universidad de buenos aires - exactas
departamento de física
Juan José Giambiagi

La materia “cuántica”

Alberto Camjayi

Las interacciones

- ¿Cuál es el rol de las interacciones en Materia Condensada?
- ¿Podemos aprender algo más allá de esta área particular?
- ¿Las correlaciones aparecen solo cuando las interacciones son importantes?
- ¿Qué nuevos estados aparecen cuando las correlaciones son importantes?

Las interacciones

Los electrones de Bloch

Electrones en un potencial periódico

Las interacciones

Los electrones de Bloch

- Fermiones: principio de exclusión.
- Potencial externo periódico.
- Son partículas independientes.
- Los autoestados son onda planas con una modulación de amplitud.
- El espectro puede presentar “gaps”.

Las interacciones

Los electrones de Bloch

Un electrón moviéndose en un potencial periódico:

$$H^0\phi_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V^{\text{ion}}(\mathbf{r})\right]\phi_{\mathbf{k},\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}}\phi_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r})$$

donde $\phi_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r})$ es la función de onda de Bloch y $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ la energía de banda.

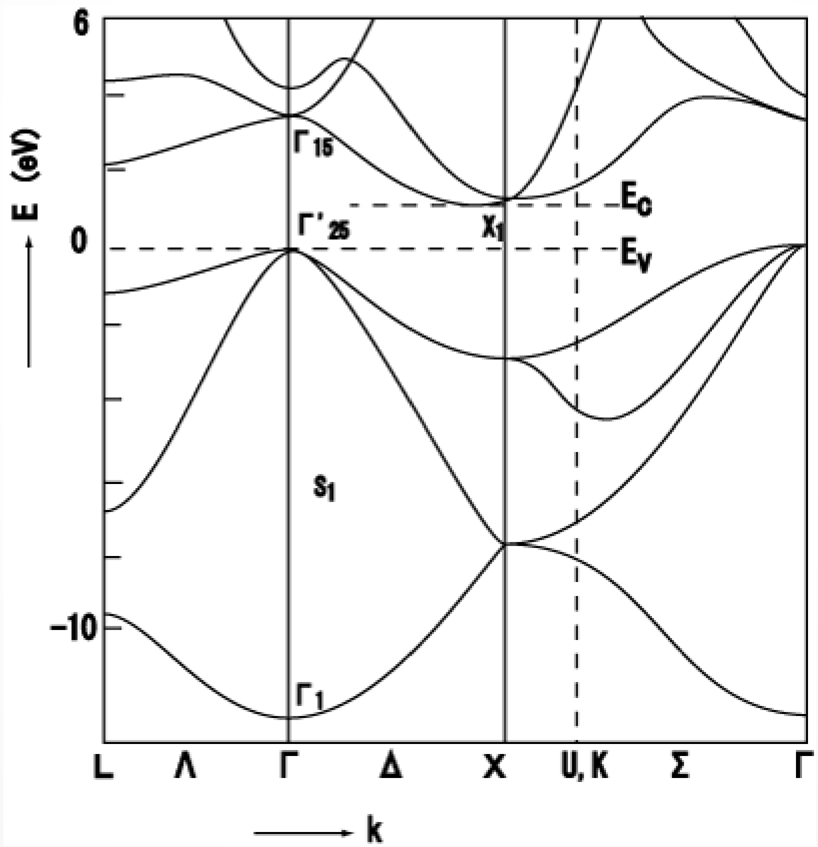
Como el Hamiltoniano es separable $\mathcal{H}^0 = \sum_{i=1}^{N} H^0[\nabla_i, \mathbf{r}_i]$, sus autoestados y autoenergías:

$$\boxed{\Psi^{\text{Fock}}_{[\mathbf{k},\sigma]} = \det_{ij}\left[\phi_{\mathbf{k_i},\sigma_i}(\mathbf{r}_j)\right] \qquad E_{[\mathbf{k}]} = \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_{\mathbf{k}_i}}$$

Las interacciones

Los electrones de Bloch

Electrones en un potencial periódico. **Teoría de bandas.**



Las interacciones

Los electrones con interacción

¿Qué representan las bandas?

En Bloch, electrones independientes, las pensamos como las energías de 1 partícula.

Las interacciones

Los electrones con interacción

¿Qué representan las bandas?

Alternativamente, podemos pensarlo como las energías que se obtienen al agregar (o sacar) un electrón: el espectro de excitaciones de una partícula.

Si bien esta idea se traslada al caso con interacciones, tiene un problema.

Las interacciones

Los electrones con interacción

¿Qué representan las bandas?

El espectro de excitaciones de una partícula.

Las energías dependen del número de partículas y la temperatura.

