CORRELACIONES DE LARGO ALCANCE EN MATERIA CONDENSADA

R. Bochicchio*
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires.

Las correlaciones de largo alcance (ODLRO) están fuertemente relacionadas con la condensación de Bose-Einstein generalizada. Bajo ciertas condiciones de contorno especiales, una implica la otra. Estos fenómenos son de capital importancia en la descripción de situaciones cuánticas con manifestación macroscópica (superfluidez, superconductividad, etc.). Dado que los pares electrónicos no son bosones, la definición de ODLRO se modifica. En esta presentación se muestra la información contenida con el propagador de 2-partículas (pares electrónicos) y las consecuencias que conducen a la estadística de pares. Asimismo, se analiza la analogía fluidística de la correlación de largo alcance.

INTRODUCCION

Los fenómenos cooperativos son aquéllos donde gran parte o todo el sistema colabora en la aparición de una determinada propiedad del mismo [1]. El aspecto que aquí nos interesa es el de las correlaciones entre partículas componentes de un sistema multielectrónico, es decir un aspecto particularmente importante y fundamental en la comprensión de la distribución electrónica en materia condensada: las correlaciones no diagonales de largo alcance (ODLRO, *off diagonal long range order*) [2,3]. El concepto de ODLRO es el sustento teórico del modelo de dos fluidos en las teorías de la superconductividad y superfluidez como así los fenómenos asociados con ellas [3]. Las correlaciones no diagonales de largo alcance expresan la importancia de la interacción entre las partículas o asociaciones de ellas a grandes distancias en el límite termodinámico. Estas dependen de la estadística de las partículas o cuasipartículas consideradas. Por lo tanto, es su desconocimiento lo que hace dificultosa esta descripción [3,4].

Las escasas formulaciones sobre este tema han sido expresadas parcialmente, es decir no fueron generalizadas a partículas compuestas como por ejemplo, los pares electrónicos o cualquier tipo de cuasipartícula en el sentido amplio del término. La importancia relevante de los pares electrónicos en los procesos de transporte en materia condensada se pone en evidencia en el caso de la superconductividad.

La propiedad fundamental del ODLRO es su estrecha relación con el fenómeno de condensación generalizada del tipo Bose-Einstein [3b]. Dado que los pares electrónicos o "parones" no son bosones [4], la definición de condensación generalizada necesitó ser modificada [5] pero, salvo en casos muy específicos, aún no ha sido demostrada su validez de manera general.

La generalización de la definición del ODLRO y la condensación de q-ones (quasipartículas compuestas por q electrones), que contiene a las anteriores [3b,4] como casos particulares, ha sido expresada en el lenguaje de los operadores densidad reducidos de orden arbitrario [5] y pone de manifiesto su conexión con el denominado análisis poblacional estadístico en sistemas moleculares y de estado sólido [6].

El motivo de este trabajo es mostrar de que manera está contenida la información en los propagadores asociados [7], y su interpretación física en dichos términos. De esa manera se denota la necesidad natural e imperiosa de buscar la forma exacta de la estadística que rige el comportamiento de los pares electrónicos y su interpretración fluidística a partir de la ecuación de von Neumann (ecuación de Liouville cuántica) de los operadores densidad reducidos, para comprender el por qué de la aparición de los términos superfluídos en los fenómenos mencionados más arriba y de esta manera hallar el camino para la comprensión microscópica de los mismos. Por último, se mencionan brevemente algunas conclusiones y líneas de aplicabilidad de estos conceptos a sistemas de intrínseco interés físico.

* Investigador CONICET

TEORIA

Se dice que hay correlaciones de largo alcance (ODLRO) si existe [5m]

$$\lim_{|x_j - x'_k| \to \infty} \mathrm{limtherm} \langle x_1, \ldots x_q | \Lambda_q^{CORR} | x'_1 \ldots x'_q \rangle = 0$$

$$(i,k, \quad \{1,\ldots,q\}) \qquad (1)$$

donde Λ_q^{CORR} es el operador densidad reducido de correlación de orden q (q<N) definido por [5] $\Lambda_q^{CORR} = \{\binom{N}{q}/n_{MAX}^{(q)}\}\ \mathbf{D}_q$, donde $\binom{N}{q}$ es el número de q-ones en el sistema de N electrones $n_{MAX}^{(q)}$ la máxima población del autoestado del operador densidad reducido de orden q=$\mathbf{D}^q$.

