



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**EMULACIÓN ESPECTRAL DE CAMPOS NO ABELIANOS EN REDES DE AMARRE
FUERTE**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
Yael Hernández Espinosa

DR. EMERSON LEAO SADURNÍ HERNÁNDEZ
INSTITUTO DE FÍSICA "ING. LUIS RIVERA TERRAZAS"
BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

DR. CARLOS FRANCISCO PINEDA ZORRILLA
INSTITUTO DE FÍSICA

DR. EUGENIO LEY KOO
INSTITUTO DE FÍSICA

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX. ENERO 2022



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Emulación espectral de campos no abelianos en redes de amarre fuerte

Yael Hernández Espinosa

Resumen

En este trabajo se presenta la incorporación de campos no abelianos $SU(N)$ en el formalismo de amarre fuerte en redes mediante la introducción apropiada del acoplamiento mínimo para sistemas discretos. Se exploraron sistemas con simetría $C_6, C_3 \times Z_2$ y $C_3 \times C_3$ usando conceptos de teoría de grupos. Para el caso C_6 se presentó un estudio de supersimetría que explica la distribución de los niveles de energía para anillos hexagonales. Las degeneraciones dobles presentes en dichos anillos se deben a la simetría C_3 junto con la simetría de inversión temporal. La ruptura de C_3 se estudió colocando un defecto en el polímero. Por otra parte, la introducción de un campo magnético perpendicular al plano molecular rompe la invariancia bajo inversión temporal. En ambos casos emergen desdoblamientos de energía en los dobletes. En el caso de $C_3 \times Z_2$ se encontró un punto de degeneración triple que no corresponde a alguna simetría configuracional. Se construyó un espacio fase de dimensión 6 para explorar la función de Wigner del sistema. Se presentan los retratos en espacio fase de este sistema. Como aplicación de estos modelos de amarre fuerte, se presentaron los espectros de las moléculas de benceno y boraceno, así como sus funciones de onda. El caso $C_3 \times C_3$ está conformado por un trímero de trímeros y se calcularon de manera numérica los niveles de energía, al rotar cada trímero interno de manera independiente se encontraron puntos de cruce de niveles. Las emulaciones de campo $U(1)$ se realizaron con la construcción de una cadena de dímeros rotantes. El hamiltoniano se puede escribir en la base de estados simétrico y antisimétrico de los dímeros lo que permite obtener dos bloques desacoplados que corresponden a dos teorías de campo $U(1)$. La mariposa de Hofstadter emerge en la banda antisimétrica al variar la distancia intradimérica y la distancia entre centros de dímeros. En la banda simétrica tenemos un espectro que corresponde al hamiltoniano de Harper con $\Lambda \neq 1$. La parte final del trabajo corresponde al estudio del confinamiento del campo no abeliano $SU(2)$ en una red de amarre fuerte cuadrada hecha de dímeros. Para ciertos parámetros de la red se encontraron estados localizados en el centro del arreglo.

Dedicación

A mis padres a quienes agradezco su apoyo incondicional.

Agradecimientos

Quiero agradecer a mi asesor el Dr. Emerson Sadurní por compartir sus conocimientos a lo largo de estos años, por su paciencia y su constante apoyo sin el cual la realización de este trabajo no hubiera sido posible. Agradezco al Dr. Eugenio Ley Koo y al Dr. Carlos Pineda por sus valiosos comentarios que enriquecieron el contenido de este proyecto. Así mismo, agradezco a los profesores que marcaron de alguna manera el camino que desembocó en la presentación de esta tesis. De igual manera debo mencionar el apoyo recibido por parte de CONACyT mediante la beca doctoral 463680. Un sincero agradecimiento a la Universidad Nacional Autónoma de México por haberme acogido durante todo este tiempo dentro de las instalaciones del Instituto de Física.

Agradezco a mis padres y hermanos por brindarme siempre su ayuda incondicional. A mi novia por ser mi confidente y amiga. A mi familia, amigos y compañeros por las incontables pláticas y consejos.

Índice

1	Introducción	1
2	Sistemas de resonadores como realización de un sólido	3
2.1	Implementaciones experimentales de cristales artificiales.	4
3	Sistemas con grados internos de libertad: Casos C_6, $C_3 \times Z_2$ y $C_3 \times C_3$	6
3.1	Anillo con simetría C_6	6
3.2	Sistema $C_3 \times Z_2$	10
3.3	Rompimiento de simetría	13
3.3.1	Campo magnético externo	13
3.3.2	Otros rompimientos de simetría	17
3.4	Aplicación a la molécula de Benceno	18
3.4.1	Resultados numéricos	18
3.5	Álgebra dinámica	20
3.6	Espacio fase en una cuadrícula de 6×6	25
3.7	Funciones propias y corrientes discretas	28
3.8	Aplicación a la molécula de boraceno	32
3.8.1	Introducción de múltiples vecinos en el esquema de C_3	32
3.8.2	Resultados numéricos para el boraceno	34
3.9	Supersimetría	38

3.10	Sistema de trímeros $C_3 \times C_3$	40
4	Construcción de redes de amarre fuerte con N grados de libertad: Caso SU(N)	45
4.1	Teoría general general en la red	45
4.2	Descomposición en términos de acoplamientos externos de la red y acoplamientos internos poliméricos	48
4.3	Emulación U(1)	50
4.3.1	Operador casi Mathieu	50
4.3.2	Sistema de dímeros: caso abeliano	55
4.4	Estados confinados de SU(2)	61
4.5	Cadenas de trímeros y SU(3)	64
5	Conclusiones	66
A	Mapeo unitario entre los operadores de traslación en 1D. Dualidad de Aubry	68

Lista de figuras

3.1	a) Anillo de benceno. Los seis carbonos se encuentran en los vértices del hexágono, cada carbono está coordinado con un átomo de hidrógeno. Las líneas sólidas representan los enlaces covalentes de la molécula. b) El anillo de boraceno está constituido por tres átomos de boro y tres de nitrógeno dispuestos en los vértices del hexágono de forma alternada. Cada boro y nitrógeno está coordinado con un átomo de hidrógeno. c) Anillo hexagonal de seis sitios.	7
3.2	a) El grupo de simetría C_6 del hexágono puede descomponerse en $C_6 = C_3 \times Z_2i$. Visualmente tenemos tres dímeros cuyos centros están colocados en los vértices de un triángulo. Las etiquetas para los sitios son de la forma (m, n) donde m denota el número de dímero y n la posición intradimérica. b) Los acoplamientos del anillo hexagonal.	7
3.3	a) Representación gráfica de las fases propias del grupo C_6 . Las fases que tienen la misma proyección sobre el eje real corresponden a los dobletes. b) La presencia de un campo magnético externo equivale a la introducción de una fase provocando que las fases degeneradas dejen de tener la misma proyección en el eje real y por tanto desdoblado los dobletes. .	10
3.4	a) Los dímeros que conforman el anillo rotan con el mismo ángulo desde una configuración hexagonal a una configuración tipo estrella. b) La configuración estrella se alcanza al rotar los dímeros por un ángulo de $\theta = \pi/2$. c) La configuración de partida es la configuración tipo hexágono que corresponde a $\theta = 0$	11
3.5	Esta figura muestra los niveles de energía para varias configuraciones con degeneración triple en función de la distancia. a) En este recuadro se muestran las energías propias del hamiltoniano que contiene todas las interacciones a pares entre sitios. c) Energías propias para el hamiltoniano de la ecuación (??)	14

3.6	Gráfica de las corrientes para los seis estados propios de la molécula de benceno bajo la acción de un campo magnético de $B = 8.5855 \times 10^{-3}$ G perpendicular al plano molecular. Las dos filas de la figura corresponden a niveles de energía reflejados, la única manera de distinguirlos es mediante el esquema de corrientes. Los recuadros a) y d) corresponden a los singuletes mientras que los b), c) y e), f) son los esquemas de corriente (no equivalentes) para los dobletes desdoblados respectivamente. Podemos notar que los diagramas de corriente para ambas filas tienen direcciones de corriente invertidas	15
3.7	En esta figura se muestran los esquemas de corriente para las funciones propias de la molécula de boraceno bajo la acción de un campo magnético de $B = 8.5855 \times 10^{-3}$ G. De manera similar al benceno, los recuadros a) y b) representan los estados singuletes con direcciones de corriente opuestas. Los recuadros b), c) y e), f) corresponden a los dobletes desdoblados. Los diagramas de corrientes para energías reflejadas son en este caso diferentes.	16
3.8	Niveles de energía del benceno. La distancia entre sitios es de 1.39\AA y las energías en sitio recorridas a cero. La relación de dispersión del grafeno es incluida como guía visual; un dibujo de la zona de Brillouin se incluye en la parte superior de la figura. a) Acoplamiento a primeros vecinos. La estructura de los niveles de energía es la siguiente: (de arriba a abajo) singulete, doblete, doblete, singulete. Estos niveles de energía gozan de simetría bajo reflexión alrededor del valor cero de energía. b) La introducción de acoplamiento de segundos vecinos rompe la simetría bajo reflexión. c) Acoplamiento con terceros vecinos. Las correcciones al espectro generadas por la inclusión de segundos y terceros vecinos es despreciable. d) Acoplamiento de primeros vecinos con un defecto en sitio de 1 eV. e) Acoplamiento a primeros vecinos con defectos en los acoplamientos (1, 2), (1, 6), (6, 1) y (2, 1) de 0.3 eV. f) Acoplamiento a primeros vecinos con un campo magnético externo perpendicular al plano molecular de $B = 8.5855 \times 10^{-3}$ G. Las líneas punteadas corresponden a la relación de dispersión del grafeno obtenido de un modelo de primeros vecinos.	21
3.9	Funciones propias del benceno para un modelo de primeros vecinos. Los recuadros a) y d) representan estados singuletes y exhiben la misma probabilidad de encontrar al electrón en cualquiera de los seis sitios del anillo. La molécula de benceno se presenta como referencia de la dependencia espacial de las funciones de onda propias del sistema.	22

- 3.10 Funciones propias del benceno con la simetría C_6 rota debido a un defecto en sitio de 1eV. El espectro esta ilustrado en la figura ?? celda d). El recuadro a) y d) muestra las funciones de los estados singuletes, la probabilidad se modifica en las regiones cercanas al defecto. Los cuadros b) y e) presentan la modificación a las funciones de onda propias en dos de los sitios del anillo; mientras que en los recuadros c) y f) no hay un cambio visible. 23
- 3.11 Espectros del anillo de benceno con segundos vecinos. a) Existe un punto triple de degeneración entre el singulete y doblete inferiores correspondiente a $\Delta_2/\Delta_1 = 1/3$ y $\lambda_c = 0.926\text{\AA}$. b) Inversión de niveles entre doblete-singulete inferiores. La inversión de niveles ocurre cuando $\Delta_2/\Delta_1 > 1/3$ or $\lambda > \lambda_c$, en este caso $\lambda = 0.956\text{\AA}$ 24
- 3.12 Espacio fase discreto de los estados triplete. Los recuadros (a)-(c) corresponden al sistema con simetría bajo inversión temporal, $\theta = \theta_c$ y $\Delta_h/\Delta_d = 1.9$. Una combinación lineal de estos recuadros revela una estructura invariante de por lo menos tres filas de píxeles, con probabilidades de ocupación arbitrarias. Las casillas (d),(e) muestran el estado singulete y (f) el estado singulete del sistema con una perturbación pequeña sobre el acoplamiento tipo estrella Δ_s ; el cuadro (f) muestra franjas con probabilidad cero (celdas de color blanco, ver código de color) para un estado con una fase de C_3 bien definida. Los recuadros (g)-(i) exhiben la función de Wigner cuando se rompe la simetría bajo inversión temporal (*i.e.* flujo magnético) en donde también podemos observar que sólo las funciones propias de C_3 son permitidas. El espacio de Hilbert de las funciones de onda localizadas esta denotado por \mathcal{H} y su transformada de Fourier por \mathcal{C} 29
- 3.13 Niveles de energía del boraceno. Se uso como distancia entre sitios el valor de 1.43 Å, y como energías en sitio $\epsilon_1 = 0\text{eV}$ y $\epsilon_2 = 4.57\text{eV}$. La relación de dispersión del nitruro de boro es incluido como guía. a) Modelo de primeros vecinos. La estructura de los niveles de energía (de arriba hacia abajo) es: singulete, doblete, doblete, singulete; presentando así una simetría bajo reflexión al igual que el benceno. b) Modelo de segundos vecinos. c) Modelo de terceros vecinos. La última fila de recuadros muestra el desdoblamiento de los dobletes en un modelo de primeros vecinos por tres vías: d) Inclusión de un defecto incrementando la energía de un sólo sitio por 0.7 eV. e) Introducción de defectos en los acoplamientos $\Delta_{(1,2)}$, $\Delta_{(1,6)}$, $\Delta_{(6,1)}$ y $\Delta_{(2,1)}$ mediante un incremento en su energía de 0.3 eV. f) Inclusión de un campo magnético de $B = 8.5855 \times 10^{-3}\text{G}$ 35

3.14	Funciones propias del modelo de amarre fuerte a primeros vecinos para de la molécula de boraceno. Las esferas de color amarillo representan los átomos de nitrógeno mientras que las verdes simbolizan los átomos de boro. Las casillas a) y d) muestran los estados singuletes. Mientras que b), c) y e), f) muestran las funciones de los dobletes degenerados.	36
3.15	Funciones propias del anillo de boraceno con la simetría C_3 rota por la introducción de un defecto de 0.7 eV en uno de los sitios de boro. Las esferas de color amarillo denotan átomos de nitrógeno, las verdes representan átomos de boro y las esferas negras el defecto en sitio. Los recuadros a) y b) muestran los estados singuletes. b),c) y e),f) ilustran la función de onda de los dobletes desdoblados.	37
3.16	Este arreglo $C_3 \times C_3$ consiste en tres trímeros colocados en los vértice de un triángulo equilátero. Los trímeros están denotados por las letras A, B y C; mientras que los sitios internos de cada trímero se numeran del 1 al 3.	41
3.17	Niveles de energía en función del ángulo de rotación. Uno de los trímeros rota, mientras los otros dos permanecen fijos. Podemos ver sólo seis niveles, esto indica la existencia de estados degenerados. Para cierto valor del ángulo, emerge un punto de cruce.	43
3.18	Separación de niveles debido al rompimiento de simetría interna C_3 . Nueve niveles de energía emergen.	44
4.1	Polímeros vecinos. De manera general cada polímero alberga m sitios donde cada sitio contiene un solo estado localizado. La descomposición de los acoplamientos en externos e internos se puede visualizar gráficamente: las líneas azules punteadas representan los acoplamientos externos, mientras que las líneas más claras que conectan sitios del polímero son los acoplamientos internos. La distancia entre los centros del polímero se ilustra con la línea punteada verde.	49
4.2	(a) Parámetros geométricos de la cadena de dímeros. L representa la distancia entre el centro del dímero y uno de sus sitios. La distancia interdimérica está denotado por d y el ángulo de rotación del dímero es θ_n . (b) Esquema de todos los acoplamientos a pares entre dos dímeros vecinos.	51
4.3	Cadena de dímeros rotantes. Las flechas van del sito intradimérico 1 al sitio intradimérico 2 y sólo son ilustrativas para apreciar el movimiento de rotación a lo largo de la cadena. El parámetro p indica el número de vueltas completas que da el dímero a lo largo de la cadena.	51

4.4	(a) Espectro de la banda simétrica desacoplada de una cadena con 400 dímeros. La mariposa de Hofstadter emerge en el primer cuarto del rango de las frecuencias $\omega(N - 1)/2\pi$. Los parámetros geométricos son $L = 1.68$, $d = 0.1$ y $\lambda = 1.66$. El valor estimado de $\Lambda = 1$. (b) Espectro de la banda antisimétrica desacoplada con los parámetros geométricos $L = 2.8$, $d = 0.35$ y $\lambda = 1$. Esta banda es análoga al hamiltoniano de Harper para $\Lambda = 0.08 \cos \omega$	52
4.5	Retrato de la bandas de la figura ?? con acoplamiento. (a) Fuertes correcciones a la banda simétrica. (b) Ligeras correcciones a la banda antisimétrica.	53
4.6	Red cuadrada de dímeros con estados localizados. La parte oscura de la gráfica representa las regiones con menor probabilidad de encontrar al electrón mientras que las zonas mas blancas indican una alta probabilidad. El parámetro N denota el número de dímeros a lo largo del eje x , d es la distancia intradimérica mientras que l representa la distancia entre centros de dímeros vecinos.	54
4.7	(a) Red cuadrada tipo erizo. (b) Red cuadrada con función de onda localizada en el centro. Los dímeros se presentan como guía visual. El estado de mayor energía muestra el efecto de localización. Los dímeros están hechos de puntos naranja y amarillo. Los parámetros son $L = 2.9$, $d = 1.3$ y $\lambda = 1$	55
4.8	Espectro de una red cuadrada tipo erizo como función del parámetro de red L . Los puntos azules representan estados localizados en el centro del arreglo como se muestra en la figura ?. Este estado se funde con una de las bandas conforme la distancia interdimérica incrementa. Las líneas azules representan las distancias entre los centros.	56
4.9	Retratos de \mathbf{A} sobre la red cuadrada. Se presentan las componentes $\text{Im}\{A_0\}$, $\text{Im}\{A_2\}$, mientras que $\text{Re}\{A_0\} = \text{Re}\{A_2\} = 0$. De manera similar, se muestran las componentes $\text{Re}\{A_1\}$, $\text{Re}\{A_3\}$ cuyas componentes $\text{Im}\{A_1\} = \text{Im}\{A_3\} = 0$	58
4.10	Cadena lineal hecha de trímeros. La celda unitaria rota un número p de vueltas completas. La simetría global C_3 se rompe si un trímero interno es rotado con respecto a los otros dos. Cuando la simetría C_3 se restablece, bandas planas aparecen en la parte inferior del espectro. El rompimiento de simetría provoca un desdoblamiento de las bandas. . .	59
4.11	Dimensiones fractales para la banda antisimétrica. El recuadro (a) corresponde al caso desacoplado mientras que el recuadro (b) para el caso acoplado.	61