Las bandas no son rígidas

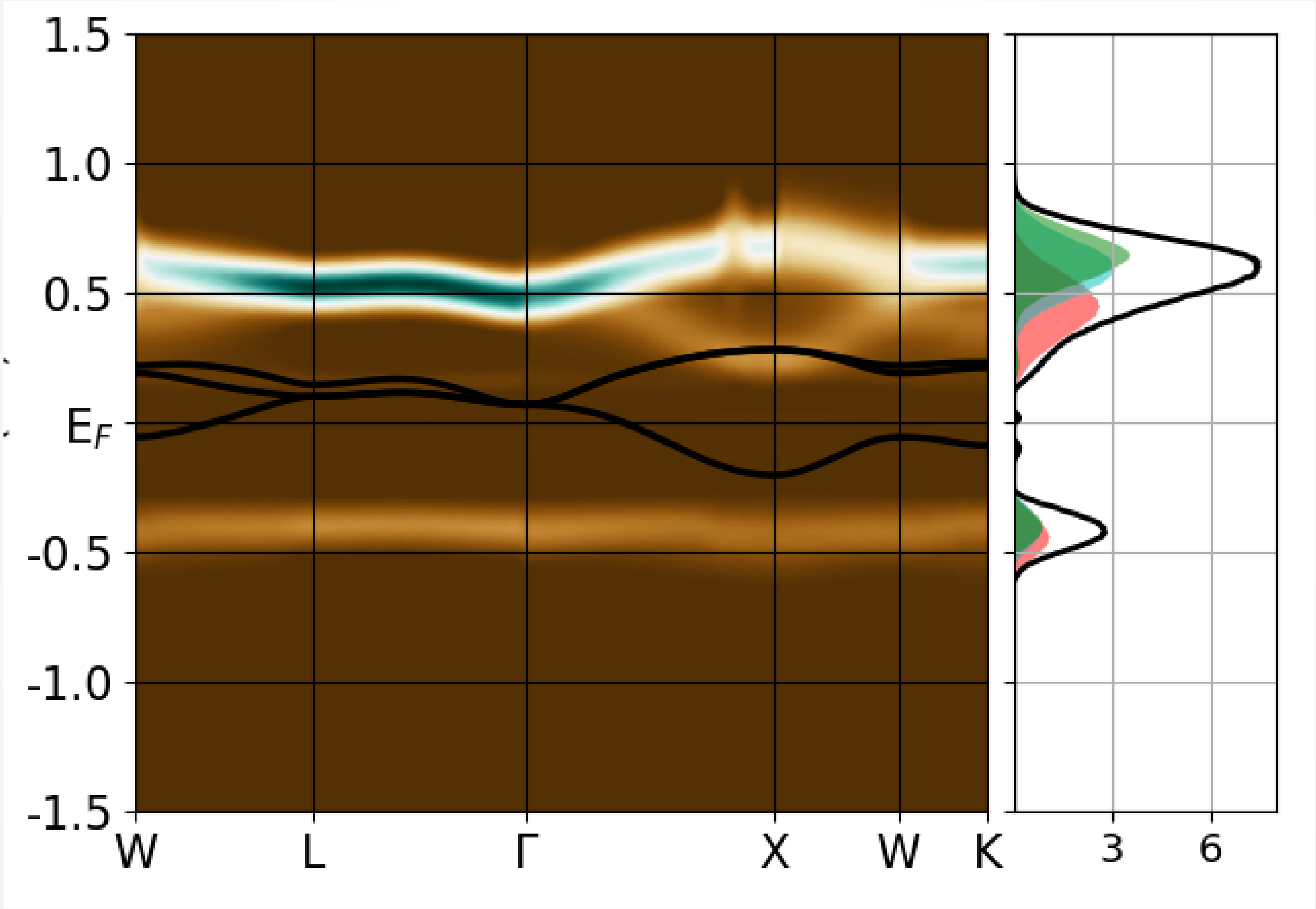
Las interacciones

Los electrones con interacción

El espectro de 1 partícula, en el caso general, se describe con la ***función espectral*** $A(\mathbf{k},\omega)$, contenida en la parte imaginaria de la función de Green.

