

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS

**INTERACCIÓN DE FOTONES CON
UN GAS DE ELECTRONES CON IMPUREZAS
(COEFICIENTE DE ATENUACIÓN)**

**PROYECTO PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE
FÍSICO**

JORGE FERNANDO FRAGA FLORES

jorgefraga911@yahoo.com

DIRECTOR: DR. ERICSON LÓPEZ I.

ericsonl@hotmail.com

QUITO, MARZO DE 2009

DECLARACIÓN

Yo Jorge Fernando Fraga Flores, declaro que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

La Escuela Politécnica Nacional, puede hacer uso de los derechos correspondientes a este trabajo, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normatividad institucional vigente.

Jorge Fernando Fraga Flores

CERTIFICACIÓN

Certifico que el presente trabajo fue desarrollado por Jorge Fernando Fraga Flores bajo mi supervisión.

Dr. Ericson López I.
Director del Proyecto

Agradecimientos

Agradezco muy cordialmente al Dr. Ericson López, director de este proyecto de titulación, por su acertada dirección y recomendaciones. A Mary Díaz por motivarme a escribir este trabajo en Latex. Además agradezco de manera especial a Milagros Castillo por sus constantes motivaciones, críticas y observaciones a este trabajo. Finalmente quisiera expresar un agradecimiento muy afectuoso a mis padres por su paciente e incondicional apoyo moral y económico.

A mis padres Jorge y Celia

Índice general

RESUMEN	1
Introducción	2
I Conceptos y Métodos	5
1. Física del Plasma	6
1.1. Breve Historia de la Física del Plasma	6
1.2. Tipos de Plasmas	8
1.3. Conceptos Básicos de la Física del Plasma	9
1.4. El Plasma con Impurezas	11
1.4.1. Proceso de Carga de las Impurezas	13
1.4.2. Apantallamiento de Debye del Campo de la Impureza	15
2. Interacción de Fotones con la Materia	18
2.1. Cuantización de la Radiación Electromagnética	18
2.2. Interacción de la Radiación con la Materia	21
2.3. Atenuación de la Radiación	23
2.3.1. Dispersión de Mie y Rayleigh	23
2.3.2. Efecto Fotoeléctrico	25
2.3.3. Efecto Compton	27
2.3.4. Producción de Pares	28
3. Teoría Cuántica de Sistemas de Muchas Partículas	30
3.1. Sistemas de Partículas Idénticas	31

3.1.1.	Operadores de Segunda Cuantización	33
3.1.2.	Operadores de Muchas Partículas	36
3.2.	Representaciones de la Mecánica Cuántica	37
3.3.	Funciones de Green	40
3.3.1.	Promedio Térmico	40
3.3.2.	Funciones de Green Reales e Imaginarias	41
3.3.3.	Contenido Físico de la Función de Green	44
3.4.	Teoría Diagramática de Perturbaciones	46
3.4.1.	Teorema de Wick	46
3.4.2.	Reglas y Diagramas de Feynman	47
3.4.3.	Ecuación de Dyson	49
4.	Impurezas en un Gas de Fermi	51
4.1.	El Gas de Fermi Ideal	51
4.1.1.	Propiedades Termodinámicas	51
4.1.2.	El Gas de Fermi en Segunda Cuantización	55
4.2.	Introducción de una Impureza	58
4.2.1.	Teoría de Dispersiones	58
4.2.2.	Matriz de Transición para una Impureza	60
4.3.	Muchas Impurezas	61
4.3.1.	Promedio de Desorden	62
4.3.2.	Función de Green de Impureza Simple	64
II	Coeficiente de Atenuación	67
5.	Interacción de Fotones con un Plasma con Impurezas	68
5.1.	Modelo para el Plasma con Impurezas	68
5.1.1.	Descripción del Modelo y Restricciones	72
5.2.	Sección Eficaz de la Dispersión de Compton	73
5.3.	Concentración de un Gas de Electrones con Impurezas	79
5.3.1.	Primera Aproximación de la Auto-Energía	81

5.3.2. Impurezas con Potencial de Debye	84
5.3.3. Análisis para Varios Plasmas con Impurezas	86
5.4. Coeficiente de Atenuación y Camino Libre Medio	90
6. Conclusiones y Recomendaciones	96
6.1. Conclusiones	96
6.2. Recomendaciones	97
Bibliografía	99

Resumen

El presente proyecto de titulación es una investigación teórica que busca estudiar los fenómenos de naturaleza cuántica de la interacción entre radiación electromagnética y un plasma con impurezas. Para esto se requiere calcular y analizar el coeficiente de atenuación del plasma con impurezas. El trabajo se divide en dos partes. En la primera se resumen los métodos y conceptos necesarios para resolver el problema. Entre los más importantes se mencionan los conceptos básicos de la Física del Plasma, la interacción de la radiación electromagnética con la materia y la teoría de sistemas de muchas partículas. Se introduce la definición de función de Green la cual constituye la herramienta principal de la teoría. Además como aplicación de estos métodos, se estudia un gas de Fermi con una impureza, se desarrolla el concepto de promedio de desorden y se lo aplica a un gas de Fermi con muchas impurezas.

En la segunda parte se calcula y analiza el coeficiente de atenuación de radiación del sistema. Para esto se propone un modelo para el plasma con impurezas, con las aproximaciones y restricciones adecuadas, que permite aplicar la teoría mencionada a la resolución del problema. El modelo es un gas de electrones en el ensamble gran-canónico con impurezas de concentración determinada y distribución aleatoria. Se demuestra que las impurezas no influyen en la sección eficaz de la dispersión de Compton. Se plantea la ecuación de Dyson de este sistema y se calcula su función de Green. Con esta se calcula la concentración de electrones en el plasma en la primera aproximación de la autoenergía. Se considera que las impurezas interactúan con los electrones mediante un potencial de Debye y se analiza la variación en la concentración de electrones de varios plasmas obtenidos de la literatura. Con este resultado se estudian los efectos cuánticos en el coeficiente de atenuación y el camino libre medio de un plasma con impurezas determinado.

Introducción

El plasma es considerado el cuarto estado de la materia y representa alrededor del 99% de la materia visible del universo. En este estado de la materia, las partículas se encuentran totalmente ionizadas, es decir separadas en electrones e iones. Además existen algunos sistemas en la naturaleza donde se puede encontrar materia en el estado de plasma con partículas neutras e impurezas [1]. Debido a que el plasma es un estado donde en general los electrones e iones tienen temperaturas no relativistas, los modelos que se proponen en la literatura para su descripción requieren sólo mecánica y electrodinámica clásica, y en general no se toman en cuenta los fenómenos de origen cuántico de manera formal [1, 2]. Por otro lado, en investigaciones asociadas con plasmas astrofísicos, el único parámetro con el que podemos estudiar los fenómenos físicos externos, es la radiación electromagnética emitida por los objetos a analizarse, que está asociada a la dispersión, absorción y emisión de la radiación de la materia [3, 4].

Con estos antecedentes, el presente trabajo es una investigación teórica que busca dar una respuesta a los fenómenos de naturaleza cuántica de la interacción entre la radiación electromagnética y un plasma con impurezas. En particular, se requiere investigar el comportamiento del coeficiente de atenuación de la radiación de el plasma con impurezas, ya que esta magnitud está ligada directamente a la parte experimental y observacional de los procesos físicos de interacción [3]. El problema planteado requiere estudiar el comportamiento cuántico de un sistema de muchas partículas, por lo cual no se lo puede abordar desde la perspectiva de la Mecánica Cuántica ordinaria ya que se tenderían problemas con el número de ecuaciones diferenciales a resolver [5, 6]. Además, debido a que las posiciones de las impurezas en el gas de electrones son arbitrarias, estas se pueden considerar un sistema desordenado y con respecto a esto, la Física Estadística no provee una herramienta analítica adecuada [7]. Por tanto ha sido necesario recurrir a ciertos métodos que han adquirido el nombre de *teoría cuántica de sistemas de muchas partículas*. Esta teoría ha sido desarrollada con el fin de solucionar problemas en Materia Condensada, donde se tratan sistemas con un gran número de partículas . La teoría consiste en una combinación de diversos métodos y conceptos de la Física Estadística y Teoría Cuántica de Campos [5, 8, 9, 10].

Por tanto, el objetivo principal del presente proyecto es calcular y analizar el coeficiente de atenuación de la radiación electromagnética de un gas de electrones que contenga una determinada concentración de impurezas. Básicamente se realizará una aplicación de la teoría cuántica de sistemas de muchas partículas a un plasma con impurezas. Como se verá más adelante, la función de Green de un sistema contiene la información completa del sistema, de manera análoga a la función de onda en mecánica cuántica. De esta manera, el problema puede reducirse a buscar esta función de Green y utilizarla adecuadamente [9].

Para esto, la presente investigación ha sido dividida en dos partes, que se describen a continuación. La **primera parte**, que contiene los capítulos del 1 al 4, recoge todos los conceptos y métodos más importantes que se han consultado en la literatura citada. En el **capítulo 1** se realiza un breve estudio de la Física del Plasma para identificar los conceptos más importantes para el entendimiento de los plasmas con impurezas a nivel experimental. En el **capítulo 2** se estudian los distintos procesos de interacción de la materia con la radiación electromagnética de distintas energías. El **capítulo 3** está dedicado al tratamiento de los conceptos fundamentales de la *teoría cuántica de sistemas de muchas partículas*, la cual es la herramienta teórica principal que se utilizará en la resolución del problema. Aquí se introducen las funciones de Green y las reglas y diagramas de Feynman para describir sistemas de muchas partículas. En el **capítulo 4** se estudia la introducción de una impureza en un gas de Fermi, aplicando la teoría desarrollada en el capítulo anterior. Aquí se introducen también ciertos conceptos de la teoría de dispersiones, como la sección eficaz, la matriz de transición y la aproximación de Born. Finalmente se introduce el concepto de promedio de desorden y se calcula la función de Green de un gas de Fermi con muchas impurezas.

La **segunda parte** contiene los capítulos 5 y 6, y está dedicada al cálculo y análisis del coeficiente de atenuación del proceso de interacción entre fotones y un plasma con impurezas. En el **capítulo 5**, se plantea el modelo que se utilizará para el plasma con impurezas y se imponen las restricciones y aproximaciones físicas para simplificar el problema. Se demuestra que la sección eficaz de la dispersión de Compton se mantiene invariante al introducir impurezas en el gas de electrones. Mediante la función de Green del sistema, se calcula la concentración de electrones en el plasma. Luego se toma la primera aproximación de la expansión en serie de la auto-energía y se consideran impurezas con un potencial de Debye. Con estos resultados se hace un análisis para varios plasmas con impurezas obtenidos de la literatura. Para un plasma determinado, se calcula el coeficiente de atenuación del sistema y se analiza gráficamente las contribuciones de las impurezas y del gas de electrones al coeficiente de atenuación. Luego se analiza las variaciones del camino libre medio del sistema, debido a su interpretación física inmediata. Por último en el **capítulo 6** se presentan las principales conclusiones del

presente trabajo. Además se realizan las recomendaciones y las posibles aplicaciones que los resultados de la presente investigación puedan tener en ciertos problemas asociados a la Física del Plasma, Astrofísica y Cosmología.

En esta investigación se logra describir y analizar teóricamente, los efectos cuánticos asociados a la presencia de impurezas en un plasma y los posibles efectos que estos presentan en la interacción entre la radiación electromagnética y el plasma con impurezas. Con respecto a esto, puede mencionarse que las principales contribuciones del presente trabajo son las siguientes. (i) La aplicación de la *teoría de sistemas de muchas partículas* a un plasma con impurezas, con el objeto de indagar los efectos cuánticos de la presencia de las impurezas en el plasma. (ii) La demostración de que la presencia de impurezas en un gas de electrones no afecta a la sección eficaz de Compton de un electrón individual en el gas. Y por último, (iii) la demostración teórica de que las impurezas pueden causar una variación finita de la concentración de los electrones en el plasma con impurezas. Esto causa también una variación en el coeficiente de atenuación de la radiación del plasma.

Parte I

Conceptos y Métodos

Capítulo 1

Física del Plasma

En este capítulo se presenta una breve introducción a la Física del Plasma con el objeto de conocer ciertos conceptos que se consideran importantes para la presente investigación, ya que representan la parte experimental y de inmediata aplicación del proyecto. La Física del Plasma trata precisamente el modelo clásico del gas de electrones con impurezas. En este capítulo se empieza con una breve exposición de la historia, desarrollo y estado actual la Física del Plasma, luego se dan a conocer ciertos conceptos y definiciones importantes derivados de la investigación experimental, tales como la cuasi-neutralidad, la frecuencia de un plasma y el apantallamiento de Debye. Finalmente se hace referencia al plasma con impurezas, mejor conocido como *dusty plasma*, el cual es el modelo experimental del plasma con impurezas que se modelará a nivel cuántico en esta investigación.

1.1. Breve Historia de la Física del Plasma

Históricamente el término “*plasma*” viene de la palabra griega ‘*πλάσμα*’ que significa formado o moldeado y fue introducido por el fisiólogo checo Jan Evangelista Purkinje a mediados del siglo XIX, para nombrar el fluido claro en el que estaban contenida la materia corpuscular de la sangre. En 1922 el científico estadounidense Irving Langmuir, ganador del Premio Nobel de Química, propuso que los electrones iones y otras partículas neutras en una nube de gas, sean considerados como partículas contenidas en una especie de fluido de manera similar al de la sangre, el cual llamó también plasma [1], [11].

En los años 20 y 30 se empezó el estudio de lo que hoy se conoce como “Física del Plasma”. Este trabajo estaba dirigido a entender los efectos del plasma ionosférico de la atmósfera terrestre para la propagación de ondas de radio a largas distancias y

desarrollos en tubos de electrones gaseosos, en la era de la electrónica anterior a los semiconductores [1]. En los años 40, Hannes Alfvén desarrolló la teoría de la magnetohidrodinámica (MHD), en la cual el plasma era tratado como un fluido superconductor. Esta teoría ha sido usada extensa y exitosamente en astrofísica para investigar la manchas solares, las protuberancias solares, el viento solar, la formación de estrellas y muchos otros problemas [11]. A partir de 1952, después de la creación de la bomba de hidrógeno, se iniciaron investigaciones en secreto de la física del plasma a gran escala, basada en la energía de fusión magnética. Éstas investigaciones estaban lideradas por los Estados Unidos, La Unión Soviética y Gran Bretaña. Estos estudios se desclasificaron en 1958 debido al desarrollo de la energía nuclear controlada con fines no bélicos y generaron gran interés, ya que la fusión termonuclear controlada podía ser una fuente de energía para el futuro. Además, en esta época se realizaron muchas publicaciones de gran importancia, dando inicio a la física del plasma tórica como una disciplina matemática rigurosa. Junto con los desarrollos en los plasmas de fusión, ha existido también un importante y extenso estudio de los plasmas astrofísicos. Usando radio telescopios, telescopios ópticos, interferometría y recientemente los telescopios espaciales (como el Hubble y el Spitzer), han sido observados muchos jets astrofísicos eyectados de objetos magnetizados como estrellas, núcleos de galaxias activas y agujeros negros [1].

A finales de los años 60 se inventaron los primeros tokamaks, que son aparatos toroidales con bobinas magnéticas utilizados para generar energía a partir de la fusión de un plasma confinado [2]. A finales del siglo XX, en estos aparatos se han logrado energías cercanas a las de fusión, de manera que en la actualidad existe un proyecto internacional de desarrollo e investigación llamado ITER (International Tokamak Research Engineering), que tiene como objetivo demostrar la viabilidad técnica y científica de la energía de fusión. Además pretende ser un paso experimental entre los estudios actuales de la física de plasma y las futuras plantas de energía de fusión [12].

A principios de los años 80 surgen los procesadores de plasma, que consisten en la fabricación de circuitos integrados complejos y pequeños usados en dispositivos electrónicos modernos. En los años 90 se iniciaron estudios en el *plasma con impurezas* (dusty plasma), donde los granos de impurezas introducidos en el plasma pueden cargarse eléctricamente y actuar como una especie de partícula cargada adicional. Dado que los granos de polvo son masivos comparados con los electrones o los iones y su carga es variable, se esperan que ocurran nuevos comportamientos físicos, los cuales son una extensión de lo que sucede en un plasma regular. En los 80 y 90 se iniciaron las investigaciones en los *plasmas no neutros*, y además se comenzó una continua investigación y desarrollo de plasmas industriales como arcos, torchas de plasma, plasmas laser y pantallas de plasma [1].

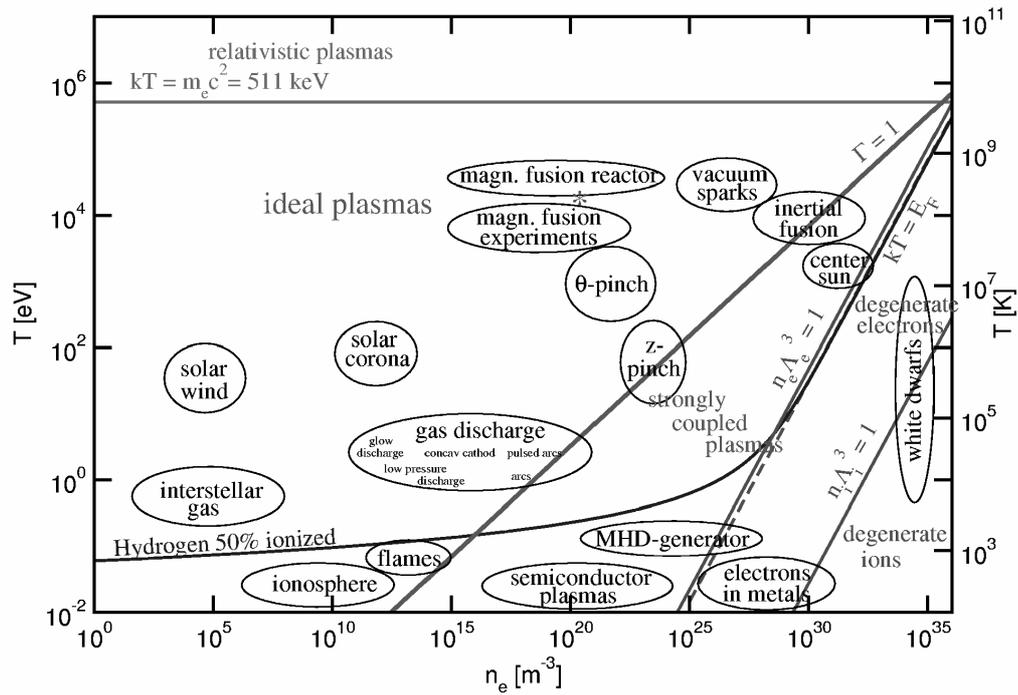


Figura 1.1: Temperaturas versus densidad de plasmas astrofísicos y de laboratorio. Imagen tomada de A. Könies (2004), p. 26.

1.2. Tipos de Plasmas

Los plasmas son muy complejos y existen en una amplia variedad de estados físicos, temperaturas y densidades. Una propiedad importante de los plasmas es que son extremadamente *interpolables*, es decir, los mismos fenómenos cualitativos ocurren para todos los plasmas en diferentes ordenes de magnitud. Un caso importante donde los plasmas no existen en forma normal son las condiciones terrestres ordinarias, por lo cual no se ha estudiado el comportamiento del plasma como se lo ha hecho para los sólidos, líquidos y gases. A los plasmas en general se los puede clasificar como se menciona a continuación. [1].

Plasmas Terrestres. Muchos plasmas terrestres naturales y artificiales, como luces de neon, lámparas fluorescentes, arcos de suelda y rayos, tienen temperaturas asociadas a los electrones de unos pocos eV, y temperaturas de los iones aún menores, casi siempre relacionados con la temperatura ambiente. En general, estos plasmas no tiene un campo magnético estable y no producen auto campos magnéticos significativos. Además son débilmente ionizados y dominados por procesos de colisión y radiación. Las densidades de estos plasmas varía desde 10^{14} a 10^{22} m^{-3} (por comparación, la densidad del aire en condiciones estándar es $2,7 \times 10^{25} \text{ m}^3$).

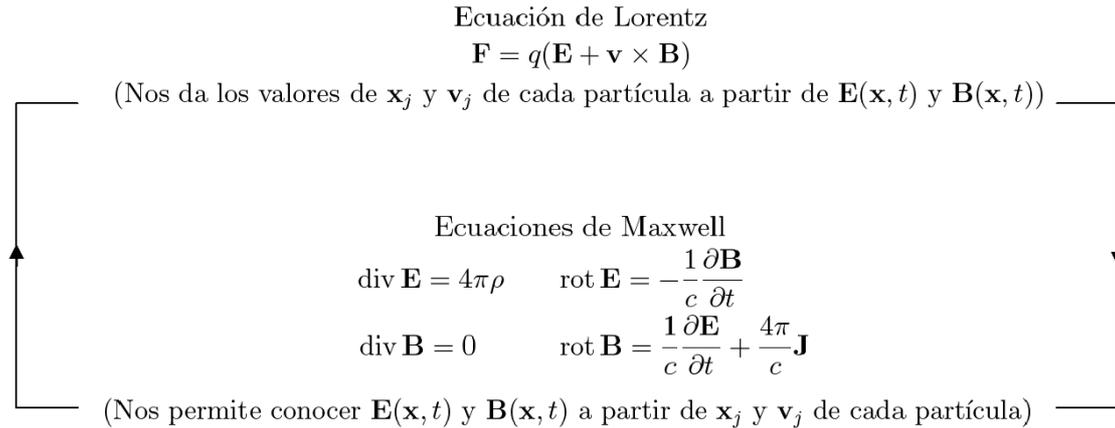


Figura 1.2: Interrelación entre las ecuaciones de Maxwell y la ecuación de Lorentz en el estudio de la física del plasma. Figura adaptada de P. Bellan (2004), p. 4.

Plasmas Terrestres de Fusión. Estos son generados en sistemas de confinamiento de plasmas cuidadosamente diseñados, como tokamaks, stellarators y otros. Los investigadores han logrado crear plasmas completamente ionizados de hidrógeno y deuterio, los cuales alcanzan temperaturas desde decenas de eV hasta miles de eV . En estos aparatos de confinamiento, usando una geometría adecuada, se ejerce en el plasma un campo magnético externo de entre 1 y 10 *teslas*. Los elementos de confinamiento magnético en general tienen una densidad de entre 10^{19} a 10^{21} m^{-3} .

Plasmas Astrofísicos. Los parámetros de estos plasmas cubren un amplio rango. Por ejemplo la densidad del espacio interestelar es de 10^6 m^{-3} y en la atmósfera estelar es de 10^{20} m^{-3} . La mayoría de los plasmas astrofísicos que se han investigado tienen temperaturas que van de 1 a 100 eV y en general se encuentran totalmente ionizados [1]. Ejemplos de estos son los discos de acreción, jets de núcleos de galaxias activas, atmósferas estelares, y los procesos de formación de galaxias.

1.3. Conceptos Básicos de la Física del Plasma

La física del plasma no es una ciencia precisa, sino más bien una red de puntos de vista superpuestos, cada uno modelando un rango limitado de su comportamiento. El entendimiento de los plasmas se desarrolla mediante el estudio de estos varios puntos de vista, tomando siempre en cuenta los diversos vínculos entre ellos. La dinámica del plasma está determinada por las interacciones autoconsistentes entre los campos electromagnéticos, descritos por las ecuaciones de Maxwell, y un número estadísticamente grande de partículas cargadas, descritas por la ecuación de Lorentz, como se muestra esquemáticamente en la Figura 1.2. En principio la evolución del plasma puede ser calculada de esta manera, pero es impráctico implementarlo debido al gran número de

partículas y debido a la complejidad del campo electromagnético. Por tanto el estudio de los plasmas se aborda considerando aproximaciones simplificadas en los modelos, ya sea en la descripción del campo electromagnético o en el de las partículas [1].

Un plasma está caracterizado por tres parámetros fundamentales: la densidad n medida en partículas por metro cúbico, la temperatura T de cada especie (usualmente medida en eV), y el campo magnético estacionario B (medido en Teslas). Un grupo de parámetros adicionales como la longitud de Debye, el radio de Larmor, las frecuencias del plasma, la frecuencia ciclotrónica y la velocidad térmica, pueden ser derivados de estos tres parámetros fundamentales. Para plasmas parcialmente ionizados, la ionización fraccional y la sección eficaz de las partículas neutras son también importantes [1].

Cuasi-Neutralidad

En general se considera que los plasmas son eléctricamente casi neutros, es decir, las concentraciones locales de carga o de un potencial externo, son apantalladas a distancias cortas comparadas con las dimensiones del sistema. Se estima que una pequeña separación x de los electrones de los iones causa una gran potencial de restauración dado por

$$E \approx \frac{n_e e x}{\epsilon_0}, \quad (1.1)$$

donde n_e es la densidad del gas de electrones, e la carga del electrón y ϵ_0 la constante dieléctrica en el vacío [2].

Frecuencia de un Plasma

Los grandes campos eléctricos de restauración asociados a las desviaciones de la cuasi-neutralidad, causan oscilaciones armónicas. En ausencia de un campo magnético los electrones reaccionarán al campo eléctrico del potencial anterior mediante la fuerza $m_e d^2x/dt^2 = -eE$. La solución de esta ecuación da una oscilación de los electrones con frecuencia

$$\omega_e = \left(\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e} \right)^{1/2}, \quad (1.2)$$

donde las oscilaciones de los iones no se consideran debido a que su masa es grande comparada con la de los electrones [2].

Apantallamiento de Debye

Usualmente los iones son rodeados por electrones que cubren la carga del ion. En el plasma, sólo a pequeñas distancias una variación de la neutralidad de la carga puede ser observada. En la presencia de un potencial eléctrico ϕ , las densidades de los electrones n_e y los iones n_i en equilibrio térmico son modificados de acuerdo a la distribución de Boltzmann, de modo que $n_{e,i} = n_{0,e,i} \exp(-q\phi/k_B T_{e,i})$, donde n_0 son las densidades para

Cuadro 1.1: Diferencias básicas entre plasmas ion-electrón y plasmas con impurezas. Tabla adaptada de P. K. Shukla (2002), p.3.

Característica	Plasma ion-electron	Plasma con Impurezas
Condición de cuasi-neutralidad	$n_e = Z_i n_i$	$Z_d n_d + n_e = Z_i n_i$
Carga de la partícula masiva	$q_i = Z_i e$	$ q_d = Z_d e \gg q_i$
Carga dinámica	$q_i = const.$	$\partial q_d / \partial t = \text{corriente neta}$
Masa de la partícula masiva	m_i	$m_d \gg m_i$
Frecuencia del Plasma	ω_i	$\omega_d \ll \omega_i$
Radio de Debye	λ_{De}	$\lambda_{Di} \ll \lambda_{De}$
Interacción	Sólo repulsiva	Atractiva entre impurezas
Transiciones de Fase ¹	No	Si

$\phi = 0$ y $T_{e,i}$ son las temperaturas de los electrones o los iones. Para iones simplemente cargados, la ecuación de Poisson $\nabla^2 \phi = -\rho_E / \epsilon_0$ en coordenadas esféricas es

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = \frac{n_e e}{\epsilon_0} \frac{e\phi}{1/k_B T_e + 1/k_B T_i}. \quad (1.3)$$

Usando la definición de longitud de Debye, la cual describe el rango de un potencial eléctrico dentro del plasma

$$\lambda_D = \left(\frac{\epsilon_0 k_B T}{2n_e e^2} \right)^{1/2}, \quad (1.4)$$

y la longitud de Debye total $\lambda_D^{-2} = \lambda_{De}^{-2} + \lambda_{Di}^{-2}$, la solución de la ecuación de Poisson nos da el potencial de apantallamiento

$$\phi(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-r/\lambda_D}}{r}. \quad (1.5)$$

Como se observa el potencial de Coulomb es modificado (apantallado), de manera que decae exponencialmente a una distancia del orden de λ_D desde la fuente [2].

1.4. El Plasma con Impurezas

Los plasmas con impurezas contienen cierto tipo de partículas adicionales además de los electrones y los iones, cuya presencia produce nuevos grados de libertad y da lugar a nuevos fenómenos en el comportamiento del plasma. En general las impurezas adicionadas al plasma, van a adquirir una nueva carga eléctrica, la cual es producida por distintos métodos, como el bombardeo de electrones y iones, la foto-ionización y el decaimiento radiactivo. Un plasma con impurezas de laboratorio y con granos de impurezas adicionados se encontrará débilmente ionizado por lo cual la carga de los

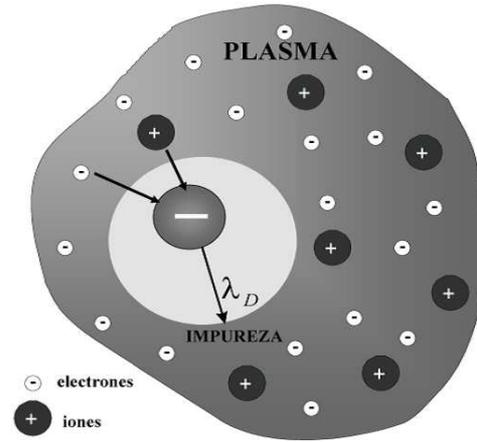


Figura 1.3: Plasma con una impureza.

granos de impurezas se produce en general por el bombardeo de electrones e iones. Los granos se cargan negativamente debido a que los electrones, siendo más ligeros que los iones y usualmente con mayor temperatura, tienen una velocidad térmica mayor que los iones. Como resultado, cuando un grano de impureza es insertado en el plasma, este es inicialmente sujeto a un flujo grande de electrones incidentes, mayor que el de los iones, lo que causa que el grano se cargue negativamente (véase Figura 1.3). Esta carga eventualmente se vuelve lo suficientemente grande para repeler el flujo inicial de electrones incidentes. Por otra parte la carga negativa del grano acelera iones incidentes causando un incremento en el flujo de iones. La carga neta en el grano de impureza logra un equilibrio cuando los flujos de los iones y los electrones son iguales. Este es un equilibrio dinámico porque involucra un flujo continuo de plasma al grano de impureza.

Dado que un grano individual de impureza es mucho más pesado que un electrón o un ion, este puede ser descrito aproximadamente por un centro dispersor infinito y masivo para los electrones y iones que colisionen con él. En experimentos de laboratorio típicos de plasmas con impurezas, el camino medio de la colisión l_{mfp} excede en gran manera a la longitud de Debye, como se muestra en la Figura (1.5). Aquí se muestra un grano de impureza de radio r_d es rodeado por una esfera imaginaria de diámetro l_{mfp} el cual es mucho más grande que la longitud de Debye λ_D . Se considera que los iones y electrones no colisionan dentro de la esfera de radio l_{mfp} y tienen orbitas keplerianas asociadas al campo central electrostático producido por la carga del grano. A nivel experimental se espera que la sección eficaz del grano de impureza sea proporcional a la sección eficaz geométrica $\sigma_{geom} = \pi r_d^2$, es decir

$$\sigma(v) = \pi b^2 = \left(1 - \frac{2q\phi_d}{mv^2} \sigma_{geom} \right), \quad (1.6)$$

donde b es el parámetro de impacto, ϕ_d es el potencial en la superficie del grano y v es la velocidad inicial de la partícula incidente de masa m y carga q [1].

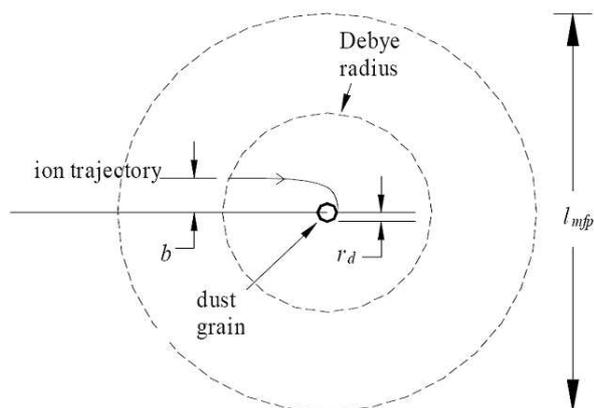


Figura 1.4: Trayectoria de un ion incidente con parámetro de impacto b . Imagen tomada de P. Bellan (2004), p. 484.

1.4.1. Proceso de Carga de las Impurezas

Los procesos elementales que llevan a la carga de las impurezas son complicados y dependen principalmente del entorno cercano de la impureza. Estos procesos son (i) la interacción de la impureza con partículas gaseosas del plasma, (ii) la interacción de las impurezas con partículas energéticas como electrones e iones y (iii) la interacción de las impurezas con fotones.

Cuando las impurezas son inmersas en un plasma, las partículas del plasma como electrones e iones son colectadas por la impureza. Por tanto las impurezas son cargadas por la colección de partículas que fluyen a su superficie. La carga de la impureza q_d está determinada por

$$\frac{dq_d}{dt} = \sum_j I_j, \quad (1.7)$$

donde j representa los componentes del plasma e I_j es la corriente asociada a cada componente j . En equilibrio, la corriente neta que fluye a la superficie de la impureza es nula, es decir, $\sum_j I_{j0} = 0$, donde I_{j0} es la corriente de equilibrio de cada componente. En general las impurezas en un plasma se cargan negativamente, debido a que es más fácil que los electrones que entran a la superficie de la impureza permanezcan ahí debido a su menor masa.

Carga por partículas primarias del plasma. Para partículas del plasma como iones y electrones con una carga q_j y con una distribución de velocidades $f_j(v_j)$ a una distancia grande respecto a la impureza, se puede calcular la corriente de carga I_j llevada por el componente j de la siguiente manera

$$I_j = q_j \int_{V_j^{min}}^{\infty} v_j \sigma_j^d f_j(v_j) dv_j \quad (1.8)$$

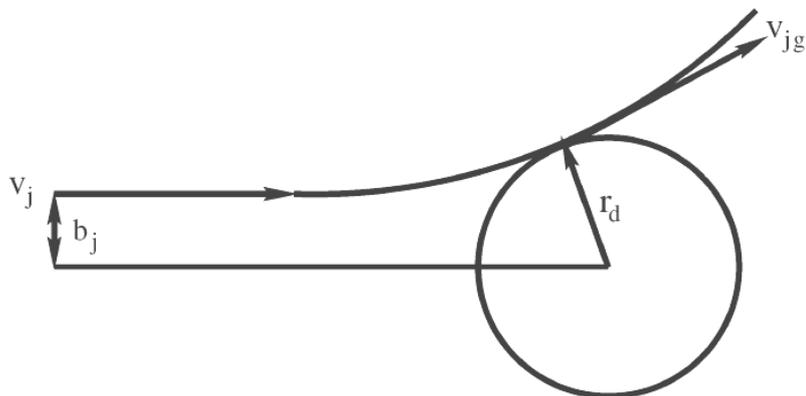


Figura 1.5: Colisión de una partícula del plasma j con una impureza cargada de radio r_d y $q_j q_d < 0$. Imagen tomada de P. K. Shukla (2002), p. 38.

donde V_j^{min} es la velocidad mínima que requiere la partícula para chocar con la impureza y σ_j^d es la sección eficaz de la impureza dada en (1.6). Para una distribución de velocidades maxwelliana tenemos

$$I_j = 4\pi r_d^2 n_j q_j \left(\frac{k_B T_j}{2\pi m_j} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{q_j \phi_d}{k_B T_j} \right) \quad (1.9)$$

para potenciales atractivos ($q_j \phi_d < 0$), y

$$I_j = 4\pi r_d^2 n_j q_j \left(\frac{k_B T_j}{2\pi m_j} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{q_j \phi_d}{k_B T_j} \right) \quad (1.10)$$

para potenciales repulsivos ($q_j \phi_d > 0$). Aquí T_j es la temperatura, n_j la concentración y m_j es la masa del componente j .

