

## CURVATURA ESCALAR RIEMANNIANA EN UN GAS DE ELECTRONES UNIDIMENSIONAL

Autores: Augusto Melgarejo, Cora I. Tori, Ma. de las Mercedes Trípoli

Lugar de trabajo: Departamento de Ciencias Básicas - Calles 115 y 50 (1900) La Plata - [mercedes.tripoli@ing.unlp.edu.ar](mailto:mercedes.tripoli@ing.unlp.edu.ar)

Palabras clave: Geometría Diferencial, Termodinámica Estadística, Electrones altamente correlacionados.

### Introducción

Distintos enfoques geométricos de la termodinámica han sido tratados por numerosos autores. En particular Ruppeiner incluyó la teoría de fluctuaciones en los axiomas de la termodinámica, lo que permitió definir una métrica Riemanniana sobre el espacio de estados de equilibrio [1]. En este sentido, el tensor métrico queda asociado a los segundos momentos de las fluctuaciones de los parámetros termodinámicos. Por otro lado, a partir del estudio de la curvatura escalar  $R$  en varias situaciones, se encontró que  $R$  era un indicador de los volúmenes de correlación en los entornos de los puntos críticos [2]. En este sentido, conocer  $R$  permite estudiar la longitud de correlación como una función de los parámetros que que identifican los estados de equilibrio del sistema.

Así mismo, el concepto de Variedad Estadística fue formalizado por Amari [3]. En la teoría geométrica de variedades estadísticas el tensor métrico está identificado por los valores de expectativa de las derivadas segundas de una función de densidad de probabilidad con respecto a sus parámetros naturales. Resulta pertinente resaltar que los enfoques de Ruppeiner y Amari son equivalentes cuando consideramos la función de densidad de probabilidad en el equilibrio termodinámico.

Se puede ver que para el gas ideal clásico, la curvatura escalar es cero, en este sentido, la curvatura escalar  $R \neq 0$  puede ser vista como una medida del potencial de interacción entre la partículas del sistema. Sin embargo, cuando los efectos cuánticos son tomados en cuenta,  $R \neq 0$  aun en el caso del ideal. En particular, para el gas de electrones ideal en dos, tres y una dimensión,  $R < 0$  divergiendo a bajas temperaturas [4].

En este trabajo, nos enfocamos en sistemas unidimensionales no ideales. Siguiendo esta línea, y para considerar el efecto de la interacción entre electrones en la curvatura escalar, usamos el modelo de Tomonaga-Luttinger. En general, este modelo hace una buena descripción de las excitaciones de baja energía en líquidos de Fermi cuasi unidimensionales conocidos como cables o hilos cuánticos. Los líquidos unidimensionales de Fermi son un sistema singular porque las excitaciones elementales están caracterizadas por fluctuaciones bosónicas colectivas de carga.

Como mencionamos antes, aun cuando el modelo de Tomonaga-Luttinger realiza una buena descripción de las excitaciones elementales, introduce una dependencia inusual con la densidad de partículas del sistema. Esta dependencia puede ser vista en la parte cinética del hamiltoniano,

lo que permite encontrar una solución no perturbativa del modelo. En este sentido, el estudio de aspectos geométricos de este modelo no será necesariamente consistente con los resultados hallados para sistemas en dos y tres dimensiones.

El trabajo está organizado de la siguiente manera. Comenzamos dando una revisión corta de variedades estadísticas y continuamos mencionando las cuestiones relevantes del modelo y de la función de partición. Luego, estudiamos la curvatura escalar para interacciones electrón-electrón de corto alcance y para un potencial de tipo Coulombiano de largo alcance. En el último caso, usamos estrictamente el potencial Coulombiano unidimensional  $v(x) \sim |x|$ , el cual tiene la característica de no ser repulsivo para longitudes de onda cortas. Sin embargo, el uso de este potencial aunque irreal, nos permite entender el comportamiento del sistema para longitudes de onda largas.