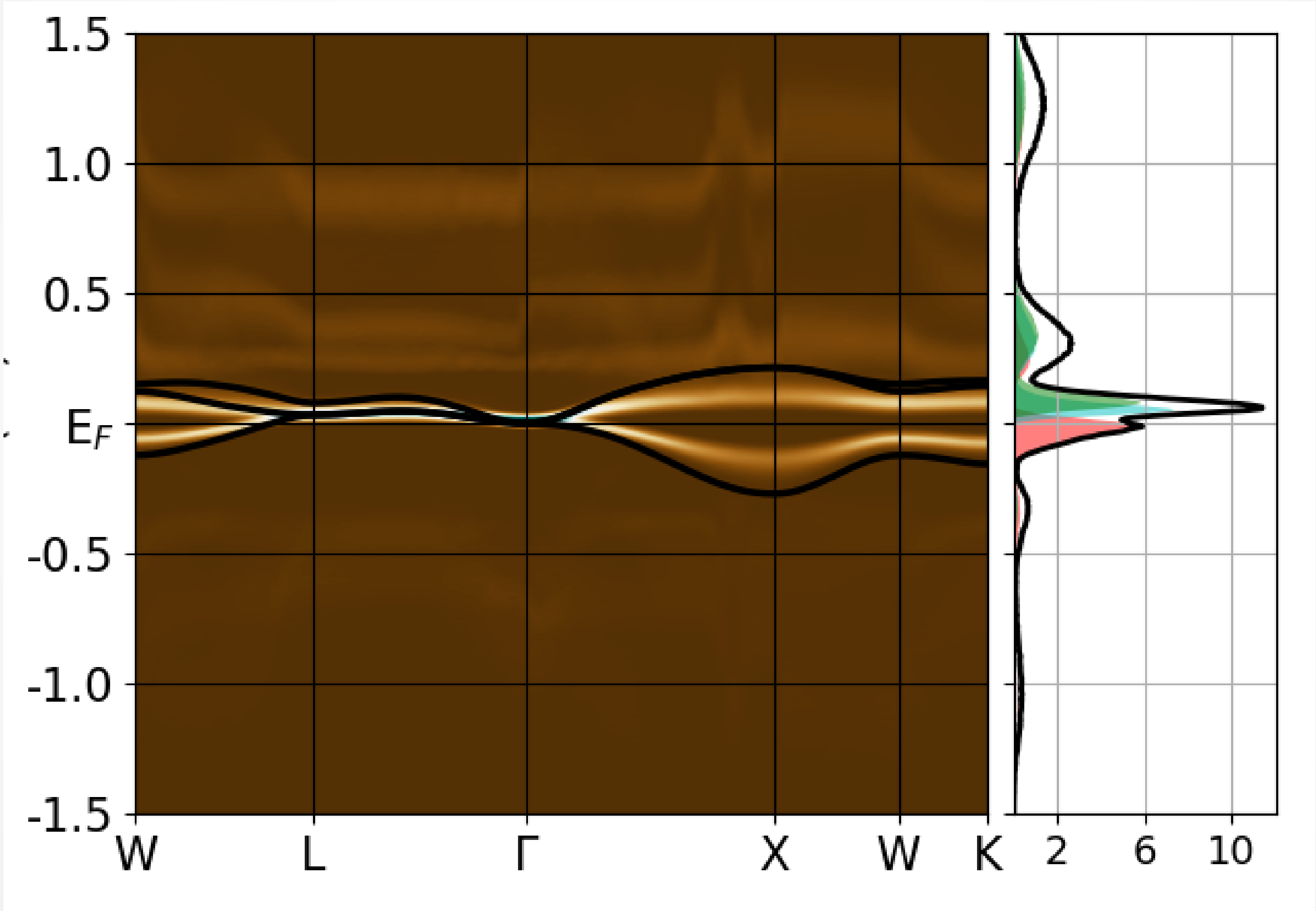
Las interacciones

Función espectral



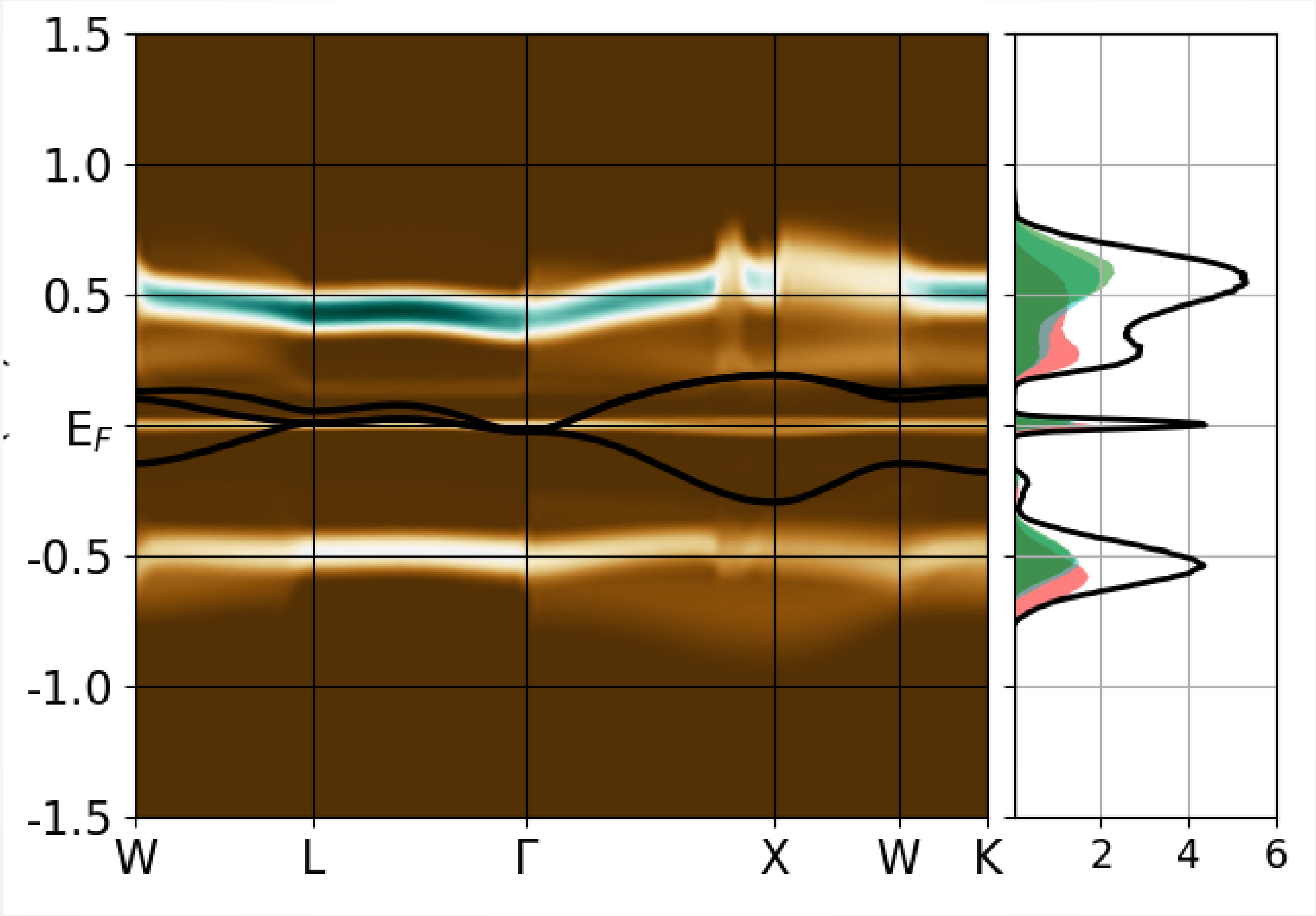
Las interacciones

Función espectral



Las interacciones

Función espectral



Coulomb ¿dónde estás?

Los metales simples

¿Por qué funcionan tan bien las teorías de electrones libres? Drude, Sommerfeld, Bloch.

¿La interacción de Coulomb es despreciable frente a la energía cinética?

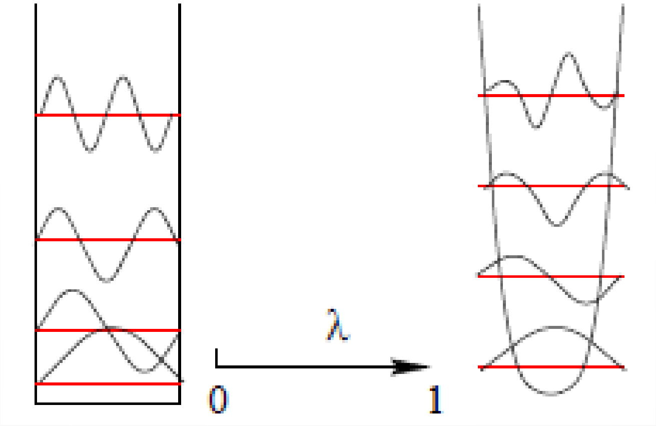
La respuesta es **no**, de hecho a baja densidad, donde Coulomb domina, el gas de electrones puede cristalizar en un "*cristal de Wigner*".

Coulomb ¿dónde estás?

Teoría de Landau: líquidos de Fermi

Continuidad adiabática:

- Los números cuánticos son determinados por simetrías, son "robustos" mientras estás no se rompan.
- Las excitaciones elementales del sistema con interacciones se pueden conectar "adiabáticamente" con las del sistema libre.