4.12 Espectros de una cadena lineal hecha de trímeros. (a) Celda unitaria para la cadena de trímeros. Cada triángulo interno puede rotar independientemente con ángulos θ_1 , θ_2 y θ_3 . (b) El espectro superior está compuesto por dos bandas solapadas. Se puede distinguir una estructura fractal que hace referencia a la ,mariposa de Hofstadter. (c) Parte baja del espectro. La banda es densa y no muestra estructura reconocible. (d) Espectro con simetría interna y global C_3 rota. Podemos notar la aparición de bandas planas en la parte inferior. 62

Lista de tablas

- 4.1 Dimensiones fractales obtenidas del conteo de cajas para la banda simétrica. 60

Artículos

- Sadurní E and Hernández-Espinosa Y 2019 *J. Phys. A: Math. Theor.* **52** 295204
- Hernández-Espinosa Y, Méndez-Sánchez R A and Sadurní E 2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 105101
- Manuscrito: Hernández-Espinosa Y and Sadurní E. *Tight-Binding realization of non-abelian gauge fields: singular spectra and wave confinement.*
<https://arxiv.org/abs/2106.05417>

Capítulo 1

Introducción

Sin lugar a dudas, las emulaciones cuánticas en sistemas mesoscópicos han sido el foco de interés de los investigadores en años recientes. El ejemplo más célebre lo podemos encontrar en el grafeno donde los electrones se comportan como fermiones de Dirac sin masa alrededor de los llamados puntos cónicos. Desde entonces, se ha explorado esta analogía entre las ecuaciones de la mecánica cuántica relativista y los nuevos materiales bidimensionales como el ya mencionado grafeno, nitruro de boro, siliceno entre otros. El uso de simetrías es una de las partes torales de estas investigaciones debido a su aportación a una descripción elegante e intuitiva sobre la estructura espectral de estos sistemas. Sin embargo, hasta el momento no hay un formalismo completo que involucre la emulación de teorías de norma en redes de amarre fuerte. El presente trabajo de tesis tiene por objetivo contribuir a la emulación de campos no abelianos en sistemas de amarre fuerte; en particular se abordan los casos $U(1)$ y $SU(2)$ por lo que desde el principio intuimos que las simetrías juegan un papel relevante en el proceso.

Para llegar al objetivo plantado, es importante familiarizarse con las técnicas de amarre fuerte de estado sólido. Debemos estudiar otros sistemas que resultan relevantes por sí mismos e indispensables para el resultado final. El proceso lógico empleado en la realización de esta investigación consistió en estudiar sistemas más simples pero que permitieran un tratamiento analítico en la generación de los niveles espectrales basándonos en las propiedades de simetría de dichos sistemas. También es importante mencionar que se buscaron sistemas que tuvieran relación con sistemas ya conocidos. De esta manera emerge el primer sistema que se propone el cual consiste en un hexágono que encontrará su conexión con las moléculas de benceno y boraceno (a veces también llamado el benceno inorgánico) cuyas estructuras moleculares en términos de los orbitales de valencia ha sido ampliamente estudiada[? ? ?]. Si bien el benceno no goza de una simetría C_6 como el benceno, se verá en el capítulo ?? que esta molécula puede ser estudiada descomponiendo la estructura hexagonal en dos partes: la primera correspondiente a un triángulo (C_3) y la segunda a una parte dimérica (Z_2)[?]. Existen cálculos no tan recientes del espectro electrónico del benceno, podemos mencionar el trabajo de Moskowitz[?] quien uso bases adaptadas simétricamente así como las interacciones entre los orbitales $\pi - \sigma$ para entender las nubes electrónicas resultantes, sin embargo, el uso de los grupos C_6 y C_3 enriquecen el entendimiento y aportan una

explicación a ciertas características presentes en la distribución de los niveles de energía aún deformando la estructura hexagonal. Como punto de comparación, se consultaron artículos con cálculos empleando la teoría del funcional de la densidad (DFT) en donde presentan los modos vibracionales del anillo de boraceno[? ? ? ?].

Como mencionamos en el párrafo anterior, el grupo C_6 se puede descomponer en una parte C_3 y otra Z_2 . Un efecto interesante surge al rotar los dímeros que componen el anillo, los niveles de energía comienzan a reorganizarse y existe un ángulo θ_c donde un punto de degeneración ocurre entre el doblete y singulete inferior[?]. Esta degeneración accidental no pertenece a ninguna simetría configuracional del sistema, sin embargo, mediante la construcción de un espacio fase discreto, la función de Wigner nos revela el retrato de esta simetría oculta.

Se persigue la emulación espectral de teorías de norma abelianas y no abelianas usando ondas escalares. En el caso abeliano, encontramos necesario el uso de acoplamientos complejos que serán obtenidos por medio de manipulaciones geométricas de la red. Nos enfocamos en la parte fermiónica de una teoría no abeliana de Yange-Mills, donde consideramos la parte bosonica como estática. El Lagrangiano de Yang-Mills para campos vectoriales que interactúan con fermiones es:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}i\gamma^\mu\partial_\mu\psi - m\bar{\psi}\psi + \bar{\psi}\gamma^\mu gA_\mu^a\tau_a\psi - \frac{1}{4}(F_{\mu\nu}^a)^2 \quad (1.1)$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig[A_\mu, A_\nu], \quad F_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}^a\tau_a. \quad (1.2)$$

El Lagrangiano de Dirac $\bar{\psi}i\gamma^\mu\partial_\mu\psi - m\bar{\psi}\psi$ en dimensión 2+1 se ha emulado usando redes hexagonales de una sola especie como en el grafeno (caso sin masa) y con dos especies como el nitruro de boro (caso masivo). Por simplicidad buscamos la emulación de campos no abelianos que actúen sobre fermiones que salten en una red cuadrada. Esto nos llevó a centrar nuestra atención en los primeros dos términos del lagrangiano (??) por medio de la introducción de la sustitución de Peierls para campos no abelianos. Los grados internos de libertad dados por el grupo de norma son introducidos en nuestro modelo a través de estados poliméricos, es decir, usamos un conjunto de átomos de un solo nivel que constituye una celda del cristal.

En el capítulo ?? se revisan ejemplos de emulaciones de sólido en diferentes sistemas de materia condensada como cristales fotónicos, condensados en trampas ópticas usando láseres contrapropagantes. También se hace mención de realizaciones con resonadores dieléctricos cuya frecuencia de resonancia está bien determinada. En el capítulo ?? se exploran los sistemas $C_6, C_3 \times Z_2$ y $C_3 \times C_3$ usando el modelo de amarre fuerte. Se presentan aplicaciones concretas a la descripción de las moléculas de benceno y boraceno. Finalmente en el capítulo ?? se presenta el formalismo general para la emulación de campos no abelianos SU(N). El caso electromagnético se logra con la construcción de cadenas de dímeros rotantes mientras que el fenómeno de confinamiento en SU(2) se consigue mediante una red cuadrada hecha de dímeros.

Capítulo 2

Sistemas de resonadores como realización de un sólido

Este trabajo de tesis está motivado por el estudio de sistemas mesoscópicos que emulan efectos cuánticos usando el modelo de amarre fuerte de la física de estados sólido. En la literatura podemos encontrar artículos muy diversos de estos sistemas que hacen uso de resonadores de microondas [? ? ? ? ? ? ?], guías de ondas [?], sistemas ópticos [? ?], cristales fotónicos[?] y resonadores acústicos [?]. La construcción de arreglos basados en estos sistemas mesoscópicos ha permitido el estudio del transporte ondulatorio análogo al transporte electrónico de los materiales bidimensionales emergentes como el grafeno, nitruro de boro, disulfuro de molibdeno, entre otros y su analogía con la ecuación de Dirac[? ? ? ? ?].

Por otro lado, las redes de amarre fuerte en realizaciones atómicas también resultan atractivas pese a que sus configuraciones deformadas sean técnicamente desafiante. No descartamos la posibilidad de que a través de litografía cuántica sea posible implantar defectos en posiciones específicas dando lugar a la ingeniería de redes artificiales. Más aún, existen importantes trabajos en donde redes artificiales emulando grafeno deformado han sido fabricadas en matrices de cobre[?]. Sin embargo, en construcciones mesoscópicas ya se ha encontrado una alternativa útil, como es el caso de la construcción artificial de un oscilador de Dirac, cuya primera realización experimental se llevó a cabo usando una cadena de resonadores en configuración dimérica de dos resonadores diferentes A y B .

Las deformaciones de redes hexagonales bidimensionales se han estudiado en diversas referencias. Por ejemplo, en [?], donde el análogo a las transformaciones de Lorentz se estudiaron en el contexto de redes hexagonales y cuya principal consecuencia es la generación de un grupo infinito de cristales isoenergéticos. Los trabajos mencionados en este párrafo tienen en común el uso de funciones de onda reales localizadas, exponencialmente evanescentes; por lo tanto, los acoplamientos entre dos sitios vecinos están determinados de la siguiente manera:

$$\Delta_{i,j} = \int \Psi_i^*(\mathbf{x}) H \Psi_j(\mathbf{x}) d^3x \sim \Delta_0 e^{-d_{i,j}/\lambda}, \quad (2.1)$$

donde $d_{i,j}$ es la distancia entre sitios y λ la longitud de evanescencia. El factor Δ_0 controla el tunelamiento que existe entre los sitios en una configuración de referencia, correspondiente a la geometría periódica del cristal

Volviendo al ejemplo relevante de la referencia [?], encontramos el análisis de una cadena y una red hexagonal también deformada con dos tipos diferentes de sitios. Dichas deformaciones del sistema pueden ajustarse de manera que los operadores de traslación involucrados en el modelo satisfagan las bien conocidas condiciones sobre el álgebra del oscilador armónico (el conmutador de los operadores a y a^\dagger , *i.e.* álgebra de Heisenberg). Recuperamos el oscilador de Dirac reconociendo que el álgebra restante $SU(2)$ está representada por los dos tipos de sitio en la cadena. Para cristales unidimensionales además de las cadenas de resonadores cerámicos, se conoce desde hace mucho tiempo una construcción metamaterial a través de cortinas dieléctricas en donde una componente del campo eléctrico juega el papel de la onda escalar que se pretende emular.

2.1 Implementaciones experimentales de cristales artificiales.

Existen realizaciones experimentales de cristales artificiales usando sistemas cuánticos[? ? ?], ondas electromagnéticas[? ?] y ondas mecánicas[?]. Estos sistemas son estudiado bajo el modelo de amarre fuerte y tienen aplicaciones en la implementación de sistemas de materia condensada como en los materiales bidimensionales. Dado que la presente tesis persigue la emulación de teorías de normas en redes de amarre fuerte, debemos conocer las posibles implementaciones experimentales realizadas hasta el día de hoy.

Dentro de los sistemas cuánticos nos encontramos con trampas ópticas en gases ultrafríos[?] que permiten emular potenciales de norma para átomos neutros. Existen trabajos con condensados de Bose-Einstein y trampas ópticas en donde las interacciones entre átomos pueden ajustarse[?]. De manera general, en la referencia [?] nos encontramos una revisión del estudios sobre condensados en potenciales periódicos por medio de redes ópticas creadas a partir de dos o más láseres superpuestos para crear un patrón de interferencia.

Por otra parte en la referencia [?] con la ayuda de láseres bicromáticos, se construye una red unidimensional en cuyos sitios se encuentran átomos de rubidio (^{87}Rb) que presentan estados de un aislante de Mott. Dentro de estas emulaciones cuánticas también encontramos sistemas que hacen uso de metamateriales los cuales permiten ajustar las propiedades de transmisión de un arreglo de nano cables[?]. Dentro de realizaciones con cristales fotónicos encontramos construcciones con arreglos hechos de capas dieléctricas corrugadas[?] y bloques que contienen cilindros dieléctricos en aire[?].

En cuestión de realizaciones mesoscópicas, encontramos el diseño de grafeno artificial [?] en donde la propagación de microondas en un arreglo compuesto por resonadores se estudia haciendo el paralelismo con la propagación de electrones en el grafeno. El

experimento consiste en la construcción de una red hexagonal hecha de resonadores dieléctricos cilíndricos que a su vez se encuentra entre dos placas metálicas separadas 17 mm que constituye la cavidad electromagnética; en esta geometría sólo el modo TE más bajo dentro del resonador se excitará.

En cuanto a cuestiones más técnicas, dichos resonadores tienen las siguientes dimensiones: altura de 5 mm, un radio de 4 mm y una permitividad de $\epsilon = 36$. La señal reflejada por cada uno de estos cilindros dieléctricos tiene un pico en $\nu_0 = 6.65$ GHz. Analizando el sistema, hay una evidente simetría cilíndrica con lo cual podemos hacer la separación entre las coordenadas z y la coordenada radial ρ . La parte radial del campo tiene por solución las funciones de Bessel modificadas de segunda especie K_0 cuando la coordenada ρ sea mayor que el radio del disco. Recordamos que las funciones de Bessel K_a son exponencialmente decrecientes. Este último hecho es indispensable para la emulación y construcción de sistemas de amarre fuerte.

Capítulo 3

Sistemas con grados internos de libertad: Casos C_6 , $C_3 \times Z_2$ y $C_3 \times C_3$

El fin último del presente trabajo de tesis doctoral es la emulación de campos de norma abelianos y no abelianos, en particular se presentarán los casos de $U(1)$ y $SU(2)$. La incorporación de estructura interna a cada uno de los sitios constituye la parte toral del trabajo ya que necesitamos los grados de libertad internos para la correcta emulación de una teoría de norma $SU(2)$. En este capítulo se muestran dos sistemas, el primero consiste en un triángulo de dímeros con simetría $C_3 \times Z_2$ y el segundo un triángulo de trímeros con simetría $C_3 \times C_3$. Ambos sistemas son interesantes por si mismos, en particular el primero que puede usarse para el estudio de moléculas aromáticas como el benceno y boraceno.

El estudio de los ejemplos anteriores sirven de base para la formulación y el análisis formal de la construcción de redes bidimensionales que emulen teorías de norma $SU(N)$ que se expone de manera detallada en el capítulo ??.

3.1 Anillo con simetría C_6

Esta sección está dedicada a la construcción del sistema de amarre fuerte a estudiar. Es importante mencionar que el formalismo teórico aquí presentado es aplicable para diferentes realizaciones mesoscópicas como resonadores de microondas, sistemas con vibraciones mecánicas, cristales fotónicos y guías de ondas entre otros. El esquema del sistema se encuentra en la figura ?? c) donde cada uno de los sitios están numerados del 1 al 6. La figura ?? nos ayuda a visualizar la simetría $C_3 \times Z_2$. Sobre las funciones de onda, debemos aclarar que $\Psi_i(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | i \rangle$ es la función de onda correspondiente a cada sitio i -ésimo del anillo.

Para encontrar los niveles de energía de estas moléculas, recurrimos al modelo de amarre fuerte.