Emisión secundaria de electrones. Cuando partículas primarias del plasma con energías altas inciden sobre la superficie de la impureza estas son reflejadas por la superficie o pasan a través de la impureza. Estas partículas pueden causar la emisión de electrones secundarios desde la superficie de la impureza. Estos procesos pueden ocurrir por impacto de electrones o por impacto de iones. La emisión de estos electrones secundarios de la impureza tiende a cargar positivamente a la impureza.

Fotoemisión. Cuando un flujo de fotones con energía $h\nu$ mayor que la función de trabajo de la impureza incide en la superficie, esta emite electrones. La emisión de electrones depende de la longitud de onda de los fotones incidentes, el área de la superficie y las propiedades de la materia de la impureza. Este mecanismo hace que la impureza se cargue positivamente. Si W_f es la función de trabajo fotoeléctrico del material de la impureza que es cargada positivamente ($q_d > 0$), entonces para excitar un electrón de la superficie, el fotón debe tener una energía de $h\nu > W_f + q_d e / r_d$, donde r_d es el radio de la impureza. Esto implica que la carga máxima es

$$q_d = (h\nu - W_f) \frac{r_d}{e} \quad (1.11)$$

Dado que la carga de la impureza es positiva, una fracción de los electrones emitidos regresan a la superficie y los más energéticos escapan. De manera que la corriente neta es determinada por el balance entre los electrones que escapan y los que regresan.

Existen otros procesos de carga de las impurezas los cuales son significativos sólo en determinadas circunstancias especiales. Entre los más importantes se encuentran:

- **Emisión Termoiónica.** Cuando una impureza es sometida a altas temperaturas, puede haber emisión termoiónica de electrones e iones. La emisión termoiónica puede inducirse mediante calentamiento térmico infrarrojo o por laser. Este es un proceso que carga a la impureza positivamente.
- **Emisión de Campo.** Existen circunstancias especiales cuando una impureza con un tamaño del orden de las micras, puede adquirir una carga alta positiva o negativa. En estas circunstancias la impureza puede emitir espontáneamente electrones o iones, lo cual se denomina emisión de campo. El campo eléctrico de la impureza está limitado por la emisión de campo de electrones o iones para impurezas con carga negativa o positiva respectivamente.
- **Radiactividad.** Para un cuerpo en el espacio exterior, la radiactividad puede constituir un mecanismo de carga de las impurezas. Esto sucede mediante el escape de cargas primarias emitidas por un núcleo radiactivo, y el escape de electrones secundarios excitados por los primarios al pasar por la superficie. La cantidad de material radiactivo en los cuerpos ordinarios es insignificante para producir efectos sobre la carga de una impureza. Sin embargo para plasmas con impurezas formados en novas y supernovas pueden tener niveles significativos de radiactividad. La carga por emisión varía de acuerdo a las dimensiones de la impureza, por lo cual impurezas grandes tienden a ser cargadas positivamente.
- **Ionización por impacto.** Cuando partículas neutras de alta energía chocan con la superficie de la impureza, esta o la partícula incidente son ionizadas con el subsecuente escape de iones o electrones. Este fenómeno puede producir una carga positiva o negativa de las impurezas y se vuelve significativo cuando la temperatura de las partículas neutras es alta [26].

1.4.2. Apantallamiento de Debye del Campo de la Impureza

Como hemos visto, una partícula envuelta en un plasma se carga negativamente debido a la gran movilidad de los electrones en el plasma. La carga de la impureza puede ser estimada igualando el potencial de la superficie del grano con la temperatura de los

electrones

$$\frac{Z_d e^2}{a} = k_B T_e \quad (1.12)$$

donde a es la dimensión de la impureza y Z_d la carga. Las corrientes de electrones e iones se encuentran en equilibrio y la corriente neta de la impureza en la superficie se vuelve nula. El potencial del grano en la superficie es más grande que la temperatura de los electrones $k_B T_e$, y por tanto la carga de la impureza adimensional puede estimarse experimentalmente como

$$z = \frac{Z_d e^2}{a k_B T_e} \approx 2 - 4. \quad (1.13)$$

Esta estimación es válida sólo cuando los electrones presenten una distribución térmica. La energía de los iones que son atraídos por el potencial de la impureza, aumentará hasta $(2 - 4)T_e$ al llegar a la impureza, que es una energía bastante grande respecto a las energías medias del ion en un plasma de baja temperatura, donde $\tau = T_i/T_e \ll 1$ (el valor típico para plasmas con impurezas es de $\tau \approx 0.01$). Como se ve la carga de la impureza es alta respecto a la de los iones y electrones. Aunque en principio es simple, la presencia de cargas grandes en la impureza posee muchos problemas aún no resueltos. El análisis se vuelve complicado debido a que varios procesos incluyen los efectos de las no-linealidades y la presencia de átomos neutros en plasmas de baja temperatura que hacen que las colisiones de iones y electrones con estos sean importantes. La carga puede depender de la polarización alrededor de la impureza, es decir del apantallamiento del campo del grano. La condición para que este apantallamiento sea lineal, requiere que la energía potencial de las partículas que forman parte del apantallamiento de una carga grande de la impureza, es decir la energía del electrón $|e|\phi$ y la energía del ion $Z_i e \phi$ sea mucho menor que su energía cinética asociada a las temperaturas de los electrones e iones, T_e y T_i respectivamente. El potencial que describe el apantallamiento lineal de la impureza es

$$\phi(r) = -\frac{Z_d e}{r} e^{-(r-a)/\lambda_D}, \quad (1.14)$$

donde λ_D es la longitud de Debye de la impureza, determinada por

$$\frac{1}{\lambda_D^2} = 4\pi n_0 e^2 \left(\frac{1}{T_i} + \frac{1}{T_e} \right). \quad (1.15)$$

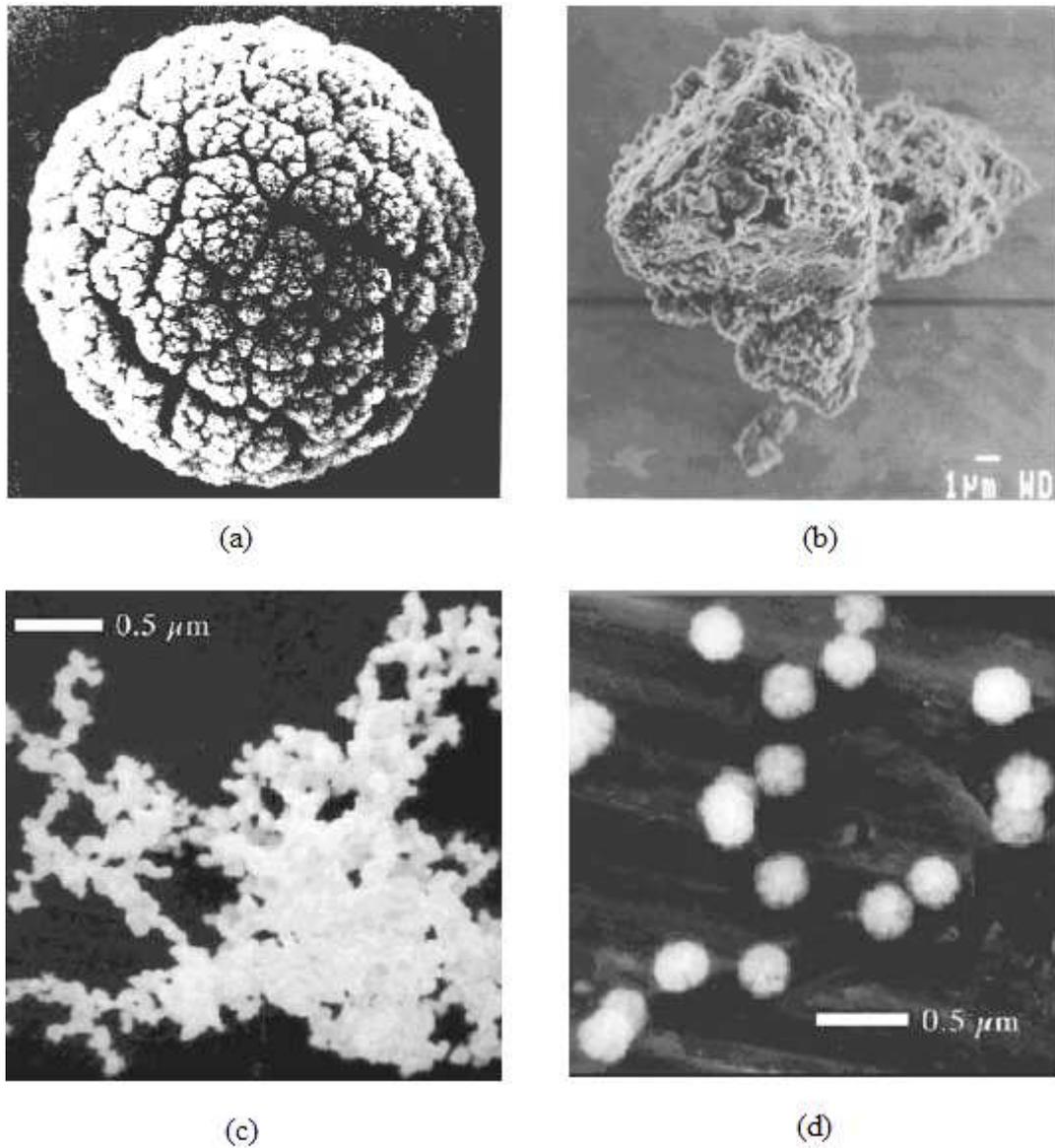


Figura 1.6: (a) Partículas de polvo de 650 nm de diámetro en un plasma de Helio, (b) partículas de polvo interplanetario, (c) granos aglomerados en forma de filamento y (d) granos esféricos en la superficie de experimentos de sputtering. Imágenes (a) y (b) tomadas de P. K. Shukla (2002) e imágenes (c) y (d) tomadas de V. N. Tsytovich (2008).

Capítulo 2

Interacción de Fotones con la Materia

En este capítulo estudiamos las diferentes formas de interacción de la radiación electromagnética con la materia. Para esto estudiamos la cuantización de la radiación electromagnética, los procesos de la atenuación de los fotones en la materia y la dependencia de las secciones eficaces en la energía de los fotones y en las propiedades de la materia.

2.1. Cuantización de la Radiación Electromagnética

Para tratar al campo electromagnético a nivel cuántico, es necesario empezar por una descripción clásica del campo, en la cual este es representado por un conjunto de variables infinito pero discreto. Esta descripción permite la inmediata aplicación del formalismo usual de la mecánica cuántica.

Sea $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ el vector potencial del campo electromagnético libre, que satisface la condición de transversalidad

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0, \quad (2.1)$$

y con potencial escalar $\Phi = 0$, de manera que los campos eléctrico y magnético son

$$\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}, \quad \mathbf{H} = \operatorname{curl} \mathbf{A}. \quad (2.2)$$

Las ecuaciones de Maxwell se reducen a la ecuación de onda para \mathbf{A}

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (2.3)$$

En electrodinámica clásica la descripción del campo en términos de un conjunto de variables discretas viene de considerar al campo en un volumen grande y finito. El

campo en un volumen finito puede ser expandido en términos de ondas planas, y su potencial se representa por la serie

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}), \quad (2.4)$$

donde los coeficientes $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ son funciones del tiempo tales que

$$\mathbf{a}_{\mathbf{k}} \sim e^{i\omega t}, \quad \omega = |\mathbf{k}|. \quad (2.5)$$

La condición (2.1) muestra que los vectores complejos $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ son ortogonales a los correspondientes vectores de onda, es decir $\mathbf{a}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k} = 0$.

Si los vectores \mathbf{k} son definidos, el campo en el volumen considerado es completamente determinado. Así estas cantidades pueden referirse como un conjunto discreto de *variables de campo* clásicas. Sin embargo para explicar la transición a la teoría cuántica se requiere una transformación adicional de estas variables, donde las ecuaciones de campo tomen una forma análoga a las ecuaciones canónicas de la mecánica clásica. Las variables de campo canónicas se definen por

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} + \mathbf{a}_{\mathbf{k}}^*) \\ \mathbf{P}_{\mathbf{k}} = \frac{-i\omega}{\sqrt{4\pi}} (\mathbf{a}_{\mathbf{k}} - \mathbf{a}_{\mathbf{k}}^*) = \dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k}}, \end{cases} \quad (2.6)$$

y son evidentemente reales. El vector potencial es expresado en términos de las variables canónicas por

$$\mathbf{A} = \sqrt{4\pi} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{Q}_{\mathbf{k}} \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{\omega} \mathbf{P}_{\mathbf{k}} \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (2.7)$$

Consideramos ahora la cuantización del campo electromagnético libre. La descripción clásica del campo dada anteriormente, hace que la transición a la teoría cuántica sea inmediata. Se deben usar entonces las variables canónicas como operadores con la regla de conmutación

$$\hat{P}_{\mathbf{k}\alpha} \hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha} - \hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha} \hat{P}_{\mathbf{k}\alpha} = -i; \quad (2.8)$$

donde los operadores con distintos valores de \mathbf{k} y α siempre conmutan. De igual manera, el potencial \mathbf{A} y, de acuerdo a (2.2), los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} se convierten en operadores hermitianos.

Definimos los operadores

$$\begin{cases} \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega \hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha} + i \hat{P}_{\mathbf{k}\alpha}) \\ \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega \hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha} - i \hat{P}_{\mathbf{k}\alpha}), \end{cases} \quad (2.9)$$

donde las cantidades físicas $c_{\mathbf{k}\alpha}$ y $c_{\mathbf{k}\alpha}^*$ son las mismas que $a_{\mathbf{k}\alpha}$ y $a_{\mathbf{k}\alpha}^*$ en (2.4) aparte de un factor $\sqrt{2\pi/\omega}$. Los elementos de matriz de estos operadores son

$$\begin{aligned} \langle N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle &= \langle N_{\mathbf{k}\alpha} | \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger | N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 \rangle \\ &= \sqrt{N_{\mathbf{k}\alpha}} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Las reglas de conmutación para $\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}$ y $\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^+$ se obtienen usando las definiciones (2.9) y la regla (2.8):

$$\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^+ - \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^+\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} = 1. \quad (2.11)$$

Para el vector potencial, se retorna a una expresión del tipo (2.4) pero con operadores como coeficientes, de manera que este se expresa en la forma

$$\hat{A} = \sum_{\mathbf{k},\alpha} (\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha} + \hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^+ \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}^*), \quad (2.12)$$

donde

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha} = \sqrt{4\pi} \frac{\mathbf{e}^{(\alpha)}}{\sqrt{2\omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.13)$$

El símbolo $\mathbf{e}^{(\alpha)}$ denota los vectores unitarios de las dos direcciones de polarización de las oscilaciones, estos vectores son perpendiculares al vector de onda \mathbf{k} . Los vectores $\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}$ son mutuamente ortogonales, es decir

$$\int \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha'} d^3x = \frac{2\pi}{\omega} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (2.14)$$

donde, si $\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}$ y $\mathbf{A}_{\mathbf{k}'\alpha'}$ pertenecen a diferentes vectores de onda, entonces su producto contiene un factor $e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}$, lo cual se anula en la integración respecto al volumen; y si difieren sólo en la polarización, entonces $\mathbf{e}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{e}^{(\alpha')} = 0$, dado que las dos direcciones independientes de la polarización son mutuamente ortogonales.

Es bien conocido que el potencial de campo en electrodinámica clásica, está sujeto a una elección arbitraria de los componentes del cuadri-vector A_μ , el cual puede presentar cualquier *transformación de gauge*¹ de la forma

$$A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \chi, \quad (2.15)$$

donde χ es cualquier función de las coordenadas y del tiempo. Para ondas planas, si consideramos sólo transformaciones que no dependan de la forma del potencial (proporcionales a $\exp(-ik_\mu x^\mu)$), la elección se reduce a la posibilidad de adherir a la amplitud de onda, cualquier cuadri-vector proporcional a k_μ . Esta arbitrariedad en el potencial persiste en la teoría cuántica, donde esta se relaciona con los operadores de campo o con las funciones de onda de los fotones. Si consideramos sólo transformaciones de gauge que no alteren la dependencia de la función (2.13) ni en las coordenadas ni en el tiempo, la transformación debe ser

$$e_\mu \rightarrow e_\mu + \chi k_\mu, \quad (2.16)$$

¹La traducción formal que se hace para la expresión “gauge” al español es “contraste”, sin embargo, en este trabajo se usará la expresión original para mayor claridad.

donde $\chi = \chi(k^\mu)$ es una función arbitraria. Dado que la polarización es transversal, es posible tomar una transformación de gauge tal que el cuadri-vector e^μ sea

$$e^\mu = (0, \mathbf{e}), \quad \mathbf{e} \cdot \mathbf{k} = 0. \quad (2.17)$$

Este resultado se denomina la *transformación de gauge transversal* [13].

2.2. Interacción de la Radiación con la Materia

Empezamos definiendo la intensidad de un haz de fotones para posteriormente analizar cómo esta intensidad se comporta al interactuar con la materia. La definición de la intensidad específica puede entenderse a partir de la Figura 2.1, donde dE es la cantidad de energía radiante que cruza en un tiempo dt el área dA con vector unitario normal $\hat{\mathbf{n}}$ en una dirección con ángulo sólido $d\Omega$ centrado alrededor de $\hat{\mathbf{k}}$ y con una frecuencia del fotón entre $d\nu$ y $\nu + d\nu$. La intensidad específica monocromática I_ν está definida por la expresión

$$dE = I_\nu(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA d\Omega d\nu dt \quad (2.18)$$

Esta definición viene de la conservación de I_ν en la ausencia de interacciones con la materia [14]. Considerando que la intensidad I_ν para un haz de fotones monocromáticos no-polarizados se puede expresar como una función de distribución de la forma

$$I_\nu = \sum_{\alpha=1}^2 I_{\nu\alpha} = \sum_{\alpha=1}^2 n_{\nu\alpha} \frac{h\nu^3}{c^2} = n_\nu \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} \right) \quad (2.19)$$

entonces podemos usar el principio de conservación de una función de distribución f en el espacio de fases $\{x^i(s), p^\alpha(s)\}$ a lo largo de una trayectoria de espacio-tiempo ds , que está dada por

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{df}{ds} = \frac{dx^i}{ds} \frac{\partial f}{\partial x^i} + \frac{dp^\alpha}{ds} \frac{\partial f}{\partial p^\alpha} \\ &= \frac{E_{\mathbf{p}}}{mc^2} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{d\mathbf{p}}{ds} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \\ &= \frac{E_{\mathbf{p}}}{mc^2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{mc^2}{E_{\mathbf{p}}} \frac{d\mathbf{p}}{ds} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Aquí $x^i = (ct, \mathbf{x})$ y $p^\alpha = (E_{\mathbf{p}}/c, \mathbf{p})$ son los cuadri-vectores de posición y momento de la partícula en el espacio de fases respectivamente. Usando la relación $(E_{\mathbf{p}}/mc^2)ds = dt$, se puede escribir esta ecuación como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{p}}{dt} \frac{\partial f}{\partial d\mathbf{p}} = 0. \quad (2.21)$$

En la presencia de fuentes o sumideros para las partículas, o si existen colisiones (dispersiones) entre las partículas, la ecuación anterior no será cero, y contendrá términos

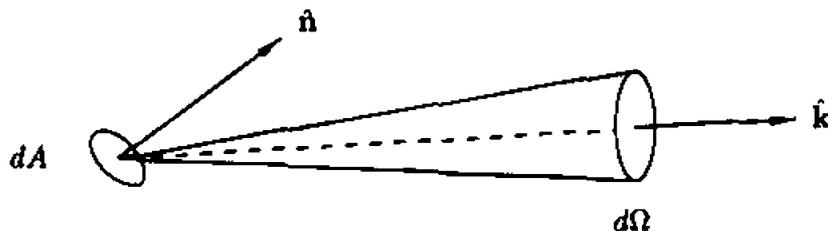


Figura 2.1: Definición de la intensidad específica. Imagen tomada de F. H. Shu (1991), p.4.

que representen la destrucción, creación o dispersión de las partículas. Para partículas de masa cero y que viajen a la velocidad de la luz (como los fotones) tendremos que $\dot{\mathbf{p}} = 0$ y $\mathbf{v} = c\mathbf{k}$, donde \mathbf{k} es el vector unitario en la dirección de propagación del fotón. Por tanto tendremos [15]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c\mathbf{k} \cdot \nabla f = 0 \quad (2.22)$$

Por tanto si reemplazamos f por la intensidad I_ν en (2.22) y consideramos que existen interacciones de la radiación con la materia, obtenemos la ecuación de transporte radiativo

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu}{\partial t} + \mathbf{k} \cdot \nabla I_\nu = \frac{1}{4\pi} \rho j_\nu - \rho \kappa_\nu^{\text{abs}} I_\nu - \rho \kappa_\nu^{\text{sca}} I_\nu + \rho \kappa_\nu^{\text{sca}} \oint \phi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{k}') I_\nu(\mathbf{k}') d\Omega' \quad (2.23)$$

donde ρ es la densidad del medio, j_ν es la emisividad por unidad de masa, κ_ν^{abs} es la opacidad de absorción total (sección eficaz de absorción por unidad de masa), κ_ν^{sca} es la opacidad total de dispersión, y $\phi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ es la densidad de probabilidad de transición (de \mathbf{k} a \mathbf{k}') que está normalizada satisface la condición

$$\oint \phi_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d\Omega' = \oint \phi_\nu(\mathbf{k}', \mathbf{k}) d\Omega' = 1 \quad (2.24)$$

En la ecuación (2.23), ρj_μ representa la fuente de la radiación que proviene de la emisión del medio (el factor 4π sirve para expresarlo por ester-radián); $-\rho \kappa_\nu^{\text{abs}}$ representa la cantidad de radiación absorbida del haz, por unidad de longitud recorrida por el fotón; $-\rho \kappa_\nu^{\text{sca}}$ representa análogamente la cantidad de radiación dispersada del haz; y el último término representa la contribución integral dispersada hacia el haz de radiación de cualquier otro lugar del sistema [14]. La ecuación de transporte radiativo puede expresarse de manera más simple en función del camino recorrido dl como

$$\frac{dI_\mu}{dl} = -\kappa_\nu \rho I_\nu + j_\nu \rho, \quad (2.25)$$

donde j_ν es la emisividad total, κ_ν es la opacidad total del sistema.

2.3. Atenuación de la Radiación

Los fotones tienen una alta probabilidad de ser absorbidos o dispersados a diversos ángulos por los átomos en la materia. Consecuentemente un haz colimado de fotones monoenergéticos de I fotones por segundo que atraviese un espesor dx de un material determinado perderá

$$dI = -I \frac{dx}{\lambda}, \quad (2.26)$$

fotones por segundo, donde

$$\lambda = (n_{atom}\sigma_\gamma)^{-1} \quad (2.27)$$

es el camino libre medio del fotón antes de la absorción o dispersión del haz, n_{atom} es la concentración de átomos en la muestra de materia y σ_γ es la sección eficaz total de la interacción del fotón con un átomo. Integrando (2.26) tenemos

$$I(x) = I_0 e^{-x/\lambda}, \quad (2.28)$$

para la intensidad del haz de fotones como función de la distancia, donde I_0 es la intensidad inicial del haz. Los principales procesos que contribuyen a σ_γ son: la dispersión de Rayleigh, donde los fotones se dispersan coherentemente de los átomos; el efecto fotoeléctrico, donde el fotón es absorbido por el átomo con la emisión de un electrón; el efecto Compton, donde el fotón se dispersa de un electrón atómico; y la producción de pares en el campo eléctrico del núcleo de un átomo o de un electrón atómico. En la Figura 2.2 se puede observar las correspondientes secciones eficaces del carbono (a) y del plomo (b). En general se puede ver una dependencia directa de la sección eficaz total con el número atómico de la muestra [16].

2.3.1. Dispersión de Mie y Rayleigh

Lord Rayleigh en 1899 formuló una teoría para la depresión de la luz por gases ideales, que explicaba no solo el origen de la dispersión atmosférica y el color azul del cielo despejado, sino que también proveía una expresión cuantitativa para la cantidad de luz dispersada. La dispersión de Rayleigh es una dispersión que se da debido al comportamiento dipolar de los átomos o moléculas. Una formulación moderna para la sección eficaz de la dispersión de Rayleigh para una sola molécula esta dada por

$$\sigma_R(\nu) = \frac{24\pi^3\nu^4}{N^2} \frac{(n^2 - 1)^2}{(n^2 + 2)^2} F_k \quad (2.29)$$

donde ν es la frecuencia del fotón incidente, N es la densidad molecular, n es el índice de refracción del medio y F_k es el factor de corrección de King, definido como $F_k = (6 + 3\rho_n)/(6 - 7\rho_n)$, donde ρ_n es la razón de despolarización de la luz natural y es un factor que viene de la anisotropía de moléculas no esféricas [17].

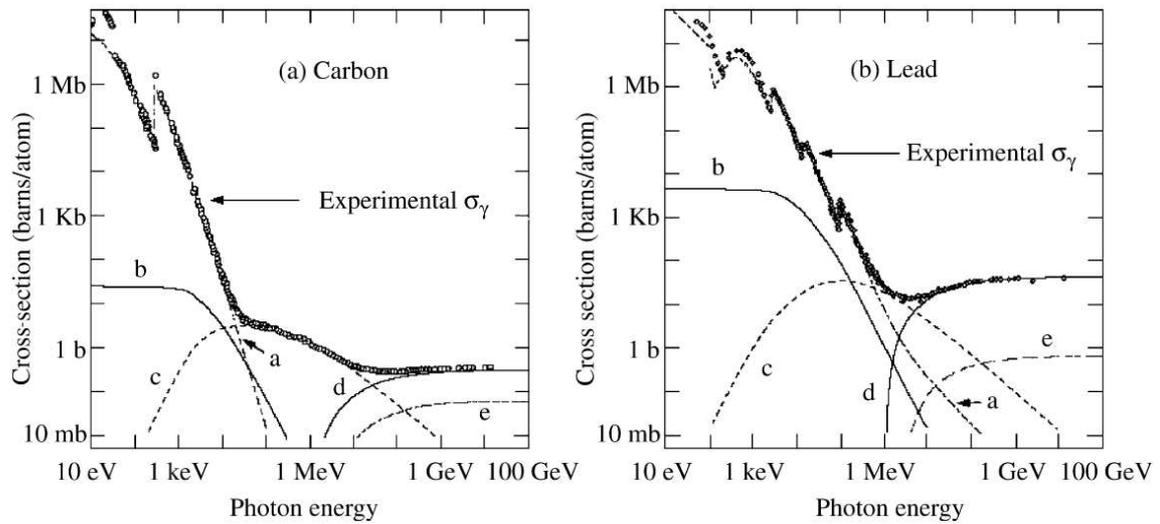


Figura 2.2: Secciones eficaces experimentales para fotones para (a) un átomo de carbono y (b) un átomo de plomo. Se pueden ver también las contribuciones respectivas de (a) el efecto fotoeléctrico, (b) dispersión atómica coherente de Rayleigh, (c) Dispersión de Compton, (d) producción de pares en el campo de Coulomb del núcleo y (e) producción de pares en el campo de Coulomb de los electrones atómicos. Imagen tomada de B. R. Martin (2006), p. 130.

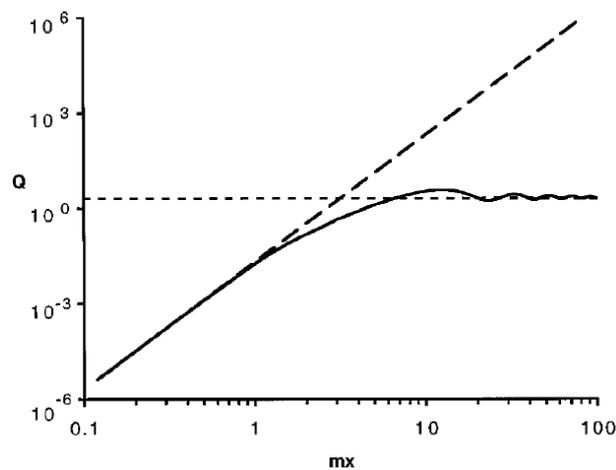


Figura 2.3: Gráfico de los coeficientes de dispersión $Q = \sigma/\pi a^2$ para la dispersión de Rayleigh (curva entrecortada) y la dispersión de Mie vs. mx para $m = 1.59/1.33$. La línea punteada indica el valor máximo de $Q = 2$. Imagen tomada de A. J. Cox, Alan J. DeWeerd, and Jennifer Linden. Am. J. Phys. 70 (6), 620-625, June (2002).

Para una partícula esférica, es posible expresar la ecuación (2.29) en términos del radio de la molécula y la longitud de onda de la radiación incidente, para lo cual tenemos

$$\sigma_R(\nu) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2\pi n_{med}}{\lambda_0} \right)^4 a^6 \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right)^2 \quad (2.30)$$

donde $m = n_{sph}/n_{med}$. La sección eficaz de Rayleigh es válida para partículas esféricas con un radio mucho menor comparado con el de la longitud de onda de la radiación dispersada, dentro y fuera de la partícula. Si $n_{med} \approx 1$ y expresamos λ_0 en función de la energía del fotón $\hbar\omega$,

$$\sigma_R(\hbar\omega) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{\hbar\omega}{c\hbar} \right)^4 a^6 \left(\frac{n_{sph}^2 - 1}{n_{sph}^2 + 2} \right)^2 \quad (2.31)$$

La sección eficaz de Mie es válida para átomos y moléculas esféricos de cualquier tamaño y se extiende para valores de longitud de onda mayores. Esta sección eficaz involucra un cálculo más complicado y la solución involucra una onda plana incidente y ondas esféricas dispersadas. La sección eficaz total se expresa como una serie infinita

$$\sigma_{Mie} = \frac{2\pi}{k_{med}^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (2.32)$$

donde $k_{med} = 2\pi n_{med}/\lambda$ y los coeficientes a_n y b_n están dados por

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{\mu m^2 j_n(mx) [x j_n(x)]' - \mu_1 j_n(x) [mx j_n(mx)]'}{\mu m^2 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu_1 h_n^{(1)}(x) [mx j_n(mx)]'} \\ b_n &= \frac{\mu_1 j_n(mx) [x j_n(x)]' - \mu j_n(x) [mx j_n(mx)]'}{\mu_1 j_n(mx) [x h_n^{(1)}(x)]' - \mu h_n^{(1)}(x) [mx j_n(mx)]'} \end{aligned} \quad (2.33)$$

donde j_n son las funciones de Bessel esféricas de primera clase y h_n son las funciones de Hankel esféricas, y μ_1 y μ son las permeabilidades magnéticas de la esfera y del medio, respectivamente. La cantidad $x = (2\pi n_{med}a)/\lambda_0$ se denomina parámetro de dimensión y las primas indican derivadas respecto a x . En la Figura 2.3 puede observarse que $\sigma_R \approx \sigma_{Mie}$ para $mx \ll 1$. Para $mx > 1$ se ve que la predicción de Rayleigh diverge, mientras que la de Mie tiende al valor de $Q = 2$, es decir el doble de la sección eficaz geométrica de la partícula πa^2 [18].

2.3.2. Efecto Fotoeléctrico

En este proceso la energía de un fotón incidente puede ser absorbida completamente por los electrones en el un átomo, en especial por los electrones de las capas energéticas más profundas. Por este motivo alrededor del 80 % de la absorción en el efecto fotoeléctrico

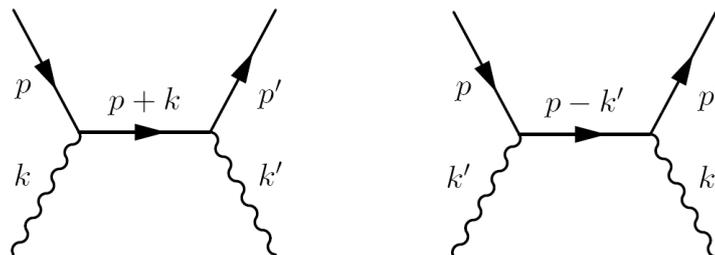


Figura 2.4: Diagramas de Feynman que describen la dispersión de Compton.

ocurre con los electrones de la capa K , si la energía del fotón excede la energía de enlace del electrón. La interacción ocurre básicamente con toda la nube atómica de la capa, no con los electrones individuales; cuando la energía del fotón incidente $\hbar\omega$ excede la energía de enlace de la capa electrónica B_e , entonces un electrón es emitido con una energía cinética

$$E_{kin} = \hbar\omega - B_e, \quad (2.34)$$

y el átomo adquiere la energía de retroceso (relativamente pequeña). La energía de enlace de un electrón puede calcularse mediante la siguiente fórmula semi-empírica

$$(B_e)_{tot} = 15.73 Z^{7/3} \text{ eV}. \quad (2.35)$$

Dependiendo del número atómico de la materia absorbadora, el efecto fotoeléctrico es predominante para energías del fotón de hasta 0.5 MeV ($\sim mc^2$) [19].

El cálculo de la sección eficaz del efecto fotoeléctrico puede realizarse mediante la teoría de dispersiones, tomando en cuenta la incidencia de un fotón con función de onda $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$ en un átomo hidrogenoide de numero atómico Z . Se considera el electrón antes de la colisión en el estado base con función de onda $\psi = (Ze^2m)^{3/2}e^{-Ze^2mr}/\sqrt{\pi}$; y después de la colisión en un estado de partícula libre, descrita por una función de onda esférica $\psi' = (3/2p)(\mathbf{n}_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{r}})R_{pl}(r)$. Para el caso no relativista en el que la energía del fotón es menor a la energía en reposo del electrón, es decir $\hbar\omega \ll mc^2$, la sección eficaz total del efecto fotoeléctrico está dada por

$$\sigma_{ph} = \frac{2^9\pi^2}{3}\alpha a^2 \left(\frac{I}{\hbar\omega}\right)^4 \frac{e^{-4\nu \cot^{-1}\nu}}{1 - e^{-2\pi\nu}} \quad (2.36)$$

donde $I = Z^2e^4m/2\hbar^2$ es la energía de ionización aproximada del estado base del átomo, $\nu = Ze^2/\hbar v$, y v es la velocidad del electrón emitido.