Coulomb ¿dónde estás?

Teoría de Landau: líquidos de Fermi

Continuidad adiabática:

- Las excitaciones del sistema interactuante se denominan “cuasi-partículas” y son clasificadas por los mismos números cuánticos.
- El sistema sin interacciones provee un sistema de referencia desde el cuál el verdadero fundamental puede obtenerse por perturbaciones, ¡aunque quizá a orden infinito!

Coulomb ¿dónde estás?

Los metales simples

- El estado fundamental de un gas de electrones es la esfera de Fermi completa hasta la superficie de Fermi.
- Las excitaciones elementales son excitaciones de partícula – agujero.
- Lo mismo debe ser cierto para el sistema con interacciones.

Coulomb ¿dónde estás?

Los metales simples

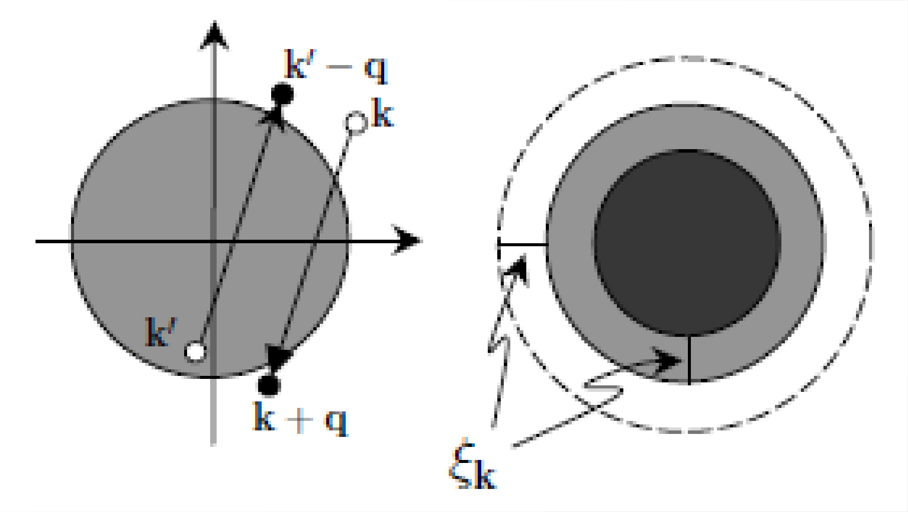
- ¿Cuál es la vida media de las cuasi-partículas de energía:

  $\varepsilon = |\varepsilon_k - \varepsilon_F|$?

- Regla oro de Fermi: $$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} \propto \sum_{\text{est. final } j} |V_{ij}| \delta(\varepsilon_j - \varepsilon)$$

- Ppio de exclusión y conservación:

  poco espacio de fases.



Coulomb ¿dónde estás?

Los metales simples

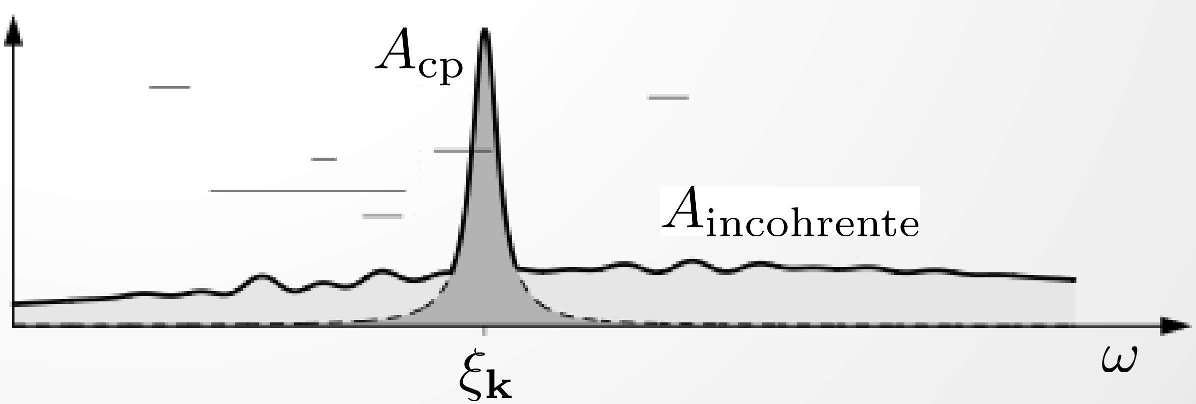
- ¿Cuál es la vida media de las cuasi-partículas?

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} \propto \frac{|V|^2}{\varepsilon_F^3}\varepsilon^2; \quad \varepsilon \ll \varepsilon_F$$

- Consecuencias:

a) Misma estadística

b) Masa, susceptibilidad y compresibilidad “renormalizados”.



Transición de Mott

Problemas con la teoría de bandas

- Algunos compuestos no eran descritos adecuadamente.
- Algunos materiales con bandas semillenas se comportaban como aisladores.

R. Peierls, Proc. Phys. Soc. London, Ser. **A 49**, 72 (1937).

> *"it is quite possible that the electrostatic interaction between the electrons prevents them from moving at all. At low temperatures the majority of the electrons are in their proper places in the ions. The minority which have happened to cross the potential barrier find therefore all the other atoms occupied, and in order to get through the lattice have to spend a long time in ions already occupied by other electrons. This needs a considerable addition of energy and so is extremely improbable at low temperatures."*

Transición de Mott

Hamiltoniano de Mott – Hubbard

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} \left(c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + \mathrm{h.c.} \right) + \sum_{i} U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- A llenado mitad:

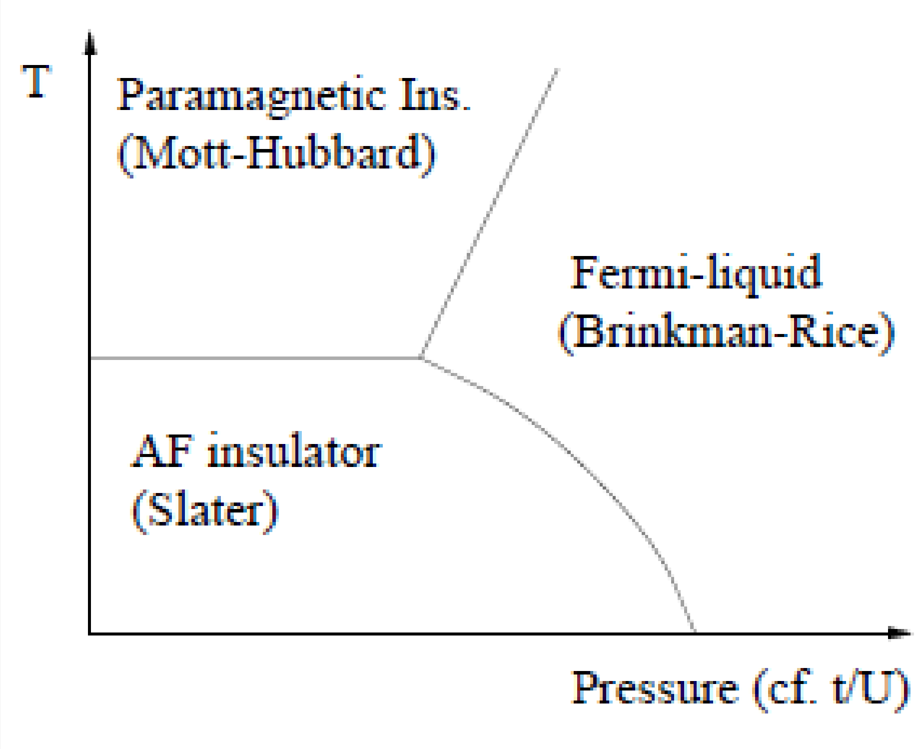
  $U \ll t$: líquido de Fermi.