Para q=2 (parones) el propagador causal de 2 partículas está definido [7].

$$\langle\langle \mathbf{A};\mathbf{B} \rangle\rangle = -i\ \theta(\tau) \langle \mathbf{A}(\tau)\mathbf{B}(0) + i\ \theta(-\tau) \langle \mathbf{B}(0)\mathbf{A}(\tau) \rangle, \qquad (2)$$

donde $\mathbf{A}(\tau) = \psi^+(x_1, \tau)$ y $\mathbf{B}(0) = \psi(x'_1,0)\ \psi(x'_2,0)$, siendo ψ el operador de campo asociado y ψ^+ su adjunto. Este es el propagador de parones o pares electrónicos.

Luego, para (1) en este lenguaje se obtiene:

$$\lim_{|x_j - x'_j| \to \infty} \lim\ \mathrm{therm}\ (N-1) \sum_{n,l \geq 0} w_n^N\ g_{nl}^{(2)}(x_1,x_2)\ g_{ln}^{(2)*}(x'_1,x'_2) = 0 \qquad (3)$$

donde los valores medios en (2) han sido expresados mediante la ecuación general.

$$\langle \mathbf{O} \rangle = \mathrm{tr}(\ \rho\mathbf{O}\ ) \qquad (4a)$$

con tr indicando la operación traza y ρ el operador estadístico definido por

$$\rho = \sum w_m^N | \Psi_m^N \rangle \langle \Psi_m^N |\ , \mathrm{con}\ \ H | \Psi_m^N \rangle = E_m | \Psi_m^N \rangle, \qquad (4b)$$

donde **H** es el operador hamiltoniano y su ecuación de autovalores.

Los g's en (3) son las amplitudes generalizadas de Feynman-Dayson de dos partículas que pueden expresarse en términos de las de 1-partícula [8] de la siguiente manera

$$g_{nl}^{(2)}(x_1,x_2) = \sum_{s \geq 0} \langle \Psi_n^N | \psi(x_1) | \Psi_s^{N+1} \rangle \langle \Psi_s^{N+1} | \psi(x_2) | \Psi_l \rangle \qquad (5)$$

A partir de (5) puede interpretarse el fenómeno ODLRO como la existencia de una conexión o acoplamiento entre estados de N y N±2 partículas a grandes distancias, es decir los pares o los agujeros se propagan grandes distancias en el espacio o sea ''viven'' mucho. Aún no está claro si este precepto se condice con el estado ligado deun par de Cooper. Además, dado que el estado ''superfluido'' conduce a una condensación de Bose-Einstein [2], esto nos estaría indicando que es necesario conocer de qué manera se condensan los pares electrónicos conforme a que ellos no son bosones [4]. Este es el camino natural que desemboca en el estudio de la estadística de pares electrónicos para conocer los límites a la ocupación de sus estados.

En el lenguaje de propagadores la función de distribución de pares electrónicos, en el espacio de los impulsos, se expresa así

$$\langle \psi^+(p_1)\ \psi^+(p_2)\ \psi(p_2)\ \psi(p_1) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(E)\ \exp\beta(E-2\mu)dE; \qquad (6a)$$

donde J(E) es la función de distribución expectral [9] de la función de correlación (miembro de la izquiera de (6a), β la inversa de la temperatura y $\propto$ el potencial químico. Esta función espectral se evalúa en términos de las transformadas de Fourier de los propagadores

$$\lim \{\langle\langle \psi^+\ \psi^+;\psi\ \ \psi \rangle\rangle_{E+i\varepsilon} - \langle\langle \psi^+\ \psi^+;\psi\ \ \psi \rangle\rangle_{E-i\varepsilon}\} =$$

$$-\ i\ J(E)\ [\exp\beta(E-2\mu) + 1]^{-1} \quad (\varepsilon,\mathrm{real}), \qquad (6b)$$

que representa la discontinuidad del propagador sobre el eje real. A partir de (6b) puede aplicarse el método perturbativo con el objeto de evaluar la estadística de pares interactuantes. Nótese que aparece el doble del potencial químico que en el caso de partículas.