Para el caso relativista en el que la energía del fotón es del orden de la energía en reposo del electrón $\hbar\omega \sim \gg mc^2$, y mayor que la energía de enlace $\hbar\omega \gg I$, la sección

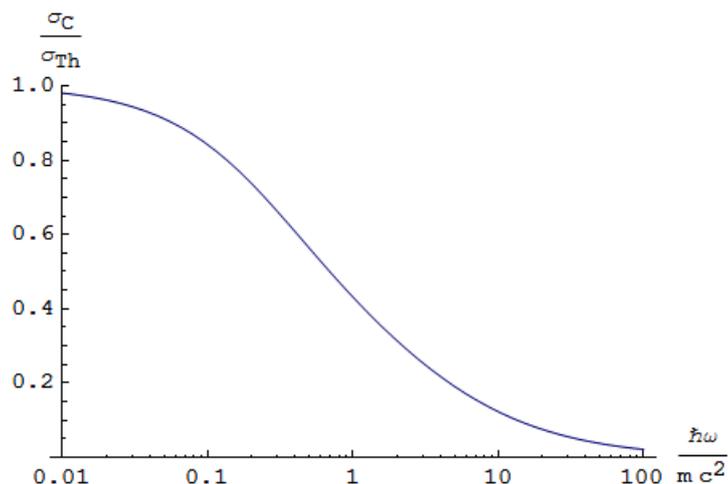


Figura 2.5: Sección eficaz total para la dispersión de Compton normalizada respecto a la sección eficaz de Thompson σ_C/σ_{Th} , en función de la energía del fotón normalizada respecto a la masa del electrón $\hbar\omega/mc^2$.

eficaz total del efecto fotoeléctrico está dada por

$$\sigma_{ph} = 2\pi Z^5 \alpha^4 r_e^2 \frac{(\gamma^2 - 1)^{3/2}}{(\gamma - 1)^5} \left[\frac{4}{3} + \frac{\gamma(\gamma - 2)}{\gamma - 1} \left(1 - \frac{1}{2\gamma\sqrt{\gamma^2 - 1}} \ln \frac{\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 1}} \right) \right]^2 \quad (2.37)$$

donde $\gamma = 1/\sqrt{1 - (v/c)^2} \approx \epsilon/m$ es el factor de Lorentz. Las ecuaciones (2.36) y (2.37) definen totalmente el efecto fotoeléctrico [13].

2.3.3. Efecto Compton

El efecto Compton es la dispersión de fotones por electrones libres. El efecto Compton es significativo cuando la energía del fotón es comparable o mayor a $mc^2 = 0.15$ MeV. Su máximo es alrededor de 1 MeV y es pronunciado para ángulos de dispersión grandes. El cálculo de la sección eficaz de Compton es complicado ya que involucra el uso de electrodinámica cuántica [19].

El proceso se da cuando fotón entrante con cuadri-momento k es absorbido por un electrón con cuadri-momento p , y un segundo fotón con cuadri-momento k' es emitido y el electrón queda con un cuadri-momento p' . Los diagramas de Feynman correspondientes se muestran en la Figura 2.4. Resolviendo estos diagramas, promediando las polarizaciones del fotón y promediando los espines de los electrones, se obtiene la ecuación de Klein-Nishina, que describe la sección eficaz diferencial del efecto Compton, y está dada por

$$\frac{d\sigma_C}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_e^2 \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{\omega} - \sin^2 \theta \right) \quad (2.38)$$

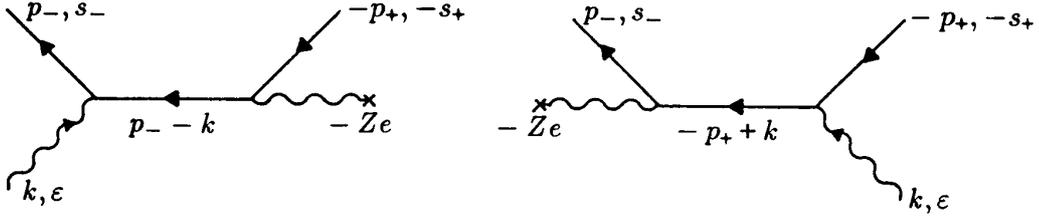


Figura 2.6: Diagramas de Feynman para la producción de un par electrón-positrón producido por un fotón en el campo de Coulomb de un núcleo atómico.

donde $r_e = e^2/mc^2$ es el radio clásico del electrón, ω es la frecuencia angular del fotón incidente, ω' es la frecuencia angular del fotón dispersado, θ es el ángulo de dispersión. Esta ecuación se puede integrar tomando en cuenta la relación que existe entre el fotón incidente y dispersado, dada por

$$\omega' = \frac{\omega}{1 + \frac{\hbar\omega}{mc^2}(1 - \cos\theta)}. \quad (2.39)$$

Reemplazando esta ecuación en (2.38) e integrando respecto a todos los ángulos, se obtiene la sección eficaz total de la dispersión de Compton

$$\sigma_C = 2\pi r_e^2 \left(\frac{1+x}{x^3} \left(\frac{2x(1+x)}{1+2x} + \frac{1}{2x} \right) \ln(1+2x) - \frac{1+3x}{(1+2x)^2} \right), \quad (2.40)$$

donde $x = \hbar\omega/mc^2$. Para energías bajas del fotón $\hbar\omega \ll mc^2$, es decir en límite en el que $x \rightarrow 0$ se obtiene

$$\sigma_{Th} = \frac{8\pi}{3} r_e^2, \quad (2.41)$$

que es la sección eficaz de Thompson clásica para el electrón [20].

2.3.4. Producción de Pares

Si la energía de la radiación electromagnética excede $2mc^2 = 1.02$ MeV, la producción de un par electrón-positrón es energéticamente posible. En este caso estamos interesados en la producción de un par electrón-positrón que se da cuando un fotón $\hbar\omega$ interactúa con el campo de Coulomb de un núcleo Ze , es decir $(Z + \gamma \rightarrow Z + e^- + e^+)$. Utilizando los métodos de la electrodinámica cuántica, la sección eficaz de este proceso está dada por

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{pp}}{dE_+} = & Z^2 r_e^2 \alpha \frac{p_+ p_-}{\omega^3} \left\{ -\frac{4}{3} - 2E_+ E_- \frac{p_+^2 + p_-^2}{p_+^2 p_-^2} + \frac{mE_+ \eta_-}{p_-^2} + \frac{mE_- \eta_+}{p_+^2} - \right. \\ & \left. -\eta_+ \eta_- + L \left[\frac{\omega^2}{p_+^3 p_-^3} (E_-^2 E_+^2 + p_-^2 p_+^2) - \frac{8E_+ E_-}{3 p_+ p_-} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{m^2 \omega}{2p_+ p_-} \left(\frac{E_+ E_- - p_-^2}{m p_-^2} \eta_- + \frac{E_+ E_- - p_+^2}{m p_+^2} \eta_+ + \frac{2\omega E_+ E_-}{p_+^2 p_-^2} \right) \right] \right\}; \quad (2.42) \end{aligned}$$

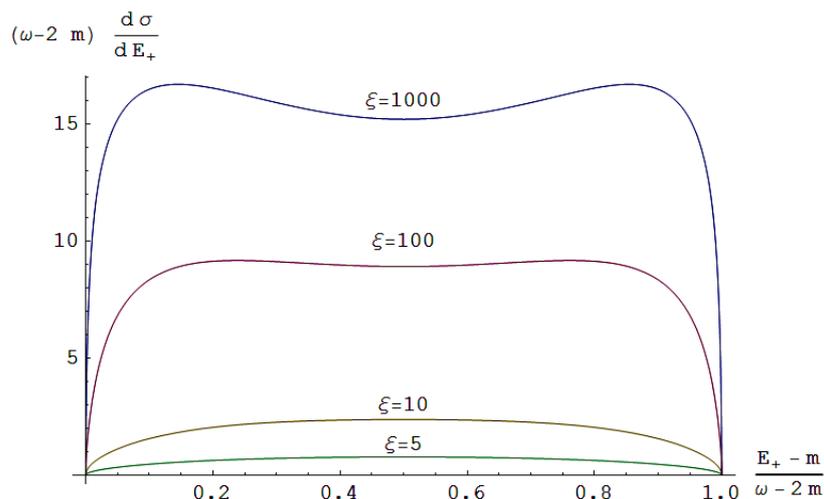


Figura 2.7: Sección eficaz diferencial para la producción de pares electrón-positrón a partir de fotones con energía ω .

donde

$$\eta_{\pm} = 2 \frac{m}{p_{\pm}} \ln \left[\frac{E_{\pm} + p_{\pm}}{m} \right], \quad L = 2 \text{Log} \left[\frac{E_+ E_- + p_+ p_- + m^2}{m\omega} \right].$$

En la ecuación (2.42), $p_+ = |\mathbf{p}_+|$ y $p_- = |\mathbf{p}_-|$ son los momentos del positrón y el electrón respectivamente, $E_+ = \sqrt{p_+^2 + m^2}$ y $E_- = \sqrt{p_-^2 + m^2}$ son las energías del positrón y el electrón producidos respectivamente. La conservación de la energía está dada por la relación $E_+ + E_- = \omega$ y el momento transferido al núcleo es $\mathbf{q} = \mathbf{p}_+ + \mathbf{p}_- - \mathbf{k}$, donde \mathbf{k} es el momento del fotón. Se debe mencionar que el resultado de la ecuación anterior está basado en la aproximación de Born de ondas planas para el electrón y el positrón, es decir tiene un rango limitado de validez dado por

$$\frac{Ze^2}{\hbar|v_{\pm}|} \quad (2.43)$$

Para cargas nucleares altas y velocidades bajas del electrón y el positrón, la interacción de las cargas producidas con el campo de Coulomb del núcleo se vuelven importantes.

La Figura 2.7 muestra la distribución de energía del positrón creado como función de la energía cinética $E_+ - m$, normalizado respecto a la energía total disponible $\omega - 2m$. La sección eficaz $d\sigma_{pp}/dE_+$ ha sido multiplicada por $\omega - 2m$ de manera que el área bajo la curva represente la sección eficaz total σ_{pp} , la cual se observa que crece lentamente con la energía [20].

Capítulo 3

Teoría Cuántica de Sistemas de Muchas Partículas

En este trabajo requerimos investigar los efectos cuánticos de la radiación en un plasma. Dado que este puede ser considerado como un sistemas de muchas partículas, hemos encontrado que la teoría más adecuada para abordar el problema es la *Teoría Cuántica de Sistemas de Muchas Partículas*. Por tanto, en este capítulo se extrae los principales elementos de esta teoría, la cual es una materia extensa que ha sido desarrollada para entender teóricamente las propiedades observacionales de una amplia variedad de sistemas físicos, en especial en Materia Condensada. En la literatura existen dos teorías para describir un sistema de muchas partículas: las teorías del estado base de muchas partículas y las teorías que se refieren a un promedio térmico a temperatura T . En todos los casos, los resultados a temperatura cero se puede obtener en el límite $T \rightarrow 0$ de la teoría a temperatura finita. Este capítulo empieza tratando los sistemas de partículas idénticas, donde se definen los operadores de segunda cuantización. Se realiza una revisión de las diferentes representaciones que describen la evolución de un sistema. También se presentan los principales elementos de la *teoría de perturbaciones diagramática*, la cual es un método que permite calcular magnitudes de interés físico para sistemas de muchas partículas, utilizando la facilidad gráfica de los diagramas de Feynman. Los elementos principales de esta teoría son las funciones de Green, con las cuales es más fácil aplicar las reglas de Feynman para encontrar la contribución de n -ésimo orden de la teoría de perturbaciones.

3.1. Sistemas de Partículas Idénticas

En esta sección desarrollamos una descripción mecánico cuántica de un sistemas de muchas partículas no relativistas. Estos sistemas aparecen en la naturaleza de muchas formas, como en electrones en cristales, moléculas y átomos, fotones en campos electromagnéticos, vibraciones y combinaciones de electrones y fonones en cristales, protones y neutrones en el núcleo y quarks en mesones y bariones, etc. Hay que notar que los últimos ejemplos requieren descripciones relativistas.

El espacio de Hilbert de estados para sistemas de N partículas idénticas, es el espacio \mathcal{H}_N de funciones integrables cuadráticas complejas, definido en el espacio de configuración de las N partículas. La función de onda $\psi_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$, la cual representa la amplitud de probabilidad de encontrar a las partículas en las N posiciones $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$, debe satisfacer la condición

$$\langle \psi_N | \psi_N \rangle = \int d^3r_1 \dots d^3r_N |\psi_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 < +\infty. \quad (3.1)$$

De esta manera, el espacio de Hilbert \mathcal{H}_N es simplemente el N -ésimo producto tensorial del espacio de Hilbert de partícula simple \mathcal{H}

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H} \quad (3.2)$$

Los estados base tienen asociadas las funciones de onda

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \langle \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N | \alpha_1 \dots \alpha_N \rangle \\ &= \phi_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2) \dots \phi_{\alpha_N}(\mathbf{r}_N) \end{aligned} \quad (3.3)$$

Físicamente, es claro que el espacio \mathcal{H}_N es generado por las combinaciones lineales de productos de funciones de onda de partícula simple. Más aún, definiendo el espacio de Hilbert \mathcal{H}_N , no hemos tomado en cuenta la propiedad de simetría de la función de onda. En contraste a la multitud de estados simétricos puros y mezclados que se pueden definir matemáticamente, sólo estados totalmente simétricos o antisimétricos se observan en la naturaleza [8]. Este se denomina *postulado de simetrización* y menciona lo siguiente:

Cuando un sistema incluye muchas partículas idénticas, sólo ciertos kets del espacio de estados pueden describir su estado físico. Dependiendo de la naturaleza de las partículas, estos estados pueden ser completamente simétricos o completamente antisimétricos con respecto a la permutación de estas partículas. Las partículas que están en estados físicos simétricos o antisimétricos se denominan bosones o fermiones respectivamente [21].

Aunque los requerimientos de simetría para bosones y fermiones son por último determinados por el experimento, se puede probar en el contexto de la teoría cuántica de

campos, que dadas ciertas condiciones generales de localidad, causalidad e invariancia de Lorentz, que las partículas con spin entero $(0, 1, 2, \dots)$ son bosones y las partículas con spin semientero $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots)$ son fermiones. Ejemplos familiares de bosones incluyen fotones, piones, mesones, gluones y el átomo de 4He . Ejemplos de fermiones incluyen protones, neutrones, electrones, muones, neutrinos, quarks y el átomo de 3He . Partículas compuestas de cualquier número de bosones o un número par o impar de fermiones, se comportan como bosones o fermiones respectivamente a energía suficientemente bajas comparadas con sus energías de enlace.

Una función de onda $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ de \mathcal{H}_N pertenece al espacio de Hilbert de N bosones \mathcal{B}_N o al espacio de Hilbert de N fermiones \mathcal{F}_N , si esta es simétrica o antisimétrica respectivamente, bajo una permutación de partículas. Estos requerimientos de simetría requieren restricciones del espacio de Hilbert \mathcal{H}_N de sistemas de N partículas. Para esto definimos el operador de simetrización \mathcal{P}_B y el operador de antisimetrización \mathcal{P}_F en \mathcal{H}_N por su acción en la función de onda $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$

$$\mathcal{P}_{\{\mathcal{B}, \mathcal{F}\}}\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{N!} \sum_P \zeta^P \psi(\mathbf{r}_{P1}, \dots, \mathbf{r}_{PN}) \quad (3.4)$$

donde P es la paridad de la permutación y ζ es $+1$ o -1 para bosones o fermiones respectivamente. Estos operadores proyectan \mathcal{H}_N en el espacio de Hilbert de bosones \mathcal{B}_N y en el espacio de Hilbert de fermiones \mathcal{F}_N

$$\mathcal{B}_N = \mathcal{P}_B \mathcal{H}_N \quad (3.5)$$

$$\mathcal{F}_N = \mathcal{P}_F \mathcal{H}_N \quad (3.6)$$

Si la base $|\alpha\rangle$ es ortogonal en \mathcal{H} , entonces la base $|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle_o$ es ortogonal en \mathcal{H}_N y la base $|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle_s$ es ortogonal en \mathcal{B}_N o \mathcal{F}_N . El producto escalar construido con la misma base $|\alpha\rangle$ es

$${}_s\langle \alpha'_1 \dots \alpha'_N | \alpha_1 \dots \alpha_N \rangle_s = \sum_P \zeta^P \langle \alpha'_1 | \alpha_{P1} \rangle \dots \langle \alpha'_N | \alpha_{PN} \rangle. \quad (3.7)$$

Para fermiones, dado que solo existe un partícula por estado $|\alpha\rangle$, no pueden estar presentes dos estados idénticos en el conjunto $\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$, y por lo tanto se obtiene

$$\langle \alpha'_1 \dots \alpha'_N | \alpha_1 \dots \alpha_N \rangle = (-1)^P \quad (3.8)$$

Para bosones, muchas partículas pueden ocupar el mismo estado, y por tanto, cualquier permutación que no intercambie partículas en el mismo estado contribuye a la suma (3.7). Por tanto la superposición está dada por

$$\langle \alpha'_1 \dots \alpha'_N | \alpha_1 \dots \alpha_N \rangle = n_1! n_2! \dots n_P! \quad (3.9)$$

Para bosones los números de ocupación no tienen restricciones, mientras que para fermiones estos pueden tomar solo los valores 1 y 0. En ambos casos, la suma de los

números de ocupación, la cual cuenta el número total de estados, debe ser igual al número de partículas N ,

$$N = \sum_{\alpha} n_{\alpha}. \quad (3.10)$$

Usando la convención de que $0! = 1$ las formulas (3.8, 3.9) son equivalentes a la expresión

$$\langle \alpha'_1 \dots \alpha'_N | \alpha_1 \dots \alpha_N \rangle = \zeta^P \prod_{\alpha} n_{\alpha}!. \quad (3.11)$$

Una base ortonormal para el espacio de Hilbert \mathcal{B}_N o \mathcal{F}_N se obtiene utilizando (3.11) para normalizar los estados $|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle$

$$|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{\alpha} n_{\alpha}!}} \sum_P \zeta^P |\alpha_{P1}\rangle \otimes |\alpha_{P2}\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_{PN}\rangle. \quad (3.12)$$

El producto escalar entre $|\beta_1 \dots \beta_N\rangle$ construido a partir de una base ortonormal $|\beta\rangle$ y el estado simetrizado o anisimetrizado $|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle$ es

$$\begin{aligned} \langle \beta_1 \dots \beta_N | \alpha_1 \dots \alpha_N \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{\alpha} n_{\alpha}!}} \sum_P \zeta^P \langle \beta_1 | \alpha_{P1} \rangle \langle \beta_2 | \alpha_{P2} \rangle \dots \langle \beta_N | \alpha_{PN} \rangle \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{\alpha} n_{\alpha}!}} S(\langle \beta_i | \alpha_i \rangle), \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde $S(M_{ij})$ denota una permanente para bosones y un determinante para fermiones

$$Per(M_{ij}) \equiv \sum_P M_{1,P1} M_{2,P2} \dots M_{N,PN} \quad (3.14)$$

$$det(M_{ij}) \equiv \sum_P (-1)^P M_{1,P1} M_{2,P2} \dots M_{N,PN} \quad (3.15)$$

En representación de coordenadas, obtenemos entonces una base permanente de funciones de onda para bosones y una base de determinantes de Slater para fermiones

$$\psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{\alpha} n_{\alpha}!}} Per(\phi_{\alpha_i}(x_i)) \quad (3.16)$$

$$\psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} det(\phi_{\alpha_i}(x_i)). \quad (3.17)$$

3.1.1. Operadores de Segunda Cuantización

Los operadores de creación y aniquilación proveen una representación conveniente de los estados de muchas partículas introducidos anteriormente. Estos operadores generan todo el espacio de Hilbert bajo su acción en un único estado de referencia y provee una base para el algebra de operadores en el espacio de Hilbert. Para cada partícula en el estado $|\lambda\rangle$ del espacio de Hilbert de partícula simple \mathcal{H} , definimos un operador

de creación de fermiones o bosones a_λ^\dagger por su acción en un estado simetrizado o antisimetrizado $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ de una base ortonormal $\{|\lambda\rangle\}$ de \mathcal{B}_N o \mathcal{F}_N como sigue

$$a_\lambda^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = \sqrt{n_\lambda + 1} |\lambda \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle. \quad (3.18)$$

donde n_λ es el número de ocupación del estado $|\lambda\rangle$ en $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$. Físicamente el operador a_λ^\dagger adiciona una partícula en el estado $|\lambda\rangle$ al estado en el que opera, y simetriza o antisimetriza el nuevo estado. En el caso de fermiones, dado que solo puede existir un fermión en un estado dado, entonces (3.27) toma la forma

$$a_\lambda^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = \begin{cases} |\lambda \lambda_1 \dots \lambda_N\rangle & \text{si } |\lambda\rangle \text{ no esta presente en } |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle \\ 0 & \text{si } |\lambda\rangle \text{ esta presente en } |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle \end{cases} \quad (3.19)$$

Definimos el estado de vacío denotado como $|0\rangle$, el cual representa un estado con cero partículas, es decir

$$a_\lambda^\dagger |0\rangle = |\lambda\rangle. \quad (3.20)$$

El estado de vacío $|0\rangle$ es un estado físico sin partículas y debe ser diferenciado del cero del espacio de Hilbert. Los operadores de creación no operan dentro de un espacio \mathcal{B}_n o \mathcal{F}_n , sino desde cualquier espacio \mathcal{B}_n o \mathcal{F}_n al espacio \mathcal{B}_{n+1} o \mathcal{F}_{n+1} . Es útil definir el espacio de Fock como la suma directa de los espacios de bosones o fermiones

$$\mathcal{B} = \mathcal{B}_0 \oplus \mathcal{B}_1 \oplus \mathcal{B}_2 \oplus \dots = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{B}_n \quad (3.21)$$

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus \dots = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{F}_n \quad (3.22)$$

donde por definición

$$\mathcal{B}_0 = \mathcal{F}_0 = |0\rangle \quad (3.23)$$

$$\mathcal{B}_1 = \mathcal{F}_1 = \mathcal{H} \quad (3.24)$$

Cualquier vector de la base $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ puede ser generado por repetidas acciones del operador de creación en el vacío $|0\rangle$

$$|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\prod_\lambda n_\lambda!}} a_{\lambda_1}^\dagger a_{\lambda_2}^\dagger \dots a_{\lambda_N}^\dagger |0\rangle \quad (3.25)$$

De esta manera los operadores de creación generan todo el espacio de Fock mediante repetidas aplicaciones en el vacío. Las propiedades de simetría o antisimetría de los estados de muchas partículas, imponen relaciones de conmutación o anticonmutación entre los operadores de creación. Para cualquier estado $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ y cualesquiera estados de partícula $|\nu\rangle$ y $|\mu\rangle$ se obtiene

$$a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle = \zeta a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger |\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle. \quad (3.26)$$

Dado que esta ecuación se mantiene para cualquier estado, entonces los operadores a^\dagger 's satisfacen la relación

$$[a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger]_\zeta = a_\nu^\dagger a_\mu^\dagger - \zeta a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger = 0, \quad (3.27)$$

la cual es una relación de conmutación para bosones y una de anticonmutación para fermiones. Los operadores de creación a_λ^\dagger no son autoadjuntos, por tanto definimos a los operadores de aniquilación a_λ como los adjuntos de los operadores de creación. Las relaciones de conmutación de los operadores de aniquilación siguen directamente de (3.27)

$$[a_\nu a_\mu]_{-\zeta} = a_\nu a_\mu - \zeta a_\mu a_\nu = 0. \quad (3.28)$$

Es decir, el efecto de a_λ actuando sobre cualquier estado es aniquilar una partícula en el estado $|\lambda\rangle$. Para un estado normalizado $|\beta_1 \dots \beta_n\rangle$ con números de ocupación n_λ para el estado $|\lambda\rangle$, se tiene

$$a_\lambda |\beta_1 \dots \beta_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_\lambda}} \sum_{i=1}^{n_\lambda} \zeta^{i-1} \delta_{\lambda\beta_i} |\beta_1 \dots \beta_{i-1} \beta_{i+1} \dots \beta_n\rangle. \quad (3.29)$$

En particular, cuando actúa sobre el estado de vacío se tiene

$$a_\lambda |0\rangle = 0, \quad \langle 0|a_\lambda^\dagger = 0 \quad (3.30)$$

De aquí se deduce que el estado de vacío es el núcleo de los operadores de aniquilación. Para fermiones es conveniente escribir (3.29) en la forma

$$a_\lambda |\beta_1 \dots \beta_n\rangle = \begin{cases} (-1)^{i-1} |\beta_1 \dots \beta_{i-1} \beta_{i+1} \dots \beta_n\rangle & \text{si } |\lambda\rangle \text{ está ocupado} \\ 0 & \text{si } |\lambda\rangle \text{ no está ocupado} \end{cases} \quad (3.31)$$

Para completar el algebra de los operadores de segunda cuantización, evaluamos el conmutador de los operadores de creación y aniquilación. Para cualquier estado $|\lambda_1 \dots \lambda_N\rangle$ y cualesquiera estados de partícula $|\nu\rangle$ y $|\mu\rangle$ se puede demostrar que

$$a_\nu a_\mu^\dagger |\beta_1 \dots \beta_n\rangle = (\delta_{\nu\mu} + \zeta a_\mu^\dagger a_\nu) |\beta_1 \dots \beta_n\rangle, \quad (3.32)$$

para cualquier estado $|\beta_1 \dots \beta_n\rangle$, de manera que los operadores de creación y aniquilación satisfacen las ecuaciones

$$[a_\nu, a_\mu^\dagger]_{-\zeta} = a_\nu a_\mu^\dagger - a_\mu^\dagger a_\nu = \delta_{\nu\mu}. \quad (3.33)$$

Esta es una relación de conmutación para bosones y una de anticonmutación para fermiones. Además de generar todos los estados de muchas partículas en el espacio de Fock por repetidas acciones en el vacío, una propiedad fundamental de los operadores de segunda cuantización es que estos proveen una base para todos los operadores en el espacio de Fock. es decir, cualquier operador puede ser expresado como una combinación lineal de un conjunto de productos de los operadores $\{a_\alpha^\dagger, a_\alpha\}$.

De particular importancia son los operadores de creación y aniquilación expresados en la base $\{|x\rangle\}$, donde $|x\rangle$ representa $|\mathbf{r}\sigma\tau\rangle$. En este caso los operadores son denotados como $\hat{\psi}^\dagger(x)$ y $\hat{\psi}(x)$ y se denominan operadores de campo. Sus relaciones de conmutación y anticonmutación son

$$\left[\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(y)\right]_{-\zeta} = \left[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y)\right]_{-\zeta} = 0 \quad (3.34)$$

$$\left[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)\right]_{-\zeta} = \delta(x - y). \quad (3.35)$$

La expansión de estos estados en una base $\{|\alpha\rangle\}$ es

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_{\alpha} \langle\alpha|x\rangle a_{\alpha}^{\dagger} = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(x) a_{\alpha}^{\dagger} \quad (3.36)$$

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{\alpha} \langle x|\alpha\rangle a_{\alpha} = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(x) a_{\alpha} \quad (3.37)$$

donde $\phi_{\alpha}(x)$ es la representación de coordenadas de la función de onda del estado $|\alpha\rangle$.

3.1.2. Operadores de Muchas Partículas

Consideramos los elementos de matriz de los operadores de muchas partículas en la base canónica de \mathcal{H}_N . De aquí la representación de los operadores en los espacios \mathcal{B}_N y \mathcal{F}_N sigue inmediatamente usando los operadores de simetrización y antisimetrización $\mathcal{P}_{\mathcal{B},\mathcal{F}}$. Sea \mathcal{O} un operador arbitrario en \mathcal{B}_N o \mathcal{F}_N . Independientemente de que las partículas sean fermiones o bosones, su indistinguibilidad implica que $\hat{\mathcal{O}}$ sea invariante bajo cualquier permutación de partículas. De manera que para cualquier estado y permutación P :

$$(\beta_{P1} \dots \beta_{PN} | \mathcal{O} | \beta_{P1}^{\dagger} \dots \beta_{PN}^{\dagger}) = (\beta_1 \dots \beta_N | \mathcal{O} | \beta_1^{\dagger} \dots \beta_N^{\dagger}) \quad (3.38)$$

Empezamos considerando el caso de operadores de una partícula. Un operador \hat{U} es un operador de partícula simple si la acción de \hat{U} en el estado $|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle$ de N partículas es la suma de la acción de U en cada partícula:

$$\hat{U}|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = \sum_{i=1}^N \hat{U}_i |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle, \quad (3.39)$$

donde el operador \hat{U}_i opera sólo en la i -ésima partícula. Por ejemplo, el operador de energía cinética \hat{T} en la base \mathbf{p} , actúa como:

$$\hat{T}|\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_N\rangle = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i}{2m} |\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_1\rangle. \quad (3.40)$$

En general se define un operador de n-partículas \hat{R} como un operador que actúa en un estado $|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle$ de la siguiente manera:

$$\hat{R}|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = \frac{1}{n!} \sum_{1 \leq i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_n \leq N} \hat{R}_{i_1, i_2, \dots, i_n} |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle \quad (3.41)$$

Es decir, la acción de \hat{R} en el estado de N-partículas es la suma de la acción de \hat{R} en todos los subconjuntos de n-partículas. Análogamente al caso previo, los elementos de matriz de \hat{R} satisfacen:

$$\frac{(\alpha_1 \dots \alpha_N | \hat{R} | \beta_1 \dots \beta_N)}{(\alpha_1 \dots \alpha_N | \beta_1 \dots \beta_N)} = \frac{1}{n!} \sum_{i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_n} \frac{(\alpha_{i_1} \dots \alpha_{i_n} | \hat{R} | \beta_{i_1} \dots \beta_{i_n})}{\langle \alpha_{i_1} | \beta_{i_1} \rangle \langle \alpha_{i_2} | \beta_{i_2} \rangle \dots \langle \alpha_{i_n} | \beta_{i_n} \rangle}, \quad (3.42)$$

y un operador de n-partículas está enteramente determinado por sus elementos de matriz $(\alpha_1 \dots \alpha_n | \hat{R} | \beta_1 \dots \beta_n)$ en el espacio de Hilbert \mathcal{H}_n de sistemas de n-partículas.

Como ejemplos citamos a la energía cinética \hat{T} , a la operador de interacción entre dos partículas y al operador de interacción entre un numero indefinido de partículas \hat{R} .

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \nabla^2 \hat{\psi}(x) \quad (3.43)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\nu\rho} \langle \lambda\mu | V | \nu\rho \rangle a_\lambda^\dagger a_\mu^\dagger a_\rho a_\nu \quad (3.44)$$

$$\hat{R} = \frac{1}{n!} \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_n} \sum_{\mu_1 \dots \mu_n} \langle \lambda_1 \dots \lambda_n | R | \mu_1 \dots \mu_n \rangle a_{\lambda_1}^\dagger \dots a_{\lambda_n}^\dagger a_{\mu_n} \dots a_{\mu_1} \quad (3.45)$$

3.2. Representaciones de la Mecánica Cuántica

Formalmente, existen diferentes maneras de formular la dinámica de la mecánica cuántica, pero estas son matemáticamente equivalentes. Estas distintas formulaciones se denominan *representaciones*. Para un observable \mathcal{A} , el valor esperado en el estado cuántico $|\psi\rangle$ es

$$\bar{A} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \quad (3.46)$$

La dependencia en el tiempo del valor esperado de \mathcal{A} puede ser introducida a través de la dependencia en el tiempo del estado cuántico $|\psi\rangle$, o mediante la dependencia en el tiempo del operador \hat{A} , o a través de ambos [7].

Representación de Schrödinger

En la representación de Schrödinger, toda la dependencia en el tiempo se introduce mediante el estado cuántico $|\psi(t)\rangle$. Los operadores son independientes del tiempo, a excepción de ciertos operadores con dependencia explícita en el tiempo. La evolución en el tiempo del estado cuántico depende del operador de evolución unitario $\hat{U}(t, t_0)$,

el cual relaciona el estado cuántico en el tiempo t con el mismo estado en un tiempo de referencia t_0 ,

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle. \quad (3.47)$$

Los estados cuánticos en dos tiempos arbitrarios t y t' están relacionados por el operador de evolución $\hat{U}(t, t') = \hat{U}(t, t_0)\hat{U}^\dagger(t', t_0)$. El operador de evolución \hat{U} satisface las propiedades de grupo $\hat{U}(t, t) = \hat{1}$ y $\hat{U}(t, t') = \hat{U}(t, t'')\hat{U}(t'', t')$ para cualesquiera tiempos arbitrarios t , t' y t'' ; además de la condición unitaria

$$\hat{U}(t, t') = \hat{U}^\dagger(t', t). \quad (3.48)$$

La dependencia en el tiempo del operador de evolución $\hat{U}(t, t_0)$ está dado por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}(t, t_0). \quad (3.49)$$

Para un hamiltoniano independiente del tiempo \hat{H} , el operador de evolución $\hat{U}(t, t_0)$ es una función exponencial de \hat{H} ,

$$\hat{U}(t, t') = e^{-i\frac{\hat{H}(t-t')}{\hbar}} \quad (3.50)$$

Si el hamiltoniano \hat{H} es dependiente del tiempo, se debe resolver la ecuación de Schrödinger del sistema [7].

Representación de Heisenberg

En la representación de Heisenberg, la dependencia en el tiempo está incluida en los operadores $\hat{A}(t)$, mientras que el estado cuántico $|\psi\rangle$ es independiente del tiempo. El operador en la representación de Heisenberg $\hat{A}(t)$ está relacionado al operador en la representación de Schrödinger \hat{A} mediante

$$\hat{A}(t) = \hat{U}(t_0, t)\hat{A}\hat{U}(t, t_0), \quad (3.51)$$

donde t_0 es un tiempo de referencia. El estado cuántico en la representación de Heisenberg $|\psi\rangle$ no tiene dinámica y es igual al estado cuántico en la representación de Schrödinger $|\psi(t_0)\rangle$ en el tiempo t_0 . La evolución temporal de $\hat{A}(t)$ se deriva de la ecuación de Schrödinger,

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{A}(t)]_- + \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t}, \quad (3.52)$$

donde $\hat{H}(t) = \hat{U}(t_0, t)\hat{H}(t_0)\hat{U}(t, t_0)$ es el hamiltoniano en la representación de Heisenberg y el último término es la representación de Heisenberg de una eventual dependencia explícita del tiempo del observable \mathcal{A} . Para un hamiltoniano dependiente del tiempo, la solución de la ecuación (3.52) toma la forma conocida

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}. \quad (3.53)$$

Se puede verificar fácilmente que las representaciones de Heisenberg y Schrödinger son equivalentes [7].