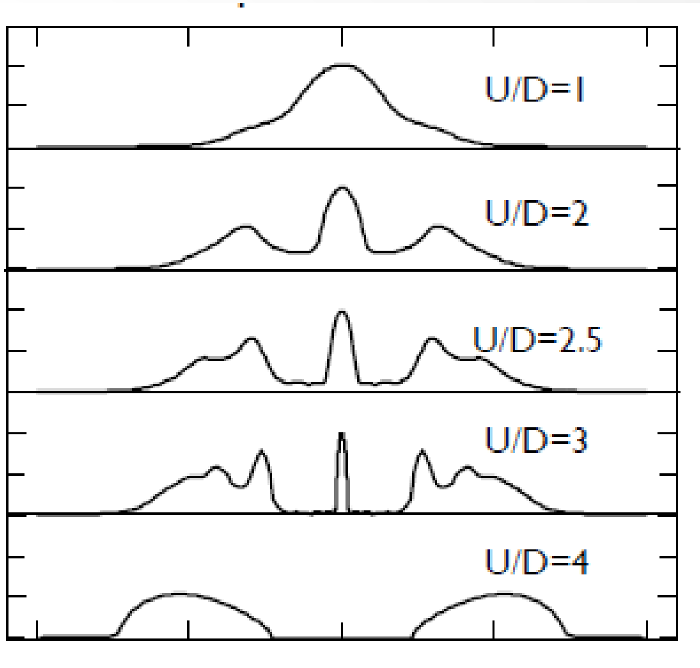
  $U \gg t$: electrones localizados. Doble ocupación cuesta energía (gap): *Aislador de Mott*.

- En el límite $U \to \infty$ se obtiene el Hamiltoniano de Heisenberg.

Transición de Mott

Hamiltoniano de Mott – Hubbard





- No existe una teoría completa. Grandes avances por DMFT.

Transición de Mott

Hamiltoniano de Mott – Hubbard

- Fuera de llenado entero, la física es más compleja.
- Las cuasi-partículas todavía son “electrones” pero su estructura es muy distinta a los estados de Bloch.
- Las fases descriptas incluyen: metal y aislador “correlacionados”, antiferromagnetismo, superconductividad.
- Si se incluyen grados de libertad orbitales/espaciales: transiciones selectivas, ondas de densidad, etc.

Superconductividad

El rol de los fonones

$$\underbrace{H = \sum_k \varepsilon_k c^\dagger_{k,\sigma} c_{k,\sigma} + \sum_q \hbar\omega_q a^\dagger_q a_q}_{H_0} + \underbrace{\sum_{k,q} \left(M c^\dagger_{k+q,\sigma} c_{k,\sigma} a_q + \text{h.c.} \right)}_{H_1}$$

Eliminamos los fonones haciendo una transformación canónica (transformación de Schrieffer – Wolf):

$$H \rightarrow H' = e^{-S} H e^{S}$$

$$e^{-S} H e^{S} = H + [H, S] + \frac{1}{2} \left[[H, S], S\right] + \ldots$$

Superconductividad

El rol de los fonones

Pidiendo $H_1 + [H_0, S] = 0$ podemos eliminar el término de interacción a primer orden:

$$H' = H_0 + [H_1, S] + \mathcal{O}(M^3)$$

Resolviendo

$$H' = H_0 + \sum_{k,k',q} |M|^2 \frac{\hbar\omega_q}{\left(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}\right)^2 - \hbar^2\omega_q^2} c^\dagger_{k'+q,\sigma'} c_{k',\sigma'} c^\dagger_{k-q,\sigma} c_{k,\sigma}$$

Si $|\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}| < \hbar\omega_q$ el *potencial es **atractivo***.