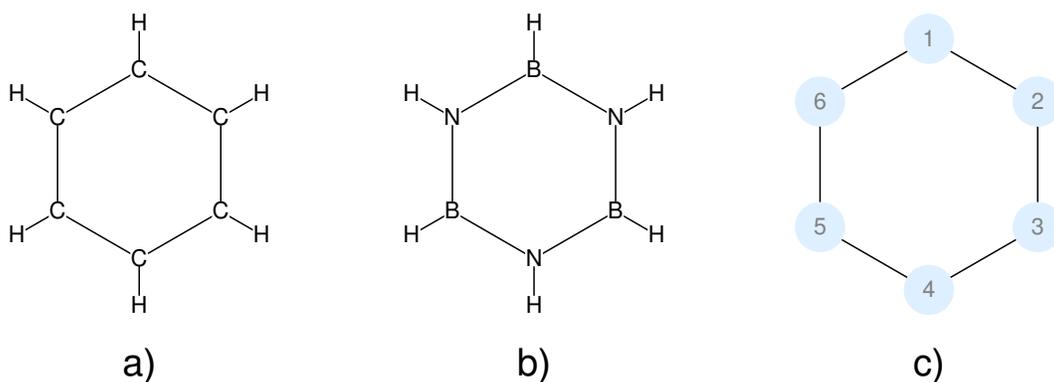


Figura 3.1: a) Anillo de benceno. Los seis carbonos se encuentran en los vértices del hexágono, cada carbono está coordinado con un átomo de hidrógeno. Las líneas sólidas representan los enlaces covalentes de la molécula. b) El anillo de boraceno está constituido por tres átomos de boro y tres de nitrógeno dispuestos en los vértices del hexágono de forma alternada. Cada boro y nitrógeno está coordinado con un átomo de hidrógeno. c) Anillo hexagonal de seis sitios.

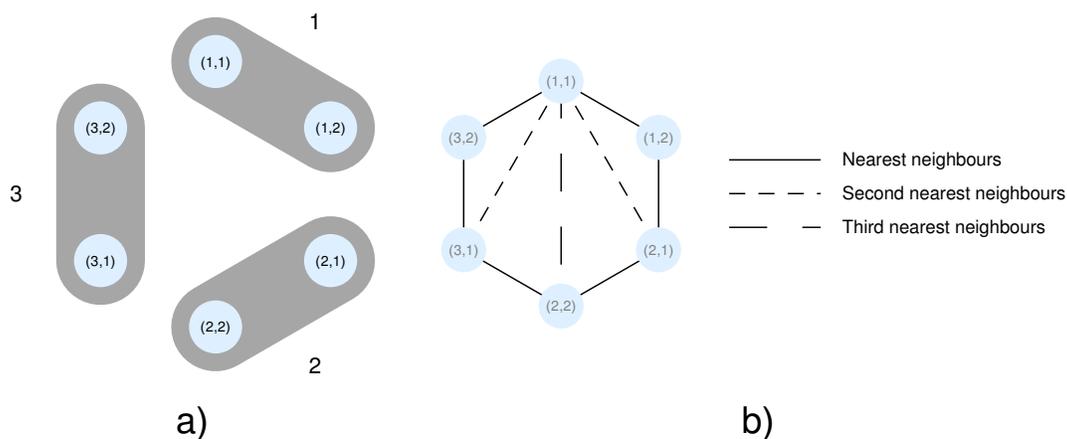


Figura 3.2: a) El grupo de simetría C_6 del hexágono puede descomponerse en $C_6 = C_3 \times Z_2i$. Visualmente tenemos tres dímeros cuyos centros están colocados en los vértices de un triángulo. Las etiquetas para los sitios son de la forma (m, n) donde m denota el número de dímerno y n la posición intradimérica. b) Los acoplamientos del anillo hexagonal.

$$H \doteq \left(\begin{array}{ccc|ccc} \epsilon & \Delta_{12} & \Delta_{13} & \Delta_{14} & \Delta_{15} & \Delta_{16} \\ \Delta_{12}^* & \epsilon & \Delta_{23} & \Delta_{24} & \Delta_{25} & \Delta_{26} \\ \Delta_{13}^* & \Delta_{23}^* & \epsilon & \Delta_{34} & \Delta_{35} & \Delta_{36} \\ \hline \Delta_{14}^* & \Delta_{24}^* & \Delta_{34}^* & \epsilon & \Delta_{45} & \Delta_{46} \\ \Delta_{15}^* & \Delta_{25}^* & \Delta_{35}^* & \Delta_{45}^* & \epsilon & \Delta_{56} \\ \Delta_{16}^* & \Delta_{26}^* & \Delta_{36}^* & \Delta_{46}^* & \Delta_{56}^* & \epsilon \end{array} \right), \quad (3.1)$$

donde $\Delta_{ij} = \Delta_{ji}^*$ puesto que el modelo es hermitiano. La configuración con más alta simetría es la correspondiente al hexágono. El operador de traslación módulo 6 está dado por rotaciones de $\pi/3$ en el anillo. Operacionalmente esto se denota $\hat{T}|i\rangle = |(i+1)\bmod 6\rangle$ en donde hemos usado la base canónica $\{|i\rangle\}$. Matricialmente el operador tiene la siguiente representación:

$$\hat{T} \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

con las siguientes relaciones

$$\hat{T}\hat{T}^\dagger = \hat{T}^\dagger\hat{T} = \mathbf{1}, \quad [\hat{T}, \hat{T}^\dagger] = 0. \quad (3.3)$$

Como bien se sabe, para que \hat{T} sea una simetría del hamiltoniano y se pueda diagonalizar simultáneamente, debe cumplirse que $[H, \hat{T}^q] = 0$ para $q = 1, \dots, 6$. De esta manera tenemos que el grupo abeliano C_6 es:

$$C_6 = \{\mathbf{1}, \hat{T}, \hat{T}^2, \hat{T}^3, \hat{T}^4, \hat{T}^5\}. \quad (3.4)$$

De esta forma, para encontrar los valores propios de la energía debemos encontrar una base apropiada donde \hat{T} sea diagonal. Es importante aclarar que existen otras simetrías en el sistema por ejemplo la inversión espacial $1 \rightarrow 1, 2 \rightarrow 6, 3 \rightarrow 5, 4 \rightarrow 4, 5 \rightarrow 3, 6 \rightarrow 2$; sin embargo, no conmuta con el hamiltoniano y la base propia de este operador no es útil para diagonalizar H . Para que nuestro hamiltoniano tenga simetría C_6 las diagonales secundarias deberán tener elementos iguales.

$$H \doteq \begin{pmatrix} \epsilon & \Delta_1 & \Delta_2 & \Delta_3 & \Delta_2 & \Delta_1 \\ \Delta_1 & \epsilon & \Delta_1 & \Delta_2 & \Delta_3 & \Delta_2 \\ \Delta_2 & \Delta_1 & \epsilon & \Delta_1 & \Delta_2 & \Delta_3 \\ \Delta_3 & \Delta_2 & \Delta_1 & \epsilon & \Delta_1 & \Delta_2 \\ \Delta_2 & \Delta_3 & \Delta_2 & \Delta_1 & \epsilon & \Delta_1 \\ \Delta_1 & \Delta_2 & \Delta_3 & \Delta_2 & \Delta_1 & \epsilon \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

donde el subíndice i de cada acoplamiento Δ_i indica el número de vecino. En forma más compacta podemos escribir este hamiltoniano de la siguiente manera

$$H = \epsilon + \sum_{n=1}^3 \left[\Delta_n \hat{T}^n + \Delta_n \left(\hat{T}^\dagger \right)^n \right]. \quad (3.6)$$

Las potencias del operador traslación presentan las siguientes propiedades:

$$\hat{T}^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (\hat{T}^\dagger)^3,$$

$$\hat{T}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{T}^4 = (\hat{T}^\dagger)^{-4} = (\hat{T}^\dagger)^{-2},$$

$$\hat{T}^5 = \hat{T}^{-1} = \hat{T}^\dagger. \quad (3.7)$$

Podemos notar que el hamiltoniano sólo depende de \hat{T} y \hat{T}^\dagger y por tanto procedemos a diagonalizar H . Tenemos la base propia del operador de traslación $\{|q\rangle\}$, $q = 1, \dots, 6$ tal que

$$\hat{T}|q\rangle = \exp(2i\pi q/6)|q\rangle, \quad (3.8)$$

donde la exponencial aparece debido a la unitariedad de \hat{T} y la forma del exponente emerge debido a $\hat{T}^{6n} = \mathbf{1}$, $n \in \mathbb{Z}$, con lo cual $\exp(2i\pi(6n)/6) = \exp(2i\pi qn) = 1$. Proponemos la base propia $\{|q\rangle\}$ como combinación lineal de la base canónica $\{|j\rangle\}$ de la siguiente manera:

$$|q\rangle = \sum_{j=1}^6 C_j^q |j\rangle, \quad (3.9)$$

donde debemos determinar las constantes C_j^q . Aplicando el operador a esta base tenemos:

$$\hat{T}|q\rangle = \sum_{j=1}^6 C_j^q \hat{T}|j\rangle = \sum_{j=1}^6 C_j^q |(j+1) \bmod 6\rangle = \sum_{j=1}^6 C_{(j-1) \bmod 6}^q |j\rangle. \quad (3.10)$$

Tomando la ecuación (??) con la base (??) llegamos a la siguiente igualdad

$$T|q\rangle = \sum_{j=1}^6 C_{(j-1) \bmod 6}^q |j\rangle = \sum_{j=1}^6 e^{2i\pi q/6} C_j^q |j\rangle. \quad (3.11)$$

Dado que $C_j^q = \exp(-i\pi p/3) C_{(j-1) \bmod 6}^q$ y tomando en cuenta el factor de normalización $1/\sqrt{6}$, los coeficientes adquieren la siguiente expresión:

$$C_j^q = e^{-i\pi qj/3} / \sqrt{6}, \quad j = 1, \dots, 6. \quad (3.12)$$

Hemos obtenido la base propia del operador de traslación, lo que resta hacer es aplicar H sobre esta base para obtener las energías propias del sistema:

$$H|q\rangle = \left\{ \epsilon + \sum_{n=1}^3 (\Delta_n e^{in\pi q/3} + \Delta_n e^{-in\pi q/3}) \right\} |q\rangle. \quad (3.13)$$

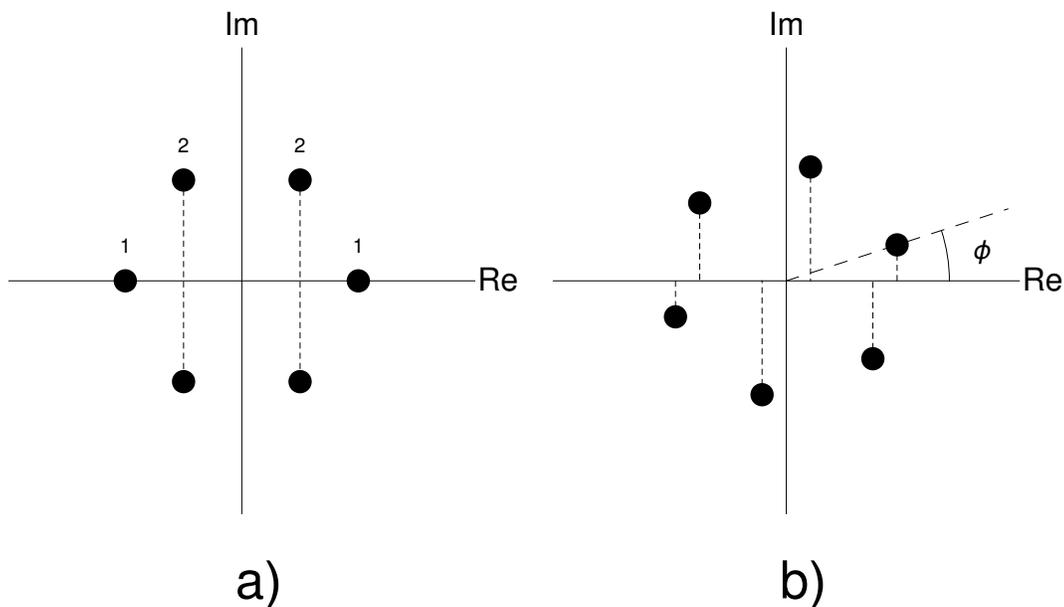


Figura 3.3: a) Representación gráfica de las fases propias del grupo C_6 . Las fases que tienen la misma proyección sobre el eje real corresponden a los dobletes. b) La presencia de un campo magnético externo equivale a la introducción de una fase provocando que las fases degeneradas dejen de tener la misma proyección en el eje real y por tanto desdoblado los dobletes.

Finalmente, los niveles de energía del anillo están determinados por la siguiente expresión:

$$E_q = \epsilon + 2 \sum_{n=1}^3 \Delta_n \cos\left(\frac{\pi q n}{3}\right). \quad (3.14)$$

De esta expresión podemos notar que si $q \rightarrow -q$, entonces $E_q = E_{-q}$. Pero $-q = (6 - q) \bmod 6$ así que analizando la ecuación anterior (??) encontramos que los pares $q = 1, 5$ y $q = 2, 4$ están degenerados.

3.2 Sistema $C_3 \times Z_2$

El sistema que se presenta a continuación está formado por dímeros colocados en los vértices de un triángulo equilátero. Es un sistema que puede visualizarse como un triángulo cuyos sitios tienen estructura interna, en este caso dos niveles internos dados por las funciones propias del dímero correspondientes al estado simétrico y antisimétrico. La construcción del sistema puede apreciarse en la figura ???. Más adelante, el uso de sitios con dos grados de libertad internos son indispensables en la construcción de sistemas que emulen campos no abelianos de $SU(2)$.

Los dímeros rotan entre dos configuraciones particulares, las cuales llamamos configuración estrella y configuración hexagonal. Un cálculo de valores propios revela la

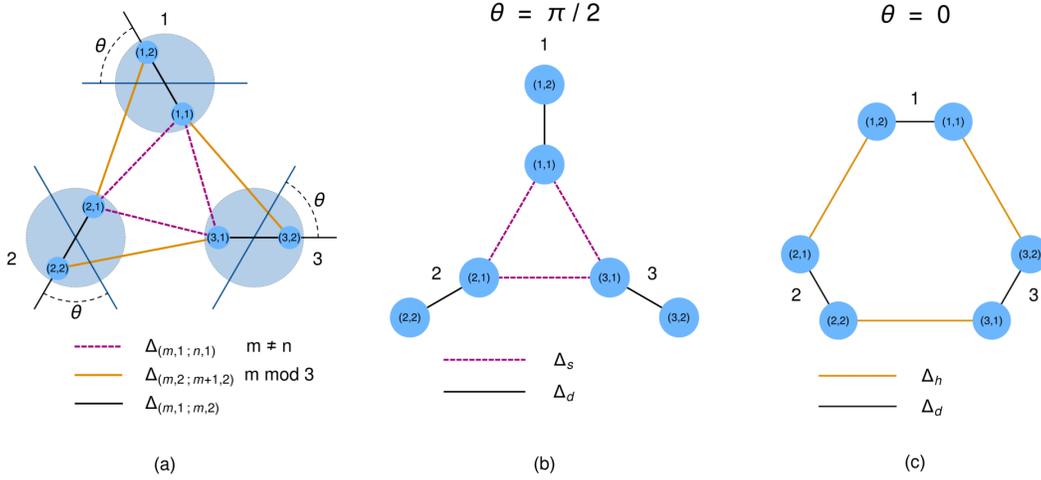


Figura 3.4: a) Los dímeros que conforman el anillo rotan con el mismo ángulo desde una configuración hexagonal a una configuración tipo estrella. b) La configuración estrella se alcanza al rotar los dímeros por un ángulo de $\theta = \pi/2$. c) La configuración de partida es la configuración tipo hexágono que corresponde a $\theta = 0$.

existencia de un punto de degeneración triple que no corresponde a una simetría con-figuracional, ya que la simetría por paridad está evidentemente rota. Este punto triple se da entre un doblete y un singulete. Como se muestra posteriormente, esta degeneración tiene una interpretación en el espacio fase discreto. El formalismo matemático aquí presentado es útil para abordar sistemas ya existentes como las moléculas de benceno y boraceno. La ruptura de la simetría es estudiada por medio de la introducción de defectos in sitio, modificación de los acoplamientos o bien la introducción de un campo externo que se manifiesta como una fase en los acoplamientos y esta no es removible por transformaciones unitarias. Como consecuencia, se genera un desdoblamiento en los dos dobletes a través de dos procesos: sólo con la ruptura de inversión temporal, o bien la ruptura de C_3 para un hamiltoniano real.

Empecemos por describir el hamiltoniano de este sistema. Como vimos en la sección ?? el anillo hexagonal tiene simetría C_6 , este sistema con invariancia de inversión temporal posee dos dobletes y dos singuletes. Esta estructura en los niveles de energía prevalece aún si rompemos la simetría C_6 pero se conserva la simetría C_3 como es el caso de la configuración estrella de la figura ??.