Representación de Interacción

La representación de interacción es una combinación de las representaciones de Heisenberg y Schrödinger, ya que el estado cuántico $|\psi(t)\rangle$ y el operador $\hat{A}(t)$ son dependientes del tiempo. La representación de interacción es usada en general si el hamiltoniano puede ser separado en una parte no perturbada e independiente del tiempo \hat{H}_0 y una posible perturbación dependiente del tiempo \hat{H}_1 , es decir

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t). \quad (3.54)$$

En la representación de interacción los operadores evolucionan de acuerdo al hamiltoniano no perturbado \hat{H}_0

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}\hat{A}(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}, \quad (3.55)$$

mientras que el estado cuántico $|\psi\rangle$ evoluciona de acuerdo al operador de evolución modificado $\hat{U}_I(t, t_0)$,

$$\hat{U}_I(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}\hat{U}(t, t_0). \quad (3.56)$$

Se puede demostrar fácilmente que esta asignación nos lleva a la misma dependencia en el tiempo del valor esperado (3.63), como lo hacían las representaciones de Schrödinger y Heisenberg. El operador de evolución en la representación de interacción también satisface las propiedades unitarias y de grupo. Una ecuación diferencial para la dependencia en el tiempo del operador $\hat{A}(t)$ puede obtenerse de la definición (3.52)

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{A}(t)]_- + \frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}. \quad (3.57)$$

La dependencia en el tiempo del operador de evolución en la representación de interacción está gobernada solo por la representación de interacción de la perturbación \hat{H}_I ,

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}_I(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}_I(t)\hat{U}_I(t, t_0), \quad (3.58)$$

donde

$$\hat{H}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}\hat{H}_1e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}. \quad (3.59)$$

La solución de (3.58) no es simplemente una función exponencial de \hat{H}_I como lo es en el caso de la representación de Schrödinger. La razón es que la perturbación \hat{H}_I es siempre dependiente del tiempo en la representación de interacción, como se ve en (3.59). Una excepción es cuando \hat{H}_I y \hat{H}_0 conmutan, pero en ese caso \hat{H}_I no sería una perturbación real. Sin embargo, se puede escribir una solución formal de (3.58) en la forma de un

exponencial ordenado en el tiempo. Para $t > t_0$, estos exponenciales ordenados en el tiempo son

$$\hat{U}_I(t, t_0) = \text{T}e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_I(t')}. \quad (3.60)$$

En esta solución formal el exponente tiene que ser interpretado como su serie de potencias, y en cada término el *operador de ordenación temporal* T ordena los factores \hat{H} con argumentos de tiempo descendentes [7].

3.3. Funciones de Green

Matemáticamente, la función de Green es un tipo de función utilizada para resolver ecuaciones diferenciales no homogéneas, sujetas a condiciones de frontera. Una función de Green de un operador lineal \hat{L} actuando sobre una distribución de la variedad M en un punto x_0 es una solución de

$$\hat{L}G(x, s) = \delta(x - s), \quad (3.61)$$

donde δ es la función delta de Dirac. Esta técnica puede ser usada para resolver ecuaciones diferenciales de la forma

$$\hat{L}u(x) = f(x). \quad (3.62)$$

Si el núcleo de \hat{L} es no trivial, entonces la función de Green no es única. Sin embargo en la práctica, algunas combinaciones de simetría, condiciones de frontera y otros criterios externos nos darían como resultado una función de Green única. Las funciones de Green en general son distribuciones, no necesariamente funciones propias.

El término es usado en la Teoría Cuántica de Campos y en la Teoría Diagramática de Perturbaciones para referirse a varios tipos de funciones de correlación, muchas de las cuales no cumplen necesariamente con la definición matemática. Las funciones de Green son también utilizadas ampliamente en la teorías de la materia condensada, donde estas permiten la resolución de la ecuación de difusión y en mecánica cuántica, donde la función de Green del Hamiltoniano es un concepto clave con importantes vínculos al concepto de densidad de estados [22].

3.3.1. Promedio Térmico

Recordamos brevemente algunos resultados básicos de la mecánica estadística en equilibrio que son de nuestro interés. El promedio térmico de un observable \mathcal{A} se define como

$$\langle A \rangle = \text{tr} \hat{A} \hat{\rho}, \quad (3.63)$$

donde $\hat{\rho}$ es la matriz de densidad y \hat{A} es el operador correspondiente al observable \mathcal{A} . La matriz de densidad $\hat{\rho}$ describe la distribución térmica sobre los diferentes estados propios del sistema. El símbolo "tr" denota la traza de un operador, es decir la suma sobre los valores esperados del operador sobre una base ortonormal

$$\text{tr} A\rho = \sum_n \langle n|A\rho|n\rangle. \quad (3.64)$$

El conjunto base $\{|n\rangle\}$ puede ser una colección de estados propios de muchas partículas del hamiltoniano \hat{H} , o cualquier otra base ortonormal. En el ensamble canónico de la mecánica estadística, la traza es tomada sobre todos los estados con N partículas y se tiene

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\hat{H}/T}, \quad Z = \text{tr} e^{-\hat{H}/T}, \quad (3.65)$$

donde \hat{H} es el hamiltoniano. Usando la base de estados propios de N partículas $|n\rangle$ del hamiltoniano \hat{H} con valores propios E_n , el equilibrio térmico $\langle A \rangle$ puede ser expresado como

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n e^{-E_n/T} \langle n|\hat{A}|n\rangle}{\sum_n e^{-E_n/T}}. \quad (3.66)$$

En el ensamble gran canónico, la traza se toma sobre todos los estados, sin tomar en cuenta el número de partículas, y se tiene

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/T}, \quad Z = \text{tr} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/T}. \quad (3.67)$$

Aquí μ es el potencial químico y \hat{N} es el operador de número de partícula [7].

3.3.2. Funciones de Green Reales e Imaginarias

En la teoría de sistemas de muchas partículas, las funciones de Green se definen como valores esperados de productos de operadores, evaluados en distintos tiempos. A continuación se presentan algunas definiciones de las funciones de Green y ciertas relaciones importantes entre estas. Para esto restringiremos la atención a las funciones de Green definidas para dos operadores \hat{A} y \hat{B} , los cuales no requieren ser hermitianos. Funciones de Green para más de dos operadores pueden definirse de manera similar. En las aplicaciones físicas se encuentra que los operadores \hat{A} y \hat{B} son operadores de creación y aniquilación de fermiones o bosones, desplazamientos de átomos en un cristal y corrientes o densidades de carga.

Los operadores \hat{A} y \hat{B} satisfacen la relación de conmutación si describen bosones o sistemas de fermiones con funciones de onda pares de operadores de creación y aniquilación de fermiones. Se referirá este caso como el caso de bosones y se utilizará el signo - en las formulas a continuación. Los operadores \hat{A} y \hat{B} satisfacen las relaciones

de anti-conmutación, si describen fermiones o son funciones impares de operadores de aniquilación o creación de fermiones. Este caso es el caso de fermiones y se usará el signo $+$ en las formulas [7].

Funciones de Green con Argumentos de Tiempo Reales

Las así llamadas funciones de Green *mayores* y *menores* están definidas como

$$G_{A;B}^>(t, t') \equiv -i\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle, \quad (3.68)$$

$$G_{A;B}^<(t, t') \equiv \pm i\langle \hat{B}(t')\hat{A}(t) \rangle, \quad (3.69)$$

donde el signo $+$ es para fermiones y el signo $-$ para bosones. Aquí los brackets representan un promedio en equilibrio o en no equilibrio térmico definido apropiadamente. Se definen también las funciones de Green *retardadas* y *avanzadas*, las cuales son valores esperados del conmutador entre $\hat{A}(t)$ y $\hat{B}(t')$,

$$\begin{aligned} G_{A;B}^R(t, t') &\equiv -i\theta(t-t')\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\pm} \rangle \\ &= \theta(t-t')[G_{A;B}^>(t, t') - G_{A;B}^<(t, t')] \end{aligned} \quad (3.70)$$

$$\begin{aligned} G_{A;B}^A(t, t') &\equiv i\theta(t-t')\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\pm} \rangle \\ &= \theta(t-t')[G_{A;B}^<(t, t') - G_{A;B}^>(t, t')], \end{aligned} \quad (3.71)$$

donde $\theta(x) = 1$ si $x > 0$, $\theta(x) = 0$ si $x < 0$ y $\theta(0) = 1/2$.

Las funciones de Green ordenadas en el tiempo se definen como

$$\begin{aligned} G_{A;B}(t, t') &\equiv -i\theta(t-t')\langle \mathcal{T}\hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle \\ &= \theta(t-t')G_{A;B}^>(t, t') + \theta(t'-t)G_{A;B}^<(t, t'), \end{aligned} \quad (3.72)$$

donde el operador \mathcal{T} representa el operador de orden temporal. Para fermiones, al orden temporal se lo define con un factor adicional -1 para cada cambio de operadores, por tanto

$$\mathcal{T}\hat{A}(t)\hat{B}(t') = \begin{cases} \hat{A}(t)\hat{B}(t') & \text{si } t > t' \\ -(\pm)\hat{B}(t')\hat{A}(t) & \text{si } t < t' \end{cases} \quad (3.73)$$

La función de Green ordenada anti-temporalmente y la ordenada en contorno están definidas de forma similar. Una razón por la cual es útil considerar estas funciones es que existe más artificios matemáticos para calcularlas. Así un cálculo típico empieza obteniendo las funciones de Green de tiempo ordenado y de tiempo de contorno, y luego se usan estos resultados para buscar cantidades físicas de interés.

Funciones de Green con Argumentos de Tiempo Imaginarios

Estas funciones de Green se conocen también como *funciones de Green de temperatura*, y para los operadores \hat{A} y \hat{B} se define como

$$\mathcal{G}_{A;B}(\tau_1, \tau_2) \equiv -\langle T\hat{A}(\tau_1)\hat{B}(\tau_2) \rangle. \quad (3.74)$$

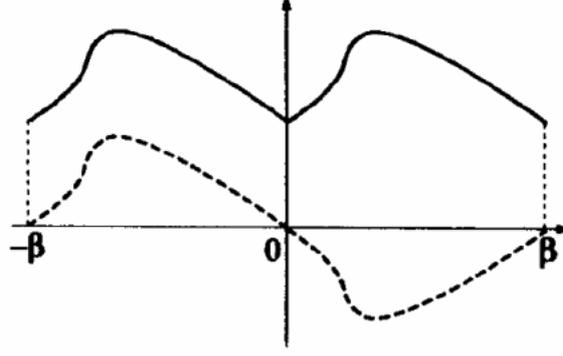


Figura 3.1: Funciones periódicas y anti-periódicas en el eje imaginario de τ . Imagen tomada de A. Zagoskin (1998), p. 106.

Aquí los brackets denotan un promedio térmico y el símbolo \mathcal{T} el ordenamiento en el tiempo. La definición (3.74) se usa sólo para el intervalo $-1/\beta < \tau_1 - \tau_2 < 1/\beta$, donde $\beta = k_B T$, con k_B la constante de Boltzmann.

Las funciones de Green de temperatura son usadas sólo para cálculos que involucran un equilibrio térmico a temperatura T . Por tanto, haciendo uso de la definición de promedio térmico (3.66) y de las propiedades de la traza, se puede demostrar que

$$\mathcal{G}_{A;B}(\tau_1, \tau_2) = \mathcal{G}_{A;B}(\tau_1 - \tau_2, 0), \quad (3.75)$$

de manera que $\mathcal{G}(\tau_1, \tau_2)$ dependa sólo de la diferencia de tiempos imaginarios $\tau_1 - \tau_2$. De aquí, para $\mathcal{G}_{A;B}(\tau)$ con $0 \leq \tau \leq 1/\beta$ se tiene

$$\mathcal{G}_{A;B}(\tau) = -(\pm 1)\mathcal{G}_{A;B}(\tau - 1/\beta). \quad (3.76)$$

De esto se deduce que $\mathcal{G}(\tau)$ es periódica en el intervalo $-\hbar/T < \tau < \hbar/T$, con período \hbar/T para bosones y antiperiódica con el mismo período para fermiones. Esta propiedad se usa para extender la definición de la función de Green $\mathcal{G}(\tau)$ a todo el eje de tiempo imaginario. Si los operadores \hat{A} , \hat{B} y el hamiltoniano \hat{H} son todos simétricos, las funciones de Green de temperatura son simétricas o antisimétricas en el argumento del tiempo para el caso de bosones y fermiones respectivamente,

$$\mathcal{G}_{A;B}(\tau) = -(\pm 1)\mathcal{G}_{A;B}(-\tau) \quad \text{si } \hat{A}, \hat{B}, \hat{H} \text{ son simétricos.} \quad (3.77)$$

Considerando la periodicidad de \mathcal{G} , se puede expandir esta función en una serie de Fourier,

$$\mathcal{G}_{A;B}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}_{A;B}(i\omega_n), \quad (3.78)$$

donde n es entero con frecuencias $\omega_n = 2\pi n T/\hbar$ para bosones y $\omega_n = (2n + 1)\pi T/\hbar$ para fermiones. La relación inversa es

$$\mathcal{G}_{A;B}(i\omega_n) = \int_0^{\hbar/T} d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}_{A;B}(\tau) \quad (3.79)$$

Las frecuencias ω_n se denominan *frecuencias de Matsubara*.

En equilibrio térmico, todas las funciones de Green definidos anteriormente están relacionadas. En muchas aplicaciones es muy difícil y aún imposible, calcular las funciones de Green exactamente. Para esto se requiere recurrir a la teoría de perturbaciones u otros métodos de aproximación.

Mientras los observables físicos se expresan en términos de funciones de Green mayores y menores (para funciones de correlación) o funciones de Green avanzadas y retardadas (para funciones de respuesta física), la maquinaria teórica se optimiza para el cálculo de las funciones de Green de tiempo imaginario, de tiempo ordenado y de tiempo de contorno.

3.3.3. Contenido Físico de la Función de Green

Conocemos que el propagador de partícula simple es la amplitud de transmisión de una partícula entre los puntos (x', t') y (x, t) ,

$$K(x, t; x', t') = \langle x|S(t, t')|x'\rangle = \langle xt|x't'\rangle. \quad (3.80)$$

Una generalización inmediata de la última expresión es un elemento de matriz del operador de N partículas $\langle \Phi|S(t, t')|\Phi'\rangle$. Pero esto no tiene sentido ya que físicamente la amplitud de transición involucra $N \approx 10^{23}$ partículas. Por otro lado, el propagador de partícula simple expresado de la forma (3.80) sugiere que podemos ver a los dos estados como una partícula simple excitada,

$$\begin{aligned} |x, t\rangle_{\text{estado}} &\equiv \psi^\dagger(x, t)|\text{estado}\rangle \\ |x', t'\rangle_{\text{estado}} &\equiv \psi^\dagger(x', t')|\text{estado}\rangle \end{aligned} \quad (3.81)$$

donde $\psi^\dagger(x, t)$ es el operador de campo de Heisenberg que crea una partícula en un punto dado. Introducimos la función de Green como la superposición de estos estados

$$\text{Función de Green} \rightsquigarrow \langle \text{estado}|\psi(x, t)\psi^\dagger(x, t)|\text{estado}\rangle, \quad (3.82)$$

Por su puesto se debe promediar sobre los estados de los sistemas de muchas partículas en los cuales nuestros operadores de campo actúan, para librarnos de todas las demás variables no-macroscópicas excepto las dos coordenadas y momentos de tiempo entre los que las cuasi-partículas viajan . Tal promedio de un operador cuántico y estadístico \mathcal{A} se obtiene tomando la traza con el operador de la matriz de densidad del sistema $\hat{\rho}$,

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \text{tr}(\hat{\rho}\mathcal{A}) \quad (3.83)$$

De esta manera la formula (3.82) se ve como un propagador que describe un proceso en el que adherimos al sistema de N fermiones una partícula extra, se la deja propagar de (x', t') a (x, t) , y luego se la retira. La función de Green se define como

$$G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i\langle \mathcal{T}\psi_\alpha(\mathbf{x}, t)\psi_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', t') \rangle. \quad (3.84)$$

donde se han escrito los índices de spin, los cuales toman dos valores para fermiones y uno para bosones. El promedio usado en (3.83) es una operación lineal por lo cual se puede aplicar la diferenciación respecto al tiempo a (3.84) para obtener

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2) = & \mathcal{E}(\mathbf{r}_1)G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2) + \mathcal{V}(\mathbf{r}_1, t_1)G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_2, t_2) - \\ & - i \int d^3r_3 U(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1) \langle \mathcal{T}\psi_\gamma^\dagger(\mathbf{r}_3, t_1)\psi_\gamma(\mathbf{x}_3, t_1)\psi_\alpha(\mathbf{x}_1, t_1)\psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}_2, t_2) \rangle + \\ & + \dots + \hbar\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta(t_1 - t_2) \end{aligned} \quad (3.85)$$

Observamos que la función de Green de muchas partículas definida anteriormente no es una función de Green en el sentido matemático, sino una solución de la ecuación diferencial (3.85). Esta no es una ecuación para la función de Green debido a que contiene promedios de cuatro y más operadores de campo que representan funciones de Green de dos, tres, etc., partículas.

Para promediar en condiciones de equilibrio, puede usarse el ensamble canónico y el gran-canónico. La principal diferencia entre los dos es que en el ensamble canónico el sistema puede sólo intercambiar energía con sus alrededores y en el ensamble gran-canónico el sistema puede intercambiar también partículas, el número promedio de partículas está fijado por el potencial químico, mientras que la temperatura fija la energía cinética promedio de las partículas en ambos casos. El operador estadístico tiene la forma

$$\rho = e^{\beta(\Omega - \mathcal{H}')} \quad (3.86)$$

donde $\beta = 1/k_B T$, $\mathcal{H}' = \mathcal{H} - \mu\mathcal{N}$, donde \mathcal{N} es el operador de número de partícula, y $\Omega = -(1/\beta)\ln \text{tr} e^{-\beta\mathcal{H}'} = -PV$ es el gran-potencial.

Asumiendo que el hamiltoniano tiene un conjunto completo de estados propios $|n\rangle$ con valores propios $E'_n = E_n - \mu N_n$, donde N_n es el numero de partículas en el estado $|n\rangle$, el promedio de un producto de tiempo ordenado de dos operadores de campo en la representación de Heisenberg puede ser escrito como

$$\langle \mathcal{T}\psi(t_1)\psi^\dagger(t_2) \rangle = \text{tr}(e^{\beta(\Omega - \mathcal{H}')} \mathcal{T}\psi(t_1)\psi^\dagger(t_2)) \quad (3.87)$$

$$= \frac{\sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} \langle n | \mathcal{T}\psi(t_1)\psi^\dagger(t_2) | n \rangle \langle n | n \rangle^{-1}}{\sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}} \quad (3.88)$$

A temperatura cero ($\beta \rightarrow \infty$), de (3.84) se tiene

$$G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \frac{\langle 0 | \mathcal{T}\psi_\alpha(\mathbf{x}, t)\psi_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', t') | 0 \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle}. \quad (3.89)$$

donde $|0\rangle$ es el estado base del sistema en la representación de Heisenberg, el cual es independiente del tiempo e incluye todos los efectos de interacción. En un sistema homogéneo e isotrópico en estado estacionario, la función de Green puede depender sólo de las diferencias entre las coordenadas y los tiempos

$$G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t'). \quad (3.90)$$

Además si el sistema no tiene orden magnético y no está en un campo magnético externo, la dependencia en el spin se reduce a la matriz unidad

$$G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G, \quad (3.91)$$

donde $G = \frac{1}{2}\text{tr}G_{\alpha\beta}$, de otro modo existiría una dirección especial en el espacio, que sería el eje de cuantización de spin.

3.4. Teoría Diagramática de Perturbaciones

El logro de Feynman fue formular un formalismo de la teoría de perturbaciones en el cual toda la expansión perturbativa, incluyendo las expresiones más complicadas se reducen a un conjunto de gráficos, los diagramas de Feynman. Se pueden sacar dos conclusiones: (1) las funciones de Green proveen un método físicamente sensible de aproximación al problema de las muchas partículas. (2) Los resultados deben expresarse en términos de los promedios sobre los estados no perturbados del sistema, en lugar de correcciones a las funciones de onda de muchas partículas. (en mecánica cuántica ambas serían equivalentes, dado que es una teoría de una sola partícula)

Cuando calculamos las funciones de Green de un sistema con interacciones, nos encontramos con el obstáculo usual de no conocer la función de onda (estado) sobre el cual se está promediando. No conocemos el estado base $|0\rangle$, ni los estados excitados. Mas aún cualquier aproximación que se haga será virtualmente ortogonal al propio estado de muchas partículas. Afortunadamente los elementos de matriz aproximados (como las funciones de Green) pueden ser algo precisos. La paradoja aparente es que mientras la función de onda involucra todos los N estados de partículas, la función de Green sólo trata con dos estados de una partícula, el inicial y el final.

3.4.1. Teorema de Wick

Considerando la función de Green

$$iG_{\alpha,\alpha'}(x, t; x', t') = \frac{\langle \Phi_0 | \mathcal{T} \mathcal{S}(\infty, -\infty) \Psi_\alpha(x, t) \Psi_{\alpha'}^\dagger(x', t') | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \mathcal{S}(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (3.92)$$

Esta fórmula es la base para la teoría de perturbaciones, simplemente debemos expandir el exponente obtener una serie que contenga términos de la forma

$$\langle \Phi_0 | \mathcal{T} \mathcal{W}(t_1) \mathcal{W}(t_1) \dots \mathcal{W}(t_m) \Psi_\alpha(x, t) \Psi_\alpha^\dagger(x', t') | \Phi_0 \rangle. \quad (3.93)$$

En este caso es necesario calcular los elementos de matriz entre los vectores de estado base del sistema de muchas partículas en lugar de los estados propios de partícula simple. Después de expandir el operador S, debemos calcular elementos de matriz de la forma $\langle \Phi_0 | \mathcal{T} \phi_1 \phi_2 \dots \phi_m | \Phi_0 \rangle$, donde $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_m$ son operadores de campo de fermiones o bosones en la representación de interacción. Es precisamente el teorema de Wick que permite realizar esto.

El teorema de Wick establece que el producto de ordenación de tiempo de los operadores de campo en la representación de interacción son iguales a la suma de sus productos normales con todas las posibles contracciones

$$\begin{aligned} \mathcal{T} \phi_1 \phi_2 \dots \phi_m \phi_{m+1} \phi_{m+2} \dots \phi_n &= : \phi_1 \phi_2 \dots \phi_m \phi_{m+1} \phi_{m+2} \dots \phi_n : + \\ &+ : \overbrace{\phi_1 \phi_2 \dots \phi_m \phi_{m+1} \phi_{m+2} \dots \phi_n} : + : \overbrace{\phi_1 \phi_2 \dots \phi_m \phi_{m+1} \phi_{m+2} \dots \phi_n} : + \\ &+ \dots + : \overbrace{\phi_1 \phi_2 \dots \phi_m \phi_{m+1} \phi_{m+2} \dots \phi_n} : \end{aligned} \quad (3.94)$$

definiciones. El ordenamiento normal de los operadores de campo $: \phi_1 \phi_2 \dots \phi_m :$ implica que todos los operadores de aniquilación van a la derecha de los de creación.

La contracción de dos operadores $\overbrace{\phi_n \phi_m}$ es la diferencia entre el ordenamiento en el tiempo y el normal

$$\overbrace{\phi_n \phi_m} = \mathcal{T} \phi_n \phi_m - : \phi_n \phi_m :. \quad (3.95)$$

Un hecho importante es que la contracción de operadores de campo de bosones y fermiones es un número, es decir como se en (3.96) ve esta contracción corresponde a una función de Green no perturbada

$$\begin{aligned} \overbrace{\phi_1 \phi_2} &= \langle \Phi_0 | \overbrace{\phi_1 \phi_2} | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \mathcal{T} \phi_1 \phi_2 | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | : \phi_1 \phi_2 : | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \mathcal{T} \phi_1 \phi_2 | \Phi_0 \rangle \\ &= iG^0(12) \end{aligned} \quad (3.96)$$

3.4.2. Reglas y Diagramas de Feynman

Inicialmente, Feynman derivó sus expansiones diagramáticas como una herramienta nemotécnica para calcular amplitudes de dispersión. Su aproximación fue heurística:

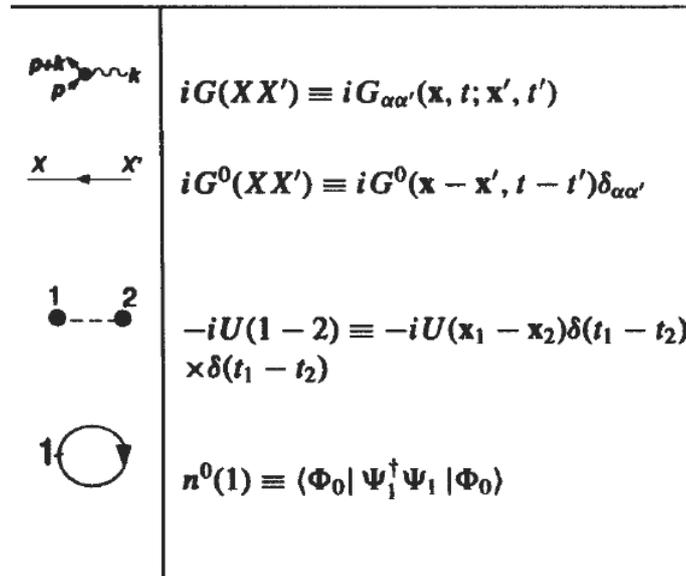


Figura 3.2: Reglas de Feynman para la interacción electrón-electrón. Imagen tomada de A. Zagoskin (1998), p. 76.

cada diagrama tenía un significado físico en términos de un proceso de dispersión específico. Feynman derivó un conjunto de reglas que explicaban cómo convertir los diagramas en amplitudes de dispersión. Estas reglas fueron probadas en casos simples donde se podían ser comprobadas por otros medios. Luego Feynman aplicó su método a casos donde una aproximación algebraica directa era demasiado laboriosa. Fue más tarde que Dyson demostró cómo esta expansión diagramática podía desarrollarse sistemáticamente [23].

Reglas Generales

- Dibuje todos los diagramas de Feynman conectados topológicamente distintos
- Decodificar los de acuerdo a la Figura 3.2
- Multiplique cada diagrama por $(-1)^F$, donde F es el número de lazos cerrados con más de un vértice, que consisten en líneas de fermiones.

Teorema de Cancelación. Todos los diagramas desconectados que aparecen en la serie de perturbación de la función de Green, se cancelan en el numerador y denominador. Por tanto la función de Green se expresa como una suma sobre todos los diagramas conectados.

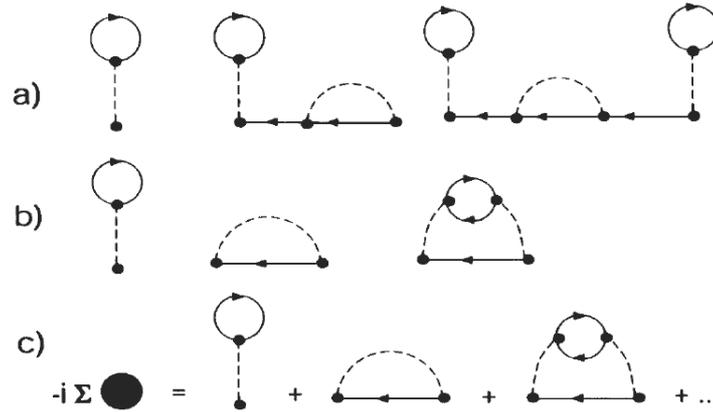


Figura 3.3: Diagramas de auto-energía: (a) partes de auto-energía, (b) partes irreducibles de auto-energía, (c) auto-energía propia. Imagen tomada de A. Zagoskin (1998), p. 81.

3.4.3. Ecuación de Dyson

Una de las razones por las cuales las funciones de Green se usan tan ampliamente es que los diagramas correspondientes tienen una propiedad importante: Los valores de cualquier diagrama para la función de Green pueden encontrarse como la composición de expresiones correspondientes a sus partes, independientemente del diagrama como un todo. Es decir, cualquier parte del diagrama puede ser calculada separadamente y luego ser insertada en un diagrama que contenga tal parte. Este procedimiento se denomina *suma parcial* de una serie de diagramas. Usualmente se puede demostrar que físicamente, aunque sin rigor matemático, que cierta clase de diagramas son más importantes que otros y por tanto los resultados de la sumatoria reflejarán las propiedades esenciales del sistema.

Para aproximarnos a la suma parciales sistemáticamente, haremos las siguientes definiciones. Una *parte de auto-energía* es cualquier parte del diagrama conectado al resto del diagrama sólo por dos líneas de partícula. La *parte de auto-energía irreducible* es la que no puede ser separada cortando una línea de partícula. Finalmente, la auto-energía propia u operador de masa, se denomina a la suma de todos los posibles partes de auto-energía irreducibles y se nota mediante $\sum_{\alpha\alpha'}(X, X')$. Este nombre viene dado por razones históricas en la teoría de campos. Es conveniente incluir un factor $(-i)$ en la definición de la Figura 3.3 de manera que la serie para la función de Green se exprese como

$$iG = iG^0 + iG^0\Sigma G^0 + iG^0\Sigma G^0\Sigma G^0 + \dots \quad (3.97)$$

Aquí los términos en la serie infinita son redistribuidos de manera que se obtenga una serie simple (progresión geométrica), sólo en potencias de la auto-energía y la función

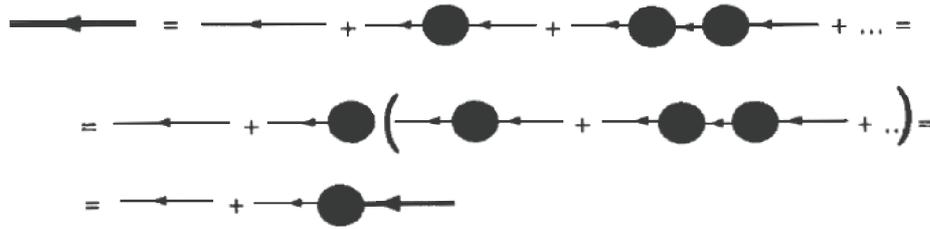


Figura 3.4: Ecuación de Dyson. Imagen tomada de A. Zagoskin (1998), p. 82.

de Green no perturbada. Separando el factor iG^0 se obtiene la *ecuación de Dyson*

$$G(X, X') = G^0(X, X') + \int dX'' \int dX''' G^0(X, X'') \Sigma(X'', X''') G(X''', X'). \quad (3.98)$$

En sistemas homogéneos, estacionarios y no magnéticos, podemos realizar una transformación de Fourier, reduciendo la ecuación anterior a

$$G(P) = G^0 + G^0(P) \Sigma(P) G(P) \quad (3.99)$$

de donde se puede obtener

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}, \omega) &= [(G^0(\mathbf{p}, \omega))^{-1} - \Sigma(\mathbf{p}, \omega)]^{-1} \\ &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - \Sigma(\mathbf{p}, \omega)} \end{aligned} \quad (3.100)$$

Podemos escribir esta ecuación simbólicamente como

$$G = \left[i \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{E} - \hat{\Sigma} \right]^{-1} \quad (3.101)$$

La última ecuación se entiende como un operador inverso, y se cumple aún si G y Σ son no diagonales, como en el caso de un sistema no homogéneo. Una propiedad importante de (3.100) es que si sustituimos una aproximación de orden finito por la auto-energía, la aproximación resultante para G será equivalente a calcular una subserie infinita de una serie de perturbación, y esto da un mejor resultado que el simple cálculo de los términos iniciales de la serie.

Capítulo 4

Impurezas en un Gas de Fermi

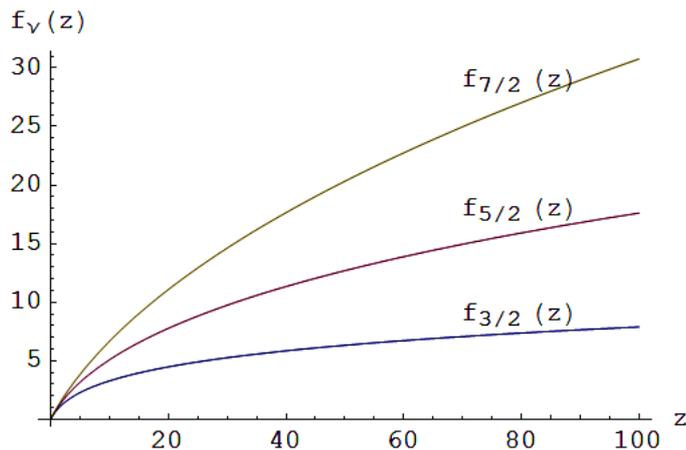
Este capítulo tiene la intención de presentar una descripción del gas de Fermi con impurezas en el contexto de la teoría de sistemas de muchas partículas. Este está basado en la solución dada por la literatura para bajas concentraciones de impurezas [9, 7]. Como se verá más adelante, este resultado es analítico gracias a la ecuación de Dyson presentada por Edwards (1958). Primeramente se analizan las propiedades del gas de Fermi dadas por la Física Estadística. Luego se hace una aplicación de la teoría planteada en el capítulo anterior. Se estudia la introducción de una impureza en el gas de Fermi, utilizando la teoría de dispersiones usual de la Mecánica Cuántica. Se calcula la matriz de transición para la presencia de una impureza en el gas, se define el concepto de promedio de desorden de forma análoga al promedio térmico con el fin de describir al gas de fermi con muchas impurezas. Finalmente, Se calcula la función de Green de promedio de desorden considerando que las impurezas no interactuar entre sí.

