 340.
 — ferromagneto, 339, 345.
 —, interacción, 358, 362.
 —, momento magnético intrínseco, 346.
 —, velocidad, 344.
- Matriz densidad, componentes Fourier, 38.
- Matsubara, operador, 171, 390.
- Maxwell, ecuaciones, 337, 412.
 —, —. Función Green, 374.
 —, — generales, 205.
- Medio homogéneo, función Green, 375.
- Meissner, efecto, 204.
- Metal, función Green electrones, 299.
 — normal, espectro electrónico, 293.
 —, superconductividad, 201.
 —, susceptibilidad magnética, 303.
- Modelo BCS, 202.
- Momento en precesión libre, ecuación movimiento, 337.
 — magnético, densidad, 335.
 —, ecuación continuidad, 338.
 —, tensor flujo, 338.
- Néel, punto, 367.
- Nivel energía cuasiclásico, 281.
- Onda Cherenkov sonido cero, 19.
 —, relación dispersión, 334.
 — sonora, energía líquido, 110.
 — spin, 22, 334.
 — — monocromática plana, ecuaciones movimiento, 366.
- Operador coeficiente transporte, expresiones, 444.
 — densidad carga sistema, 413.
 — — corriente, 111.
 — — eléctrica, 371.
 — hermítico, 265.
 — interacción campo electromagnético, 371.
 — masa, 63.
 — Matsubara, 171, 390.
 — polarización, 387.
 —, regla conmutación, 111.
 — traslación magnético, 290.
- Oscilador, intensidad, 404.
- Partícula, densidad numérica media, 423.
 — real, densidad numérica, 448.
- Pauli, matrices, 9.
 —, vector matricial, 266.
- Permitividad, expresión operador, 412.
 — longitudinal, 412.
 — transversal, 412.
- Pippard, caso, 206.
- Plasma degenerado, 414.
- Polarización, operador, 387.
- Potencial campo, 369.
 — deformación, 312.
 — químico gas cero absoluto, 30.
- Punto Néel, 367.
- Radiación cuerpo negro, 380.
 — electromagnética, propiedades estadísticas, 369.
- Radio Larmor órbita, 302.
- Red magnética, 291.
- Renormalización, constante, 44.
 —, procedimiento, 25.
- Resonancia ferromagnética, frecuencia, 343.
- Rotación potencial, 130.
- Rotón, 101.
- Ruptura magnética, 277.
- Schrödinger, ecuación, 235.
 —, operador densidad, 424.
 —, operadores, 34.
- Semiconductor cristalino puro, espectro energético, 323.
 — dopado, 324.
 —, electrones, 323.
 —, huecos, 323.
- Semimetal, 297.
- Serie escalera, 72.
- Sistema ferromagnético, 333.
 — partículas interactivas, hamiltoniano, 35.
- Sonido cero, 15, 18.
 —, velocidad líquido, 99.
- Spin, hamiltoniano, 351.
 —, longitud onda, 334.
 —, onda, 334.
- Suma, reglas, 428.
- Superconductividad, corriente, 202.
 —, densidad corriente, 208.
- Superconductor London, 206.
 —, profundidad penetración campo magnético, 250.
 —, relación entre corriente y campo magnético, 242.
 —, tipos, 221.
- Superfluidez, 103.
- Susceptibilidad generalizada, 372.

- Susceptibilidad magnética encima punto fusión, 234.
- Temperatura, funciones Green, 170, 171.
- , técnica diagramática funciones Green, 174.
- Tensión Van der Waals, tensor, 389.
- Tensor flujo momento, 338.
- masa efectiva electrón red, 284.
- tensiones van der Waals, 389.
- Teoría macroscópica, interacción van der Waals, 389.
- Transformación «gauge», 84, 240.
- Transporte, ecuación, 447.
- Trayectoria cuasiclásica, 276.
- electrón o hueco, 279.
- Umbral desintegración, 152.
- — dos cuasipartículas con impulsos paralelos, 162.
- — rotones, 160.
- Van der Waals, tensor tensiones, 389.
- Vértice diagrama, 60.
- Wannier-Mott, excitón, 322.
- Wick, teorema, 55.