Vamos a escribir el hamiltoniano. Distinguimos tres tipos de acoplamientos: Δ_h que corresponde a los acoplamientos a la configuración hexagonal, Δ_s correspondiente a la configuración estrella y Δ_d que representa el acoplamiento de los sitios internos del

dímero. El hamiltoniano lo escribimos de la siguiente manera:

$$H \doteq \begin{pmatrix} \epsilon & \Delta_d & 0 & 0 & 0 & \Delta_h \\ \Delta_d & \epsilon & \Delta_h & \Delta_s & 0 & \Delta_s \\ 0 & \Delta_h & \epsilon & \Delta_d & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_s & \Delta_d & \epsilon & \Delta_h & \Delta_s \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_h & \epsilon & \Delta_d \\ \Delta_h & \Delta_s & 0 & \Delta_s & \Delta_d & \epsilon \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Es posible encontrar de manera analítica el punto de degeneración triple. Ignorando la energía en sitio ϵ , digonalicemos cada bloque dimérico con la matriz de Hadamard:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +1 & +1 \\ +1 & -1 \end{pmatrix}, \quad H^{(1)} = (\mathbf{1}_3 \otimes U)^\dagger H (\mathbf{1}_3 \otimes U). \quad (3.16)$$

Reorganizamos esta matriz resultante en dos bloques 3×3 distinguiendo los niveles superiores y los niveles inferiores del dímero:

$$H^{(2)} = \begin{pmatrix} \Delta_d & \Delta_+ & \Delta_+ & 0 & \Delta_- & -\Delta_+ \\ \Delta_+ & \Delta_d & \Delta_+ & -\Delta_+ & 0 & \Delta_- \\ \Delta_+ & \Delta_+ & \Delta_d & \Delta_- & -\Delta_+ & 0 \\ 0 & -\Delta_+ & \Delta_- & -\Delta_d & -\Delta_- & -\Delta_- \\ \Delta_- & 0 & -\Delta_+ & -\Delta_- & -\Delta_d & -\Delta_- \\ -\Delta_+ & \Delta_- & 0 & -\Delta_- & -\Delta_- & -\Delta_d \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

con $\Delta_\pm \equiv (\Delta_h \pm \Delta_s)/2$. Para diagonalizar cada bloque 3×3 usamos la siguiente matriz:

$$U_{C_3} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ e^{i2\pi/3} & e^{i4\pi/3} & 1 \\ e^{i4\pi/3} & e^{i2\pi/3} & 1 \end{pmatrix}, \quad H^{(3)} = (\mathbf{1}_2 \otimes U_{C_3})^\dagger H^{(2)} (\mathbf{1}_2 \otimes U_{C_3}), \quad (3.18)$$

obteniendo lo siguiente:

$$H^{(3)} = \begin{pmatrix} X_+ & Y \\ Y^\dagger & X_- \end{pmatrix}, \quad X_\pm = \text{diag}\{\pm(\Delta_d - \Delta_\pm), \pm(\Delta_d - \Delta_\pm), \pm(\Delta_d + 2\Delta_\pm)\} \\ Y = \text{diag}\{(\Delta_s + i\sqrt{3}\Delta_h)/2, (\Delta_s - i\sqrt{3}\Delta_h)/2, -\Delta_s\}. \quad (3.19)$$

El hamiltoniano $H^{(3)}$ puede escribirse en bloques 2×2 desacoplados.

$$\begin{pmatrix} \Delta_d - \Delta_+ & \frac{\Delta_s + i\sqrt{3}\Delta_h}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\Delta_s - i\sqrt{3}\Delta_h}{2} & \Delta_- - \Delta_d & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_d - \Delta_+ & \frac{\Delta_s - i\sqrt{3}\Delta_h}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta_s + \sqrt{3}\Delta_h}{2} & \Delta_- - \Delta_d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_d + 2\Delta_+ & -\Delta_s \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_s & -\Delta_d - 2\Delta_- \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Cada bloque puede diagonalizarse para obtener el siguiente espectro:

$$E_{\text{dobletes}}^\pm = -\frac{\Delta_s}{2} \pm \sqrt{\left(\Delta_d + \frac{\Delta_h}{2}\right)^2 + \left(\frac{\Delta_s}{2}\right)^2 + 3\left(\frac{\Delta_h}{2}\right)^2} \\ E_{\text{singletes}}^\pm = \Delta_s \pm \sqrt{(\Delta_d + \Delta_h)^2 + \Delta_s^2}. \quad (3.21)$$

El punto triple de degeneración se encuentra igualando $E_{\text{dobletes}}^- = E_{\text{singuletes}}^-$. Realizando el álgebra correspondiente se llega a la siguiente ecuación:

$$\frac{\Delta_s}{\Delta_d} = \frac{(\Delta_h/\Delta_d)}{\sqrt{1 + (\Delta_h/\Delta_d)^2}} \equiv F(\Delta_h/\Delta_d). \quad (3.22)$$

3.3 Rompimiento de simetría

Como se expuso en la sección ??, el espectro para un anillo hexagonal esta conformado por dos dobletes y dos singuletes. La degeneración de los dobletes puede romperse. Existen diversas maneras de remover la simetría en este sistema: *i*) al introducir un campo magnético externo, introducimos una diferencia entre las corrientes derechas e izquierdas presentes en el anillo, puesto que estas se acoplan con el campo de manera diferente rompiendo así la simetría bajo inversión temporal. *ii*) El sistema tiene simetría C_6 . Añadiendo un defecto a alguno de los sitios podemos romper esta simetría, logrando levantar la degeneración existente en los dobletes.

3.3.1 Campo magnético externo

En esta sección se exploran las implicaciones de introducir un campo magnético en el anillo hexagonal. El campo será perpendicular al plano del anillo. Empecemos escribiendo el hamiltoniano para una sola partícula

$$H = \frac{[\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}]^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \neq H^* \quad (3.23)$$

debido a la presencia de $(e/2mc)\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ y $(e/2mc)\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ cuando expandimos el término cuadrático. Esto nos da indicios que en nuestro modelo de amarre fuerte a múltiples vecinos, los valores de los acoplamientos Δ_{ij} dejan de ser reales. La relación con el campo magnético emerge cuando aplicamos una transformación unitaria para remover todas las fases de Δ_{ij} tanto como sea posible. Esto se ve más claro si aplicamos una transformación unitaria

$$U \doteq \text{diag}\{e^{i\phi_1}, \dots, e^{i\phi_n}\}, \quad \tilde{H} = U^\dagger H U \quad (3.24)$$

que remueve todas las fases, entonces no puede existir flujo magnético a través de la molécula y el espectro no presentará modificación alguna. Por otro lado, si después de aplicar U tenemos al menos un elemento, $\Delta_j e^{i\phi_j}$ tendremos entonces un hamiltoniano con fases acumuladas. A continuación presentamos un ejemplo:

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \epsilon & \Delta_1 & \Delta_2 & \Delta_3 & \Delta_2 e^{i\phi_2} & \Delta_1 e^{i\phi_1} \\ \Delta_1 & \epsilon & \Delta_1 & \Delta_2 & \Delta_3 & \Delta_2 e^{i\phi_2} \\ \Delta_2 & \Delta_1 & \epsilon & \Delta_1 & \Delta_2 & \Delta_3 \\ \Delta_3 & \Delta_2 & \Delta_1 & \epsilon & \Delta_1 & \Delta_2 \\ \Delta_2 e^{-i\phi_2} & \Delta_3 & \Delta_2 & \Delta_1 & \epsilon & \delta_1 \\ \Delta_1 e^{-\phi_1} & \Delta_2 e^{\phi_2} & \Delta_3 & \Delta_2 & \Delta_1 & \epsilon \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

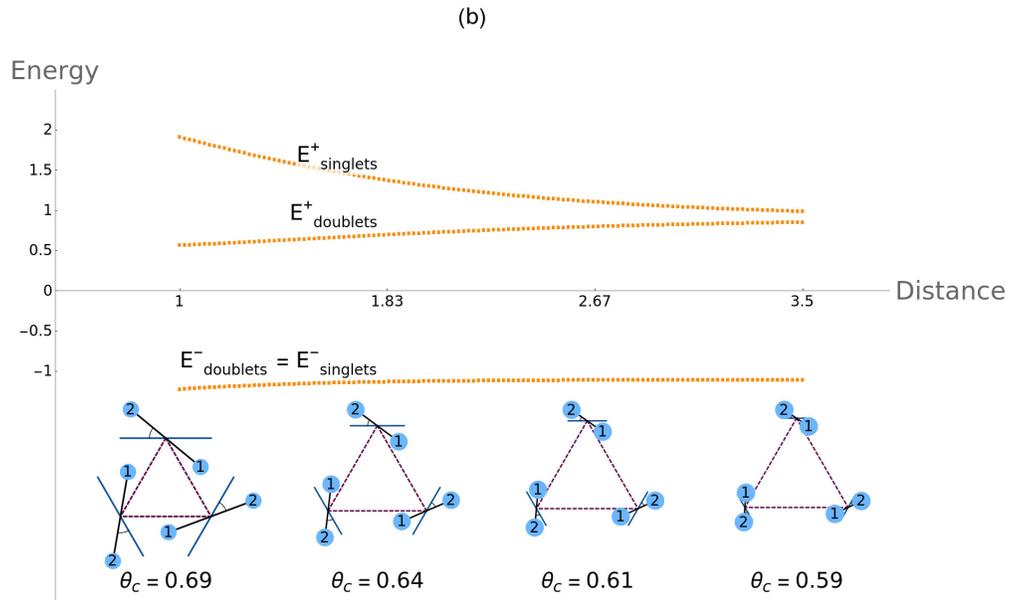
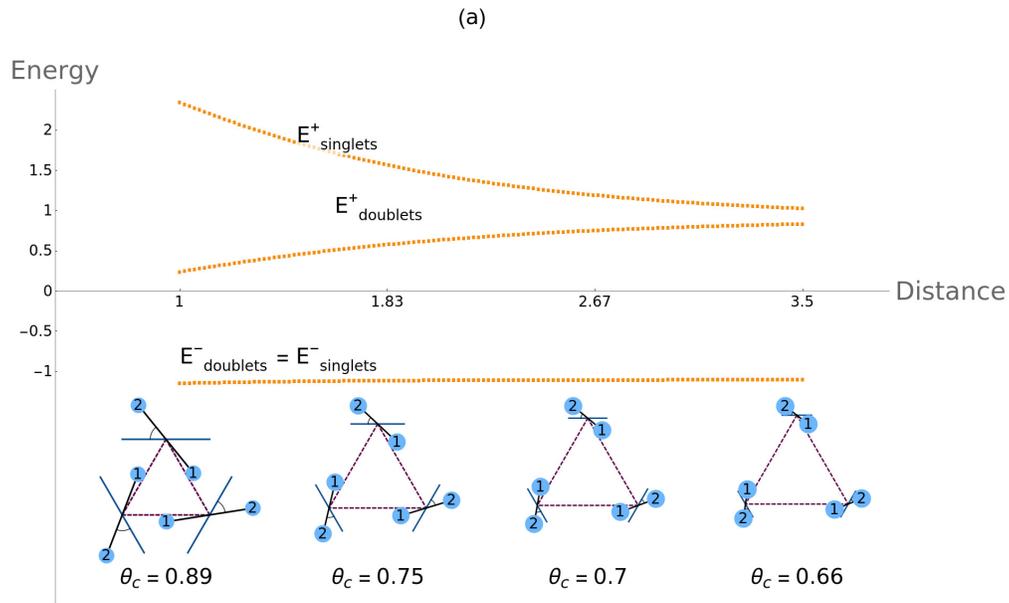


Figura 3.5: Esta figura muestra los niveles de energía para varias configuraciones con degeneración triple en función de la distancia. a) En este recuadro se muestran las energías propias del hamiltoniano que contiene todas las interacciones a pares entre sitios. c) Energías propias para el hamiltoniano de la ecuación (??)

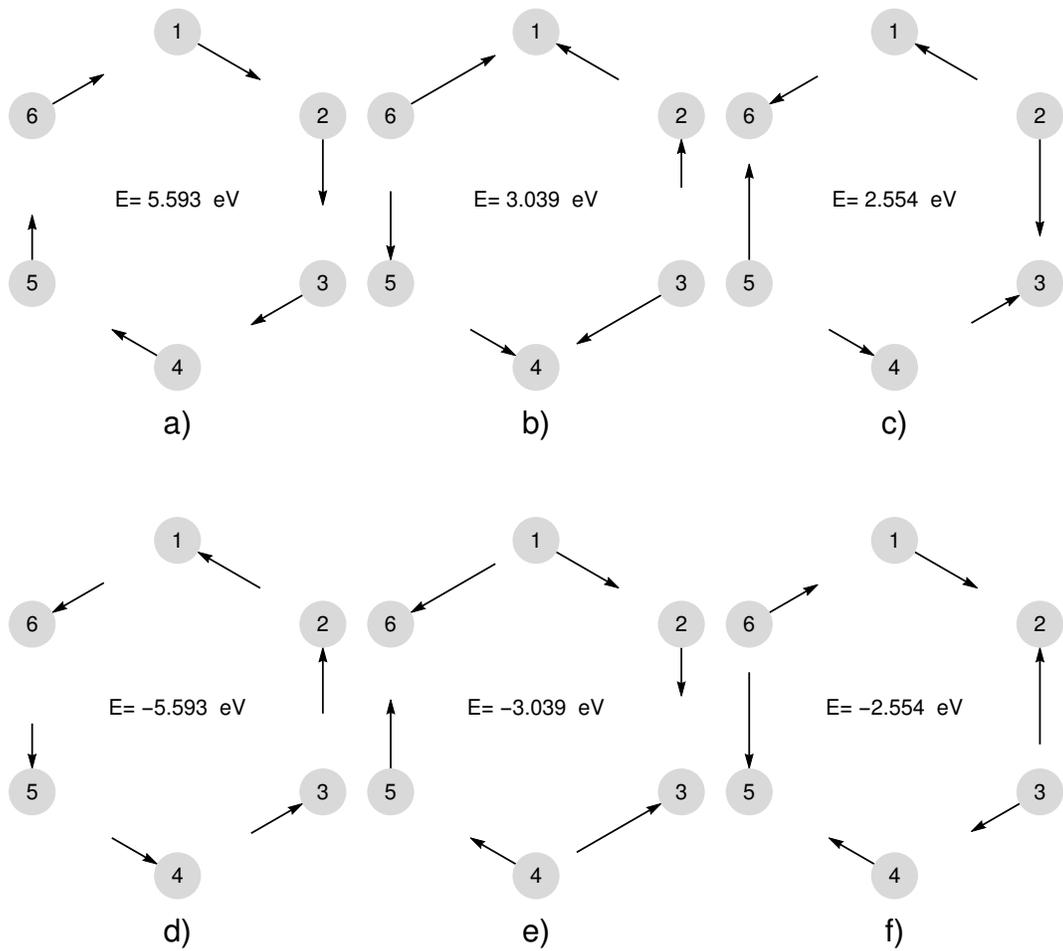


Figura 3.6: Gráfica de las corrientes para los seis estados propios de la molécula de benceno bajo la acción de un campo magnético de $B = 8.5855 \times 10^{-3} \text{ G}$ perpendicular al plano molecular. Las dos filas de la figura corresponden a niveles de energía reflejados, la única manera de distinguirlos es mediante el esquema de corrientes. Los recuadros a) y d) corresponden a los singletes mientras que los b), c) y e), f) son los esquemas de corriente (no equivalentes) para los dobletes desdoblados respectivamente. Podemos notar que los diagramas de corriente para ambas filas tienen direcciones de corriente invertidas

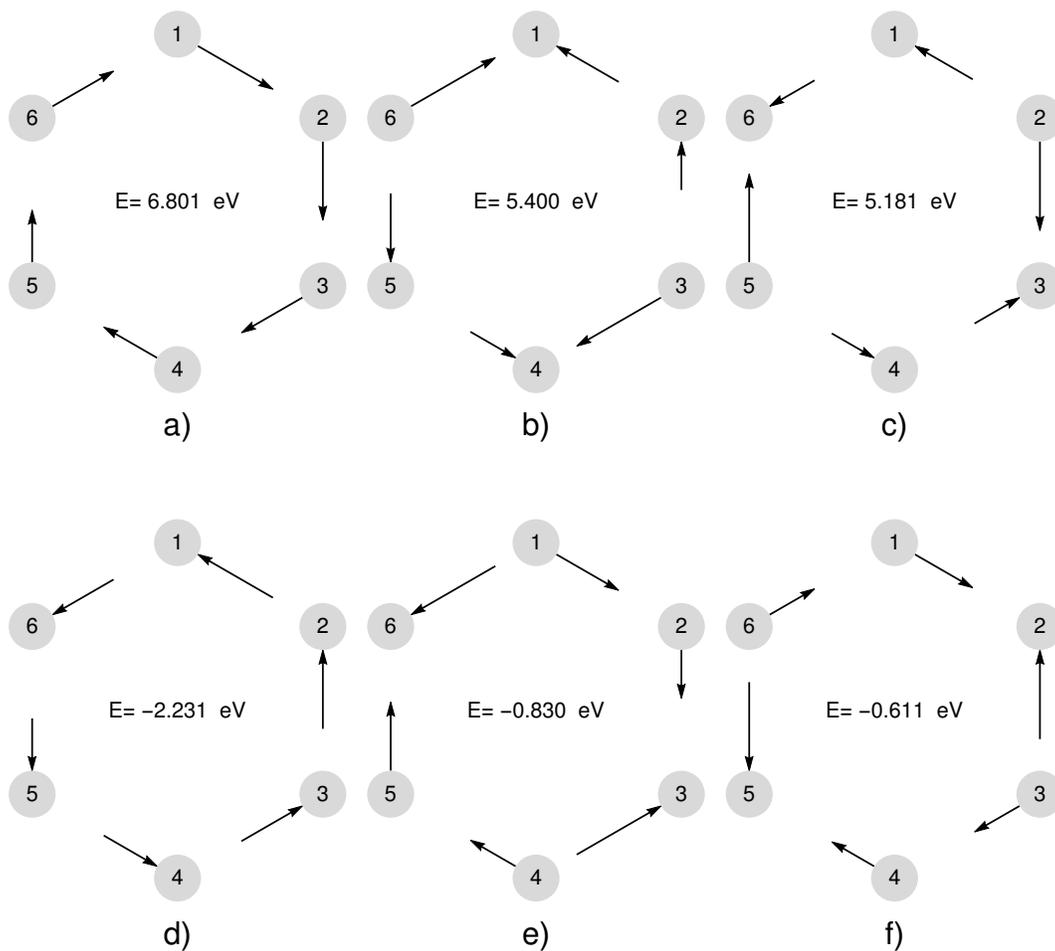


Figura 3.7: En esta figura se muestran los esquemas de corriente para las funciones propias de la molécula de boraceno bajo la acción de un campo magnético de $B = 8.5855 \times 10^{-3} \text{ G}$. De manera similar al benceno, los recuadros a) y b) representan los estados singletes con direcciones de corriente opuestas. Los recuadros b), c) y e), f) corresponden a los dobletes desdoblados. Los diagramas de corrientes para energías reflejadas son en este caso diferentes.