4.1. El Gas de Fermi Ideal

4.1.1. Propiedades Termodinámicas

A continuación analizamos las propiedades termodinámicas de un gas de partículas de Fermi no interactuante y no relativista. Este modelo puede usarse como una primera aproximación para describir los electrones en un metal y los nucleones en el átomo. A continuación analizamos las propiedades termodinámicas del gas de Fermi ideal, que surgen del logaritmo de la función \mathcal{Z} de partición en el ensamble gran-canónico

$$q(T, V, z) = \ln \mathcal{Z} = \sum_k \ln (1 + z \exp [-\beta \epsilon_k]) \quad (4.1)$$

Figura 4.1: Funciones $f_{\nu}(z)$.

donde la suma corre sobre todos los estados de energía propia. La fugacidad $z = \exp(\nu/k_B T)$ puede ser determinada para un número de partículas dado, que se obtiene de

$$N(T, V, z) = \sum_k \langle n_F(\epsilon_k) \rangle = \sum_k \frac{1}{z^{-1} \exp[-\beta \epsilon_k] + 1} \quad (4.2)$$

Aquí ν puede tomar cualquier valor, de modo que $0 \leq z \leq \infty$. Dado que es la energía mínima necesaria para adherir una partícula al sistema ν debe incrementarse con el número de partículas a volumen constante. Considerando que los valores propios de energía se encuentran arbitrariamente cerca entre ellos en un volumen grande, podemos expresar las sumas anteriores en términos de integrales respecto a la energía ϵ , es decir

$$q(T, V, z) = \int_0^{\infty} d\epsilon g(\epsilon) \ln(1 + z \exp[-\beta \epsilon]) \quad (4.3)$$

$$N(T, V, z) = \int_0^{\infty} d\epsilon g(\epsilon) \frac{1}{z^{-1} \exp[-\beta \epsilon] + 1} \quad (4.4)$$

donde $g(\epsilon)$ es la densidad de estados de una partícula simple, dado por

$$g(\epsilon) = g \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2} \quad (4.5)$$

donde $g = 2s + 1$ es el factor de degeneración que viene de considerar las diferentes orientaciones de spin que son energéticamente degeneradas en el caso de interacciones libres. Insertando este término e integrando (4.4) por partes, tenemos

$$q(T, V, z) = g \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{z^{-1} \exp[-\beta \epsilon] + 1} \quad (4.6)$$

$$N(T, V, z) = g \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{z^{-1} \exp[-\beta \epsilon] + 1} \quad (4.7)$$

Estas ecuaciones pueden ser expresadas por funciones estandarizadas mediante la sustitución $x = \beta\epsilon$. Definimos la función

$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1} dx}{z^{-1}e^x + 1}, \quad 0 \leq z \leq \infty \quad (4.8)$$

donde $\Gamma(\nu)$ es la función gamma. Con esta definición obtenemos

$$q(T, V, z) = \frac{pV}{k_B T} \frac{gV}{\lambda^3} f_{5/2}(z) \quad (4.9)$$

$$N(T, V, z) = \frac{gV}{\lambda^3} f_{3/2}(z) \quad (4.10)$$

donde

$$\lambda = \left(\frac{h^2}{2\pi m k_B T} \right)^{1/2}, \quad (4.11)$$

es la longitud de onda térmica. El comportamiento de las funciones $f_\nu(z)$ puede observarse en la Figura 4.1. Usando las ecuaciones (4.9) y (4.10) podemos encontrar el resto de parámetros termodinámicos del gas de Fermi ideal. Calculamos la energía interna del sistema mediante

$$\begin{aligned} U &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{Z}|_{z,V} = \frac{3}{2} k_B T \frac{gV}{\lambda^3} f_{5/2}(z) \\ &= \frac{3}{2} N k_B T \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \end{aligned} \quad (4.12)$$

También puede hallarse el calor específico a volumen constante mediante

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = N k_B \left(\frac{15}{4} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}(z)} \right) \quad (4.13)$$

La energía libre $F = U - TS = N\mu - pV$ puede ser calculada usando $\mu = k_B T \ln z$ y p de (4.9) y (4.10),

$$F = N\mu - pV = N k_B T \left(\ln z - \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \right). \quad (4.14)$$

Para la entropía S se obtiene

$$S = \frac{1}{T}(U - F) = N k_B \left(\frac{5}{2} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \ln z \right). \quad (4.15)$$

Analizamos el caso en el que $T = 0$, es decir el gas de Fermi degenerado. Este caso es de interés ya que en muchos sistemas mecánico-cuánticos, las energías de excitación típicas son de 10^1 eV; la energía térmica media a temperatura ambiente es de aproximadamente $\frac{1}{40}$ eV, es decir mucho menor que las energías de excitación, por tanto para tales sistemas, como un gas de electrones en un metal, la aproximación $T = 0$ es aceptable.

En este caso, el número de ocupación medio $\langle n_k \rangle$ es buena aproximación puede ser descrito por la función de paso $\Theta(\mu - \epsilon)$, definida como

$$\langle n_k \rangle_{T=0} = \Theta(\mu - \epsilon) = \begin{cases} 1 & \text{si } \epsilon \leq \mu \\ 0 & \text{si } \epsilon > \mu \end{cases} \quad (4.16)$$

Para $T = 0$, todos los fermiones se encuentran en el estado base, y el potencial químico μ debe ser igual a la energía de Fermi ϵ_F del sistema. De (4.7) obtenemos

$$N = \int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) \Theta(\epsilon_F - \epsilon) = g \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{1/2} = gV \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right)^{3/2} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \epsilon_F \quad (4.17)$$

por tanto, la energía de Fermi para una determinada concentración del gas de Fermi N/V , es

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2 N}{g V} \right)^{2/3} \quad (4.18)$$

Para el gas de Fermi casi-degenerado, es decir cuando $T \rightarrow 0$, se tiene que $z = e^{\mu/k_B T} \gg 1$, con lo cual podemos realizar una expansión en serie de $f_{3/2}(z)$,

$$f_\nu(z) \approx \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\ln z)^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8} (\ln z^{-2}) + \dots \right) \quad (4.19)$$

Por tanto para (4.10) tenemos

$$\frac{N}{V} = \frac{4\pi g}{3} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} (k_B T \ln z)^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8} (\ln z^{-2}) + \dots \right) \quad (4.20)$$

con lo cual podemos resolver aproximadamente para z y obtener una relación para el potencial químico en el caso casi-degenerado [24],

$$k_B T \ln z = \mu \approx \epsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 + \mathcal{O}(T^4) \right)^{2/3}. \quad (4.21)$$

Finalmente, consideramos el caso en el que $T \gg 1$, es decir cuando $z = e^{\mu/k_B T} \ll 1$, que vendría a ser el límite clásico para un gas de Fermi. En este límite el número de ocupación adquiere la forma clásica de la distribución de Maxwell-Boltzmann (ver Figura 4.2),

$$\langle n_k \rangle \approx z e^{-\beta \epsilon_k} = \frac{\lambda^3 N}{g V} e^{-\beta \epsilon_k} \ll 1. \quad (4.22)$$

Para analizar la ecuación (4.10) realizamos una expansión de las funciones $f_\nu(z)$ en potencias de z , es decir

$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx x^{\nu-1} e^{-x} z \sum_{k'=0}^{\infty} (-1)^{k'} e^{-x k'} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} z^k}{k^\nu} \quad (4.23)$$

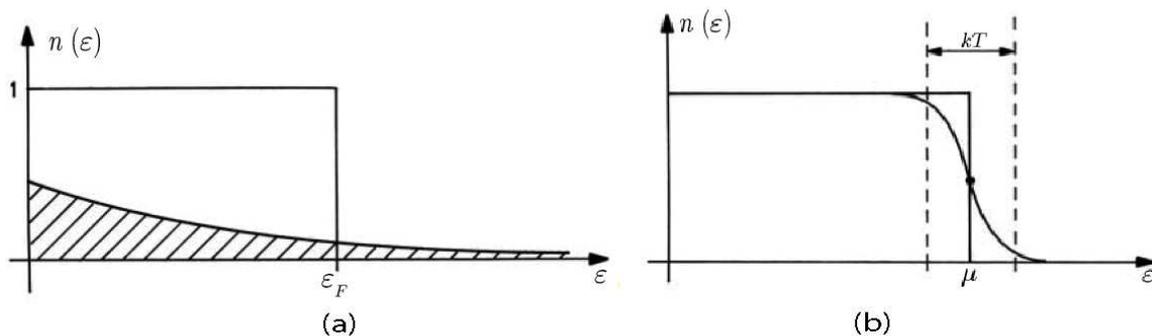


Figura 4.2: (a) Número de ocupación $n(\epsilon)$ en el límite clásico $T \gg 0$, y (b) distribución de Fermi para bajas temperaturas. Se presenta la función de paso $\Theta(\mu - \epsilon)$ (a $T = 0$) para comparación. Imágenes adaptadas de de F. Schwabl (2006), pp. 176 y 179.

Entonces la ecuación (4.10) toma la forma

$$\frac{\lambda^3 N}{V} = g \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} z^k}{k^{3/2}} = g \left(z - \frac{z^2}{2^{2/3}} + \mathcal{O}(z^3) \right) \quad (4.24)$$

Esta ecuación puede ser resuelta iterativamente para z

$$z = \frac{\lambda^3 N}{gV} + \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\lambda^3 N}{gV} \right)^2 + \dots \quad (4.25)$$

Considerando la ecuación anterior y que $\lambda^3 N/gV \ll 1$, para el potencial químico encontramos la siguiente expansión

$$\mu = k_B T \ln z \approx k_B T \left(\ln \frac{\lambda^3 N}{gV} + \frac{1}{2^{2/3}} \frac{\lambda^3 N}{gV} + \dots \right) \quad (4.26)$$

es decir, $\mu < 0$ para el límite de altas temperaturas [25].

4.1.2. El Gas de Fermi en Segunda Cuantización

Consideramos a continuación un gas de fermiones no interactuantes. Dado que tratamos con un sistema de muchos fermiones, usaremos el lenguaje de segunda cuantización. En esta notación el hamiltoniano se expresa en términos de los operadores de creación $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ y aniquilación $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ de un electron en la posición (\mathbf{r}) y con spin σ ,

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}) \mathcal{H}_{\sigma\sigma'} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \quad (4.27)$$

donde \mathcal{H} es el hamiltoniano expresado en primera cuantización. Para fermiones libres, se tiene $\mathcal{H} = \hat{p}^2/2m$ con $\hat{p} = -i\hbar\partial_r$, pero muchos de los resultados que se derivan a continuación se aplican también al caso mas general cuando \mathcal{H} contiene un potencial

escalar, un campo magnético o un acople de spin-orbita. Los operadores $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ y $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$, satisfacen las relaciones de anti-conmutación,

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')]_+ &= [\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')]_+ = \mathbf{0}, \\ [\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')]_+ &= \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (4.28)$$

En la representación de Heisenberg, la dependencia del tiempo de los operadores $\hat{\psi}^\dagger$ y $\hat{\psi}$ está dada por

$$\partial_t \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t)]_- = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\sigma'} \mathcal{H}_{\sigma\sigma'} \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}, t). \quad (4.29)$$

Nótese que la evolución temporal del operador de aniquilación $\hat{\psi}$ en la representación de Heisenberg, es formalmente idéntica a la función de onda ψ de partícula simple en la representación de Schrodinger. A continuación calculamos las funciones de Green para los operadores $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ y $\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')$. Notaremos estas funciones de Green como $G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t)$. Usando la ecuación de movimiento del operador $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, t)$, se puede derivar una ecuación de movimiento para la función de Green retardada,

$$\partial_t G_{\sigma,\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = -i\delta(t)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta_{\sigma,\sigma'} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\sigma''} \mathcal{H}_{\sigma\sigma''} G_{\sigma'',\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t); \quad (4.30)$$

donde $\mathcal{H}_{\sigma\sigma''}$ es el hamiltoniano de partícula simple expresado en primera cuantización. La ecuación diferencial (4.4), se resuelve con la condición de frontera $G^R(t) = 0$ para $t < 0$. Un cálculo similar demuestra que la función de Green avanzada G^A , satisface la misma ecuación, pero con la condición de frontera $G^A(t) = 0$ para $t > 0$. La función de Keldish-Green satisface la ecuación

$$\partial_t G_{\sigma,\sigma'}^K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\sigma''} \mathcal{H}_{\sigma\sigma''} G_{\sigma'',\sigma'}^K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t). \quad (4.31)$$

No existen condiciones de frontera para esta ecuación. Sin embargo, en equilibrio, G^K puede ser expresada en términos de G^R y G^A . Esta información es suficiente para garantizar la unicidad de la solución de (4.5) aun e condiciones de no equilibrio.

Aplicando una transformación de Fourier a (4.4), se obtiene

$$\frac{1}{\hbar} \sum_{\sigma''} (\hbar\omega\delta_{\sigma\sigma''} - \mathcal{H}_{\sigma\sigma''}) G_{\sigma,\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.32)$$

con ecuaciones similares para G^A y G^K .

Una solución formal de (4.6), puede ser obtenida en función de los valores propios ε_μ y las funciones propias $\phi_{\mu,\sigma}(\mathbf{r})$ de \mathcal{H} ,

$$G_{\sigma,\sigma'}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \hbar \sum_{\mu} \frac{\phi_{\mu,\sigma}(\mathbf{r}) \phi_{\mu,\sigma'}^*(\mathbf{r}')}{\hbar\omega - \varepsilon_\mu + i\eta}, \quad (4.33)$$

$$G_{\sigma,\sigma'}^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \hbar \sum_{\mu} \frac{\phi_{\mu,\sigma}(\mathbf{r}) \phi_{\mu,\sigma'}^*(\mathbf{r}')}{\hbar\omega - \varepsilon_{\mu} - i\eta}, \quad (4.34)$$

donde η es un infinitesimal positivo. Se puede verificar que las funciones tanto retardada como avanzada de Green, son analíticas en el semiplano superior e inferior del plano complejo, respectivamente.

En la ausencia de un potencial de impureza, el hamiltoniano es

$$\mathcal{H}_{\sigma\sigma'} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{\mathbf{r}}^2 \delta_{\sigma\sigma'} \quad (4.35)$$

Para fermiones confinados en un volumen V con condiciones de frontera periódicas, las funciones propias del hamiltoniano (10) son ondas planas

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (4.36)$$

(En esta sección omitimos el índice de spin). Dado que las funciones de Green para fermiones libres se expresan como

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{\omega + i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar}, \quad (4.37)$$

$$G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{\omega - i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar},$$

con $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$. Reemplazando la suma en \mathbf{k} por una integración se encuentra

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i|k(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (4.38)$$

$$G^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{-i|k(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (4.39)$$

Para la función de Green retardada, k es la solución de $\omega + i\eta - \varepsilon_k = 0$ de modo que $\text{Im } k > 0$, mientras que para la función de Green avanzada, k es la solución de $\omega - i\eta - \varepsilon_k = 0$ con $\text{Im } k < 0$. Linealizamos el espectro de energías alrededor de $\hbar\omega$

$$\varepsilon_{k'} = \hbar\omega + \hbar v(|\mathbf{k}'| - k), \quad (4.40)$$

donde v es la velocidad. Dado que el gas de Fermi es invariante respecto a traslaciones, las funciones de Green dependen solo de la diferencia de posiciones $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Tomando la transformada de Fourier respecto a $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, se tiene

$$G_{\mathbf{k}}^R(\omega) = \frac{1}{\omega + i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar}, \quad (4.41)$$

$$G_{\mathbf{k}}^A(\omega) = \frac{1}{\omega - i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar}. \quad (4.42)$$

Alternativamente, se puede considerar a las funciones de Green correspondientes a los operadores $\hat{\psi}_{\mathbf{k}}$ y $\hat{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger$, los cuales aniquilan y crean un fermión en un estado propio con vector de onda \mathbf{k} y \mathbf{k}' , respectivamente. En términos de los operadores $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ y $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ se tiene

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \\ \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\end{aligned}$$

Notando esta función de Green como $G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$, se tiene [7]

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^R(\omega) = \frac{\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}}{\omega + i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar}, \quad (4.43)$$

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^A(\omega) = \frac{\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}}{\omega - i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar}. \quad (4.44)$$

4.2. Introducción de una Impureza

En esta sección consideramos electrones no interactuantes en presencia de un potencial externo. Este es un problema para el cual es posible una solución exacta. En notación de primera cuantización, el hamiltoniano que consideramos es

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_{\mathbf{r}}^2 + U(\mathbf{r}), \quad (4.45)$$

donde $U(\mathbf{r})$ es el potencial de la impureza. Aquí y en el resto del capítulo omitimos la referencia al índice de spin σ . En notación de segunda cuantización, el hamiltoniano se escribe en términos de los operadores de creación $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ y aniquilación $\hat{\psi}(\mathbf{r})$, de un electrón en la posición \mathbf{r} [7]

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \partial_{\mathbf{r}}^2 \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (4.46)$$

4.2.1. Teoría de Dispersiones

En presencia de una impureza, la cual es descrita por el potencial $U(\mathbf{r})$, las funciones propias del hamiltoniano (4.45) ya no son ondas planas. Consideramos el caso de una impureza simple, y asumimos que el potencial U tiene un rango finito. Entonces tratamos de encontrar una función de onda propia $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ de \mathcal{H} con condición de frontera de onda entrante correspondiente al estado no perturbado $|\mathbf{k}\rangle$, muy lejos de la impureza. La solución puede ser escrita como

$$\begin{aligned}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle &= |\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{\hbar} G^{0R}(\varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar) \mathcal{U} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \\ &= |\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{\hbar} G^{0R}(\varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar) \mathcal{U} |\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{\hbar^2} G^{0R}(\varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar) \mathcal{U} G^{0R}(\varepsilon_{\mathbf{k}}/\hbar) \mathcal{U} |\mathbf{k}\rangle + \dots\end{aligned} \quad (4.47)$$

donde \mathcal{U} es el operador en primera cuantización correspondiente al potencial $U(\mathbf{r})$ y G^0 es la función de Green de partícula libre, vista como un operador en la función de onda $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$. La serie(4.47) se conoce como *serie de Born*. Truncando esta serie en el n -ésimo orden de U , se tiene la n -ésima aproximación de Born. Definiendo la matriz de transición como

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\omega + i\eta) &= \frac{1}{\hbar}\mathcal{U} + \frac{1}{\hbar^2}\mathcal{U}G^{0R}\mathcal{U} + \dots \\ &= \frac{1}{\hbar}\mathcal{U} + \frac{1}{\hbar}\mathcal{U}G^{0R}\mathcal{T}(\omega + i\eta), \end{aligned} \quad (4.48)$$

donde η es un infinitesimal positivo, se puede escribir (4.47) como

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\eta)}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})/\hbar + i\eta} |\mathbf{k}'\rangle, \quad (4.49)$$

con $T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\omega) = \langle \mathbf{k}' | \mathcal{T}(\omega) | \mathbf{k} \rangle$. La matriz $T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$ está relacionada a la función de Green retardada del hamiltoniano total \mathcal{H} mediante¹

$$G^R(\omega) = G^{0R}(\omega) + G^{0R}(\omega)\mathcal{T}(\omega + i\eta)G^{0R}(\omega).$$

Nótese que en esta notación se ha asumido que la suma se toma sobre un conjunto discreto de vectores de onda y la matriz T es del orden de $1/V$. Usando la ecuación (4.12), se halla que la forma asintótica de la función de onda de la onda dispersado (4.49) es

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{r} + \mathcal{O}(1/r^2), \quad f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{mV}{2\pi\hbar} T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\eta), \quad (4.50)$$

donde el vector de onda \mathbf{k}' se define como $k\hat{r}$, donde \hat{r} es el vector unitario en la dirección de \mathbf{r} . Con este resultado se puede escribir la expresión de dos magnitudes importantes de la teoría de dispersiones: la sección eficaz diferencial $d\sigma/d\Omega$,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 = \frac{m^2 V^2}{4\pi^2 \hbar^2} |T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\eta)|^2, \quad (4.51)$$

donde $d\Omega$ denota un elemento de ángulo sólido; y la razón de transición

$$W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 2\pi\hbar |T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\eta)|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (4.52)$$

La razón de transición nos da la probabilidad por unidad de tiempo de que una partícula sea dispersada del estado de onda plana $|\mathbf{k}\rangle$ en el estado $|\mathbf{k}'\rangle$. Para el orden más bajo del potencial de impureza U , la ecuación (4.52) es “*la regla de oro de Fermi*”. La razón total de dispersión del estado $|\mathbf{k}\rangle$ se encuentra mediante la suma de la ecuación (4.52) sobre todos los momentos salientes,

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = 2\pi\hbar \sum_{\mathbf{k}'} |T_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\eta)|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (4.53)$$

¹Puede encontrarse un tratamiento amplio de esta ecuación en L. Ballentine (1998), p. 447

Es importante mencionar también que la matriz T está relacionada con el “teorema óptico estándar”, que se obtiene cuando $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$,

$$\text{Im}T_{\mathbf{k},\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\eta) = -\pi \sum_{\mathbf{k}_1} |T_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}}(\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\eta)|^2 \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}_1}/\hbar). \quad (4.54)$$

El teorema óptico relaciona la amplitud de dispersión incidente con la intensidad de la onda dispersada total [7].

4.2.2. Matriz de Transición para una Impureza

A continuación estudiamos el caso en el que se tiene un potencial de función delta de Dirac $U(\mathbf{r}) = a\delta(\mathbf{r})$ en el origen. Aplicando la transformada de Fourier a la base de estados de onda plana y usando la notación de segunda cuantización, el potencial U puede ser escrito como

$$U = \frac{a}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{\psi}_{\mathbf{k}}. \quad (4.55)$$

Entonces la ecuación para la matriz T es

$$T_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\omega + i\eta) = \frac{a}{\hbar V} \frac{1}{1 - (a/\hbar)\overline{G^{0R}(\omega)}}. \quad (4.56)$$

donde se ha abreviado

$$\overline{G^{0R}(\omega)} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \overline{G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{0R}(\omega)} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\omega + i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}'}/\hbar}. \quad (4.57)$$

Una definición similar puede ser dada para $\overline{G^{0A}(\omega)}$. Nótese que la matriz T es isotrópica, es decir, para un potencial dispersivo de función delta de Dirac, la dispersión es equiprobable en todas las direcciones. Dado que T es isotrópica, sólo uno de los valores propios de T es distinto de cero. La forma más simple de calcular el correspondiente corrimiento de fase δ , es notar que $T(\omega + i\eta) = T(\omega - i\eta)^*$, de manera que

$$e^{2i\delta(\omega)} = \frac{T(\omega + i\eta)}{T(\omega - i\eta)} = \frac{1 - (a/\hbar)\overline{G^0(\omega - i\eta)}}{1 - (a/\hbar)\overline{G^0(\omega + i\eta)}}. \quad (4.58)$$

La parte real de $\overline{G^0(\omega + i\eta)}$ depende débilmente de ω . Formalmente, para una relación de dispersión cuadrática $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/2m$ y para un dispersor de función delta de Dirac, $\text{Re}\overline{G^0(\omega + i\eta)}$ es divergente en el ultravioleta. La parte imaginaria de $\overline{G^0(\omega - i\eta)}$ está relacionada a la densidad de estados por unidad de volumen ν_0 en la energía $\hbar\omega$ y en ausencia de la impureza,

$$\text{Im}\overline{G^0(\omega + i\eta)} = -\pi\hbar\nu_0(\omega) = -\frac{k^2}{2\pi v}, \quad (4.59)$$

donde $v = (1/\hbar)\partial\varepsilon/\partial k$ es la velocidad del vector de onda \mathbf{k} . Con la ayuda de la ecuación (4.59) podemos expresar T es función de δ y ν_0 [7],

$$T_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\omega \pm i\eta) = -\frac{2\pi v}{k^2 V} e^{\pm i\delta(\omega)} \sin \delta(\omega) \quad (4.60)$$

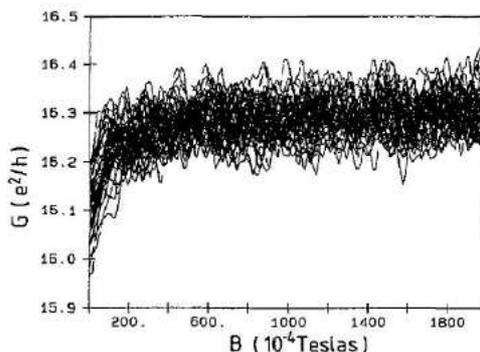


Figura 4.3: Curvas de magneto-conductancia medidas a $T = 45$ mK. Las diferentes curvas son medidas para distintos enfriamientos del mismo alambre de GaAs. Imagen tomada de P. Brower (2005), p.70 (D. Mailly and M. Sanquer, J. Phys. (France) I 2, 357 (1992)).

4.3. Muchas Impurezas

En la sección anterior hemos visto que es difícil pero aun realizable el cálculo de la función de Green para una impureza simple. En presencia de muchas impurezas, el cálculo de la función de Green es casi imposible. Sin embargo no es necesario calcular la la función de Green en presencia de muchas impurezas ya que no se conocen las posiciones exactas ni los potenciales de todas las impurezas en una muestra real. Es claro que si no conocemos el potencial exacto $U(\mathbf{r})$, no tiene sentido calcular la función de Green exacta en presencia de este potencial. La información que se tiene usualmente es la concentración de impurezas y la forma del potencial de una impureza, además de las especies químicas de los átomos de las impurezas y sus localizaciones preferidas dentro de la red cristalina unitaria.

Con esta información se puede considerar un ensamble de diferentes muestras, todas con la misma concentración de impurezas, pero con distintas localizaciones de impurezas. Tales muestras se denominan *macroscópicamente equivalentes pero microscópicamente diferentes*. Calculamos entonces cantidades que son promediadas sobre este ensamble. Tal promedio se denomina "*promedio de desorden*", para distinguirlo del promedio térmico que se ha considerado usualmente. Existe una diferencia importante entre promedios de desorden y promedios térmicos. En un promedio térmico uno se promedia sobre fluctuaciones dependientes del tiempo. De acuerdo al principio ergódico, si se espera un tiempo suficiente, una muestra accederá a todos los estados accesibles del sistema. De esto, el promedio térmico es igual al promedio en el tiempo. En un promedio de desorden, se promedia sobre las configuraciones de las impurezas. Para una muestra dada, las impurezas típicamente no se mueven. De aquí, para obtener un promedio de desorden experimentalmente se debe involucrar muchas muestras que tengan la misma concentración de impurezas pero distintas localizaciones de las impurezas.

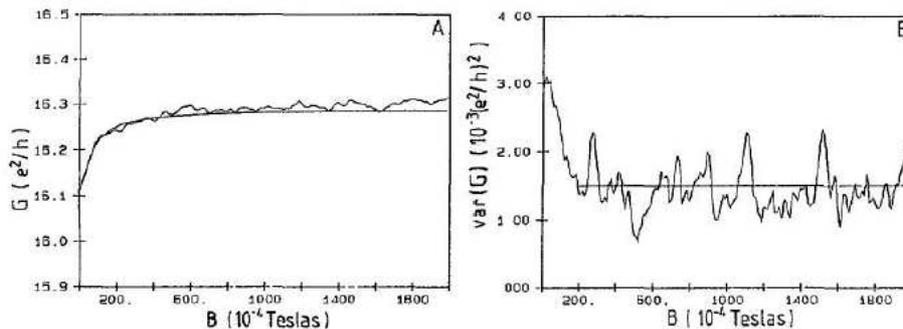


Figura 4.4: Promedio y varianza de las curvas de magneto-conductancia de la Figura 4.1, junto con las predicciones teóricas. El promedio y la varianza fueron tomados sobre 50 diferentes configuraciones de desorden. La imagen fue tomada de P. Brower (2005), p.71 (D. Mailly and M. Sanquer, J. Phys. (France) I 2, 357 (1992)).

Una manera de obtener un promedio de desorden experimentalmente es el *ciclo térmico* donde repetidamente se calienta y enfría la muestra. La razón por la que esta funciona es que a una temperatura suficientemente alta, las impurezas son móviles. Por esto, después de calentar y enfriar la muestra una vez, se obtiene una configuración de impurezas estática. Un ejemplo de este procedimiento se muestra en la Figura 4.3. Aquí, la conductancia de un alambre metálico es medida en función del campo magnético. Las diferentes curvas corresponden a las diferentes enfriamientos del mismo alambre. Junto con el enfriamiento, las curvas de conductancia son enteramente reproducibles, como se puede esperar para una configuración de impurezas estáticas. Existen pequeñas diferencias entre los enfriamientos ya que cada curva de enfriamiento corresponde a una configuración distinta y leve de las impurezas, para las cuales se esperan ligeras diferencias en las funciones de Green y por tanto, ligeras diferencias en la conductancia. De los datos experimentales de la Figura 4.3 se puede calcular la conductancia promedio de este conjunto de alambres, la varianza, etc. Por tanto estas cantidades pueden ser comparadas con los resultados teóricos. Se pueden observar gráficos de la conductancia media y de la varianza en la Figura 4.4 [7].

4.3.1. Promedio de Desorden

En esta parte se discute cómo un promedio de desorden es tomado con el formalismo de las funciones de Green. El efecto conjunto de todas las partículas se describe mediante el potencial

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^1 u(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (4.61)$$

donde r_j es la localización de la j -ésima impureza. La transformación de Fourier del potencial es

$$U_{\mathbf{q}} = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = u_{\mathbf{q}} \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \quad (4.62)$$

donde $u_{\mathbf{q}}$ es la transformada de Fourier del potencial de dispersión para una partícula simple. Para potenciales de impureza de delta de Dirac de partícula simple tenemos $u(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$, se tiene que $u_{\mathbf{q}} = u/V$.

Desarrollando el promedio de desorden para la función de Green, debemos promediar los productos del potencial de desorden $U_{\mathbf{q}}$ sobre las posiciones de las impurezas. Los promedios correspondientes son

$$\begin{aligned} \langle U_{\mathbf{q}} \rangle &= u_{\mathbf{q}} N_{\text{imp}} \delta_{\mathbf{q},0}, \\ \langle U_{\mathbf{q}_1} U_{\mathbf{q}_2} \rangle &= u_{\mathbf{q}_1} u_{\mathbf{q}_2} [N_{\text{imp}}(N_{\text{imp}} - 1) \delta_{\mathbf{q}_1,0} \delta_{\mathbf{q}_2,0} + N_{\text{imp}} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,0}], \\ \langle U_{\mathbf{q}_1} U_{\mathbf{q}_2} U_{\mathbf{q}_3} \rangle &= u_{\mathbf{q}_1} u_{\mathbf{q}_2} u_{\mathbf{q}_3} [N_{\text{imp}}(N_{\text{imp}} - 1)(N_{\text{imp}} - 2) \delta_{\mathbf{q}_1,0} \delta_{\mathbf{q}_2,0} \delta_{\mathbf{q}_3,0} \\ &\quad + N_{\text{imp}}(N_{\text{imp}} - 1)(\delta_{\mathbf{q}_1,0} \delta_{\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,0} + \delta_{\mathbf{q}_2,0} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3,0} + \delta_{\mathbf{q}_3,0} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,0}), \\ &\quad + N_{\text{imp}} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,0}, \end{aligned} \quad (4.63)$$

y así sucesivamente. Consideraremos el caso en que la muestra es grande y de muchas impurezas. En este caso se pueden despreciar las diferencias entre $N_{\text{imp}} - 1$ o $N_{\text{imp}} - 2$ y N_{imp} en las formulas anteriores. Estudiar el caso de muchas impurezas no significa por ejemplo despreciar los términos $N_{\text{imp}} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,0}$ en la segunda línea de la ecuación (4.38) con respecto al término $N_{\text{imp}}^2 \delta_{\mathbf{q}_1,0} \delta_{\mathbf{q}_2,0}$. La razón es que el término precedente tiene una sumatoria más sobre los momentos, lo cual puede traer factores extras de volumen. Nótese que para una concentración fija de impurezas, N_{imp} es proporcional al volumen de la muestra V .

El promedio de desorden se toma después del promedio térmico. Basándose en la ecuación (4.38), se puede formular un conjunto de reglas diagramáticas para el promedio de las impurezas, que debe ser implementado sobre las reglas diagramáticas para el promedio térmico. Estas reglas son:

- El momento debe ser conservado en cada vértice de la impureza (representado por una estrella en el diagrama).
- Cada vértice de la impureza contribuye un factor N_{imp} .
- Un número arbitrario de líneas punteadas puede encontrarse en cada vértice. Cada línea punteada de una impureza que lleva un momento \mathbf{q} contribuye con un factor $u_{\mathbf{q}}$ [7].

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}} \rangle_{\text{imp}} = & \left(\text{diagrama 1} + \text{diagrama 2} + \left(\text{diagrama 3} + \text{diagrama 4} \right) \right) \\
& + \left(\text{diagrama 5} + \text{diagrama 6} + \text{diagrama 7} + \text{diagrama 8} + \text{diagrama 9} + \text{diagrama 10} \right) \\
& + \left(\text{diagrama 11} + \dots + \text{diagrama 12} + \dots + \text{diagrama 13} + \text{diagrama 14} + \text{diagrama 15} \right) + \dots
\end{aligned}$$

Figura 4.5: Expansión diagramática del promedio de desorden de la función de Green de partícula simple $\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) \rangle$. Imagen tomada de H. Bruus (2002), p.188.

4.3.2. Función de Green de Impureza Simple

A continuación usaremos las reglas diagramáticas derivadas en las secciones anteriores y el formalismo de tiempo imaginario para calcular el promedio de desorden de la función de Green de partícula simple. La derivación en tiempo real del formalismo de Keldysh procede de la misma manera. Nuestra primera observación es que el promedio de desorden restablece la invariancia de traslación, por tanto, $\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\tau) \rangle$ es distinto de cero sólo si $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$,

$$\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\tau) \rangle = -\langle T_{\tau} \hat{\psi}_{\mathbf{k}}(\tau) \hat{\psi}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(0) \rangle \equiv \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(\tau) \rangle \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \quad (4.64)$$

Una expansión diagramática para $\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega) \rangle$ se muestra en la Figura 4.5, donde las etiquetas para las frecuencias imaginarias y para los vectores de onda han sido omitidos (se los puede incluir de acuerdo a las reglas diagramáticas de la sección anterior). La expansión diagramática de la Figura 4.5 se ve muy extensa, sin embargo se puede introducir cierto orden en esta expansión mediante el concepto de los *diagramas irreducibles*. Un diagrama se dice irreducible, si no puede ser separado en dos partes al cortar una línea interna de partícula simple. Por ejemplo el primero, segundo, tercer, quinto y octavo diagrama en la expansión de la Figura 4.5 son irreducibles. La suma de todos los diagramas irreducibles, sin las líneas externas de los fermiones, se denomina “*auto-energía*” y se denota como $\Sigma_{\mathbf{k}}$. Diagramáticamente, la auto-energía se expresa mediante la expansión de la Figura 4.6. En términos de la auto-energía, se observa que la función de Green del promedio de desorden obedece la ecuación de Dayson² (véase Figura 4.7),

$$\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) \rangle = \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^0(i\omega_n) \rangle + \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^0(i\omega_n) \rangle \Sigma_{\mathbf{k}(i\omega_n)} \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) \rangle. \quad (4.65)$$

La solución de esta ecuación es

$$\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) \rangle = \frac{\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^0(i\omega_n) \rangle}{1 - \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^0(i\omega_n) \rangle \Sigma_{\mathbf{k}(i\omega_n)}} = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)}. \quad (4.66)$$

²Esta relación fue deducida por Edwards (1958).