La estadística así planteada nos conduce al estudio de la forma hidrodinámica de la ecuación de von Neumann para interpretar el término superfluído de Madelung [10] de la ecuación de Schrödinger. La analogía entre ambas ecuaciones provee, mediante la reducción del operador densidad [11], la ecuación maestra para el operador densidad reducido de orden q

$$i\ \partial/\partial t\ \mathbf{D}^q = \hat{\mathcal{L}}\ \mathbf{D}^q + \hat{\mathcal{E}}\ \rho \quad \mathrm{con}\ \hat{\mathcal{E}} = [L_N^q;\hat{\mathcal{L}}] \qquad (7)$$

donde $\hat{\mathcal{L}}$ y $\hat{L}_N^q$ son los superoperadores Liouvilliano [12] y de contracción [13] respectivamente y el término $\hat{\mathcal{E}}\ \rho$ representa una ''fuente''. Esto conduce para q = 1 a la forma de Madelung, con una "fuente" de creación o destrucción de bosones. Para q≥2 nos conduce a la teoría de la condensación generalizada de cuasipartículas, de los cuales los pares son los de mayor importancia por la interacción coulombiana entre los componentes básicos del sistema (electrones) [5], con "fuente" de creación/destrucción de pares fermiónicos.

El término de fuente $\hat{E}\rho$ está ausente en la formulación de Madelung debido a que la ecuación de Schrödinger no posee la información estadística que sí está presente en la ecuación de von Neumann.

CONCLUSIONES

En sistemas fermiónicos, el ODLRO aparece para q≥2, lo que representa el "onset" de la condensación de pares y por lo tanto un efecto cooperativo, [5].

La teoría de propagadores muestra de esta manera ser un camino directo para la descripción teórica adecuada de los "super-fenómenos".

La conexión entre estos conceptos y el análisis poblacional estadístico [5,6] provee la forma adecuada para la implementación computacional y la consecuente obtención de resultados numéricos en sistemas moleculares extendidos y de estado sólido. Entre aquellos sistemas que revisten un interés intrínseco pueden mencionarse desde los semiconductores inorgánicos pasando por los conductores de origen orgánico hasta macromoléculas de función biológica [14].

Agradecimientos: deseo expresar mi agradecimiento al CONICET y al Depto. de Física de la Fac. de Cs. Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires por su apoyo para la realización de este trabajo.

REFERENCIAS

1. H.Haken, Rev. Mod.Phys., 47, 67, (1975).
2. (a) O. Penrose, Phil. Mag., 42, 1373 (1951); (b) O. Penrose y L. Onsager, Phys.Rev., 104, 576 (1956).
3. (a) C.N. Yang, Rev. Mod. Phys., 34, 694 (1962); (b) M.D. Girardeau, J.Math. Phys., 6, 1083 (1965).
4. A. J. Coleman, *Proc. A. J. Coleman Symp.*, R Erdahl and V. H.Smith Jr, Eds. Reidel Publ. Co, 1986.
5. R. C. Bochicchio, J. Mol. Struct. (Theochem), xxx, xxx (1990).
6. (a) R. C. Bochicchio, J. Mol. Struct. (Theochem), aceptado; (b) R.C.Bochicchio, J.A.Medrano, Phys. Rev.B, 40, 7186 (1989).
7. A.L. Fetter y J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particle Physics*, McGraw-Hill, N.Y., 1966; o cualquier otro texto sobre teoría de muchas partículas.
8. O. Goscinski y P Lindner, J.Math.Phys., 11, 1313 (1970).
9. D.N. Zubarev, Sov. Phys.Usp., 3, 320 (1960).
10. E. Madelung, Z. Phys., 40, 322 (1927).
11. R.C. Bochicchio y H. Grinberg, será publicado.
12. P. O. Löwdin, Int. J. Quantum. Chem. S16, 485 (1982).
13. H. Kummer, J. Math. Phys., 11, 449 (1970).
14. R.C. Bochicchio, en preparación.