Es posible escribir los acoplamientos de manera general como

$$\Delta_n = e^{i\phi_n} |\Delta_n| \quad (3.26)$$

y se tiene entonces con esta nueva notación lo siguiente:

$$H = \epsilon + \sum_{n=1}^3 (e^{i\phi_n} |\Delta_n| \hat{T}^n + e^{-i\phi_n} |\Delta_n| (\hat{T}^\dagger)^n). \quad (3.27)$$

Debemos encontrar las energías propias del sistema. La base $\{|q\rangle\}$ usada anteriormente para obtener los niveles de energía del hexágono resuelve el presente problema de valores propios del hamiltoniano con campo magnético. Obtenemos lo siguiente:

$$E_q(\{\phi_i\}) = \epsilon + 2 \sum_{n=1}^3 |\Delta_n| \cos\left(\frac{\pi q n}{3} + \phi_n\right), \quad (3.28)$$

donde podemos ver que la energía depende del flujo. La relación $E_q = E_{-q}$ está rota como se comprueba a continuación:

$$\begin{aligned} E_{-q}(\{\phi_i\}) &= \epsilon + 2 \sum_{n=1}^3 |\Delta_n| \cos\left(\frac{-\pi q n}{3} + \phi_n\right) \\ &= \epsilon + 2 \sum_{n=1}^3 |\delta_n| \left\{ \cos\left(\frac{\pi q n}{3}\right) \cos \phi_n + \sin\left(\frac{\pi q n}{3}\right) \sin \phi_n \right\}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

La brecha de energía que existen entre E_q y E_{-q} es:

$$E_{-q} - E_q = \Delta E = 4 \sum_{n=1}^3 |\Delta_n| \sin \phi_n \sin\left(\frac{\pi q n}{3}\right). \quad (3.30)$$

Esta brecha de energía se controla por $\sin \phi_n$ que era lo que se buscaba.

3.3.2 Otros rompimientos de simetría

En general, el espectro el hexágono posee una simetría de reflexión alrededor de la energía en sitio ϵ , esto es, $E_q - \epsilon = \epsilon - E_{q'}$. Esto se traduce en la relación $E_q + E_{q'} = 2\epsilon$. Lo expresado anteriormente implica lo siguiente:

$$\sum_{n=1}^3 |\Delta_n| \left\{ \cos\left(\phi_n + \frac{\pi q n}{3}\right) + \cos\left(\phi_n + \frac{\pi q' n}{3}\right) \right\} = 0. \quad (3.31)$$

Sea $q = 1$ y $q' = 6$. (o bien $q = 2$, $q' = 5$; $q = 3$, $q' = 4$). Se cumple que $q + q' = 1 \pmod{6}$. La ecuación () puede expresarse como

$$\sum_{n=1}^3 |\Delta_n| \left\{ \cos\left(\frac{(1-q)\pi n}{3} + \phi_n\right) + \cos\left(\frac{q\pi n}{3} + \phi_n\right) \right\} = 0 \quad (3.32)$$

para toda Δ_n . La suma de los cosenos deberá ser cero por lo que la diferencia entre sus argumentos deberá ser de $\pm\pi$, en otras palabras, se debe cumplir lo siguiente

$$\frac{q\pi n}{3} = \frac{\pi n}{3} - \frac{q\pi n}{3} \pm \pi \quad (3.33)$$

$$2qn\pi = (n \pm 3)\pi \quad (3.34)$$

para todo valor q . Se pueden analizar tres situaciones dependiendo del número de vecinos empleados en nuestro modelo.

- Si $n = 1$ (primeros vecinos), $2q\pi = -2\pi \pmod{2\pi}$ o bien $2q\pi = 4\pi$, que es válido para toda q
- Si $n = 2$ (segundos vecinos), $4q\pi \neq 5\pi \pmod{2\pi}$ y no hay solución para q .
- Si $n = 3$ (terceros vecinos), $2q\pi = 0 \pmod{2\pi}$ para todo valor de q y para ambos signos $\pm\pi$.

Del análisis de los tres casos anteriores podemos deducir que sólo los segundos vecinos rompen la simetría bajo reflexión del espectro alrededor de ϵ . Primeros y segundos vecinos preservan dicha simetría aún con la presencia de campo magnético.

3.4 Aplicación a la molécula de Benceno

Los anillos de benceno y boraceno presentan estructura hexagonal, la cual puede ser estudiada por el formalismo que se revisó en el capítulo anterior. En especial para el boraceno, la simetría presente en estos anillos es $C_3 \times Z_2$. Estas moléculas aromáticas pueden emularse en sistemas mesoscópicos como en resonadores de microondas y sistemas acústicos. Este capítulo da una descripción algebraica de estos sistemas que desemboca en la formulación de un álgebra supersimétrica que existe en el espectro de energías de estos anillos.

De manera general, el anillo de benceno puede visualizarse como sitios colocados en los vértices de un hexágono donde cada sitio alberga una función de onda localizada. Para el caso del boraceno, los sitios son de dos especies diferentes dispuestos alternadamente en los vértices de dicho hexágono. El análisis de la estructura molecular y los enlaces existentes entre los elementos, se explica mediante los orbitales híbridos sp^2 , mientras que el orbital de valencia, el cual es el que nos interesa, corresponde al orbital p_z que es perpendicular al plano molecular.

3.4.1 Resultados numéricos

En esta sección se exponen algunos de los cálculos para el anillo de benceno. Los datos necesarios como las distancias atómicas, energía de valencia y ángulos de enlace pueden consultarse en la literatura [? ? ?].

En el modelo propuesto, el interés radica en la dependencia que tienen los acoplamientos con la distancia, por lo cual fijamos nuestra atención en la parte radial de la función de onda atómica. Después de un análisis de la estructura molecular y la estructura de los enlaces en el benceno, notamos que debemos restringir el estudio al orbital p_z . La dependencia radial de este orbital tiene la siguiente forma:

$$R(r) = A r e^{-r/\lambda}, \quad \lambda = \frac{2a_0}{Z}, \quad A = \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{Z}{\sqrt{3}a_0}, \quad (3.35)$$

donde a_0 denota el radio de Bohr y Z la carga nuclear. Los acoplamientos están dados por la integral de traslape mostrada en la ecuación (??). Fuera del átomo, una aproximación razonable de la función de onda es $R(r) \sim e^{-r/\lambda}$, por lo que los acoplamientos adquieren la siguiente forma:

$$\Delta \sim \Delta_0 e^{-d/\lambda}, \quad \tilde{\lambda} = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2}, \quad (3.36)$$

donde la distancia entre dos átomos se denota por d ; λ_1 y λ_2 son las longitudes de evanescencia para los átomos 1 y 2 respectivamente y Δ_0 es una constante. Para el benceno $\lambda_C = a_0/3$ y para obtener los valores numéricos de Δ_0 requerimos buscar información sobre los parámetros del grafeno [? ?].

Los niveles de energía para el benceno obtenidos del modelo son presentados en la figura ???. Como una referencia visual, se incluyó el espectro del grafeno. El recuadro a) muestra el espectro tomando en consideración únicamente acoplamientos a primeros vecinos donde podemos observar que la simetría arriba-abajo está presente. La casilla b) muestra el espectro incluyendo segundos vecinos, donde la simetría arriba-abajo está rota. El cuadro c) corresponde al espectro tomando en consideración todos los acoplamientos a pares entre sitios del anillo. Las correcciones generadas por los acoplamientos de terceros vecinos no son relevantes con lo cual concluimos que un modelo a primeros vecinos es suficiente para la descripción del anillo de benceno. Los recuadros d), e) y f) muestran el desdoblamiento de los dobletes de tres diferentes maneras:

- (i) Introduciendo un defecto en un sitio concreto. Recuadro d) de la figura ??.
- (ii) Introduciendo defectos en los acoplamientos $\Delta_{(1,2)}$, $\Delta_{(1,6)}$, $\Delta_{(2,1)}$ y $\Delta_{(6,1)}$. Ver recuadro e).
- (iii) Introduciendo un campo magnético perpendicular al anillo de benceno. Casilla f).

Las funciones propias se presentan en la figura ?? para el modelo de primeros vecinos y en la figura ?? para el modelo con defecto en sitio. El anillo está dibujado como referencia visual. Los resultados numéricos para la molécula de boraceno se presentan en la sección ??.

Un caso interesante surge cuando la longitud de evanescencia es comparable con las longitudes de enlace molecular en donde se encontró un punto triple de degeneración en

el modelo de segundos vecinos cuando $\Delta_2/\Delta_1 = 1/3$, como se muestra en la figura ?? a). Más aún, existe una inversión de niveles entre el doblete y el singulete inferiores cuando $\Delta_2/\Delta_1 > 1/3$, como se ilustra en la figura ?? b) ilustra este comportamiento. En el modelo con tres vecinos, el punto triple emerge cuando $1 - 3(\delta_2/\Delta_1) + 4(\Delta_3/\Delta_1) = 0$.

3.5 Álgebra dinámica

En cualquier sistema finito, el hamiltoniano puede expresarse en términos de los generadores hermíticos de $SU(N)$. En los sistemas que hemos visto hasta ahora, $N = 6$ pero no olvidemos que tenemos bloques de dímeros, por lo que podemos considerar el producto directo de representaciones irreducibles $(1/2, 1)$ de $SU(2) \otimes SU(2)$. Si la simetría C_3 no se rompe, el segundo factor $SU(2)$ se puede remplazar por el grupo cíclico generado por la rotación $2\pi/3$ del plano del polímero. El hamiltoniano puede escribirse de la siguiente manera:

$$H = \nu_0 \otimes \mathbf{1}_2 + \sum_{j=1}^3 \nu_j \otimes \sigma_j \quad (3.37)$$

con

$$\begin{aligned} \nu_0 &= \frac{\Delta_s}{2}(J_+ + J_- + J_+^2 + J_-^2), \\ \nu_1 &= \Delta_d + \Delta_h(J_+ + J_- + J_+^2 + J_-^2), \\ \nu_2 &= i\Delta_h(J_- - J_+ + J_+^2 - J_-^2), \\ \nu_3 &= -\frac{\Delta_s}{2}(J_+ + J_- + J_+^2 + J_-^2), \end{aligned} \quad (3.38)$$

junto con las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= 2J_3, \quad J_+^3 = J_-^3 = 0, \quad J_3 = \text{diag} \{1, 0, -1\} \\ [\sigma_+, \sigma_-] &= 2\sigma_3, \quad \sigma_+^2 = \sigma_-^2 = 0, \quad \sigma_3 = \text{diag} \{1, -1\}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

De estas relaciones podemos deducir lo siguiente. Dado que $J_\pm^3 = 0$, el operador de rotación por $2\pi/3$ adquiere la forma $T = J_+ + J_-^2$, y se puede introducir en las definiciones de la ecuación (??)

$$\begin{aligned} \nu_0 &= \frac{\Delta_s}{2}(T + T^\dagger), \\ \nu_1 &= \Delta_d + \Delta_h(T + T^\dagger), \\ \nu_2 &= i\Delta_h(T^\dagger - T), \\ \nu_3 &= -\nu_0, \end{aligned} \quad (3.40)$$

lo que se reduce en

$$[\nu_\lambda, \nu_\sigma] = 0, \quad \forall \lambda, \sigma. \quad (3.41)$$

La degeneración es producida por $[H, I]$ si el operador I tiene la siguiente forma

$$I = \alpha |E_{\text{doblete}}^- \rangle \langle E_{\text{singulete}}^-| + \beta |E_{\text{doblete}}^- \rangle \langle E_{\text{doblete}}^+| + \gamma |E_{\text{doblete}}^+ \rangle \langle E_{\text{singulete}}^-| + \text{h.c.}, \quad (3.42)$$

donde h.c. son los hermíticos conjugados de los tres primeros términos.

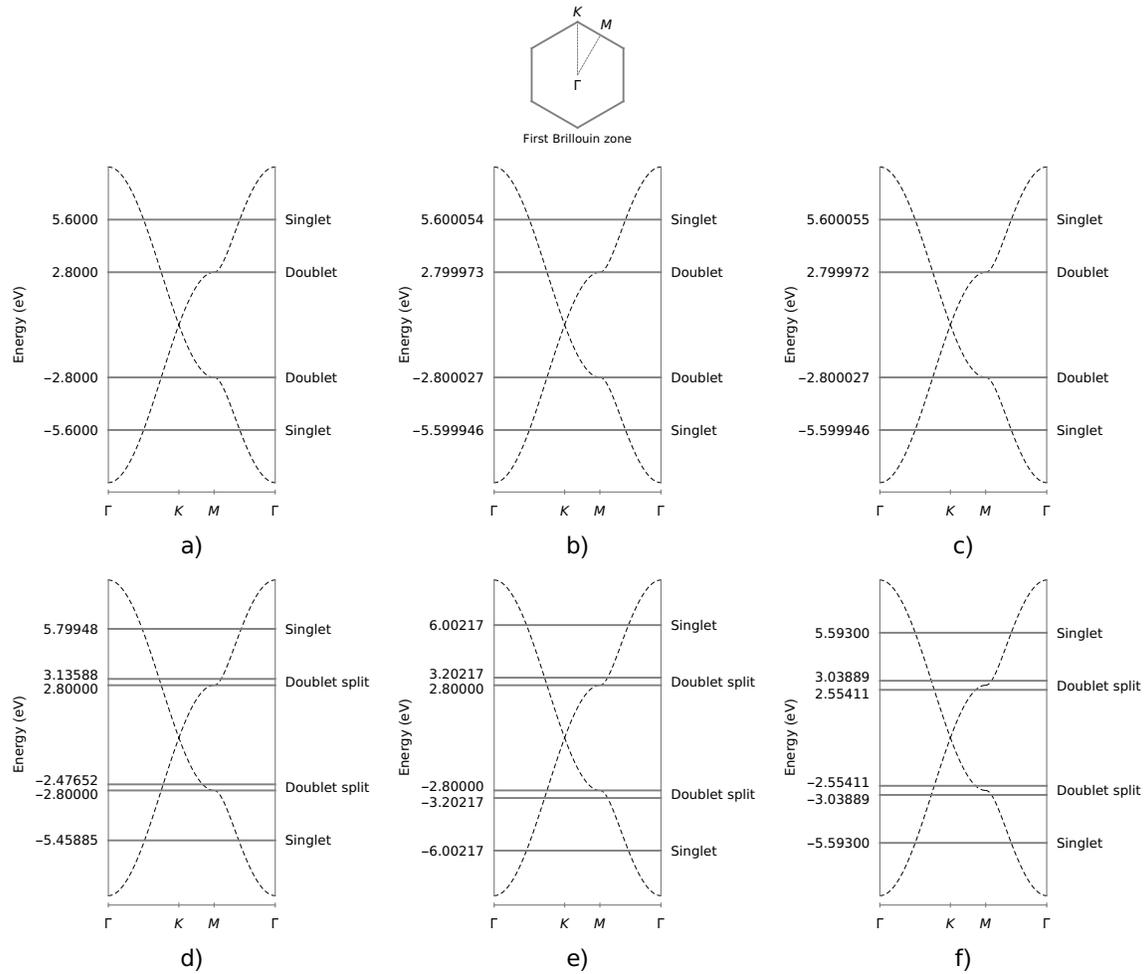


Figura 3.8: Niveles de energía del benceno. La distancia entre sitios es de 1.39\AA y las energías en sitio recorridas a cero. La relación de dispersión del grafeno es incluida como guía visual; un dibujo de la zona de Brillouin se incluye en la parte superior de la figura. a) Acoplamiento a primeros vecinos. La estructura de los niveles de energía es la siguiente: (de arriba a abajo) singlete, doblete, doblete, singlete. Estos niveles de energía gozan de simetría bajo reflexión alrededor del valor cero de energía. b) La introducción de acoplamiento de segundos vecinos rompe la simetría bajo reflexión. c) Acoplamiento con terceros vecinos. Las correcciones al espectro generadas por la inclusión de segundos y terceros vecinos es despreciable. d) Acoplamiento de primeros vecinos con un defecto en sitio de 1 eV. e) Acoplamiento a primeros vecinos con defectos en los acoplamientos (1, 2), (1, 6), (6, 1) y (2, 1) de 0.3 eV. f) Acoplamiento a primeros vecinos con un campo magnético externo perpendicular al plano molecular de $B = 8.5855 \times 10^{-3}\text{G}$. Las líneas punteadas corresponden a la relación de dispersión del grafeno obtenido de un modelo de primeros vecinos.