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{\mathbf{k}} &\equiv \left\{ \begin{array}{l} \text{Suma de todos los diagramas irreducibles en } \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}} \rangle_{\text{imp}} \\ \text{sin las líneas de fermiones externas } \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \end{array} \right\} \\
 &= \begin{array}{c} \star \\ \vdots \\ \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \star \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} + \left(\begin{array}{c} \star \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \star \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \star \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} + \dots \right) + \dots \\
 &= \text{Diagrama con círculo sombreado}
 \end{aligned}$$

Figura 4.6: Expansión diagramática de la autoenergía $\Sigma_{\mathbf{k}}$ para el promedio de desorden de la función de Green de partícula simple $\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) \rangle$. Imagen tomada de H. Bruus (2002), p.189.

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}} \rangle_{\text{imp}} &= \leftarrow + \leftarrow \text{---} \text{---} \text{---} \leftarrow + \leftarrow \text{---} \text{---} \text{---} \leftarrow \text{---} \text{---} \leftarrow + \dots \\
 &= \leftarrow + \leftarrow \text{---} \text{---} \text{---} \leftarrow \times \left(\leftarrow + \leftarrow \text{---} \text{---} \text{---} \leftarrow + \dots \right)
 \end{aligned}$$

Figura 4.7: Representación diagramática de la ecuación de Dyson para el promedio de desorden de la función de Green $\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) \rangle$. Imagen tomada de H. Bruus (2002), p.189.

Con este resultado, hemos reducido el cálculo del promedio de desorden de la función de Green de partícula simple al de la auto-energía $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$. La razón por la cual $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$ se denomina auto-energía, es evidente mediante la ecuación (4.42): la auto-energía provee un cambio de la energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ que aparece en el denominador de la función de Green de partícula simple.

Sin embargo, la expansión diagramática de la auto-energía es muy complicada para ser resuelta exactamente. En el límite de una concentración baja de impurezas, es posible restringirse la expansión diagramática a los diagramas que tienen un solo vértice de impureza. En efecto de acuerdo a las reglas diagramáticas de la sección previa, cada vértice de impureza contribuye con un factor N_{imp} , de manera que los diagramas con dos o más vertices de impureza contribuyen a concentraciones de impurezas de mayor orden. La aproximación en la cual se consideran diagramas con un vértice de impureza se refiere generalmente como la “aproximación de Born”. Se dice que una aproximación de Born es de n -ésimo orden, si esta conserva sólo los diagramas de auto-energía con $n + 1$ o menos líneas de impurezas. Para la auto-energía esto implica

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n) &= N_{\text{imp}} \left[u_0 + \sum_{\mathbf{q}} u_{-\mathbf{q}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0(i\omega_n) u_{\mathbf{q}} + \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} u_{-\mathbf{q}_1} \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1}^0(i\omega_n) u_{\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2} \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2}^0(i\omega_n) u_{\mathbf{q}_2} + \dots \right]. \quad (4.67)
 \end{aligned}$$

Si comparamos esto con la expresión para la matriz T de impureza simple de la ecuación (4.24), se llega a una conclusión importante

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n) = N_{\text{imp}} T_{k,k}(i\omega_n). \quad (4.68)$$

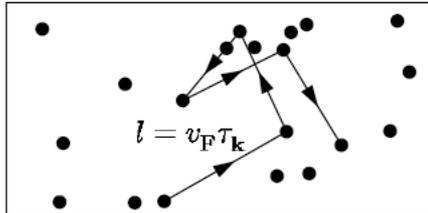
$$\langle G_{\mathbf{k}}(ik_n) \rangle_{\text{imp}} = \frac{1}{ik_n - \xi_{\mathbf{k}} + i \frac{\text{sgn}(k_n)}{2\tau_{\mathbf{k}}}}$$


Figura 4.8: La parte imaginaria de la autoenergía se relaciona con el tiempo de dispersión $\tau_{\mathbf{k}}$ y por tanto también con la longitud de dispersión elástica $l = v_F \tau_{\mathbf{k}}$, donde v_F es la velocidad de Fermi. Imagen tomada de H. Bruus (2002), p.193.

En los cálculos, es de interés la continuación analítica de la auto-energía a frecuencias reales $\omega \pm i\eta$. después de la continuación analítica, la parte real de la auto-energía no es nada más que un cambio en el polo de la función de Green de partícula simple. Este es usualmente despreciado ya que es un función lenta de \mathbf{k} y ω que puede ser absorbida e una redefinición del potencial químico o de la energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. La parte imaginaria de la auto-energía es más importante, ya que puede ser expresada en términos del tiempo de dispersión $\tau_{\mathbf{k}}$ usando el teorema óptico de la ecuación (4.30)

$$\begin{aligned} \text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega + i\eta) &= \text{Im}\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega - i\eta) \\ &= -N_{\text{imp}}\pi \sum_{\mathbf{k}'} |T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega)|^2 \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}'}/\hbar) \\ &\equiv -\frac{1}{2\tau_{\mathbf{k}}}, \end{aligned} \quad (4.69)$$

donde $1/\tau_{\mathbf{k}}$ es la razón de dispersión fuera del estado propio de momento $|\mathbf{k}\rangle$. La razón de dispersión es N_{imp} veces la razón de dispersión causada por una sola impureza de la ecuación (4.29). Esto ocurre sólo en el caso límite en el que la concentración de las impurezas es baja. En la denominada *aproximación de Born auto-consistente*, se reemplaza la función de Green no perturbada G^0 por la función de Green de promedio de desorden $\langle G \rangle$ en el cálculo de la matriz T . De esta forma se toman algunos efectos propios de concentraciones altas de impurezas [7].

Parte II

Coeficiente de Atenuación

Capítulo 5

Interacción de Fotones con un Plasma con Impurezas

En la naturaleza encontramos sistemas físicos que corresponden al estado de la materia en el estado de plasma (es decir con sus componentes ionizados) que contienen impurezas, que en general tienen dimensiones del orden de los micro-metros ($\sim \mu m$) [26, 27]. Estos plasmas con impurezas han sido brevemente descritos en la sección 1.4. En este capítulo se estudia la interacción de radiación electromagnética con un plasma con impurezas. Para esto se calcula y analiza el coeficiente de atenuación del plasma, partiendo de un modelo simplificado de un gas de electrones con impurezas. Se demuestra que la sección eficaz de Compton de los electrones no se ve afectada por la presencia de las impurezas. Se investigan las variaciones de la concentración de electrones causadas por la presencia de impurezas para algunos ejemplos de plasmas experimentales. Luego, para un plasma determinado, se calcula el coeficiente de atenuación del sistema y se analiza gráficamente las contribuciones de las impurezas y del gas de electrones al coeficiente de atenuación. Finalmente se calcula y analiza las variaciones del camino libre medio, debido a su interpretación física inmediata.

5.1. Modelo para el Plasma con Impurezas

El problema físico que vamos a estudiar a continuación, son los efectos a nivel cuántico que existen en la interacción entre radiación electromagnética (fotones) en un plasma con impurezas. Para poder estudiar este problema es necesario establecer un modelo que nos permita simplificar la gran cantidad de variables que existen en un proceso físico de esta naturaleza. Primeramente, no tomaremos en cuenta la presencia de los iones positivos. Este procedimiento es usual y una buena aproximación para la descripción

y el estudio introductorio de los plasmas en general. Esto se debe a que la radiación electromagnética interactúa principalmente con los electrones del plasma [1, 2]. El resultado es un gas de electrones con impurezas, el cual ya hemos tratado en la sección 4.3, donde hemos estudiado que la función de Green del gas de electrones experimenta una variación debido a la presencia de impurezas, lo cual modificará directamente la concentración de electrones en el sistema.

Es de nuestro interés estudiar cómo estas modificaciones afectan a la interacción del plasma con impurezas con la radiación electromagnética, y una manera de hacerlo es analizando el comportamiento del coeficiente de atenuación del sistema. Para esto empezamos mencionando la ecuación de transporte radiativo de la sección 2.2, expresada en función de la frecuencia del fotón ν

$$\frac{dI_\nu}{dx} = -\rho\kappa_\nu I_\nu + \rho j_\nu. \quad (5.1)$$

Partimos de esta ecuación debido a su generalidad en la descripción de procesos de interacción de la radiación con la materia, y para recalcar que nos restringiremos a estudiar sólo los procesos asociados a la dispersión y absorción de los fotones por parte del sistema, es decir

$$\frac{dI_\nu}{dx} = -(\rho\kappa_\nu)I_\nu. \quad (5.2)$$

Aquí podemos definir al término $\rho\kappa_\nu$ como el coeficiente de atenuación de la radiación del sistema α . Resolviendo (5.2) obtenemos la ecuación usual de atenuación de la radiación en un medio

$$I_\nu(x) = I_{\nu 0} e^{-\alpha x}. \quad (5.3)$$

El coeficiente α de un sistema con varios componentes se puede determinar mediante la suma de los coeficientes de atenuación de cada componente, es decir

$$\alpha = \sum_i \alpha_i = \sum_i n_i \sigma_i, \quad (5.4)$$

donde n_i es la concentración del i -ésimo componente que contenga el sistema y σ_i es la sección eficaz correspondiente. Para el sistema que estamos analizando tenemos entonces que el coeficiente de atenuación total α_T sería la suma de los coeficientes de atenuación correspondientes al gas de electrones y a las impurezas, es decir

$$\alpha_T = \alpha_e + \alpha_{\text{imp}}. \quad (5.5)$$

Aquí consideramos que la secciones eficaces de los átomos de la impureza y de los electrones no se ven afectadas con respecto a las formas presentadas en la sección 2.3. En el caso de las impurezas las consideramos compuestas por materia común, lo que significa que sus átomos y moléculas van a interaccionar con los fotones incidentes

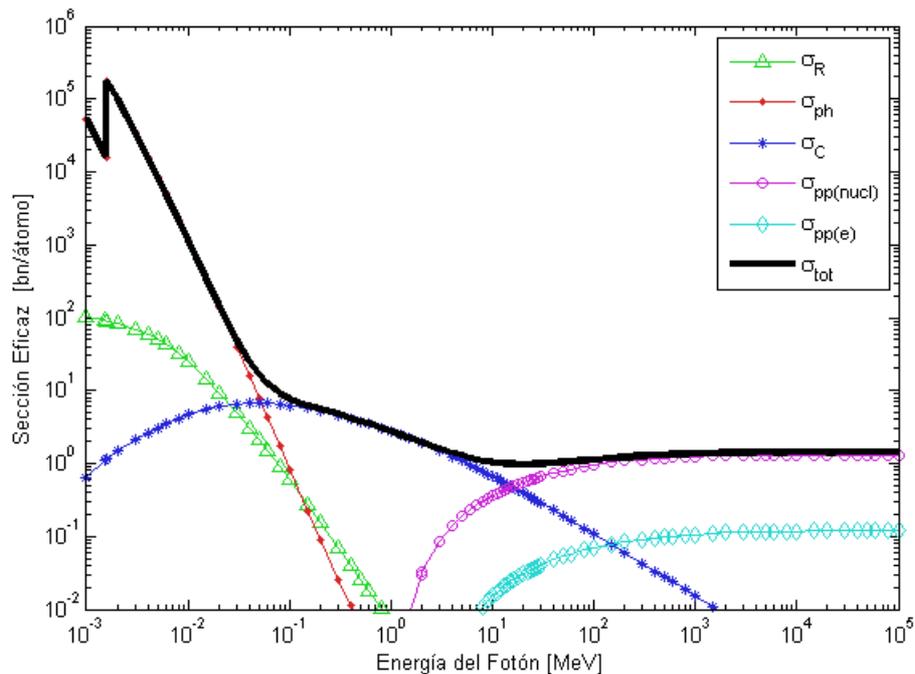


Figura 5.1: Sección eficaz total para el aluminio ($Z=13$) en función de la energía del fotón. Se muestran las contribuciones de la dispersión de Rayleigh σ_R , la absorción por efecto fotoeléctrico σ_{ph} , la dispersión de Compton σ_C , la producción de pares por el campo del núcleo $\sigma_{pp(nucl)}$ y por el campo de un electrón $\sigma_{pp(e)}$.

de todas las formas descritas en la sección 2.3, dependiendo de la energía $\hbar\omega$ de cada fotón. Por tanto el coeficiente de atenuación de las impurezas puede expresarse como

$$\alpha_{imp} = n_{imp}(\sigma_R + \sigma_{ph} + \sigma_C + \sigma_{pp(nucl)} + \sigma_{pp(e)})_{imp}, \quad (5.6)$$

donde n_{imp} es la concentración de las impurezas, σ_R la sección eficaz de Rayleigh, σ_{ph} es la sección eficaz del efecto fotoeléctrico, σ_C es la sección eficaz de Compton, $\sigma_{pp(nucl)}$ es la sección eficaz de la producción de pares en la presencia del campo de Coulomb de un núcleo y $\sigma_{pp(e)}$ es la sección eficaz de la producción de pares en la presencia del campo de Coulomb de un electrón.

Omitimos mencionar explícitamente las fórmulas de las secciones eficaces de (5.6) en este capítulo debido a su extensión, pero es importante mencionar las dependencias de cada sección eficaz en las propiedades de las impurezas

$$\begin{aligned} \sigma_R &= \sigma_R(m, r_{imp}, \hbar\omega) \\ \sigma_{ph} &= \sigma_{ph}(Z_{atom}, \hbar\omega) \\ \sigma_C &= \sigma_C(\hbar\omega) \\ \sigma_{pp(nucl)} &= \sigma_{pp(nucl)}(Z_{atom}, \hbar\omega) \\ \sigma_{pp(e)} &= \sigma_{pp(e)}(\hbar\omega). \end{aligned} \quad (5.7)$$

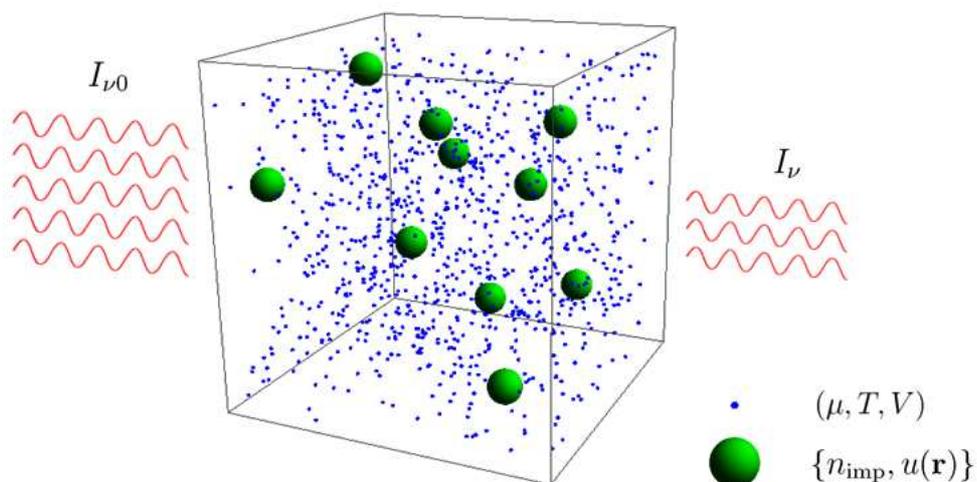


Figura 5.2: Descripción gráfica de la interacción de fotones con un gas de electrones con impurezas. En el modelo, los electrones están en un ensamble gran-canónico (μ, T, V) y las impurezas están en posiciones fijas con una concentración n_{imp} y potencial $u(\mathbf{r})$.

Aquí, $m = n_{sph}/n_{med}$ es la razón entre los índices de refracción de la impureza n_{sph} y el medio circundante n_{med} ; r_{imp} es el radio de la impureza, en el caso especial de considerar cierta simetría esférica; Z_{atom} es el número atómico de los átomos o moléculas que componen la impureza, y $\hbar\omega$ es la energía del fotón incidente, que como se observa se mantiene presente en todas las secciones eficaces. Definiendo una sección eficaz total para las impurezas como

$$\sigma_{tot} = \sigma_R + \sigma_{ph} + \sigma_C + \sigma_{pp(nucl)} + \sigma_{pp(e)}, \quad (5.8)$$

podemos expresar (5.6) de la forma

$$\alpha_{imp} = n_{imp}\sigma_{tot}(m, r_{imp}, Z_{atom}, \hbar\omega). \quad (5.9)$$

En la Figura 5.1 hemos graficado la sección eficaz total para el aluminio ($Z_{atom} = 13$) calculada a partir de datos experimentales tomados de la página web del NIST (National Institute of Standards and Technology) [28]. Se pueden observar el comportamiento característico de cada sección eficaz y el pico de la capa atómica K.

En el caso del coeficiente de atenuación del gas de electrones, sólo las dispersiones por el efecto Compton contribuyen a la sección eficaz, es decir

$$\alpha_e = n_e\sigma_C(\hbar\omega). \quad (5.10)$$

Considerando (5.9) y (5.10), para el coeficiente de atenuación total del plasma con impurezas (5.5) tenemos

$$\alpha_T = n_e\sigma_C(\hbar\omega) + n_{imp}\sigma_{tot}(m, r_{imp}, Z_{atom}, \hbar\omega). \quad (5.11)$$

Aquí necesitamos analizar la concentración de electrones n_e , ya que a nivel cuántico, la presencia de impurezas en un gas de electrones produce cambios en la función de Green del sistema, la cual es proporcional a la concentración de electrones. Además, es de interés analizar si la sección eficaz de la dispersión de Compton experimenta alguna modificación al introducir las impurezas en el gas de electrones. Más adelante analizaremos en detalle cada uno de estos posibles efectos.

5.1.1. Descripción del Modelo y Restricciones

A continuación planteamos un modelo conveniente para el sistema del gas de electrones con impurezas. Suponemos que el gas de electrones se encuentra en un ensamble macrocanónico, es decir, el sistema tiene un volumen finito V y una temperatura definida T . El número de electrones N del sistema es variable, por lo cual tienen asociado un potencial químico μ , que representa la energía necesaria para intercambiar un electrón con el medio circundante.

Las impurezas se encuentran distribuidas en el gas de electrones en forma desordenada, con una concentración n_{imp} y un potencial de interacción $u(\mathbf{r})$. En la Figura 5.2 podemos ver un esquema del sistema que estamos proponiendo. El hamiltoniano del gas de electrones y las impurezas estaría dado por

$$H = (T_e + V_{e-e}) + (T_{\text{imp}} + V_{\text{imp-imp}}) + V_{\text{imp-e}}, \quad (5.12)$$

donde T_e es la energía cinética de los electrones, T_{imp} es la energía cinética de las impurezas, V_{e-e} es la interacción entre electrones, $V_{\text{imp-imp}}$ es la interacción entre las impurezas y $V_{e-\text{imp}}$ es la interacción entre los electrones y las impurezas. Para simplificar el estudio de este sistema podemos aplicar las siguientes restricciones:

1. Dado que conocemos que las impurezas en un plasma tienen un potencial apantallado, el rango de interacción es corto para distancias grandes respecto a las dimensiones de la impureza. Por tanto a bajas concentraciones de impurezas ($n_{\text{imp}} \ll n_e$) podemos prescindir del término $V_{\text{imp-imp}}$.
2. Considerando que la temperatura de las impurezas es mucho menor que la del gas de electrones, entonces la velocidad de las impurezas es mucho menor respecto a la de los electrones, por lo cual podemos asumir que $T_{\text{imp}} = 0$, y por consiguiente que las impurezas pueden considerarse en posiciones fijas.
3. Consideramos como primera aproximación para el análisis del problema, que los electrones no interactúan entre sí. Esto se puede justificar debido a que los electrones en un plasma actúan como cuasi-partículas, es decir, no interactúan

con el potencial de largo rango de Coulomb sino con un potencial apantallado de Debye [10]. Además para concentraciones relativamente bajas y temperaturas altas, las interacciones entre ellos puede ser muy pequeña, es decir $V_{e-e} = 0$.

Con estas restricciones y simplificaciones, el modelo para el plasma con impurezas se simplifica para el análisis. Este viene a ser un gas de electrones no interactuantes, con impurezas de baja concentración localizadas en posiciones fijas aleatorias. Este sistema es descrito por el siguiente hamiltoniano

$$H = T_e + V_{\text{imp-e}}. \quad (5.13)$$

5.2. Sección Eficaz de la Dispersión de Compton

En esta sección analizamos el comportamiento de la sección eficaz de la dispersión de Compton en un gas de electrones con impurezas. Para esto seguiremos un procedimiento análogo al cálculo de la sección eficaz de dispersión de Compton para un electron libre propuesto en [20]. La diferencia radicarán en que el electrón que vamos a analizar está relacionado con un propagador S_{FG} , propuesto también en [20], en el cual se incluyen los efectos de un gas de electrones. Este propagador se expresa de la siguiente forma

$$\begin{aligned} S_{\text{FG}}(p) &= \frac{\not{p} + m_0}{p^2 - m_0^2 + i0} + 2\pi i(\not{p} + m_0)\delta(p^2 - m_0^2) \left[\frac{\Theta(p_0)}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} + 1} + \frac{\Theta(-p_0)}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{p}} + \mu)} + 1} \right] \\ &= S_{\text{F}}(p) + iS_{\text{G}}(p), \end{aligned} \quad (5.14)$$

donde $\not{p} = \gamma_\mu p^\mu$ es el cuadri-momento del electrón (γ_μ son la matrices gama), $p_0 = \epsilon_{\mathbf{p}} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_0^2}$ es la energía relativista del electrón¹, S_{F} es el propagador del electrón libre y S_{G} es la contribución del gas de electrones al que pertenece el electrón. El término entre corchetes de la primera línea de (5.14), corresponde a las contribuciones del gas de electrones y del gas de positrones respectivamente (ver Figura 5.3). Observamos que tienen la forma de distribución de Fermi-Dirac, por lo cual podemos definir a este término como la densidad de estados del gas de electrones y positrones

$$\langle n(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} + 1} \quad (5.15)$$

$$\langle n(\epsilon_{\mathbf{k}} + \mu) \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} + \mu)} + 1}. \quad (5.16)$$

De la sección 4.3, conocemos que la función de Green del sistema es proporcional a la densidad de estados, de modo que podemos asociar de manera general este término a la función de Green de promedio de desorden del sistema (sección 4.3). Por lo

¹En esta sección se utilizará las unidades naturales, es decir $\hbar = c = 1$.

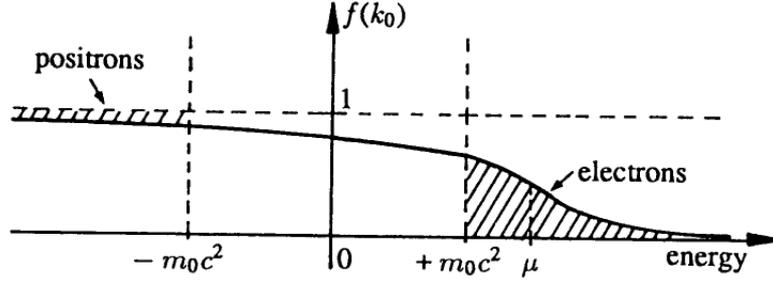


Figura 5.3: Densidad de estados para un gas de electrones a temperatura finita. Las zonas marcadas representan estados ocupados de electrones y positrones. Imagen tomada de W. Greiner (2003), p. 66.

tanto, podemos asumir que la influencia de las impurezas en el gas de electrones debe manifestarse mediante este término.

A continuación calculamos la sección eficaz diferencial de la dispersión de un fotón por un electrón en el gas. Para esto, se utilizará los parámetros dados por el diagrama de Feynman de la Figura 5.4, donde se muestran los dos procesos equivalentes de la dispersión entre un electrón de cuadri-momento y polarización (p_i, s_i) y un fotón en la medida (gauge) transversal de cuadri-momento y polarización (k, ε) . Partimos de la siguiente expresión

$$d\sigma = \int \frac{|S_{fi}|}{|\mathbf{J}|} V \frac{dp_f}{(2\pi)^3} V \frac{dk'}{(2\pi)^3}, \quad (5.17)$$

donde \mathbf{J} es el flujo de fotones entrantes, dp_f y dk' son los elementos de volumen del espacio de fases del electrón y fotón finales respectivamente. S_{fi} es la matriz de transición de la dispersión, definida mediante las reglas de Feynman como

$$S_{fi} = \frac{e^2}{V^2} \sqrt{\frac{m_0^2}{E_i E_f}} \sqrt{\frac{(4\pi)^2}{2\omega 2\omega'}} (2\pi)^4 \delta^4(p_f + k' - p_i - k) \times \\ \times \bar{u}(p_f, s_f) [(i \not{\varepsilon}') i S_{FG}(p_i + k)(i \not{\varepsilon}) + (i \not{\varepsilon}) i S_{FG}(p_i - k')(i \not{\varepsilon}')] u(p_i, s_i), \quad (5.18)$$

donde E_i y E_f son los energías de los electrones inicial y final respectivamente, ω y ω' son las energías del fotón entrante y saliente respectivamente, la función delta de Dirac $\delta^4(p_f + k' - p_i - k)$ garantiza la conservación del momento y la energía, $u(p_i, s_i)$ y $u(p_f, s_f)$ son los espinores de los electrones inicial y final respectivamente, $\not{\varepsilon}$ y $\not{\varepsilon}'$ son los cuadri-vectores de polarización del fotón entrante y saliente respectivamente. Finalmente, S_{FG} es el propagador del electrón en el gas definido en (5.14).

El cálculo de la sección eficaz se realizará en el sistema de laboratorio (ver Figura 5.5), donde el electrón estará inicialmente en reposo, es decir, $p_i = (m_0, \mathbf{0})$. En este sistema

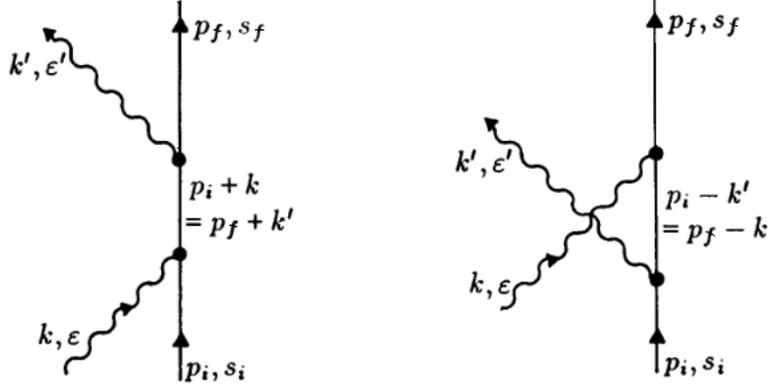


Figura 5.4: Diagramas de Feynman que describen la dispersión de Compton. Imágenes tomadas de W. Greiner (2003), p. 189.

de referencia, (5.17) puede expresarse como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}} = \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} |\bar{u}(p_f, s_f) [\not{\epsilon}' S_{\text{FG}}(p_i + k) \not{\epsilon} + \not{\epsilon} S_{\text{FG}}(p_i - k') \not{\epsilon}'] u(p_i, s_i)|^2, \quad (5.19)$$

donde α es la constante de acoplamiento y además se ha integrado la delta de Dirac de (5.18). Para electrones no polarizados se debe promediar (5.19) sobre los espines iniciales y sumarlos sobre los espines finales. Utilizando la técnica usual mencionada en [20] para eliminar los espines de los electrones se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}}(\lambda', \lambda) &= \frac{1}{2} \sum_{s_i, s_f} \frac{d\sigma}{d\Omega} (s_f, s_i, \lambda', \lambda) \\ &= \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \frac{\not{p}_f + m_0}{2m_0} \Gamma \frac{\not{p}_i + m_0}{2m_0} \bar{\Gamma} \right\}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

donde el operador Γ está definido por

$$\Gamma = \not{\epsilon}' S_{\text{FG}}(p_i + k) \not{\epsilon} + \not{\epsilon} S_{\text{FG}}(p_i - k') \not{\epsilon}', \quad \bar{\Gamma} = \gamma^0 \Gamma^\dagger \gamma^0. \quad (5.21)$$

Considerando (5.14), Γ adquiere la forma

$$\Gamma = \Gamma_F + i\Gamma_G. \quad (5.22)$$

Reemplazando esta ecuación en (5.20) tenemos

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}}(\lambda', \lambda) &= \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \frac{\not{p}_f + m_0}{2m_0} (\Gamma_F + i\Gamma_G) \frac{\not{p}_i + m_0}{2m_0} (\overline{\Gamma_F + i\Gamma_G}) \right\} \\ &= \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} \left(\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \frac{\not{p}_f + m_0}{2m_0} \Gamma_F \frac{\not{p}_i + m_0}{2m_0} \bar{\Gamma}_F \right\} + \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \frac{\not{p}_f + m_0}{2m_0} \Gamma_G \frac{\not{p}_i + m_0}{2m_0} \bar{\Gamma}_G \right\} + \\ &\quad \left. + i \left[\frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \frac{\not{p}_f + m_0}{2m_0} \Gamma_G \frac{\not{p}_i + m_0}{2m_0} \bar{\Gamma}_F \right\} - \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \frac{\not{p}_f + m_0}{2m_0} \Gamma_F \frac{\not{p}_i + m_0}{2m_0} \bar{\Gamma}_G \right\} \right] \right). \end{aligned} \quad (5.23)$$

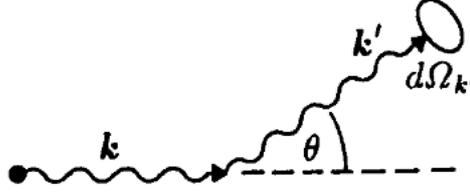


Figura 5.5: El fotón saliente es dispersado respecto al entrante un ángulo θ en el elemento de ángulo sólido $d\Omega_{k'}$. Imagen tomada de W. Greiner (2003), p. 193.