Superconductividad

La teoría BCS

- El Hamiltoniano BCS es un Hamiltoniano *modelo*, que captura la física de baja energía.
- BCS lo resolvieron utilizando campo medio (Hartree-Fock) con términos “anómalos”.
- En campo medio se lo puede diagonalizar introduciendo los “bogoliubones” $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}$:

$$H_{\mathrm{BCS}} \approx E_0 + \sum_{\mathbf{k},\sigma} E(k)\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}\gamma_{\mathbf{k},\sigma}; \quad E(k) = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}$$

Superconductividad

La teoría BCS

- Inestabilidad de Cooper: la superficie de Fermi es inestable ante la formación de pares.
- Los pares tienen estadística bosónica: pueden “condensar”.
- Schrieffer propuso que la función de onda es un estado coherente de “pares”:

$$|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \exp\left[\phi_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}\right] |0\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \phi_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}\right) |0\rangle$$

Superconductividad

La teoría BCS

- El estado fundamental puede escribirse como suma de pares

$$|\Psi_{\rm BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} e^{\left[\phi_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow}\right]}|0\rangle = \sum_n \frac{\left(\phi_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow}\right)^n}{n!}|0\rangle \equiv \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

- BCS no conserva el número de partículas, si conserva paridad.
- Ante la transformación $c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} \to e^{i\alpha} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}$ el parámetro de orden adquiere una fase $\Delta \to e^{2i\alpha}|\Delta|$.
- El operador número es conjugado de la fase $\widehat{N} \equiv -i\partial_\alpha$.

Superconductividad

La teoría BCS

- Número de partículas y fase global obedecen un principio de incerteza: $[\alpha, \widehat{N}] = i \Longrightarrow \Delta\alpha\Delta\widehat{N} \gtrsim 1$
- Igual que un estado macroscópico con la posición bien determinada y momento incierto, el estado BCS con la fase determinada es un estado de la materia, una gato de Schrödinger con un número indeterminado de partículas.
- La corriente superconductora es proporcional al gradiente de la fase.

Contexto

Una idea central en el estudio de sistemas tan diversos es el concepto de ***“ruptura de simetría”***.

Las fases *condensadas* tienen menos simetrías que la contra parte sin condensar (ejemplo, el sólido tiene menos simetrías que el gas).

Contexto

Una idea central en el estudio de sistemas tan diversos es el concepto de ***"ruptura de simetría"***.

Las fases *condensadas* tienen menos simetrías que la contra parte sin condensar (ejemplo, el sólido tiene menos simetrías que el gas).

<u>Marco teórico</u>

- Ginzburg – Landau
- Parámetro de orden
- Simetrías del sistema

Contexto

¿Puede haber transiciones que no involucren cambios de fase?

Si los sistemas tienen interacciones débiles, ¿se pueden formar cuasi-partículas tan exóticas?
¿Hay estado coherentes (correlacionados)?

<u>Marco teórico</u>

- Ginzburg – Landau
- Parámetro de orden
- Simetrías del sistema

Topología

La fase de Berry

Evolución cíclica y adiabática: $H = H(\mathbf{R}), \quad \mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$

Si la variación es lenta, podemos describir el sistema instante a instante: $H(\mathbf{R})\,|\,n(\mathbf{R})\,\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{R})\,|\,n(\mathbf{R})\,\rangle$

El teorema adiabático nos asegura que, si la evolución es "lenta", el estado se mantiene en el autoestado inicial, a menos de una fase:

$$|\,\phi_n(t)\,\rangle = e^{i\gamma_n(t)} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\,\varepsilon_n(\mathbf{R}(t'))\right]|\,n(\mathbf{R}(t))\,\rangle$$

Topología

La fase de Berry

$$|\phi_n(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' \varepsilon_n(\mathbf{R}(t'))\right] |n(\mathbf{R}(t))\rangle$$

donde γ_n es una fase.

En un camino cerrado, cíclico, la fase es un invariante de gauge, la “fase de Berry”

$$\boxed{\gamma_n = \oint_{\mathcal{C}} \mathrm{d}\mathbf{R} \cdot \mathcal{A}(\mathbf{R}) \equiv \int_{\mathcal{S}} \mathrm{d}\mathbf{S} \cdot \mathbf{\Omega}_n(\mathbf{R}).}$$

Con

$$\mathbf{\Omega}_n(\mathbf{R}) = \nabla \times \mathcal{A}(\mathbf{R}),\ \text{y}\ \mathcal{A}(\mathbf{R}) = i\,\langle n(\mathbf{R})\left|\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\right| n(\mathbf{R})\rangle$$

Topología

Fase de Berry en bandas

Hagamos la siguiente transformación de unitaria sobre Bloch

$$H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} H e^{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{\left(\widehat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k}\right)^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

Los autoestados son la parte periódica de la autofunción de Bloch $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

Podemos pensar la zona de Brillouin como el espacio de parámetros del Hamiltoniano transformado.

¡Juega el mismo rol que $\mathbf{R}(t)$!