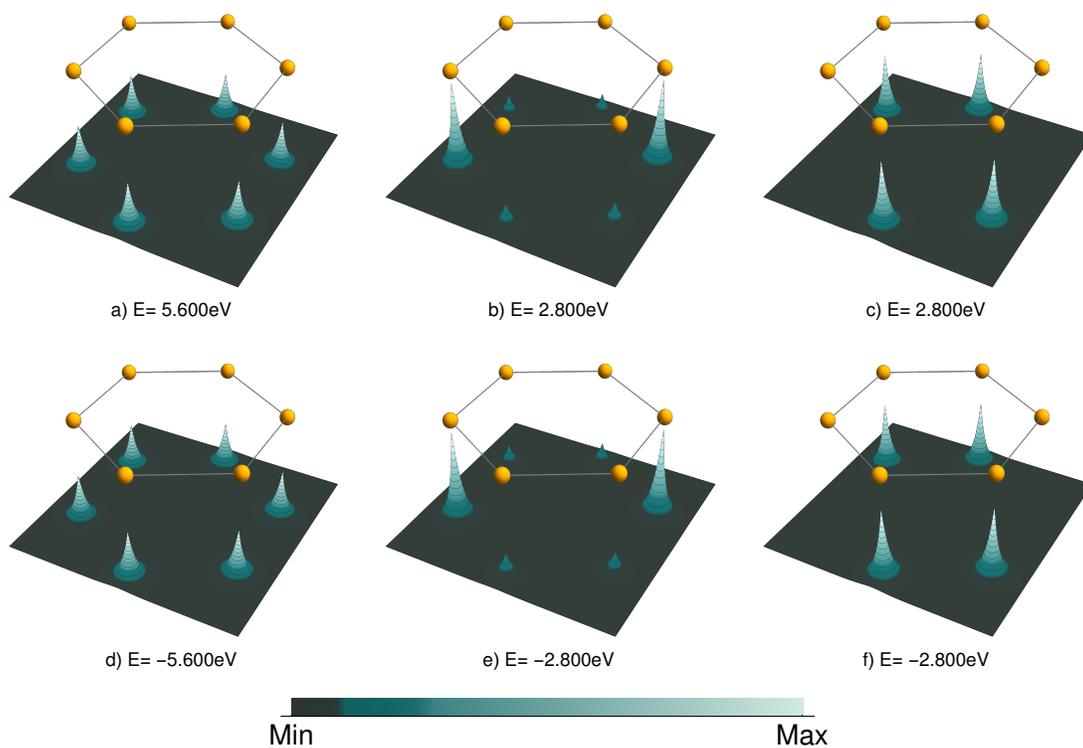


Figura 3.9: Funciones propias del benceno para un modelo de primeros vecinos. Los recuadros a) y d) representan estados singuletes y exhiben la misma probabilidad de encontrar al electrón en cualquiera de los seis sitios del anillo. La molécula de benceno se presenta como referencia de la dependencia espacial de las funciones de onda propias del sistema.

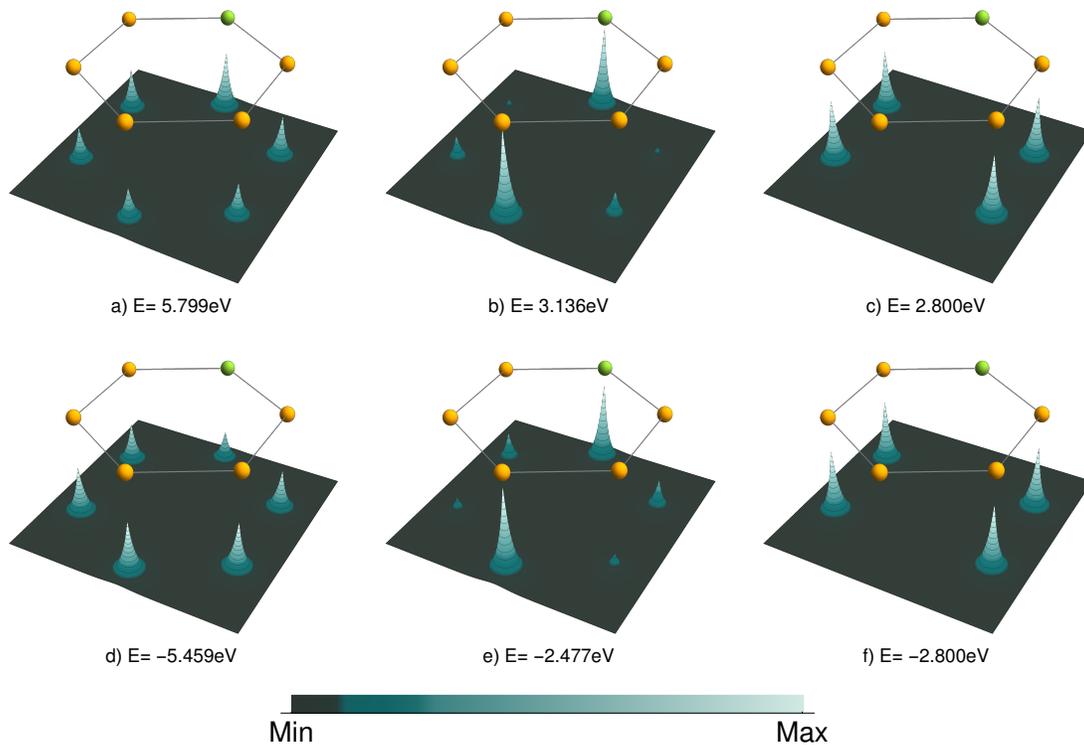


Figura 3.10: Funciones propias del benceno con la simetría C_6 rota debido a un defecto en sitio de 1eV. El espectro está ilustrado en la figura ?? celda d). El recuadro a) y d) muestra las funciones de los estados singuletes, la probabilidad se modifica en las regiones cercanas al defecto. Los cuadros b) y e) presentan la modificación a las funciones de onda propias en dos de los sitios del anillo; mientras que en los cuadros c) y f) no hay un cambio visible.

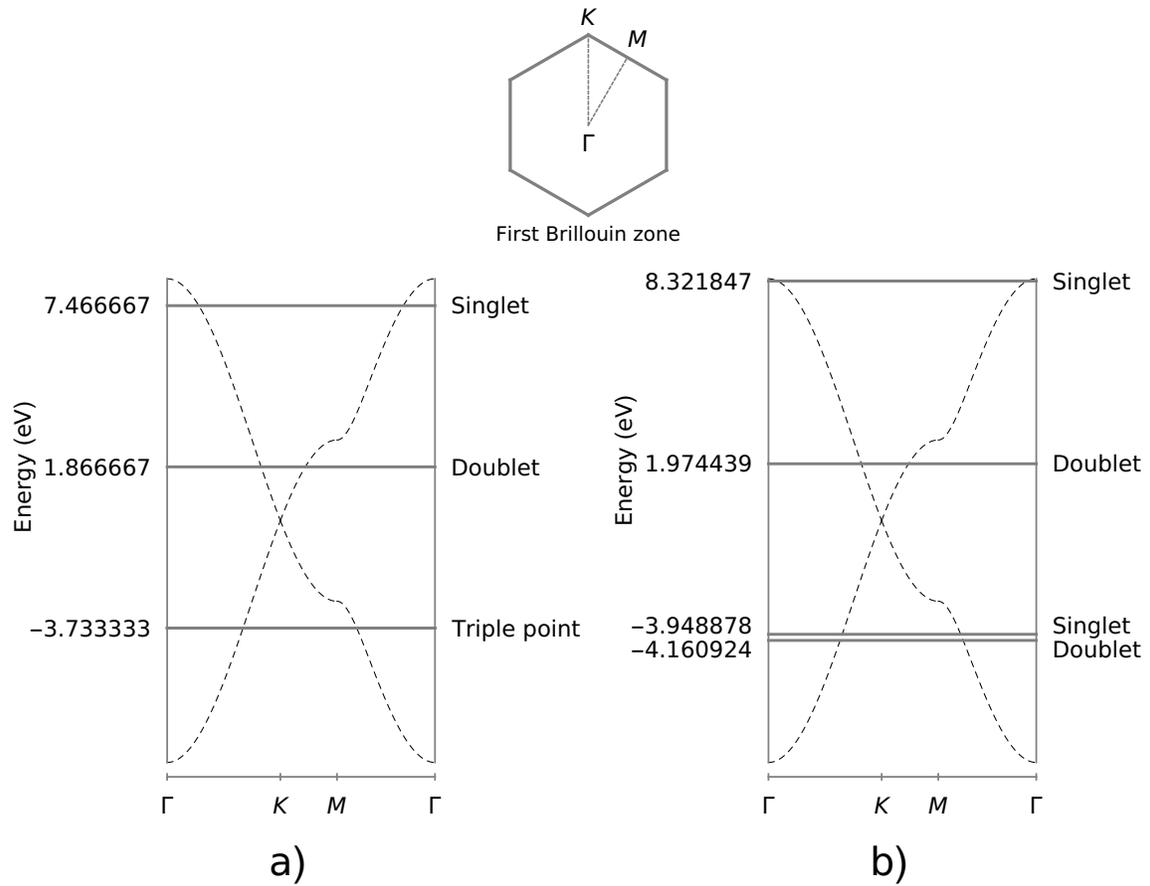


Figura 3.11: Espectros del anillo de benceno con segundos vecinos. a) Existe un punto triple de degeneración entre el singlete y doblete inferiores correspondiente a $\Delta_2/\Delta_1 = 1/3$ y $\lambda_c = 0.926\text{\AA}$. b) Inversión de niveles entre doblete-singlete inferiores. La inversión de niveles ocurre cuando $\Delta_2/\Delta_1 > 1/3$ or $\lambda > \lambda_c$, en este caso $\lambda = 0.956\text{\AA}$.

3.6 Espacio fase en una cuadrícula de 6×6

Para construir un espacio fase discreto debemos hacer una construcción original [?], basándonos en trabajos previos sobre campos finitos [? ?] y anillos [? ? ?]. Sin embargo estos trabajos tratan sistemas de dimensión prima por lo cual debemos construir nuestro espacio fase desde cero. En nuestro sistema la simetría C_6 no se alcanza pero el objetivo es usar los estados propios de $C_6 \cong C_3 \times Z_2$ como las marcas en el eje vertical, mientras que el eje horizontal usamos las seis posiciones (m, n) . Podemos pasar de un eje al otro por medio de combinaciones lineales en analogía a la transformada de Fourier. Es conveniente recordar la nomenclatura de los sitios del sistema. el índice m denota el número de dímero, y n denota la posición intradimérica. Con esto en mente, para los generadores de C_3 tenemos $T|m, n\rangle = |(m+1) \bmod 3, n\rangle^1$. Los estados transformados, denotados por un subíndice 1, son:

$$|k, n\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{q=1,2,3} e^{2\pi i q k / 3} |q, n\rangle, \quad T|k, n\rangle_1 = e^{-2\pi i k / 3} |k, n\rangle_1, \quad k = 1, 2, 3. \quad (3.43)$$

Para Z_2 tenemos las combinaciones simétricas y antisimétricas, y la transformación se denota con el subíndice 2:

$$|q, s\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [(-1)^s |q, 1\rangle + |q, 2\rangle], \quad s = 1, 2. \quad (3.44)$$

Con las dos definiciones anteriores, la transformación completa es:

$$|k, s\rangle_{1,2} = \sum_{\substack{q=1,2,3 \\ r=1,2}} e^{2\pi i q k / 3} (-1)^{rs} |q, r\rangle. \quad (3.45)$$

Debido a las transformaciones unitarias U y U_{C_3} de las ecuaciones (??), (??), la transformación inversa está bien definida. La notación para las funciones de onda es la siguiente:

$$\psi_{q,n} = \langle q, n | \psi \rangle, \quad \tilde{\psi}_{k,s} = {}_{=1,2} \langle k, s | \psi \rangle. \quad (3.46)$$

Como mencionamos al principio de esta sección, los trabajos sobre espacios fase discretos hacen uso de sistemas con dimensión prima; esto tiene como consecuencia la definición de la función de Wigner en términos de las fases propias de C_n ; sin embargo, en nuestro caso de estudio para una correcta definición de la función de Wigner debemos analizar cada factor de C_6 por separado. El factor C_3 tiene un tratamiento simple puesto que permite usar directamente las fase propias del grupo y los estados propios de T ; sin embargo, Z_2 necesita al menos tres términos (no dos como se podría pensar) para que la función de Wigner recupere de forma correcta las distribuciones marginales y las propiedades de traslación y composición que una correcta definición exige. También para la función de Wigner del hexágono se propone una nueva ley de composición entre la función de Z_2 y C_3 que preserve todas las propiedades exigibles.

¹De aquí en adelante se usaran los índices 1, 2, 3 omitiendo el 0.

Función de Wigner para Z_2

En la literatura podemos encontrar estudios de una definición covariante [? ? ?] para cualquier espín. Para sistemas de dos niveles se puede consultar [?]. El interés de este problema es recuperar las distribuciones marginales en las dos fases propias ± 1 de Z_2 , no sobre los tres posibles ejes $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. El espacio fase que necesitamos es bidimensional. Se propone una función general $W(\beta, l)$ de variables $\beta = 1, 2$, y $l = 1, 2$ que recupere las distribuciones marginales de manera correcta:

$$\begin{aligned} W(1, 1) &= A|\psi_1|^2 + B|\psi_2|^2 + 2C\Re\{\psi_1\psi_2^*\}, \\ W(2, 1) &= (1 - A)|\psi_1|^2 - B|\psi_2|^2 - 2C\Re\{\psi_1\psi_2^*\}, \\ W(1, 2) &= (1/2 - A)|\psi_1|^2 + (1/2 - B)|\psi_2|^2 + (1 - 2C)\Re\{\psi_1\psi_2^*\}, \\ W(2, 2) &= (A - 1/2)|\psi_1|^2 + (B + 1/2)|\psi_2|^2 + (2C - 1)\Re\{\psi_1\psi_2^*\}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

donde A, B, C son números reales arbitrarios y $\Re\{c\} \equiv (c + c^*)/2$. Estas relaciones satisfacen las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} W(\beta, l) &= |\psi_l|^2, \\ \sum_l W(\beta, l) &= |\tilde{\psi}_\beta|^2, \end{aligned} \quad (3.48)$$

donde $\psi_l = \langle l | \psi \rangle$ para cualquier estado arbitrario ψ , y su transformada de Fourier finita es $\tilde{\psi}_\beta = [(-1)^\beta \psi_1 + \psi_2]/\sqrt{2}$ siguiendo lo expresado en la ecuación (??). Las relaciones en (??) se pueden escribir de la siguiente manera

$$W(\beta, l) = \sum_{\substack{a=1,2 \\ b=1,2}} C_{a,b}^{l,\beta} \psi_a \psi_b^*. \quad (3.49)$$

Es posible escoger, sin pérdida de generalidad, valores para A, B, C por ejemplo $A = 1/2, B = 0, C = 1/4$. Con esta elección, los coeficientes diferentes de cero $C_{a,b}^{l,\beta}$ se pueden poner de manera explícita en términos de l, β

$$C_{1,1}^{l,\beta} = \frac{1 - (-1)^l}{4}, \quad C_{2,2}^{l,\beta} = \frac{1 + (-1)^l}{4}, \quad C_{1,2}^{l,\beta} = C_{2,1}^{l,\beta} = \frac{(-1)^{\beta+1}}{4}. \quad (3.50)$$

Esta elección particular es para fines computacionales.