Podemos definir los términos de esta ecuación de la siguiente forma

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{k'}}(\lambda', \lambda) = \left(\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{k'}} \right)_F + \left(\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{k'}} \right)_G + i \left(\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{k'}} \right)_{FG}, \quad (5.24)$$

donde observamos que la sección eficaz diferencial se ha dividido en tres contribuciones, de las cuales $(d\bar{\sigma}/d\Omega_{k'})_F$ corresponde al electrón libre y $(d\bar{\sigma}/d\Omega_{k'})_G$ al gas de electrones. $i(d\bar{\sigma}/d\Omega_{k'})_{FG}$ es una contribución combinada, pero al ser imaginaria, no se la tomará en cuenta. El cálculo de la primera contribución es conocido y conduce a la sección eficaz diferencial de Klein-Nishina, es decir

$$\left(\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{k'}} \right)_F = \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} \frac{1}{4m_0^2} \left[\frac{\omega'}{\omega} + \frac{\omega}{\omega'} + 4(\varepsilon' \cdot \varepsilon)^2 - 2 \right]. \quad (5.25)$$

Calculamos la contribución del gas de electrones, tomando en cuenta (5.21) y (5.22)

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{k'}} \right)_G &= \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \frac{\not{p}_f + m_0}{2m_0} (\not{\varepsilon}' S_G(p_i + k) \not{\varepsilon} + \not{\varepsilon} S_G(p_i - k') \not{\varepsilon}') \times \right. \\ &\quad \left. \times \frac{\not{p}_i + m_0}{2m_0} (\not{\varepsilon}' S_G(p_i + k) \not{\varepsilon} + \not{\varepsilon} S_G(p_i - k') \not{\varepsilon}') \right\}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Dado que S_G esta dado por (5.14), para facilitar los cálculos podemos definir los términos A y B de la siguiente manera

$$\begin{aligned} S_G(p_i + k) &= 2\pi(\not{p}_i + \not{k} + m_0) \delta((p_i + k)^2 - m_0^2) \left[\frac{\Theta(\varepsilon_{\mathbf{p}_i + \mathbf{k}})}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}_i + \mathbf{k}} - \mu)} + 1} + \frac{\Theta(-\varepsilon_{\mathbf{p}_i + \mathbf{k}})}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}_i + \mathbf{k}} + \mu)} + 1} \right] \\ &= (\not{p}_i + \not{k} + m_0) A(p_i + k), \end{aligned} \quad (5.27)$$

$$\begin{aligned} S_G(p_i - k') &= 2\pi(\not{p}_i - \not{k}' + m_0) \delta((p_i - k')^2 - m_0^2) \left[\frac{\Theta(\varepsilon_{\mathbf{p}_i - \mathbf{k}'})}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}_i - \mathbf{k}'}) - \mu} + 1} + \frac{\Theta(-\varepsilon_{\mathbf{p}_i - \mathbf{k}'})}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}_i - \mathbf{k}'}) + \mu} + 1} \right] \\ &= (\not{p}_i - \not{k}' + m_0) B(p_i - k'). \end{aligned} \quad (5.28)$$

Se puede simplificar las expresiones para Γ_G escogiendo una transformación de medida (gauge) conveniente, en la cual los vectores de polarización son ortogonales al momento inicial del electrón, es decir

$$\varepsilon \cdot p_i = 0, \quad \varepsilon' \cdot p_i = 0. \quad (5.29)$$

Aplicando estas definiciones, para (5.26) tenemos

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{k'}}\right)_G &= \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \frac{\not{p}_f + m_0}{2m_0} (\not{\epsilon}'(\not{p}_i + \not{k} + m_0)A \not{\epsilon} + \not{\epsilon}'(\not{p}_i - \not{k}' + m_0)B \not{\epsilon}') \times \right. \\
&\quad \left. \times \frac{\not{p}_i + m_0}{2m_0} (\overline{\not{\epsilon}'(\not{p}_i + \not{k} + m_0)A \not{\epsilon} + \not{\epsilon}'(\not{p}_i - \not{k}' + m_0)B \not{\epsilon}')} \right\} \\
&= \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \frac{\not{p}_f + m_0}{2m_0} (A \not{\epsilon}' \not{k} \not{\epsilon} + B \not{\epsilon}' \not{k}' \not{\epsilon}') \times \right. \\
&\quad \left. \times \frac{\not{p}_i + m_0}{2m_0} (A \not{\epsilon}' \not{k} \not{\epsilon}' + B \not{\epsilon}' \not{k}' \not{\epsilon}) \right\} \tag{5.30}
\end{aligned}$$

Aquí hemos considerado que los términos A y B son reales, por lo tanto $A = \bar{A}$ y $B = \bar{B}$. Evaluamos (5.30) de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{k'}}\right)_G &= \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} \frac{1}{2} \frac{1}{4m_0^2} \left[A^2 \underbrace{\text{Tr} \{ (\not{p}_f + m_0) \not{\epsilon}' \not{k} \not{\epsilon}' (\not{p}_i + m_0) \not{\epsilon}' \not{k} \not{\epsilon}' \}}_{T_1} + \right. \\
&\quad + B^2 \underbrace{\text{Tr} \{ (\not{p}_f + m_0) \not{\epsilon}' \not{k}' \not{\epsilon}' (\not{p}_i + m_0) \not{\epsilon}' \not{k}' \not{\epsilon}' \}}_{T_2} + \\
&\quad + AB \underbrace{\text{Tr} \{ (\not{p}_f + m_0) \not{\epsilon}' \not{k} \not{\epsilon}' (\not{p}_i + m_0) \not{\epsilon}' \not{k}' \not{\epsilon}' \}}_{T_3} + \\
&\quad \left. + BA \underbrace{\text{Tr} \{ (\not{p}_f + m_0) \not{\epsilon}' \not{k}' \not{\epsilon}' (\not{p}_i + m_0) \not{\epsilon}' \not{k} \not{\epsilon}' \}}_{T'_3} \right]. \tag{5.31}
\end{aligned}$$

En (5.31) puede demostrarse que $T_3 = T'_3$. A continuación mencionamos algunos productos escalares que serán útiles en los cálculos

$$k \cdot k = k' \cdot k' = \varepsilon \cdot k = \varepsilon' \cdot k' = \varepsilon \cdot p_i = \varepsilon' \cdot p_i = 0, \tag{5.32}$$

$$\varepsilon \cdot \varepsilon = \varepsilon' \cdot \varepsilon' = 1. \tag{5.33}$$

Con estos resultados, evaluamos las trazas T_1 , T_2 , T_3 y T'_3 de (5.31), obteniendo lo siguiente

$$\begin{aligned}
T_1 &= 8(k \cdot p_i)[(k' \cdot p_i) + 2(k \cdot \varepsilon')^2] \\
&= 8\omega m_0[\omega' m_0 + 2(k \cdot \varepsilon')^2] \tag{5.34}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_2 &= 8(k' \cdot p_i)[(k \cdot p_i) - 2(k' \cdot \varepsilon)^2] \\
&= 8\omega' m_0[\omega m_0 - 2(k' \cdot \varepsilon)^2] \tag{5.35}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_3 = T'_3 &= 8(k \cdot p_i)(k' \cdot p_i)[2(\varepsilon' \cdot \varepsilon)^2 - 1] - 8(k \cdot \varepsilon')^2(k' \cdot p_i) + 8(k' \cdot \varepsilon)^2(p_i \cdot k) \\
&= 8m_0^2 \omega \omega' [2(\varepsilon' \cdot \varepsilon)^2 - 1] - 8m_0 \omega' (k \cdot \varepsilon')^2 + 8m_0 \omega (k' \cdot \varepsilon)^2. \tag{5.36}
\end{aligned}$$

Considerando las coordenadas de laboratorio, es decir $k \cdot p_i = \omega m_0$, $k' \cdot p_i = \omega' m_0$ y

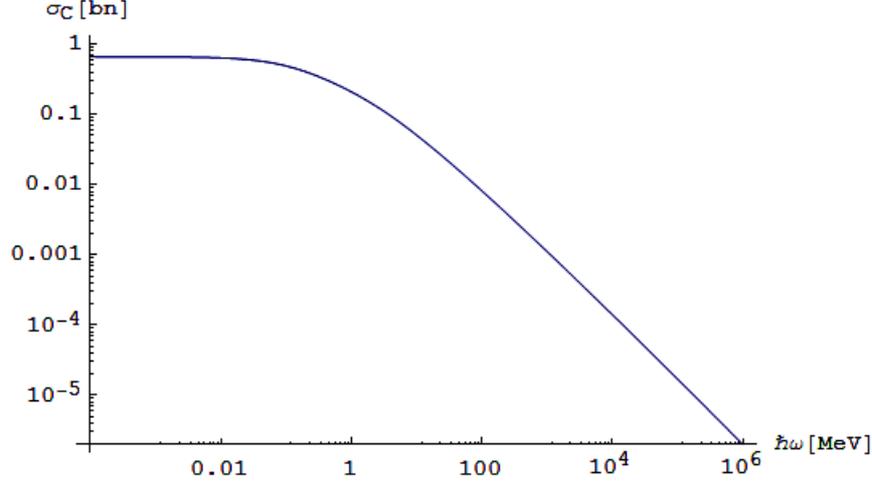


Figura 5.6: Sección eficaz total de la dispersión de Compton.

teniendo en cuenta (5.32) y (5.33), podemos evaluar las delta de Dirac del término A

$$\begin{aligned}\delta((p_i + k)^2 - m_0^2) &= \delta(p_i^2 + k^2 + 2p_i \cdot k - m_0^2) \\ &= \delta(2m_0\omega).\end{aligned}\quad (5.37)$$

De igual manera para la delta de Dirac del término B . Seguidamente evaluamos evaluamos los términos A^2 , B^2 y AB considerando (5.27) y (5.28)

$$\begin{aligned}A^2 &= 4\pi^2\delta^2(2m_0\omega) [\Theta(k_0)\langle n(\epsilon_{\mathbf{p}_i+\mathbf{k}} - \mu) \rangle + \Theta(-k_0)\langle n(\epsilon_{\mathbf{p}_i+\mathbf{k}} + \mu) \rangle]^2 \\ &= \frac{\pi^2}{m_0^2}\delta^2(\omega)h(\epsilon_{\mathbf{p}_i+\mathbf{k}}),\end{aligned}\quad (5.38)$$

$$\begin{aligned}B^2 &= 4\pi^2\delta^2(-2m_0\omega') [\Theta(k_0)\langle n(\epsilon_{\mathbf{p}_i-\mathbf{k}'} - \mu) \rangle + \Theta(-k_0)\langle n(\epsilon_{\mathbf{p}_i-\mathbf{k}'} + \mu) \rangle]^2 \\ &= \frac{\pi^2}{m_0^2}\delta^2(\omega')h(\epsilon_{\mathbf{p}_i-\mathbf{k}'}),\end{aligned}\quad (5.39)$$

$$AB = BA = -\frac{\pi^2}{m_0^2}\delta(\omega)\delta(\omega')h(\epsilon_{\mathbf{p}_i+\mathbf{k}})h(\epsilon_{\mathbf{p}_i-\mathbf{k}'}).\quad (5.40)$$

Por conveniencia, aquí hemos definido las funciones $h(\epsilon_{\mathbf{p}_i+\mathbf{k}})$ y $h(\epsilon_{\mathbf{p}_i-\mathbf{k}'})$ para simplificar la notación. Finalmente, considerando (5.34-5.36) y (5.38-5.40) podemos evaluar la sección eficaz diferencial (5.31), obteniendo lo siguiente

$$\begin{aligned}\left(\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{k'}}\right)_G &= \alpha^2 \frac{\omega'^2}{\omega^2} \frac{\pi^2}{m_0^3} [\omega\delta^2(\omega)[\omega'm_0 + 2(k \cdot \epsilon')^2]h(\epsilon_{\mathbf{p}_i+\mathbf{k}}) + \\ &\quad + \omega'\delta^2(\omega')[\omega m_0 - 2(k' \cdot \epsilon)^2]h(\epsilon_{\mathbf{p}_i-\mathbf{k}'}) - \\ &\quad - 2\delta(\omega)\delta(\omega')(m_0\omega\omega'[2(\epsilon' \cdot \epsilon)^2 - 1] - \omega'(k \cdot \epsilon')^2 + \omega(k' \cdot \epsilon)^2)h(\epsilon_{\mathbf{p}_i+\mathbf{k}})h(\epsilon_{\mathbf{p}_i-\mathbf{k}'})].\end{aligned}\quad (5.41)$$

Observamos que cada uno de los términos de esta ecuación contiene uno de los siguientes productos [21]

$$\omega\delta(\omega) = \omega'\delta(\omega') = 0.\quad (5.42)$$

Para (5.41), esto implica que

$$\left(\frac{d\bar{\sigma}}{d\Omega_{k'}} \right)_G = 0. \quad (5.43)$$

Como se ha demostrado, la contribución del gas de electrones a la sección eficaz diferencial de la dispersión de Compton es nula. Las funciones $h(\epsilon_{\mathbf{p}_i+\mathbf{k}})$ y $h(\epsilon_{\mathbf{p}_i-\mathbf{k}'})$ definidas en (5.39) contienen la información de la densidad de estados que es proporcional a la función de Green del sistema. Dado que estos términos se anulan, esto implica que la influencia de las impurezas ejercida mediante la densidad de estados del gas de electrones, no afecta a la sección eficaz de dispersión de Compton.

Como se menciona en la sección 2.3, la integración de (5.25) respecto a los ángulos conduce a la sección eficaz total

$$\sigma_C(x) = 2\pi r_e^2 \left[\frac{1+x}{x^3} \left(\frac{2x(1+x)}{1+2x} + \frac{1}{2x} \right) \ln(1+2x) - \frac{1+3x}{(1+2x)^2} \right], \quad (5.44)$$

donde $x = \omega/m_0$. Esta función se puede ver en la Figura 5.6 y es la que se usará en los cálculos posteriores.

5.3. Concentración de un Gas de Electrones con Impurezas

Tomando en cuenta el modelo simplificado para el plasma con impurezas de la sección 5.3, el hamiltoniano (5.13) describe la energía cinética de los electrones y el potencial de interacción entre las impurezas y los electrones,

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}), \quad (5.45)$$

donde m es la masa del electrón y $\Delta_{\mathbf{r}}$ es el laplaciano respecto a las coordenadas del electrón. Observamos que este hamiltoniano tiene la forma del estudiado en la sección 4.3 para el gas de Fermi con impurezas. Para nuestro problema, las impurezas también se mantienen fijas, por tanto el potencial externo $V_{\text{imp-e}}$ se expresa como

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} u(\mathbf{r} - \mathbf{P}_j), \quad (5.46)$$

donde la sumatoria va sobre todas las N_{imp} impurezas que se encuentran en el gas de electrones ($n_{\text{imp}} = N_{\text{imp}}/V$, V el volumen del sistema), ubicadas en las \mathbf{P}_j posiciones fijas distribuidas aleatoriamente, y $u(\mathbf{r} - \mathbf{P}_j)$ es el potencial de una impureza individual sobre cada electrón. Siguiendo el procedimiento de la sección 4.3, buscamos la función de Green del sistema en el formalismo de Matsubara (sección 3.4), la cual

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}} \rangle_{\text{imp}} &= \left(\text{---} \leftarrow \text{---} + \text{---} \leftarrow \text{---} \text{---} \text{---} \right) \times \left(\text{---} \leftarrow \text{---} + \text{---} \leftarrow \text{---} \text{---} \leftarrow \text{---} + \dots \right) \\
&= \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 + \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \Sigma_{\mathbf{k}} \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}} \rangle_{\text{imp}}.
\end{aligned}
\tag{a}$$

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\mathbf{k}} &= \text{---} \text{---} \text{---} \\
&= \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \left(\text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \right) + \left(\text{---} \text{---} \text{---} + \dots \right) + \dots
\end{aligned}
\tag{b}$$

Figura 5.7: Representaciones diagramáticas de (a) la función de Green de promedio de desorden y (b) la expansión en serie de la auto-energía. Imágenes adaptadas de Bruus (2002).

es proporcional al número de estados del sistema debido a su definición mediante los operadores de creación y aniquilación

$$\mathcal{G}(\tau) = \langle T_{\tau} \hat{\psi}(\tau), \hat{\psi}^{\dagger}(0) \rangle. \tag{5.47}$$

Planteamos la ecuación de Dyson para el hamiltoniano (5.45)

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n) = \mathcal{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; i\omega_n) + \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} \mathcal{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; i\omega_n) u(\mathbf{r} - \mathbf{P}_j) \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\omega_n), \tag{5.48}$$

donde

$$\mathcal{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; i\omega_n) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0(i\omega_n), \quad \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}}, \tag{5.49}$$

es la función de Green de para un electrón libre. Esta ecuación puede expresarse de manera simplificada en la aproximación de promedio de desorden (sección 4.3),

$$\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \rangle_{\text{imp}} = \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0(i\omega_n) + \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0(i\omega_n) \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \rangle_{\text{imp}}, \tag{5.50}$$

donde $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$ es la auto-energía del sistema. Resolviendo esta ecuación integral tenemos

$$\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \rangle_{\text{imp}} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)}. \tag{5.51}$$

En la Figura 5.7(a) se puede observar los diagramas de Feynman asociados a la ecuación de Dyson de la función de Green y en 5.7(b), la expansión en serie de la auto-energía.

Con la función de Green (5.51) podemos encontrar la densidad de estados del gas de electrones, evaluando la sumatoria sobre las frecuencias de Matsubara, es decir

$$\langle n(\epsilon_{\mathbf{k}}) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \rangle_{\text{imp}}. \quad (5.52)$$

Con esta densidad de estados podemos inmediatamente calcular el número de electrones en el gas aplicando los métodos de la física estadística para un gas de Fermi, mencionados en la sección 4.1

$$N(\mu, T, V) = \sum_{\mathbf{k}} \langle n(\epsilon_{\mathbf{k}}) \rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \langle n(\epsilon_{\mathbf{k}}) \rangle. \quad (5.53)$$

Por tanto, la concentración de electrones en el sistema está dada por

$$n_e = \frac{N}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \rangle_{\text{imp}}. \quad (5.54)$$

Como puede verse, n_e es proporcional a la función de Green de promedio de desorden, donde está contenida toda la información del sistema, en este caso, las interacciones del gas de electrones con las impurezas. La ecuación (5.54) es la manera más general de calcular la concentración de electrones en el sistema.

5.3.1. Primera Aproximación de la Auto-Energía

A continuación calculamos la concentración de electrones n_e para la aproximación más baja de la expansión en serie de la auto-energía (Figura 5.7(b)), para lo cual tenemos

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^0(i\omega_n) \equiv \begin{array}{c} \star \\ | \\ \bullet \end{array} = n_{\text{imp}} u_0, \quad (5.55)$$

donde n_{imp} es la concentración de las impurezas y u_0 es la transformada de Fourier del potencial de la impureza $u_{\mathbf{q}}$ evaluado en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, es decir

$$u_0 = \int d\mathbf{r} u(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}. \quad (5.56)$$

Entonces para la función de Green (5.51) en esta aproximación tenemos

$$\langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \rangle_{\text{imp}}^0 = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} - n_{\text{imp}} u_0}. \quad (5.57)$$

Como se ve, la interacción de las impurezas con el gas de electrones causa un desplazamiento de los niveles de energía con el término constante $n_{\text{imp}} u_0$. Observamos además que la auto-energía no depende de las frecuencias de Matsubara $i\omega_n$ ni del momento \mathbf{k} , por lo cual no existen consecuencias dinámicas en el gas de electrones [29]. Esto nos

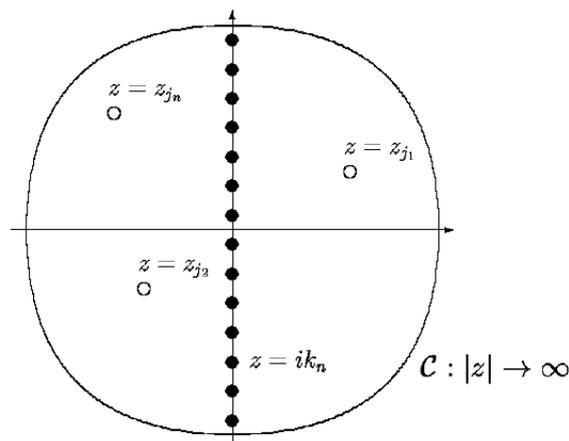


Figura 5.8: Contorno para realizar la sumatoria sobre las frecuencias de Matsubara cuando $g(z)$ tiene polos z_j conocidos. Imagen tomada de Bruus (2002), p. 167.

permite incorporar este término al potencial químico contenido en $\xi_{\mathbf{k}}$, Redefiniendo este término de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\xi_{\mathbf{k}}^0 &= \xi_{\mathbf{k}} + n_{\text{imp}}u_0 \\ &= \epsilon_{\mathbf{k}} - (\mu - n_{\text{imp}}u_0).\end{aligned}\quad (5.58)$$

Calculamos la densidad de estados de acuerdo a (5.52)

$$\begin{aligned}\langle n(\epsilon_{\mathbf{k}}) \rangle^0 &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \langle \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \rangle_{\text{imp}}^0 \\ &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}^0}.\end{aligned}\quad (5.59)$$

Aquí se tiene una sumatoria sobre frecuencias complejas, que debe evaluarse usando cálculo de residuos en variable compleja [30]. Evaluamos la sumatoria de acuerdo a la siguiente regla propuesta en [29]. Si $g(z)$ es una función de la variable compleja z y que tiene polos simples conocidos, es decir

$$g(z) = \prod_j \frac{1}{z - z_j}, \quad (5.60)$$

entonces la sumatoria sobre las frecuencias de Matsubara se calculan usando el camino de integración mostrado en la Figura 5.8. Como resultado la evaluación se la hace de la siguiente manera

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} g(i\omega_n) = \sum_j \text{Res}_{z=z_j} [g(z)] n_F(z_j) e^{z_j \tau}, \quad (5.61)$$

donde $n_F(z)$ es la distribución de Fermi-Dirac definida como

$$n_F(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1}. \quad (5.62)$$

Aplicando esta regla en la evaluación de la sumatoria (5.59) tenemos

$$g(z) = \frac{1}{z - \xi_{\mathbf{k}}^0}, \quad y \quad \text{Res}_{z=\xi_{\mathbf{k}}^0}[g(z)] = \text{Res}_{z=\xi_{\mathbf{k}}^0}\left[\frac{1}{z - \xi_{\mathbf{k}}^0}\right] = 1, \quad (5.63)$$

Por tanto la densidad de estados es

$$\begin{aligned} \langle n(\epsilon_{\mathbf{k}}) \rangle^0 &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \left\{ \text{Res}_{z=\xi_{\mathbf{k}}^0} \left[\frac{1}{z - \xi_{\mathbf{k}}^0} \right] n_F(\xi_{\mathbf{k}}^0) e^{\xi_{\mathbf{k}}^0 \tau} \right\} \\ &= \frac{1}{e^{\beta \xi_{\mathbf{k}}^0} + 1}. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Considerando (5.64), calculamos la concentración de electrones en el sistema de acuerdo a (5.54)

$$\begin{aligned} n_e &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - (\mu + n_{\text{imp}} u_0))} + 1} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{\hbar^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\sqrt{\epsilon}}{z_u^{-1} e^{\beta\epsilon} + 1} \\ &= \frac{2}{\Lambda^3} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{z_u^{-1} e^x + 1}. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Aquí hemos transformado la integral de momentos a una integral con respecto a las energías, luego realizado un cambio de variable $x = \beta\epsilon$ y redefinido la fugacidad como

$$z_u = e^{\beta(\mu + n_{\text{imp}} u_0)}. \quad (5.66)$$

Además se ha utilizado la longitud de onda térmica Λ definida como

$$\Lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{1/2}. \quad (5.67)$$

Este es el procedimiento usual mencionado en la sección 4.1 para obtener la función de Fermi

$$f_{3/2}(z_u) = \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{z_u^{-1} e^x + 1}. \quad (5.68)$$

Por tanto considerando (5.65-5.68), la concentración de electrones en el sistema en esta aproximación de la auto-energía es

$$n_e = \frac{2}{\Lambda^3} f_{3/2}(z_u). \quad (5.69)$$

Como se puede observar, la concentración de electrones en esta aproximación se expresa de la misma manera que para un gas de electrones ideal (ecuación (4.10)), pero con una fugacidad redefinida por (5.66). Considerando que el sentido físico de la fugacidad² está asociado a la estabilidad del sistema, de modo que si $z \rightarrow 0$ el sistema es más estable, entonces en (5.66), si $n_{\text{imp}} u_0 < 0$ el sistema será más estable, y si $n_{\text{imp}} u_0 > 0$ el sistema será menos estable.

²La fugacidad es una propiedad física calculada de un sistema y está asociada al potencial químico. Refleja la tendencia de las partículas a escaparse o fugarse. En física estadística, refleja la predisposición de una sustancia a preferir una fase de otra. En este caso la fase con menor fugacidad será la más estable.

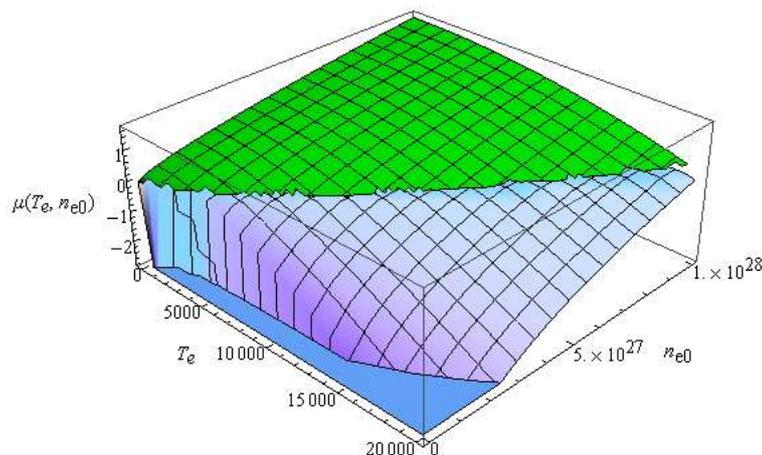


Figura 5.9: Gráfico del potencial químico $\mu(T, n_{e0})$ de la ecuación (5.73).

5.3.2. Impurezas con Potencial de Debye

A continuación vamos a calcular la concentración de electrones (5.69) para un potencial de impurezas determinado. En la sección 1.4 hemos analizado el comportamiento de las impurezas en un plasma, y se ha visto que en general las impurezas tienden a cargarse negativamente debido al apantallamiento de los electrones en su superficie. Considerando esto, estudiaremos el comportamiento del gas de electrones con impurezas que tengan un potencial de Debye dado por

$$u(r) = \frac{Z_d e^2}{r} e^{-(r-r_d)/\lambda_D}, \quad (5.70)$$

donde Z_d es la carga de la impureza, r_d es el radio medio de la impureza y λ_D es la longitud de Debye. Con el fin de buscar la concentración de electrones asociada a este potencial, calculamos el término u_0 de (5.56), que es la transformada de Fourier del potencial evaluada en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, es decir

$$\begin{aligned} u_0 &= \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{Z_d e^2}{r} e^{-(r-r_d)/\lambda_D} \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} = \frac{4\pi Z_d e^2}{1/\lambda_D^2 + q^2} e^{r_d/\lambda_D} \Big|_{q=0} \\ &= 4\pi Z_d e^2 \lambda_D^2 e^{r_d/\lambda_D}. \end{aligned} \quad (5.71)$$

Con este resultado se encuentra inmediatamente la fugacidad modificada (5.66) del sistema

$$z_u = \exp \{ \beta (\mu + n_{\text{imp}} (4\pi Z_d e^2 \lambda_D^2 e^{r_d/\lambda_D})) \}. \quad (5.72)$$

Aquí podemos observar que si las impurezas tuviesen un potencial de Coulomb, es decir $\lambda_D \rightarrow \infty$, la fugacidad (5.72) se hace infinita y por tanto la concentración (5.69) diverge. Esto refleja la importancia del apantallamiento de Debye en las impurezas para esta aproximación.

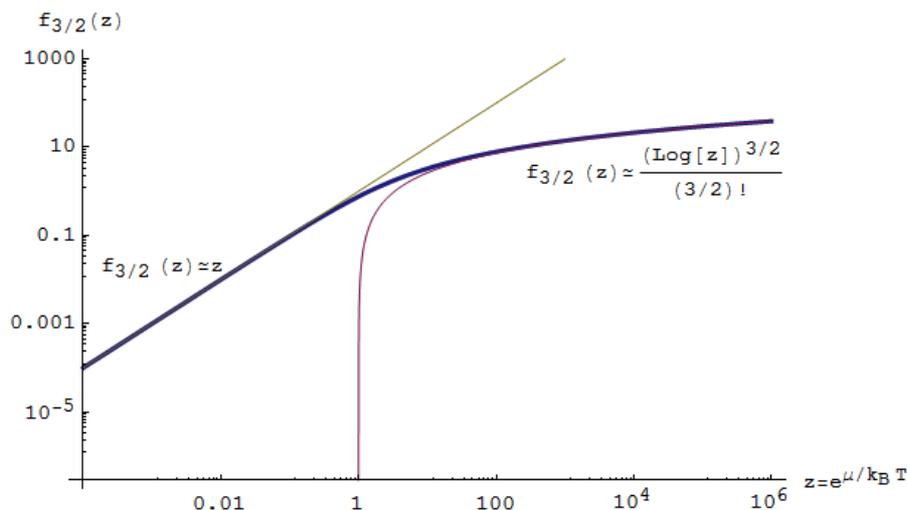


Figura 5.10: La función $f_{3/2}(z)$ en escala logarítmica. Se puede observar la validez de las aproximaciones en (5.75) para los diferentes valores de z .

Podemos calcular el potencial químico de (5.72) a partir de la concentración de electrones del gas ideal n_{e0} y de su temperatura T_e , usando las definiciones aproximadas mencionadas en la sección 4.2, de lo cual se obtiene la siguiente expresión

$$\mu(T_e, n_{e0}) = \begin{cases} \epsilon_F(n_{e0}) \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{12} [k_B T_e / \epsilon_F(n_{e0})]^2 \right\} & , \text{ si } \Theta \leq 1 \\ k_B T_e \left[\ln \left(n_{e0} \frac{\Lambda^3}{2} \right) + \frac{1}{2^{3/2}} n_{e0} \frac{\Lambda^3}{2} \right] & , \text{ si } \Theta > 1. \end{cases} \quad (5.73)$$

Aquí se ha utilizado el criterio de la temperatura reducida $\Theta = \frac{k_B T_e}{\epsilon_F}$ para determinar el comportamiento aproximado de μ . El término $\epsilon_F(n_{e0})$ es la energía de Fermi del gas de electrones definida como

$$\epsilon_F(n_{e0}) = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_{e0})^{2/3}. \quad (5.74)$$

En la Figura 5.9 se puede ver que para altas densidades y bajas temperaturas ($\Theta \leq 1$) el potencial químico es positivo y para bajas densidades y altas temperaturas ($\Theta \geq 1$) el potencial químico es negativo y está definido de mediante la aproximación termodinámica para el gas de Fermi.

Debido a la definición exponencial de la fugacidad (5.72), esta puede tomar valores extremos dependiendo de la temperatura y la concentración de los electrones. Por tanto es conveniente usar los valores aproximados de $f_{3/2}(z)$ sugeridos en la sección 4.2. En la Figura 5.10 se puede observar el rango de validez de las aproximaciones para bajas y altas fugacidades. Para nuestros cálculos numéricos utilizaremos la siguiente

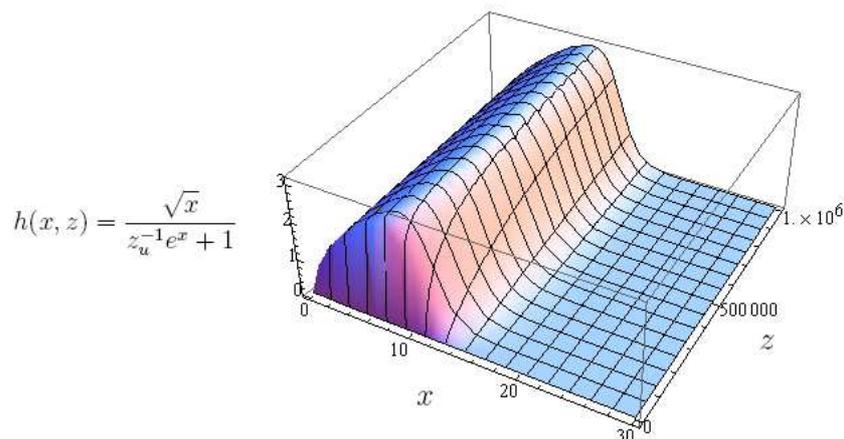


Figura 5.11: Integrando de la función $f_{3/2}(z)$ (ecuación (5.68)). Se observa que la función converge rápidamente en el eje x para un rango amplio de z .

aproximación

$$f_{3/2}(z) = \begin{cases} z & \text{si } z < 0.01 \\ \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^{30} dx \sqrt{x} / (z^{-1} e^x + 1) & \text{si } 0.01 \leq z \leq 10^6 \\ (\ln z)^{3/2} / (3/2)! & \text{si } z > 10^6 \end{cases} \quad (5.75)$$

la cual nos da un error con respecto a la función $f_{3/2}(z)$ de 0.003% para $z = 0,01$ y 0.006% para $z = 10^6$. Además hemos integrado hasta el valor de $x = 30$, ya que como se ve en el gráfico 5.11 el integrando de la función $f_{3/2}(z)$ converge hacia cero entre $x = 15$ y $x = 20$ en el rango de z sugerido en la ecuación (5.75).

Tomando en cuenta las ecuaciones (5.72-5.75), evaluamos la concentración de electrones (5.69), obteniendo la siguiente expresión

$$n_e = 2 \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T_e} \right)^{-3/2} f_{3/2} \left(\exp \{ \beta [\mu(T_e, n_{e0}) + n_{\text{imp}} 4\pi Z_d e^2 \lambda_D^2 e^{r_d/\lambda_D}] \} \right). \quad (5.76)$$

Como se observa, esta expresión tiene la misma forma de (5.69), pero gracias a las aproximaciones realizadas, esta ya puede ser utilizada para realizar cálculos numéricos de la concentración de un gas de electrones con impurezas.

5.3.3. Análisis para Varios Plasmas con Impurezas

Observamos que la concentración de electrones (5.76) depende de seis parámetros distintos

$$n_e = n_e(T_e, n_{e0}, n_{\text{imp}}, Z_d, r_d, \lambda_D). \quad (5.77)$$

Los dos primeros, n_{e0} y T_e definen el gas de electrones y debido a que se tienen cuatro parámetros que dependen de las propiedades de las impurezas, es necesario recurrir a

Cuadro 5.1: Valores aproximados de parámetros de distintos plasmas con impurezas cargadas. Se menciona como referencia los datos de plasmas solares. Datos tomados de P. K. Shukla (2002).

No.	Plasma	n_e [m^{-3}]	T_e [K]	n_{imp} [m^{-3}]	r_d [μm]	a/λ_D
	Corona Solar	10^{13}	10^6	—	—	—
	Núcleo Solar	5×10^{33}	1.7×10^7	—	—	—
1	Nubes Interestelares	$10^3 - 10^2$	12	0.1	0.2	≤ 0.3
2	Disco de Polvo Zodiacal	5×10^6	10^5	10^{-6}	2-10	5
	Cometa Halley:					
3	en la ionopausa	$10^9 - 10^{10}$	$\leq 10^3$	10^3	0.1–10	≥ 1
4	fuera de la ionopausa	$10^8 - 10^9$	$\sim 10^4$	$10^{-2} - 0.1$	0.01–10	≥ 10
	Anillos de Saturno:					
5	E	$\sim 10^7$	$10^5 - 10^6$	0.1	~ 1	0.1
6	F	$\sim 10^7$	$10^5 - 10^6$	$\leq 10^7$	1	$\leq 10^{-3}$
7	radiales	$10^5 - 10^8$	$\sim 10^4$	$\sim 10^6$	~ 1	$\leq 10^{-2}$
8	NLCs ¹	10^9	150	10^7	0.1	0.2
9	Combustión de Cohetes	10^{19}	3×10^3	10^{14}	0.1	≤ 5
10	Llamas	10^{18}	2×10^3	10^{17}	0.01	≤ 1
11	Descargas dc ²	10^{15}	$3-30 \times 10^4$	$10^9 - 10^{10}$	1 – 5 (Al)	—
12	Descargas rf ³	10^{15}	23 200	2×10^{11}	5 (SiO ₂)	—

¹Nubes Nuctilucientes Terrestres.

² $T_d = 300$, $Z_d \sim 10^5$ K para partículas de Al y $r_d = 50 - 65 \mu m$, $Z_d \sim 10^6$ K para partículas de vidrio.

³ $T_i = 350$ K, $\Gamma_c = 100 - 200$.

ejemplos astrofísicos y experimentales para analizar el comportamiento de la concentración de electrones (5.76). Para esto hemos tomado datos de diferentes plasmas con impurezas de [26], los cuales se muestran en el Cuadro 5.1. Sin embargo, es necesario obtener dos parámetros faltantes, la longitud de Debye y la carga de la impureza, a partir del resto de parámetros presentes. Para determinar la longitud de Debye a partir de la razón a/λ_D , recordamos que la magnitud a del Cuadro 5.1 es es la distancia media entre impurezas determinada por

$$a(n_{\text{imp}}) = \left(\frac{4\pi}{3} n_{\text{imp}} \right)^{-1/3}. \quad (5.78)$$

Para los plasmas (11) y (12) en los que no se da este término, podemos encontrar la longitud de Debye considerando la constante de acoplamiento entre las impurezas

$$\Gamma_{\text{imp}} = \frac{Z_d^2 e^2 / a(n_{\text{imp}})}{k_B T_d} \exp \left\{ -\frac{a(n_{\text{imp}})}{\lambda_D} \right\}, \quad (5.79)$$

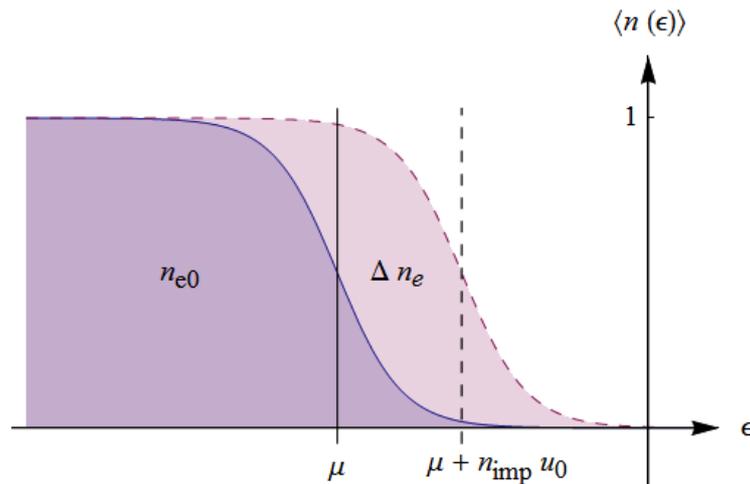


Figura 5.12: Gráfico esquemático de la concentración de estados de un gas de electrones n_e , donde se toman en cuenta la influencia de las impurezas cuando el potencial químico es negativo y Δn_e positivo.

donde T_d es la temperatura de las impurezas, que en este caso es de 300 K, la temperatura aproximada del ambiente. Para obtener la carga de la impureza Z_d a partir de los datos dados, aplicamos la ecuación sugerida en [27] para plasmas con impurezas experimentales

$$\frac{k_B T_e}{Z_d e^2 / r_d} \approx 2 - 4, \quad (5.80)$$

la cual relaciona la energía cinética de los electrones con respecto a la energía potencial en la superficie de la impureza. En el Cuadro 5.2 se muestran los cálculos de la longitud de Debye λ_D y la carga de la impureza Z_d para los diferentes plasmas del Cuadro 5.1.