### Variedades estadísticas

En esta sección resumimos brevemente el concepto de variedad estadística que es usado para analizar geoméricamente una familia de funciones de densidad de probabilidad (FDP) y su aplicación a la termodinámica. Sea  $p(x, \theta)$  una FDP descrita por una variable de probabilidad  $x$  y parámetros  $\theta = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n\}$  que caracterizan el sistema. Un conjunto de FDPs

$$S = \{p(x, \theta) / \theta \in \Omega\} \quad \theta = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n\} \quad (1)$$

es una variedad estadística  $n$ -dimensional con coordenadas  $\theta_i$  y  $\Omega$  es un subconjunto de  $\mathbb{R}^n$ . De acuerdo a la teoría de variedades estadísticas, podemos considerar un tensor métrico  $g_{ik}$

$$g_{ik}(\theta) = -E[\partial_i \partial_k l(x, \theta)] \quad (2)$$

donde  $l(x, \theta) := \ln p(x, \theta)$  y  $E[\ ]$  denota la expectación con respecto a  $p(x, \theta)$ . La última expresión se obtiene aplicando la condición de normalización  $E[\partial_i l(x, \theta)] = 0$ .

Ahora restringimos nuestra atención a un tipo especial de FDPs, llamada una "familia exponencial". Éstas son de la forma

$$p(x, \theta) = \exp \left[ c(x) + \sum_{i=1}^n \theta_i f_i(x) - \Psi(\theta) \right] \quad (3)$$

donde  $c(x)$  y  $f_i(x)$  son funciones arbitrarias de  $x$ , y  $\Psi(\theta)$  es una función de las coordenadas  $\theta_i$ . Por ejemplo, una función de distribución normal proviene de esta familia. El tensor métrico de la familia exponencial es obtenido directamente de la ecuación (2) como

$$g_{ik}(\theta) = \frac{\partial^2 \Psi(\theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_k} \quad (4)$$

y los coeficientes de conexión (símbolos de Christoffel) están dados por

$$\Gamma_{ijk}(\theta) = \frac{1}{2} (\partial_k g_{ij} + \partial_j g_{ik} - \partial_i g_{jk}) = \frac{1}{2} \frac{\partial^3 \Psi(\theta)}{\partial \theta_i \partial \theta_j \partial \theta_k}. \quad (5)$$

En el caso en que el espacio de parámetros es bidimensional, la  $R$  se reduce a [5]

$$R = -\frac{1}{2} \begin{vmatrix} \Psi_{,11} & \Psi_{,12} & \Psi_{,22} \\ \Psi_{,111} & \Psi_{,112} & \Psi_{,122} \\ \Psi_{,112} & \Psi_{,122} & \Psi_{,222} \end{vmatrix} \quad (6)$$

donde los subíndices  $,i$  denotan la derivada con respecto a  $\theta_i$  ( $i = 1, 2$ ). Notamos que en este caso  $R$  está expresada en términos las primeras tres derivadas del tensor métrico o las primeras tres derivadas de  $\Psi(\theta)$  por la simetría del tensor métrico y de los coeficientes de conexión.

En nuestro problema usamos la distribución de equilibrio como un caso especial de la familia exponencial (3)

$$p(x, \theta) = \frac{\exp[-\beta E]}{Z} = \exp[-\beta E - \ln Z] \quad (7)$$

donde  $\beta = -1/T$ ,  $T$  es la temperatura y  $Z$  es la función de partición del sistema que es una función de  $\beta$  y  $\rho$  (densidad del sistema).

De (4) y (7) obtenemos el tensor métrico

$$g_{ij} = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \theta_i \partial \theta_j}, \theta_i = \beta, \rho. \quad (8)$$

### Modelo y potencial termodinámico

#### Modelo

El modelo de Tomonaga-Luttinger posee dos ramas de fermiones sin masa ni spin que se mueven sobre una línea de longitud  $L$ . Los fermiones en la rama 1, descritos por el campo  $\psi_1(x)$ , se mueven en la dirección positiva de  $x$  con velocidad  $v_F$  mientras que la rama 2 de fermiones  $\psi_2(x)$  se mueve en la dirección opuesta con velocidad  $-v_F$ . En otras palabras, hemos linealizado la relación de dispersión para el caso de fermiones libres. Permitimos que cada rama tenga ambos, momento positivo y negativo, para tener un mar estados de energía negativa que puede ser llenado. El hamiltoniano es  $H = H_0 + H_I$  donde

$$H_0 = v_F \int_0^L dx \psi^\dagger(x) (\sigma_3 p - p_F) \psi(x) \quad (9)$$

$$H_I = \int_0^L dx \int_0^L dy \psi_a^\dagger(x) \psi_a(x) v(x-y) \psi_b^\dagger(y) \psi_b(y) \quad (10)$$

siendo  $p = -i\partial_x$ ,  $\psi^\dagger(x) = (\psi_1^\dagger(x), \psi_2^\dagger(x))$  y  $a, b = 1, 2$ . Hemos llevado el origen de la escala de energía a  $v_F p_F$  para asegurar que todos los estados por debajo del estado de Fermi están ocupados en el estado de no interacción.