Función de Wigner para C_3

Como habíamos anunciado, la función de Wigner usará los valores propios unimodulares de C_3 . La función es la siguiente:

$$W_{C_3}(q', k) = \frac{1}{3} \sum_{q=1,2,3} \psi_{(q)} \psi_{(q'-q)}^* \exp \left[i \frac{2\pi k}{3} (2q - q') \right], \quad (q' - q) \equiv q' - q \pmod{3}. \quad (3.51)$$

se confirma que

$$\sum_{q'=1,2,3} W_{C_3}(q', k) = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{a=1,2,3} \psi_a e^{2\pi i a k/3} \right|^2, \quad (3.52)$$

y

$$\sum_{k=1,2,3} W_{C_3}(q', k) = |\psi_{(-q')}|^2, \quad (3.53)$$

o equivalentemente

$$\sum_{k=1,2,3} W_{C_3}(q' \bmod 3) = |\psi_{q'}|^2. \quad (3.54)$$

Función de Wigner completa

El objetivo es encontrar una definición apropiada para la función de Wigner de C_6 . Usando las funciones de onda con los dos índices (m, n) , se propone la siguiente definición la cual recupera de forma correcta las distribuciones marginales

$$W(l_1, l_2; \beta_1, \beta_2) = \sum_{\substack{a=1,2 \\ b=1,2 \\ q=1,2,3}} \psi_{a,(q)} \psi_{b,(l_2-q)}^* C_{a,b}^{l_1, \beta_1} \exp \left[\frac{2\pi i \beta_1}{3} (2q - l_2) \right]. \quad (3.55)$$

Las funciones de nuestros interés son aquellas que intervienen el triplete del hamiltoniano (??) bajo las condiciones de los acoplamientos (??). Estudiamos la definición (??) que acabamos de exponer para estas tres soluciones en varios casos que se mencionan a continuación:

1. Ángulo crítico $\theta = \theta_c$ con simetría bajo inversión temporal.
2. Configuración ligeramente perturbada alrededor del punto triple, en otras palabras, $F(\Delta_s/\Delta_d) \mapsto F(\Delta_s/\Delta_d) + \delta$.
3. Configuración con ángulo crítico y un campo magnético aplicado con la sustitución mínima $\Delta_h \mapsto \Delta_h e^{i\Phi}$.

A continuación mostramos los retratos de $W(l_1, l_2; \beta_1, \beta_2)$ para estos casos, pero debemos introducir algunas aclaraciones sobre la notación que empleamos. Denotamos al espacio de Hilbert de estados localizados por \mathcal{H} ; los elementos de esta base pueden visualizarse como posiciones y por tanto \mathcal{H} puede asociarse con el espacio de configuraciones X . Por otro lado, llamemos \mathcal{C} al espacio de fases propias que corresponden a \mathcal{H} bajo una transformación finita de Fourier, identificando al espacio \mathcal{C} con el espacio de momentos P . La cuadrícula empleada para dibujar el espacio fase es de 6×6 . Las etiquetas para las filas de arriba hacia abajo son: $(k, q) = (1, 1), (2, 1), (3, 1), (1, 2), (2, 2), (3, 2)$, que corresponden a las fases propias de $C_3 \times Z_2$. Las columnas denotan los sitios del polímero así que las etiquetas de izquierda a derecha son: $(m, n) = (1, 1), (2, 1), (3, 1), (1, 2), (2, 2), (3, 2)$. La figura ?? muestra los retratos de la función de Wigner para los tres casos antes mencionados. Los recuadros (a)-(c) corresponde al ángulo crítico $\theta = \theta_c$, $\Delta_h/\Delta_d = 1.9$

y combinaciones lineales arbitrarias de los estados ortogonales degenerados. Podemos observar una ocupación completa de la cuadrícula. Los recuadros (d)-(f) muestran una configuración con $\theta \neq \theta_c$, $\Delta_s = F(1.9) + 0.1$. Podemos visualizar la separación los dos dobletes dibujados en (d) y (f) y el singulete (f) donde éste último solo muestra dos franjas. Finalmente, en los recuadros (g)-(i) tenemos el triplete bajo el campo magnético. El soporte de las funciones W en este caso no se intersectan entre sí. Los parámetros de este retraso son: $\theta = \theta_c$, $\Delta_h/\Delta_s = 1.9$ pero con un pequeño rompimiento de la simetría bajo inversión temporal $\Psi = 10^{-19} \times \pi/2$ con lo cual las dos representaciones conjugadas de C_3 tienen diferente energía aunque cercanas entre sí $\Delta E \sim 10^{-11}$.

La simetría escondida emerge si nos fijamos en la primera y tercera fila de la figura ???. La combinación lineal de los estados que forman el triplete llenan el espacio fase en varias configuraciones con la misma energía. Consideramos solo el semiplano inferior debido a que está correlacionado con el semiplano superior, como se nota si combinamos los cuadros (g)-(i) con diferentes coeficientes. Los cuadros (d) y (e) se consiguen por combinación de los cuadros (g) e (i). Las filas (3,1) y ((3,2) de (d) y (e) no están vacíos debido a términos cruzados en W lo que puede ser considerarse como la versión discreta de la llamada *cat's smile* [?].

3.7 Funciones propias y corrientes discretas

De la definición de corriente y usando el hamiltoniano de un solo electrón podemos escribir la corriente \mathbf{j} de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{x}) &= \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^*(\mathbf{x}) \vec{\nabla} \psi(\mathbf{x})) - \frac{e}{mc} \mathbf{A} |\psi|^2 \\ &= \frac{\hbar}{m} \rho \nabla(S/\hbar) - \frac{e\rho}{mc} \mathbf{A}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Sin embargo, hay que ser más cuidadosos con esta definición para el caso discreto. Deducimos la dependencia de \mathbf{j} con respecto a n . Hay que notar que la corriente \mathbf{j} siempre yace sobre el plano molecular. Usamos el hamiltoniano de amarre fuerte (??) para esta deducción, en nuestro caso la corriente está relacionada con el flujo de probabilidad y la ecuación de continuidad es una expresión que involucra \mathbf{j} con la densidad de probabilidad $|\psi|^2$. Empecemos con las soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y su complejo conjugado:

$$\begin{aligned} \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \Psi &= 0 \\ \Psi \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H^* \right) \Psi^* &= 0. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Sumando estas dos ecuaciones obtenemos lo siguiente:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \Psi^* H \Psi - \Psi H^* \Psi^*. \quad (3.58)$$

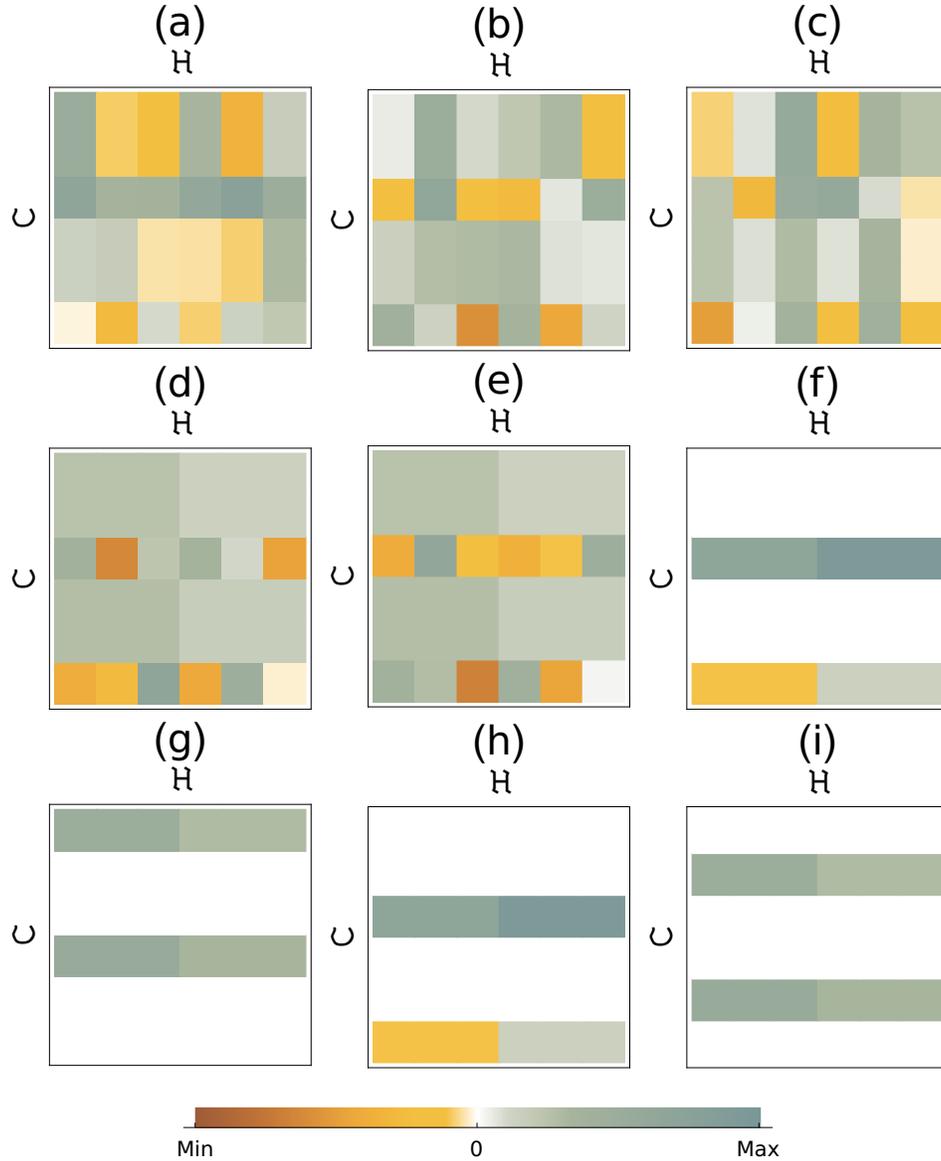


Figura 3.12: Espacio fase discreto de los estados triplete. Los recuadros (a)-(c) corresponden al sistema con simetría bajo inversión temporal, $\theta = \theta_c$ y $\Delta_h/\Delta_d = 1.9$. Una combinación lineal de estos recuadros revela una estructura invariante de por lo menos tres filas de píxeles, con probabilidades de ocupación arbitrarias. Las casillas (d),(e) muestran el estado singulete y (f) el estado singulete del sistema con una perturbación pequeña sobre el acoplamiento tipo estrella Δ_s ; el cuadro (f) muestra franjas con probabilidad cero (celdas de color blanco, ver código de color) para un estado con una fase de C_3 bien definida. Los recuadros (g)-(i) exhiben la función de Wigner cuando se rompe la simetría bajo inversión temporal (*i.e.* flujo magnético) en donde también podemos observar que sólo las funciones propias de C_3 son permitidas. El espacio de Hilbert de las funciones de onda localizadas esta denotado por \mathcal{H} y su transformada de Fourier por \mathcal{C} .

Recordemos que en el caso discreto, un estado propio del sistema $|\Psi, t\rangle$ se puede escribir como combinación lineal de la base $|n\rangle$ de estados atómicos localizados en los vértices del hexágono:

$$|\Psi, t\rangle = \sum_{n=1}^6 \psi_n(t) |n\rangle, \quad (3.59)$$

de esta manera la ecuación (??) se puede reexpresar usando el hamiltoniano (??) para cada ψ_n como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)|^2 &= \psi_n^*(t) [\epsilon\phi_n(t) + \sum_{k=1}^3 (\Delta_k \psi_{n+k}(t) + \Delta_k^* \psi_{n-k}(t))] \\ &\quad - \psi_n(t) [\epsilon\psi_n^*(t) + \sum_{k=1}^3 (\Delta_k^* \psi_{n+k}^*(t) + \Delta_k \psi_{n-k}^*(t))] \\ &= \sum_{k=1}^3 [\Delta_k \psi_n^*(t) \psi_{n+k}(t) + \Delta_k^* \psi_n^*(t) \psi_{n-k}^*(t) - \Delta_k^* \psi_n(t) \psi_{n+k}^*(t) - \Delta_k \psi_n(t) \psi_{n-k}^*(t)]. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Suponemos acoplamientos complejos $\Delta_k = |\Delta_k| e^{i\phi_k}$ para incluir el campo magnético tenemos:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)|^2 &= \sum_{k=1}^3 |\Delta_k| \{ e^{i\phi_k} [\psi_n^*(t) \psi_{n+k}(t) - \psi_n(t) \psi_{n-k}^*(t)] \\ &\quad + e^{-i\phi_k} [\psi_n^*(t) \psi_{n-k}(t) - \psi_n(t) \psi_{n+k}^*(t)] \}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Es importante mencionar que el hamiltoniano es un operador hermitiano que actúa sobre un espacio de Hilbert de dimensión seis y el teorema de la divergencia en el caso discreto exige la suma sobre los sitios del anillo. De la ecuación anterior (??), se puede verificar la versión discreta de la ecuación de continuidad: vemos que al sumar sobre los sitios n , la parte izquierda de la ecuación (??), para el caso estático, se anula debido a la conservación de la probabilidad

$$i\hbar \sum_{n=1}^6 \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)|^2 = i\hbar \frac{d}{dt} Q = 0, \quad (3.62)$$

donde Q denota la probabilidad total. Por otro lado, la parte derecha de (??) es cero debido a la hermiticidad del hamiltoniano, esto se prueba a continuación:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=1}^6 |\psi_n(t)|^2 = \sum_{k=1}^3 |\Delta_k| \\ & \times \left\{ e^{i\phi_k} \sum_{n=1}^6 [\psi_n^*(t) \psi_{n+k}(t) - \psi_n(t) \psi_{n+k}^*(t)] + e^{-i\phi_k} \sum_{n=1}^6 [\psi_n^* \psi_{n-k}(t) - \psi_n(t) \psi_{n+k}^*(t)] \right\} \\ & = \sum_{k=1}^6 \sum_{n=1}^6 |\Delta_k| \{ e^{i\phi_k} [|\psi_n \psi_{n+k}| e^{i(\chi_{n+k} - \chi_n)} - |\psi_n \psi_{n-k}| e^{i(\chi_n - \chi_{n-k})}] \\ & + e^{-i\phi_k} [|\psi_n \psi_{n-k}| e^{i(\chi_n - \chi_{n+k})} - |\psi_n \psi_{n+k}| e^{i\chi_n - \chi_{n+k}}] \} = \sum_{n,m=1}^6 (\psi_n H_{mn}^* \psi_m^* - \psi_n H_{nm} \psi_m^*) = (3.63) \end{aligned}$$

en donde hemos tomado $\psi_n = |\psi_n|e^{i\chi_n}$. Esto nos indica que el término de la derecha de (??) se debe expresar como un término de corriente de una ecuación de continuidad

$$i\hbar \sum_{k=1}^3 (J_{n+k}^{(k)} - J_n^{(k)})\alpha_k \quad (3.64)$$

que deberá ser cero cuando

$$\sum_{n=1}^6 j_{n+k} = \sum_{n=1}^6 j_n, \quad j_n = \sum_{k=1}^3 j_n^{(k)}, \quad (3.65)$$

donde $K = 1, 2, 3$ debido a la periodicidad (mod 6). Esto esta en concordancia con el teorema de la divergencia. Una expresión adecuada para $j_n^{(k)}$ necesita un poco de pasos algebraicos extras. Reexpresando el término derecho de (??)