Como se observa en el Cuadro 5.2, los plasmas (1)-(8) tienen valores de longitud de Debye mucho mayores que el radio de la impureza ($\lambda_D \gg r_d$), lo cual implica que el apantallamiento de los electrones en la impureza es débil y el potencial tiende a ser de Coulomb, es decir $e^{-(r-r_d)/\lambda_D} \rightarrow 1$ en (5.70). Además los plasmas (1), (8), (9) y (10) presentan valores de carga de la impureza muy bajas. Esto se debe a que la fórmula (5.80) utilizada para estimar Z_d es válida básicamente para plasmas complejos experimentales terrestres. Sin embargo el resto de plasmas presentan cargas de impureza con valores aceptables, es decir $Z_d \gg 1$.

Con estas consideraciones obtenemos los parámetros necesarios para calcular la concentración de electrones n_e de los distintos plasmas con impurezas del Cuadro 5.1 a partir de la ecuación (5.76). Además podemos calcular la variación en la concentración de electrones $\Delta n_e = n_e - n_{e0}$ y el porcentaje que esta variación representa respecto a la concentración original n_{e0} . Estos cálculos se encuentran en el Cuadro 5.2. La variación en la concentración de electrones del gas de electrones de los diferentes plasmas es pequeña, pero finita y positiva. Como se puede ver en la Figura 5.12, el aumento en

Cuadro 5.2: Variación de la concentración de electrones n_{e0} y otros parámetros para los diferentes plasmas del Cuadro 5.1.

No.	λ_D [m]	Z_d	n_{e0} [m^{-3}]	Δn_{e0} [m^{-3}]	%	Γ_e	Θ	z_u
1	4	1	10^2	3.5×10^{-3}	$3. \times 10^{-3}$	1×10^{-5}	1×10^{14}	5×10^{-22}
2	12	2×10^5	5×10^6	1.7	$3. \times 10^{-5}$	5×10^{-8}	8×10^{14}	3×10^{-23}
3	0.06	1200	10^{10}	9.7×10^6	0.1	6×10^{-5}	5×10^{10}	7×10^{-17}
4	0.3	2400	10^8	29.9	$3. \times 10^{-5}$	1×10^{-6}	1×10^{13}	2×10^{-20}
5	13	2×10^4	10^7	9.0×10^3	0.1	6×10^{-8}	5×10^{14}	6×10^{-23}
6	3	2×10^5	10^7	9.6×10^{35}	$9. \times 10^{30}$	6×10^{-9}	5×10^{15}	∞
7	0.6	2400	10^6	2.5×10^{16}	$2. \times 10^{10}$	1×10^{-6}	1×10^{13}	5×10^{-12}
8	0.01	1	10^9	2.9×10^6	0.3	2×10^{-4}	4×10^{10}	1×10^{-16}
9	3×10^{-6}	69	10^{19}	3.5×10^{16}	0.4	0.02	2×10^5	1×10^{-8}
10	1×10^{-6}	5	10^{18}	9.9×10^{16}	9.9	0.01	5×10^5	3×10^{-9}
11	6×10^{-5}	1×10^5	10^{15}	4.7×10^{12}	0.5	9×10^{-5}	7×10^8	4×10^{-14}
12	3×10^{-5}	3×10^4	10^{15}	4.7×10^{13}	4.7	1×10^{-4}	6×10^8	6×10^{-14}

la concentración de electrones viene de un desplazamiento de los niveles de energía respecto al potencial químico en una cantidad $n_{\text{imp}}u_0$. Dado que estamos tratando un ensamble gran-canónico, se asume que los electrones adicionales ingresan al sistema de los alrededores.

En el caso del plasma de los anillos F (6) y radiales (7) de Saturno la variación es muy alta debido principalmente a que las concentraciones de impurezas son del orden de las concentraciones de electrones, por lo cual la condición $n_{\text{imp}} \ll n_e$ no se cumple. Lo mismo sucede en el caso de las llamas (10), pero el efecto es menos notorio. Las menores variaciones de concentración Δn_e corresponden a los plasmas de nubes interestelares (1), del disco zodiacal (2) y al de fuera de la ionopausa del cometa Halley (4); esto debido a que la concentración de impurezas n_{imp} es varios ordenes de magnitud menor que la de electrones.

Con respecto a los plasmas de las descargas dc (11) y rf (12) se puede observar que los valores de la carga de la impureza y longitud de Debye están en el rango esperado. Además para estos plasmas, la variación en la concentración de electrones es también apreciable. Por tanto se puede decir que estos plasmas cumplen con las restricciones impuestas en la sección 5.1, por lo cual son candidatos idóneos para el análisis del coeficiente de atenuación.

En el Cuadro 5.2 también hemos incluido los cálculos de otros parámetros de interés

como la constante de acoplamiento del gas de electrones Γ_e definida como

$$\Gamma_e = \frac{e^2/a(n_{e0})}{k_B T_e} \quad (5.81)$$

donde $a(n_{e0})$ es la distancia media entre electrones (ver ecuación (5.78)). Esta constante determina si las interacciones entre los electrones son o no significativas. También hemos calculado la temperatura reducida Θ , que determina la aproximación para el cálculo del potencial químico (5.73). Finalmente se muestra la fugacidad modificada z_u de la ecuación (5.66), que determina la forma de aproximación de la función de Fermi (5.75).

Analizando el coeficiente de acoplamiento de los electrones Γ_e y la temperatura reducida θ , se puede concluir que para todos los casos $\Gamma_e \ll 1$ y $\Theta \gg 1$, excepto para las llamas y la combustión de cohetes. Esto significa que puede considerarse que el gas de electrones tiene un comportamiento termodinámico, es decir las interacciones entre los electrones son poco significativas. Además, de acuerdo a los datos del Cuadro 5.2, para todos los ejemplos de plasmas con impurezas tenemos un valor de fugacidad pequeño ($z_u \ll 1$) y un valor de la temperatura reducida alto ($\Theta \gg 1$). Considerando esto, podemos tomar las aproximaciones para la fugacidad y el potencial químico de las ecuaciones (5.73) y (5.75) respectivamente, para calcular la concentración de electrones de (5.76), es decir

$$n_e \approx \frac{2}{\Lambda^3} \exp \left\{ \beta \left[k_B T_e \left(\ln n_{e0} \frac{\Lambda^3}{2} + \frac{1}{2^{3/2}} n_{e0} \frac{\Lambda^3}{2} \right) + n_{\text{imp}} u_0 \right] \right\}. \quad (5.82)$$

Evaluamos algebraicamente esta ecuación y obtenemos finalmente

$$n_e = n_{e0} \exp \left\{ \beta n_{\text{imp}} u_0 + \frac{1}{2^{3/2}} n_{e0} \frac{\Lambda^3}{2} \right\}. \quad (5.83)$$

Como puede observarse, en esta aproximación la concentración de electrones es proporcional a la concentración de electrones original n_{e0} multiplicada por un exponencial que tiene dos términos. El primero viene de la auto-energía de la función de Green y es una contribución causada por las impurezas, y el segundo viene de la corrección del gas de Fermi para la aproximación termodinámica (ver ecuación (4.26)).

5.4. Coeficiente de Atenuación y Camino Libre Medio

Para analizar el coeficiente de atenuación del gas de electrones con impurezas, tomamos como ejemplo el plasma (12) del Cuadro 5.2, que corresponde a un plasma complejo de descarga rf, ya que este presenta el mayor porcentaje en la variación de la concentración de electrones y además cumple de mejor manera con las restricciones impuestas en la sección 5.1. En este caso las impurezas en la descarga rf son de SiO_2 , pero por facilidad asumiremos que las impurezas son de aluminio ($Z_{\text{atom}} = 13$), las cuales son también utilizadas experimentalmente en plasmas de descarga [27].

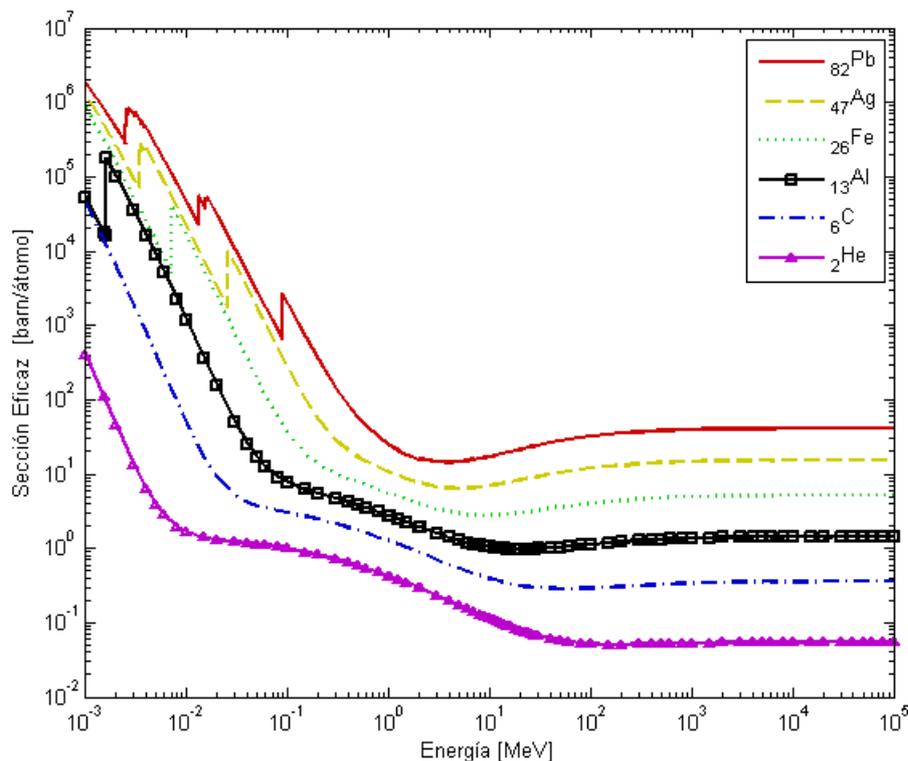


Figura 5.13: Sección eficaz total para elementos de distinto número atómico.

Empezamos evaluando la sección eficaz total de un átomo de aluminio para los diferentes energías de un fotón incidente, tomando los datos experimentales de [28]. Como podemos ver en la Figura 5.13, la sección eficaz total para la absorción y dispersión de fotones es función de la energía del fotón incidente y del número atómico de los distintos elementos químicos. Por tanto podemos expresar la sección eficaz total del átomo de la siguiente manera

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{tot}}(\hbar\omega, Z_{\text{atom}}). \quad (5.84)$$

Además en la Figura 5.13, podemos observar que existe una forma característica común para todos los elementos para energías de fotones de alrededor de 1 MeV. Esta corresponde a la región donde la dispersión de Compton es predominante.

Calculamos el coeficiente de atenuación del gas de electrones con impurezas a partir de la ecuación (5.11), recordando los resultados de la sección 5.2, donde demostramos que la sección eficaz de la dispersión de Compton no se veía modificada por la presencia de las impurezas, es decir

$$\begin{aligned} \alpha_T &= \alpha_{\text{imp}} + \alpha_e \\ &= n_{\text{imp}}\sigma_{\text{tot}}(Z_{\text{atom}}, \hbar\omega) + n_e(T_e, n_{e0}, n_{\text{imp}}, u_0)\sigma_C(\hbar\omega). \end{aligned} \quad (5.85)$$

Vemos que el coeficiente de atenuación total depende de ocho parámetros, de los cuales

la energía del fotón es la más importante ya que define el comportamiento de los distintos tipos de radiación electromagnética con el gas de electrones con impurezas.

Analizamos la concentración del gas de electrones. Con este fin calculamos el valor numérico de los miembros del exponente de la ecuación (5.83),

$$n_e = n_{e0} \exp \left\{ \underbrace{\beta n_{\text{imp}} u_0}_{(1)} + \underbrace{\frac{1}{2^{3/2}} n_{e0} \frac{\Lambda^3}{2}}_{(2)} \right\}. \quad (5.86)$$

Evaluamos los factores (1) y (2) de (5.86) con los datos del Cuadro 5.1 del plasma seleccionado para comparar sus magnitudes

$$(1) = \beta n_{\text{imp}} u_0 \approx 0.045 \quad (5.87)$$

$$(2) = \frac{1}{2^{3/2}} n_{e0} \frac{\Lambda^3}{2} \approx 2.07 \times 10^{-14} \quad (5.88)$$

Observamos que la contribución del factor (2) es mucho menor a la de (1), por lo tanto, para este caso particular, podemos expandir en series el factor (1) y despreciar el factor (2). Tomamos el término de segundo orden en la expansión debido a que el valor numérico de (5.87) no es lo suficientemente pequeño,

$$n_e \approx n_{e0} \left\{ 1 + \beta n_{\text{imp}} u_0 + \frac{(\beta n_{\text{imp}} u_0)^2}{2} + \dots \right\}. \quad (5.89)$$

Podemos tomar en cuenta a los términos de la expansión en serie de grado mayor o igual a uno como un solo factor, y definir la variación de la concentración del gas de electrones como

$$\Delta n_e = n_{e0} \left\{ \beta n_{\text{imp}} u_0 + \frac{(\beta n_{\text{imp}} u_0)^2}{2} \right\}. \quad (5.90)$$

Entonces podemos expresar (5.89) de la siguiente manera

$$n_e(T_e, n_{e0}, n_{\text{imp}}, u_0) = n_{e0} + \Delta n_e(T_e, n_{e0}, n_{\text{imp}}, u_0), \quad (5.91)$$

es decir, la concentración del gas de electrones corresponde a la suma de la concentración original n_{e0} y un componente positivo Δn_e correspondiente a los efectos cuánticos producidos por la presencia de las impurezas cargadas en el sistema.

Para el plasma que estamos analizando, utilizamos la ecuación (5.91) para determinar el coeficiente de atenuación total (5.85)

$$\alpha_T = n_{\text{imp}} \sigma_{\text{tot}}(\hbar\omega, Z_{\text{atom}}) + [n_{e0} + \Delta n_e(T_e, n_{e0}, n_{\text{imp}}, u_0)] \sigma_C(\hbar\omega), \quad (5.92)$$

donde hemos omitido las dependencias. Definiendo los términos $\alpha_{e0} \equiv n_{e0} \sigma_C$ y $\Delta \alpha_e \equiv \Delta n_e \sigma_C$, tenemos

$$\alpha_T = \alpha_{\text{imp}}(\hbar\omega, Z_{\text{atom}}, n_{\text{imp}}) + \alpha_{e0}(\hbar\omega, n_{e0}) + \Delta \alpha_e(\hbar\omega, T_e, n_{e0}, n_{\text{imp}}, u_0). \quad (5.93)$$

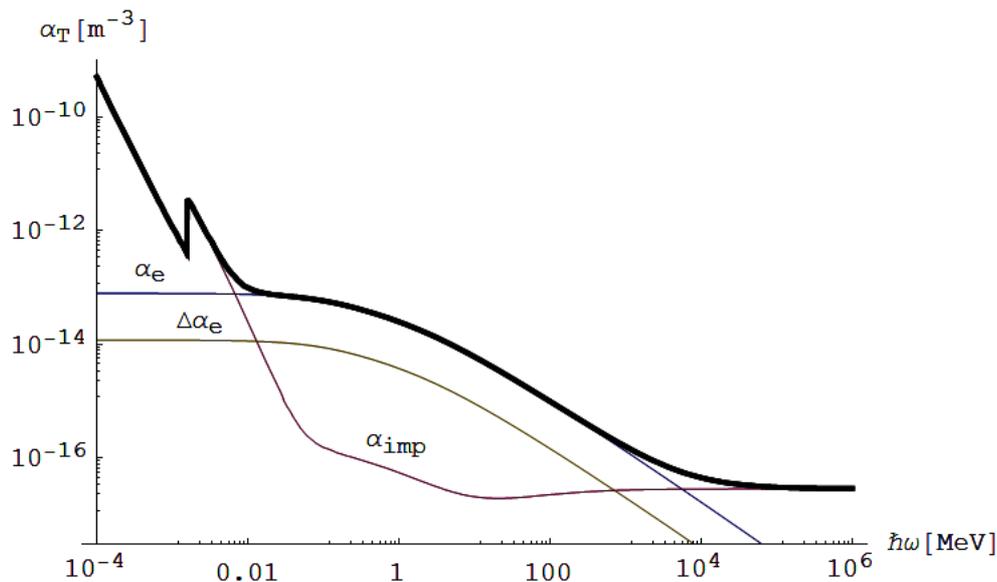


Figura 5.14: Coeficiente de atenuación total α_T para el plasma de descarga rf del Cuadro 5.2 con impurezas de aluminio ($Z_{\text{atom}} = 13$). Se muestran también, según la ecuación (5.93), las contribuciones de las impurezas α_{imp} , del gas de electrones α_{e0} , y la variación $\Delta\alpha_e$.

Como se puede ver en esta ecuación, el coeficiente de atenuación total α_T se divide en las contribuciones de las impurezas α_{imp} , del gas de electrones libre α_{e0} y el término $\Delta\alpha_e$ que se deriva de la variación de la concentración (5.91) y está asociado a los efectos cuánticos de la interacción entre las impurezas y los electrones.

En la Figura 5.14 hemos graficado el coeficiente de atenuación total α_T dado en (5.93) y la contribución de los coeficientes α_{imp} , α_e y $\Delta\alpha_e$. Como se puede observar la contribución de las impurezas tienen un comportamiento proporcional a la sección eficaz total de la Figura 5.1. Por otra parte, las contribuciones del gas de electrones α_e y $\Delta\alpha_e$, son proporcionales a la sección eficaz de la dispersión de Compton σ_C , por lo cual pasan a ser la contribución más significativa para energías del fotón de alrededor de 1 MeV.

A continuación, analizamos el camino libre medio l de un fotón en el gas de electrones con impurezas, debido a que tiene un significado físico más evidente en comparación con el coeficiente de atenuación α_T . Su definición, como ya se ha mencionado en la sección 2.3, es simplemente el inverso del coeficiente de atenuación total, es decir

$$l(\hbar\omega, Z_{\text{atom}}, T_e, n_{e0}, n_{\text{imp}}, u_0) = \frac{1}{\alpha_T} = \frac{1}{\alpha_{\text{imp}} + \alpha_{e0} + \Delta\alpha_e}. \quad (5.94)$$

Definimos el camino libre medio del gas de electrones sin el efecto de las impurezas como

$$l_0(\hbar\omega, Z_{\text{atom}}, n_{e0}, n_{\text{imp}}) = \frac{1}{\alpha_{\text{imp}} + \alpha_{e0}}. \quad (5.95)$$

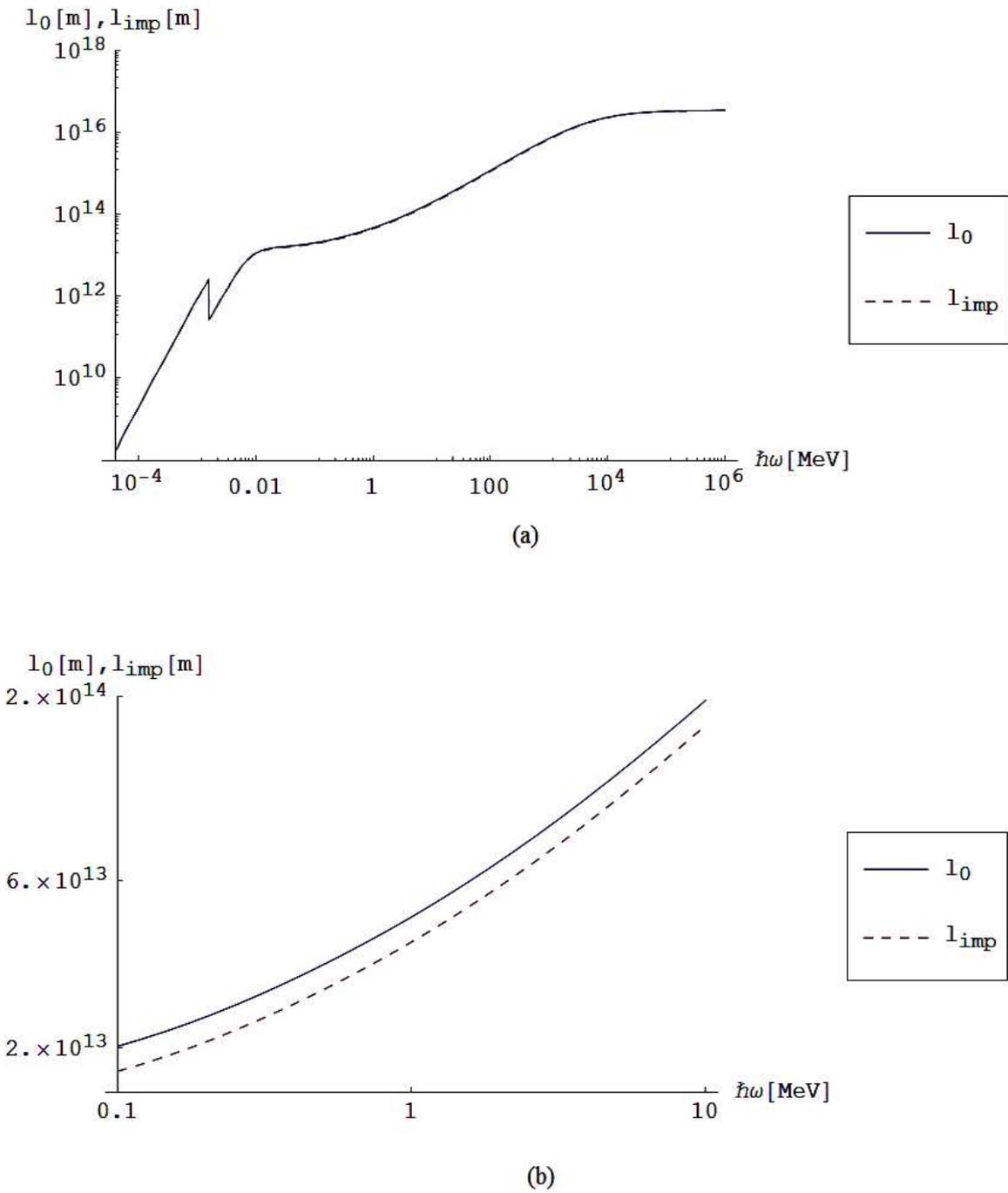


Figura 5.15: Camino libre medio del gas de electrones con impurezas, con el efecto de las impurezas l y sin dicho efecto l_0 . (a) En el rango de energías mostrado, se observa que el efecto global es pequeño y poco notorio. (b) Para energías del fotón de alrededor de 1 MeV. Se puede observar la ligera variación ocasionada al tomar en cuenta la interacción de las impurezas en el gas de electrones.

En la Figura 5.15 (a) hemos graficado el camino libre medio del gas de electrones sin el efecto de las impurezas l_0 y con el efecto de las impurezas l_{imp} , en función de la energía de un fotón incidente. Debido a la pequeña variación que experimenta la concentración del gas de electrones n_e a causa de la presencia de las impurezas, en el rango de energías mostrado no se observa diferencia alguna. Sin embargo, de la Figura 5.14 inferimos que los efectos deben ser notorios para energías de alrededor de 1 MeV, por lo tanto, en la Figura 5.15 (b) hemos hecho un acercamiento alrededor de esta energía para observar el comportamiento de l_0 y l_{imp} . Como se observa, l_0 es mayor que l_{imp} en el dominio de energías mostrado, lo cual implica que el fotón disminuye su camino libre medio recorrido. Esto se atribuye a la mayor presencia de electrones, consecuencia del aumento en la concentración ocasionada por los efectos cuánticos de la presencia de impurezas en el gas de electrones.

Capítulo 6

Conclusiones y Recomendaciones

6.1. Conclusiones

En el proceso físico de la interacción entre radiación electromagnética con un plasma con impurezas, se ha considerado analizar el coeficiente de atenuación del sistema. Para esto, el proyecto ha sido dividido en dos partes: en la primera se han desarrollado los conceptos y métodos que se utilizaron en el modelo del plasma con impurezas y en la segunda se dedica al cálculo y análisis del coeficiente de atenuación del sistema. De los resultados obtenidos en la última parte, podemos mencionar las siguientes conclusiones.

- Se ha propuesto como modelo del plasma con impurezas un gas de electrones en el ensamble gran-canónico con impurezas puntuales cargadas con una concentración y un potencial determinado. Este sistema ha sido descrito mediante el hamiltoniano (5.12). Para simplificar el análisis del problema se han considerado las restricciones de la página 71, con las cuales el sistema pasa a ser descrito como un gas de electrones no interactuante con impurezas cargadas fijas y distribuidas en forma aleatoria (ecuación 5.45).
- En la sección 5.2 se ha demostrado que la sección eficaz de dispersión de Compton de un electrón en un gas de electrones, no se ve afectada por la presencia de impurezas. Por lo tanto se concluye que los efectos a nivel cuántico de la presencia de impurezas en el gas de electrones está ligada sólo a las variaciones en la concentración.
- A partir de la función de Green de promedio de desorden (5.51) se ha calculado la variación de la concentración de electrones en el sistema (5.54). Realizando la primera aproximación en la expansión de la auto-energía (5.69), se observa que tiene la misma forma que un gas de Fermi, pero con una fugacidad redefinida

en (5.66). Esta redefinición implica que el sistema se vuelve menos estable si el desplazamiento respecto al potencial químico es positivo y más estable si este es negativo.

- Se ha asignado a las impurezas un potencial de Debye y se ha calculado la concentración de electrones para este caso. Debido a que el resultado (5.76) depende de seis parámetros, se ha tomado los datos experimentales aproximados de varios plasmas con impurezas de [26], los cuales se muestran en el Cuadro 5.1. Se puede observar que en general son plasmas de altas temperaturas y bajas concentraciones. Los resultados de la variación de la concentración de electrones se muestran en el Cuadro 5.2. De aquí se concluye que la presencia de impurezas causan un aumento positivo en la concentración de electrones. Esto se debe a que los niveles de energía se desplazan positivamente respecto al potencial químico (ver Figura 5.12). Dado que estamos tratando con un ensamble gran-canónico, se asume que los electrones adicionales ingresan al sistema de los alrededores.
- Para el análisis del coeficiente de atenuación, se ha tomado el plasma (10) del Cuadro 5.2 que corresponde a un plasma de descarga rf. Para este plasma se ha calculado el coeficiente de atenuación considerando impurezas de aluminio. Usando la forma (5.91) de la concentración de electrones, se ha obtenido la expresión (5.93) que se divide en una contribución de las impurezas, el gas de electrones libre y una contribución asociada con los efectos cuánticos de la interacción entre las impurezas y los electrones. Estos resultados han sido graficados en la Figura 5.14 donde se ha observado que la contribución más notoria del gas de electrones se presenta para energías del fotón de alrededor de 1 MeV. Esto se debe a que los fotones interactúan con el gas de electrones sólo mediante el efecto Compton.
- Para observar los efectos que provoca la variación de la concentración de electrones en el plasma con impurezas, se ha analizado el camino libre medio (5.94), que es el inverso del coeficiente de atenuación. En las Figuras 5.15 (a) y 5.15 (b) se ha graficado el camino libre medio con y sin la influencia de las impurezas. La disminución del camino libre medio es una consecuencia del aumento en la concentración de electrones en el plasma con impurezas.

6.2. Recomendaciones

A continuación presentamos ciertas recomendaciones y posibles aplicaciones de los resultados teóricos obtenidos en esta investigación. En cada caso se sugiere como ampliar el campo de la investigación según el interés de cada área.

- En la **Física del Plasma**, los resultados de esta investigación pueden ayudar a entender los efectos cuánticos de la presencia de impurezas en plasmas experimentales [26, 27]. En este caso se pueden incluir los efectos de los iones en el plasma. Para plasmas sometidos a campos electromagnéticos, es de interés observar como se comporta la función de Green del plasma con impurezas en un campo electromagnético, es decir, se debe aplicar una transformación de los momentos de los electrones a los momentos canónicos generalizados.
- Para plasmas no relativistas con coeficientes de acoplamiento bajos, las interacciones por el potencial de Coulomb entre pares de electrones se vuelven significativas, por lo cual se recomienda considerar un gas de electrones interactuante.
- Se recomienda encontrar una mejor manera de estimar la carga de las impurezas para mejorar la exactitud de los cálculos, ya que la forma usada en (5.80), se ha tomado del comportamiento típico de los plasmas complejos experimentales terrestres.
- Para un plasma con concentraciones de impurezas del mismo orden que la del gas de electrones ($n_e \sim n_{\text{imp}}$), la probabilidad de interacción de entre electrones e impurezas aumenta y se pueden presentar efectos dinámicos en los electrones. Para esto, se recomienda analizar el comportamiento de la función de Green al incluir diagrams de mayor orden en la auto-energía (Figura 5.7 (b)).
- En **Astrofísica**, es de interés el estudio de la interacción de fotones con la materia debido a que los fenómenos físicos se los analiza mediante la radiación electromagnética que emiten, absorben o dispersan los cuerpos involucrados. El presente trabajo puede servir para analizar ciertos efectos radiativos, en especial los asociados a la dispersión de Compton. Además puede ser de interés estudiar el comportamiento de la función de Green en campos magnéticos fuertes con el fin de mejorar ciertos modelos para plasmas astrofísicos, como discos de acreción, jets de núcleos de galaxias activas, atmósferas estelares, etc.
- En **Cosmología**, existen problemas relacionados con eras temprana del universo posterior a la nucleosíntesis (entre tres minutos y 300 000 años después del Big-Bang) donde se menciona la existencia de un plasma de electrones con núcleos de hidrógeno y helio [31]. En este caso se tendría un plasma relativista donde es de interés analizar las funciones de Green que resuelvan la ecuación de Dirac. La teoría relativista de sistemas de muchas partículas, ha sido desarrollada para estudios teóricos del núcleo [32], y puede ser de interés aplicarla en este problema cosmológico.

Bibliografía

- [1] PAUL M. BELLAN. *Fundamentals of Plasma Physics*. Draft copy published by CUP, Pasadena CA (2004).
- [2] AXEL KÖNIES y KARL KREIGER. *Summer University for Plasma Physics September 27-October 1, 2004*. Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Munich (2004).
- [3] GEORGE W. COLLINS. *The Fundamentals of Stellar Astrophysics*. The Ohio State University, Ohio (2003).
- [4] RUSSEL M. KULSRUD. *Plasma Physics for Astrophysics*. Princenton University Press, Princenton (2005).
- [5] ALEXANDER L. FETTER y JOHN DIRK WALECKA. *Quantum theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill Book Company, New York (1971).
- [6] RICHARD D. MATTUCK. *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*. McGraw-Hill Publishing Company Limited, Berkshire (1967).
- [7] PIET BROWER. *Theory of Many-Particle Systems*. Lecture notes for P654. (2005). Cornell University. Septiembre de 2005. <<http://people.ccmr.cornell.edu/brouwer/p654/notes.pdf>>
- [8] JOHN NEGELE y HENRI ORLAND. *Quantum Many-Particle Systems*. Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City CA (1988).
- [9] GERALD D. MAHAN. *Many-Particle Physics*. Plenum Press, New York (1990).
- [10] ALEXANDRE M. ZAGOSKIN. *Quantum Theory of Many-Body Systems. Techniques and Applications*. Springer-Verlag New York Inc., New York (1998).
- [11] RICHARD FITZPATRICK. *Introduction to Plasma Physics: A graduate level course*. The University of Texas at Austin, Austin (2007).
- [12] ITER. *ITER web page*. Modificado: 25 febrero 2007. International Tokamak Research Engineering. Acceso: 17 junio 2007. <<http://www.iter.org>>

- [13] V. B. BERESTETSKII, E. M LIFSHITZ y L. P. PITAEVSKII. *Quantum Electrodynamics*, Landau and Lifshitz Course of Theoretical Physics, Vol. 4, 2nd. Edition. Reed Educational and Professional Publishing, Oxford (1982).
- [14] FANK H. SHU. *The Physics of Astrophysics. Vol. 1. Radiation*. University Science Books, Mill Valley (1991).
- [15] T. PADMANABHAN. *Theoretical Astrophysics*. Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [16] B. R. MARTIN. *Nuclear and Particle Physics*. John Wiley & Sons Ltd., Bristol (2006).
- [17] HANS NAUS AND WIM UBACHS. *Opt. Lett.* **25** (5), 347 (2000)
- [18] A. J. COX, ALAN J. DEWEERD, AND JENNIFER LINDEN. *Am. J. Phys.* **70** (6), 620-625 (2002)
- [19] P. MARMIER Y E. SHELDON. *Physics of Nuclei and Particles*. Academic Press, London (1969).
- [20] WALTER GREINER Y JOACHIM REINHARDT. *Quantum Electrodynamics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg , Berlin (2009).
- [21] CLAUDE COHEN-TANNOUJJI, BERNARD DIU y FRANCK LALOË. *Quantum Mechanics* . Vol. 1 y 2. John Wiley & Sons, Paris (1977).
- [22] PETER SZEKERES. *A Course in Modern Mathematical Physics*. Cambridge University Press, Cambridge (2004).
- [23] PIERS COLEMAN. *Introduction to Many Body Physics*. Monograph written for the course 620 Fall 2004. (2007). Rutgers University. Agosto de 2007. <<http://www.physics.rutgers.edu/users/coleman/mbody/pdf/bk.pdf>>
- [24] WALTER GREINER, LUDWING NEISE y HORST STRÖCKER. *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Springer-Verlag New York Inc., New York (1995).
- [25] FRANZ SCHWABL. *Statistical Mechanics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin (2006).
- [26] P. K. SHUKLA Y A. A. MAMUN. *Introduction to Dusty Plasma Physics*. Institute of Physics Publishing, Bristol (2002).
- [27] V. N. TSYTOVICH et al: *Elementary Physics of Complex Plasmas*, Lect. Notes Phys. **731**, 67 - 140 (2008)

- [28] M. J. BERGER et.al. *NIST XCOM: Photon Cross Sections Database*. Modificado: Agosto 2005. NIST Standard Reference Database 8. Acceso: 20 de agosto de 2008. <<http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/Text/XCOM.html>>
- [29] HENRICK BRUSS Y KARSTEN FLENSBERG. *Introduction to Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*. Ørsted Laboratory, Niels Bohr Institute, University of Copenhagen y Mikroelektronik Centret, Technical University of Denmark. Copenhagen (2002).
- [30] GEORGE B. ARFKEN Y HANS J. WEBER. *Mathematical Methods for Physicist*. International Edition. 6th. Edition. Elsevier Inc., San Diego (2005).
- [31] JOHN A. PEACOCK. *Cosmological Physics*. Cambridge University Press, Cambridge (2005).
- [32] JOHN DIRK WALECKA. *Theoretical Nuclear And Subnuclear Physics*. 2nd Ed. Imperial College Press and World Scientific Publishing, Singapore (2004).