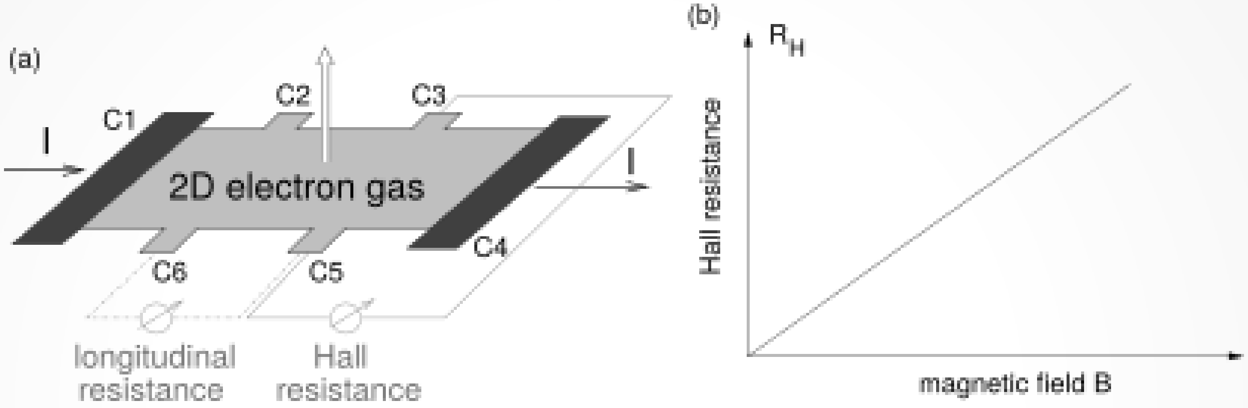
Topología

Fase de Berry en bandas

- Como la dependencia en el momento cristalino es inherente al problema de Bloch, los efectos de la fase de Berry son esperables.
- La fase de Berry depende solo de la estructura “topológica” de las bandas.
- Para generar un camino cerrado en el espacio de momentos, podemos aplicar un campo magnético o eléctrico.

Efecto Hall

Caso clásico



Corriente y campo magnético perpendiculares. Clásicamente (Drude):

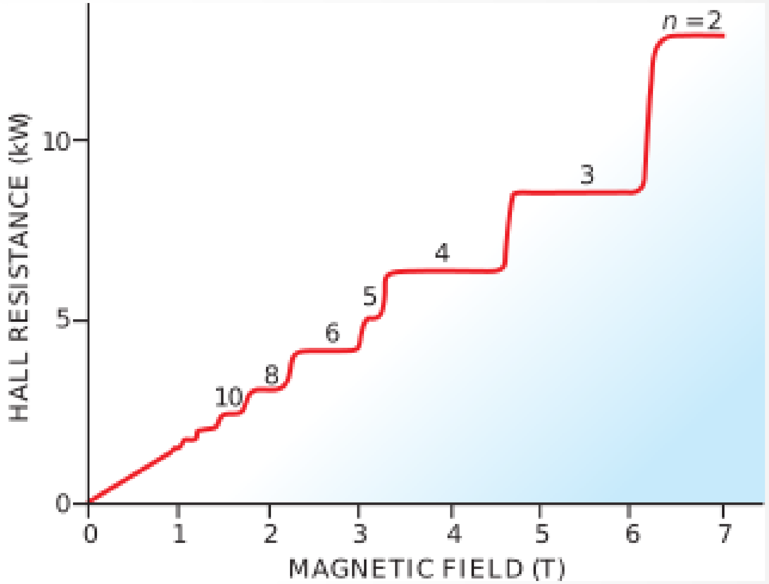
$$\rho_{xx} = \frac{m}{ne^2\tau} \qquad \rho_{xy} = \frac{B}{ne}$$

Efecto Hall

Caso cuántico

Aparecen “plateaux” donde la resistividad se mantiene constante.

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2}\frac{1}{\nu} \quad \nu \in \mathbb{Z}$$



El valor entero de ν se mide con exactitud asombrosa, ¡con errores típicos de 1 en 10^9! ¡Y el sistema es desordenado! Sin desorden el efecto desaparece.

Topología

Dinámica electrónica

- Las ecuaciones de movimiento se modifican e incluyen una “velocidad anómala”.

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}}$$

$$\dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E} - \frac{e}{c}\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}$$

- Este término contribuye a la corriente (conductancia) con nuevos fenómenos.

Topología

Efecto Hall cuántico

- La "velocidad anómala" contribuye a la conductividad transversa:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \int_{\mathrm{BZ}} \frac{\mathrm{d}^2 k}{(2\pi)^2} \Omega_z(k_x, k_y) = n \frac{e^2}{h}$$

- La conductividad Hall está cuantizada en un aislante bidimensional.
- *n* es un entero, un número de Chern.

Más allá

Todos juntos

- Hall + grafeno: Hall “relativista”
- Hall + Coulomb: Efecto Hall fraccionario.
- Topología sin campo externo: aisladores topológicos.
- Cuasi-partículas: carga fraccionaria, espín fraccionario, electrones relativistas.
- Renormalización, transiciones de fase (Higgs), Kondo (libertad asintótica), estados de borde quirales, Majoranas, etc.

Eso es todo

¡Muchas gracias!