Esta interacción  $H_I$  representa la dispersión de los fermiones en la medida que interaccionan entre sí.

#### Solución del modelo y potencial termodinámico

El modelo puede resolverse exactamente por una transformación unitaria  $e^{iS}$ . Describimos aquí los aspectos más importantes [6]

$$e^{iS} H e^{-iS} \quad (11)$$

donde

$$S = \frac{2\pi i}{L} \sum_{p>0} \frac{\varphi(p)}{p} \rho_1(p) \rho_2(-p) \quad (12)$$

y  $\rho_i(p)$  es el operador densidad.

Considerando  $\varphi(p)$  como

$$\varphi(p) = -\frac{1}{4} \ln \left[ 1 + \frac{2v(p)}{\pi v_F} \right] \quad (13)$$

tenemos

$$e^{iS} H e^{-iS} = \sum_{p>0} \varepsilon(p) \left[ A_p^\dagger A_p + B_{-p}^\dagger B_{-p} \right]. \quad (14)$$

En la ecuación (14)  $A_p$  y  $B_p$  describen fluctuaciones de carga colectiva bosónica del sistema con una relación de dispersión

$$\varepsilon(p) = v_F p \sqrt{1 + \frac{2v(p)}{\pi v_F}} \quad (15)$$

donde  $v(p)$  es la transformada de Fourier del potencial  $v(x)$ .

De la solución del modelo podemos calcular la función de partición del sistema y el potencial termodinámico [7] y [8]

$$\Psi(\beta, \rho) = \ln Z = -2 \sum_{p>0} \ln [1 - \exp(-\beta \varepsilon(p))] \quad (16)$$

donde  $\beta = 1/T$  y  $v_F \propto \rho$ .

También consideramos una interacción local  $\lambda \delta(x)$ . Encontramos que

$$\Psi_{sr}(\beta, \rho) = -2 \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi} \ln [1 - \exp(-\beta p \tilde{v}_F)] \quad (17)$$

donde  $\tilde{v}_F = v_F \sqrt{1 + \frac{2\lambda}{\pi v_F}}$  se interpreta como la velocidad de Fermi renormalizada.

### Curvatura escalar

En esta sección estudiamos la curvatura escalar en diferentes situaciones dependiendo de la interacción potencial considerada.

#### Potencial de corto alcance

Considerando una interacción de corto alcance de la forma  $\lambda \delta(x)$  (como en la sección previa) y usando (6) y (17), calculamos la curvatura escalar

$$R_{sr}(\beta, \rho) = -\frac{12\kappa^2 \lambda^2 \beta \sqrt{\pi + \frac{2\lambda}{\kappa\rho}} \rho^2 (2\lambda + \kappa\pi\rho)}{\pi^{3/2} (5\lambda^2 + 6\kappa\pi\lambda\rho + 3\kappa^2\pi^2\rho^2)^2} \quad (18)$$

donde consideramos  $v_F = \kappa\rho$ .

De este resultado podemos ver que para  $\lambda \neq 0$  la curvatura  $R_{sr}(\beta, \rho) \rightarrow -\infty$  a bajas temperaturas y es cero cuando  $\lambda = 0$ . Si asociamos la curvatura escalar con la longitud de correlación concluimos que la presencia de interacción correlaciona fuertemente al sistema cuando la temperatura decae, aun en el caso de interacción de corto alcance. Por otro lado, si  $\lambda = 0$  la longitud de correlación es cero independientemente de la temperatura. Este último resultado aparece a primera vista como inconsistente con otros previamente encontrados para gas ideal de fermiones [4], en donde la curvatura escalar diverge a bajas temperaturas.

En estos casos esta divergencia está asociada con el efecto de intercambio mecánico cuántico. El efecto de intercambio es una consecuencia de la indistinguibilidad entre partículas masivas. Por otro lado nuestro modelo linealizado, como dijimos en la sección previa, caracteriza partículas sin masa donde el efecto de intercambio no es relevante.

### Potencial Coulombiano

En el régimen de bajas temperaturas y para la interacción Coulombiana  $v(q) = \lambda/q^2$ , el potencial termodinámico (17) se comporta como [8]

$$\Psi_{lr}(\beta, \rho) \simeq - \left( \frac{2\lambda}{\pi^3 \kappa \rho} \right)^{1/2} K_1 \left( \beta \left( \frac{2\lambda \kappa \rho}{\pi} \right)^{1/2} \right) \quad (19)$$

donde  $K_1(x)$  es la función de Bessel modificada de segundo tipo.

Si usamos el resultado (6) encontramos que la curvatura escalar para bajas temperaturas

$$R(\beta, \rho) \simeq - \left( \frac{1}{\beta} \right)^{1/2} \frac{(\kappa \rho)^{1/4}}{\lambda^{3/4}} \exp \left[ \beta \left( \frac{2\lambda \kappa \rho}{\pi} \right)^{1/2} \right] \quad (20)$$

donde supusimos  $\lambda \neq 0$ .

De la ecuación (20) vemos (a diferencia del resultado de corto alcance) que la curvatura escalar crece exponencialmente con  $\lambda$ . En términos de la longitud de correlación podemos decir que el sistema está más fuertemente correlacionado que en el caso de un potencial de corto alcance. Este último resultado es de esperar porque los electrones "pueden verse unos a otros" para cualquier separación.

Por otro lado observamos un comportamiento similar con la densidad. Esto no es de esperar dado que altas densidades del sistema deberían comportarse como ideales. Este resultado nos permite decir que cuando los electrones interactúan mediante una interacción de largo alcance, la densidad  $\rho$  no caracteriza el estado macroscópico del sistema, dado que el comportamiento de la curvatura escalar está determinado por la interacción entre partículas.

### Conclusiones

En este trabajo estudiamos aspectos geométricos de un gas de electrones unidimensional. Consideramos dos situaciones, cuando los electrones interactúan con un potencial de corto alcance y cuando lo hacen con un potencial de largo alcance. En ambos casos nos concentramos en comportamientos a baja temperatura. En particular para largas longitudes de onda, consideramos el potencial coulombiano unidimensional el cual no es repulsivo a corto alcance.

Como mencionamos en la introducción, si asociamos la curvatura escalar con la longitud de correlación del sistema, encontramos que en ambas situaciones la mera presencia de interacción causa la correlación electrónica. En el caso de interacción de largo alcance notamos el crecimiento exponencial (20) en la longitud de correlación con temperatura decreciente e intensidad de interacción creciente.

Una consecuencia interesante de este resultado es que para un sistema unidimensional de electrones interactuando por un potencial de largo alcance, la densidad de electrón  $\rho$  no caracteriza el estado macroscópico por lo tanto no es un buen parámetro en la descripción termodinámica

del sistema. Este resultado podría ser relevante en el estudio de estados macroscópicos y transiciones de fase de sistemas unidimensionales como cables cuánticos. En este sentido nuestras conclusiones son consistentes con resultados previos, que muestran que en presencia de interacción de largo alcance, el sistema muestra un estado altamente correlacionado (cristal de Wigner) independientemente de la densidad [9].

### **Bibliografía**

- [1] G. Ruppeiner, Rev. Mod. Phys. **67** 605 (1995).
- [2] G. Ruppeiner, Phys. Rev. E **57** 5135 (1998).
- [3] S. Amari. Differential Geometrical Methods in Statistics (Lectures Notes in Statistics vol 28) ed D Brillinger et al (New York: Springer) 1985.
- [4] H. Oshima, T. Obata and H. Hara, J. Phys. A: Math. Gen. **32** 6373 (1999).
- [5] Janyszek and Mrugała, Phys. Rev. A **39**, 6515 (1989).
- [6] D. Mattis and E. Lieb, J. Math. Phys. **6** 304 (1965).
- [7] F. Haldane, J. Phys. C: Solid State Phys **14** 2585 (1981).
- [8] D. Lee and Y. Chen, J. Phys. A: Math. Gen. **21** 4155 (1988).
- [9] H. Schulz, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1864.