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^3 |\Delta_k| \{e^{i\phi_k}(\psi_n^* \psi_{n+k} - \psi_n \psi_{n-k}^*) + e^{-i\phi_k}(\psi_n^* \psi_{n-k} - \psi_n \psi_{n+k}^*)\} \\ &= \sum_{k=1}^3 |\Delta_k| \{(e^{i\phi_k} \psi_n^* \psi_{n+k} - e^{-i\phi_k} \psi_n \psi_{n+k}^*) - (e^{i\phi_k} \psi_{n-k}^* \psi_n - e^{-i\phi_k} \psi_{n-k} \psi_n^*)\} \end{aligned} \quad (3.66)$$

y podemos notar que coincide con la ecuación (??) si

$$|\Delta_k| = \alpha_k \quad (3.67)$$

junto con

$$\begin{aligned} j_n^{(k)} &= \frac{1}{i\hbar} (e^{i\phi_k} \psi_{n-k}^* \psi_n - e^{-i\phi_k} \psi_{n-k} \psi_n^*) \\ &= \frac{2}{\hbar} \text{Im}(e^{i\phi_k} \psi_{n-k}^* \psi_n). \end{aligned} \quad (3.68)$$

Para las funciones propias, recuperamos lo siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t} (|\psi_n(t)|^2) = 0, \quad \sum_{k=1}^3 (j_{n+k}^{(k)} - j_n^{(k)}) = 0. \quad (3.69)$$

Escribimos la función de onda estacionaria como $\psi_n(t) = \varphi_n e^{-iE_q t/\hbar}$ para obtener la corriente que es independiente de t

$$j_n = \frac{2}{\hbar} \text{Im} \left(\sum_{k=1}^3 e^{i\phi_k} \varphi_{n-k}^* \varphi_n \right). \quad (3.70)$$

Esto representa una corriente estacionaria relacionada a k vecinos. Para el Benceno y Boraceno las corrientes se presentan el al figura ?? y figura ?? para el caso particular de primeros vecinos, es decir, $K = 1$ y $\varphi_n \in \mathbb{R}$.

3.8 Aplicación a la molécula de boraceno

Con el mismo formalismo que se abordó a la molécula de benceno, podemos ilustrar el ejemplo para el boraceno. Si bien su estructura geométrica también corresponde a un hexágono, se consideró la descomposición del grupo C_6 en términos de C_3 y C_2 .

3.8.1 Introducción de múltiples vecinos en el esquema de C_3

En esta sección estudiamos un modelo con una simetría triangular para el boraceno. Como se estudió en la sección ??, el grupo C_6 puede descomponerse en C_3 y C_2 :

$$C_6 = C_3 \times C_2 = \{\mathbf{1}, \tau, \tau^2\} \times \{\mathbf{1}, P\}, \quad \tau^3 = \mathbf{1}, \quad P^2 = \mathbf{1}.$$

Notamos que $T^2 = \tau$, ya que τ representa una rotación de $2\pi/3$ radianes alrededor del centro del hexágono, y P permuta los sitios de boro con los de nitrógeno. Sólo los centros de N (nitrógeno) pueden intercambiarse; similarmente, los centros de B (boro) tiene permitidos los intercambios entre ellos. Las energías en sitio para los orbitales de valencia son diferentes: $E_B = \epsilon_1$, $E_N = \epsilon_2$. En cuanto a los acoplamientos, la simetría C_3 se conserva si Δ_1 representa el acoplamiento N-B (primeros vecinos), Δ_2^+ el acoplamiento B-B, Δ_2^- N-N y Δ_3 el acoplamiento N-B entre sitios ubicados en vértices opuestos, los cuales, de acuerdo a la geometría, deberán ser iguales para las tres posibilidades. El hamiltoniano resultante es:

$$H \doteq \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \Delta_2^+ & \Delta_2^+ & \Delta_1 & \Delta_3 & \Delta_1 \\ \Delta_2^+ & \epsilon_1 & \Delta_2^+ & \Delta_1 & \Delta_1 & \Delta_3 \\ \Delta_2^+ & \Delta_2^+ & \epsilon_1 & \Delta_3 & \Delta_1 & \Delta_1 \\ \Delta_1 & \Delta_1 & \Delta_3 & \epsilon_2 & \Delta_2^- & \Delta_2^- \\ \Delta_3 & \Delta_1 & \Delta_1 & \Delta_2^- & \epsilon_2 & \Delta_2^- \\ \Delta_1 & \Delta_3 & \Delta_1 & \Delta_2^- & \Delta_2^- & \epsilon_2 \end{pmatrix}. \quad (3.71)$$

La operación $P|N\rangle = |B\rangle$, $P|B\rangle = |N\rangle$ en forma matricial esta representado como:

$$P \doteq \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1}_{3 \times 3} \\ \mathbf{1}_{3 \times 3} & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes \sigma_1, \quad (3.72)$$

donde σ_i denota las matrices de Pauli. La representación matricial del operador de traslación τ en C_3 es:

$$\tau|N_k\rangle = |N_{(k-1) \bmod 3}\rangle, \quad \tau|B_k\rangle = |B_{(k-1) \bmod 6}\rangle$$

$$\tau \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1}_{2 \times 2}. \quad (3.73)$$

Usaremos la notación $|n, m\rangle$ para denotar los estados localizados donde n denota el número de subtriángulo (1 para boro y 2 para nitrógeno) y el índice m representa la posición interna en cada subtriángulo. Veamos como opera P y τ en esta notación:

$$P|m, n\rangle = |(n+1) \bmod 2, m\rangle, \quad \tau|n, m\rangle = |n, (m+1) \bmod 3\rangle, \quad [\tau, P] = 0. \quad (3.74)$$

El hamiltoniano debe expresarse como una suma de operadores, y por lo tanto es necesario definir otras matrices:

$$Q_{\pm} = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes \sigma_{\pm} \quad \text{y} \quad \Pi_{\pm} = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes (1/2)(\mathbf{1}_{2 \times 2} \pm \sigma_3), \quad (3.75)$$

con $\sigma_{\pm} = (1/2)(\sigma_1 \pm i\sigma_2)$. El hamiltoniano H se puede expresar como una función de los operadores Π_{\pm} , τ and Q_{\pm} :

$$H = \Pi_+(\epsilon_1 + \tau\Delta_2^+ + \tau^\dagger\Delta_2^+) + \Pi_-(\epsilon_2 + \tau\Delta_2^- + \tau^\dagger\Delta_2^-) \\ + Q_+(\Delta_1 + \Delta_1\tau + \Delta_3\tau^\dagger) + Q_-(\Delta_1 + \Delta_1\tau^\dagger + \Delta_3\tau), \quad (3.76)$$

donde las siguientes relaciones de conmutación y anticonmutación se satisfacen:

$$Q_+^2 = Q_-^2 = 0, \quad [Q_{\pm}, \tau^n] = 0, \quad [\Pi_{\pm}, \tau] = 0 \\ [Q_+, Q_-] = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes [\sigma_+, \sigma_-] = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes \sigma_3 = \Pi_+ - \Pi_- = \Sigma_3 \\ \{Q_+, Q_-\} = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes \{\sigma_+, \sigma_-\} = \Pi_+ + \Pi_- = \mathbf{1}_{6 \times 6} \\ [Q_{\pm}, P] = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes [\sigma_{\pm}, \sigma_1] = \pm i\mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes [\sigma_2, \sigma_1] = \mp 2i^2\mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes \sigma_3 = \pm 2\Sigma_3 \\ [Q_{\pm}, \Pi_{\pm}] = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes [\sigma_{\pm}, \pm \frac{1}{2}\sigma_3] = \pm \frac{1}{2}\mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes (\mp 2\sigma_{\pm}) = \pm (\mp Q_{\pm}) \\ \{Q_{\pm}, \Pi_{\pm}\} = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes \{\sigma_{\pm}, (\mathbf{1}_{2 \times 2} \pm \sigma_3)/2\} = \mathbf{1}_{3 \times 3} \otimes \sigma_{\pm} = Q_{\pm} \quad (3.77)$$

Este problema puede resolverse de manera simple usando las fases propias de C_3 , las cuales resultan ser

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{n=1}^2 \sum_{m=1}^3 e^{-i\frac{2\pi lm}{3}} |n, m\rangle, \quad l = 1, 2, 3 \\ |l, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{m=1}^3 e^{-i\frac{2\pi lm}{3}} |n, m\rangle, \quad \langle l', n' | l, n \rangle = \delta_{l'l} \delta_{n'n} \quad (3.78)$$

Los elementos de la base $\{|l\rangle\}$ son estados propios del operador de traslación τ

$$\tau|l\rangle = e^{i\frac{2\pi l}{3}} |l\rangle, \quad l = 1, 2, 3. \quad (3.79)$$

El hamiltoniano opera sobre el estado $|l\rangle$ como se muestra a continuación

$$H|l\rangle = \left\{ \Pi_+ \left[\epsilon_1 + 2\Delta_2^+ \cos\left(\frac{2\pi l}{3}\right) \right] + \Pi_- \left[\epsilon_2 + 2\Delta_2^- \cos\left(\frac{2\pi l}{3}\right) \right] \right. \\ \left. + Q_+ \left[\Delta_1 + \Delta_1 e^{i\frac{2\pi l}{3}} + \Delta_3 e^{-i\frac{2\pi l}{3}} \right] \right. \\ \left. + Q_- \left[\Delta_1 + \Delta_1 e^{-i\frac{2\pi l}{3}} + \Delta_3 e^{i\frac{2\pi l}{3}} \right] \right\} |l\rangle. \quad (3.80)$$

Los operadores Q_{\pm} and Π_{\pm} actuando sobre $|l\rangle$ dando los resultados:

$$\begin{aligned}
\Pi_+|l\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m=1}^3 e^{i\frac{2\pi lm}{3}} |1, m\rangle = \sqrt{2}|l, 1\rangle \\
\Pi_-|l\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m=1}^3 e^{i\frac{2\pi lm}{3}} |2, m\rangle = \sqrt{2}|l, 2\rangle \\
Q_+|l\rangle &= \sqrt{2}|l, 1\rangle \\
Q_-|l\rangle &= \sqrt{2}|l, 2\rangle \\
\tau|l, n\rangle &= e^{i\frac{2\pi l}{3}} |l, n\rangle.
\end{aligned} \tag{3.81}$$

Finalmente el hamiltoniano opera sobre $\{|l, n\rangle\}$ de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
H|l, 1\rangle &= \left[\epsilon_1 + 2\Delta_2^+ \cos\left(\frac{2\pi l}{3}\right) \right] |l, 1\rangle + \left[\Delta_1 + \Delta_1 e^{-i\frac{2\pi l}{3}} + \Delta_3 e^{i\frac{2\pi l}{3}} \right] |l, 2\rangle \\
H|l, 2\rangle &= \left[\epsilon_2 + 2\Delta_2^- \cos\left(\frac{2\pi l}{3}\right) \right] |l, 2\rangle + \left[\Delta_1 + \Delta_1 e^{i\frac{2\pi l}{3}} + \Delta_3 e^{-i\frac{2\pi l}{3}} \right] |l, 1\rangle,
\end{aligned} \tag{3.82}$$

lo que nos lleva a la siguiente representación matricial:

$$H^{(l)} \doteq \begin{pmatrix} \epsilon_1 + 2\Delta_2^+ \cos\left(\frac{2\pi l}{3}\right) & \Delta_1 + \Delta_1 e^{-i\frac{2\pi l}{3}} + \Delta_3 e^{i\frac{2\pi l}{3}} \\ \Delta_1 + \Delta_1 e^{i\frac{2\pi l}{3}} + \Delta_3 e^{-i\frac{2\pi l}{3}} & \epsilon_2 + 2\Delta_2^- \cos\left(\frac{2\pi l}{3}\right) \end{pmatrix} \tag{3.83}$$

donde $l = 1, 2, 3$ y puede ser resuelto mediante radicales. Las funciones de onda están dadas de manera explícita:

$$N^{(l)} [|l, 1\rangle - A^{(l)}|l, 2\rangle], \quad N^{(l)} [|l, 1\rangle + (A^{(l)})^*|l, 2\rangle]. \tag{3.84}$$

Escribiendo estas funciones en términos de los elementos de matriz de $H_{ij}^{(l)}$ escrita arriba, tenemos:

$$N^{(l)} = \frac{1}{\sqrt{1 + |A^{(l)}|^2}}, \quad A^{(l)} = \frac{\frac{H_{22}^{(l)} - H_{11}^{(l)}}{2} + \sqrt{\left(\frac{H_{22}^{(l)} - H_{11}^{(l)}}{2}\right)^2 + |H_{12}^{(l)}|^2}}{(H_{12}^{(l)})^*}. \tag{3.85}$$

Estas expresiones pueden ser vistas como soluciones analíticas las cuales, hasta donde el autor sepa, no se han proporcionado para la molécula de boraceno.

3.8.2 Resultados numéricos para el boraceno

Seguindo el método empleado para la molécula de benceno de la sección ??, analizamos los resultados numéricos para el boraceno. Los parámetros geométricos de la moléculas

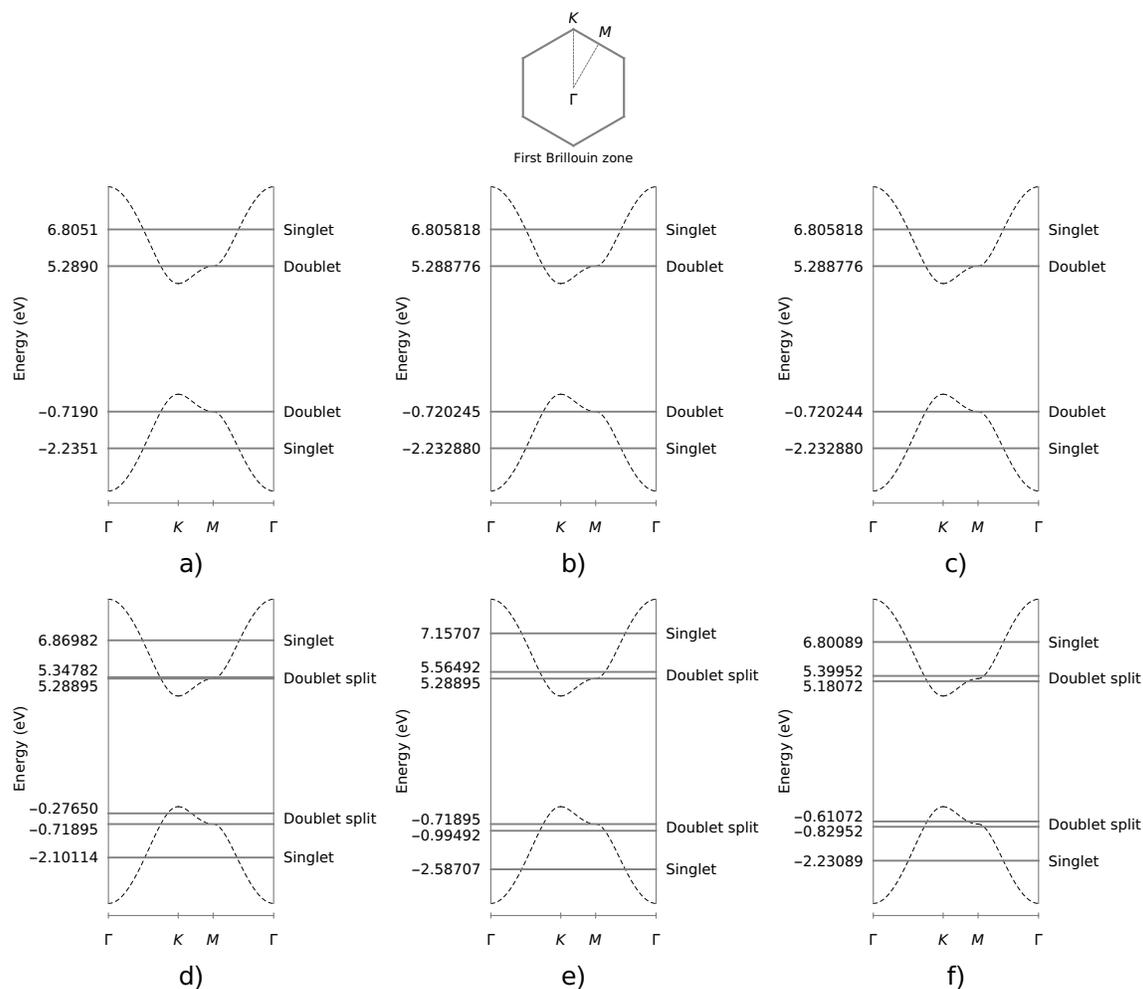


Figura 3.13: Niveles de energía del boraceno. Se uso como distancia entre sitios el valor de 1.43 \AA , y como energías en sitio $\epsilon_1 = 0\text{eV}$ y $\epsilon_2 = 4.57\text{eV}$. La relación de dispersión del nitruro de boro es incluido como guía. a) Modelo de primeros vecinos. La estructura de los niveles de energía (de arriba hacia abajo) es: singlete, doblete, doblete, singlete; presentando así una simetría bajo reflexión al igual que el benceno. b) Modelo de segundos vecinos. c) Modelo de terceros vecinos. La última fila de recuadros muestra el desdoblamiento de los dobletes en un modelo de primeros vecinos por tres vías: d) Inclusión de un defecto incrementando la energía de un sólo sitio por 0.7 eV . e) Introducción de defectos en los acoplamientos $\Delta_{(1,2)}$, $\Delta_{(1,6)}$, $\Delta_{(6,1)}$ y $\Delta_{(2,1)}$ mediante un incremento en su energía de 0.3 eV . f) Inclusión de un campo magnético de $B = 8.5855 \times 10^{-3}\text{G}$.

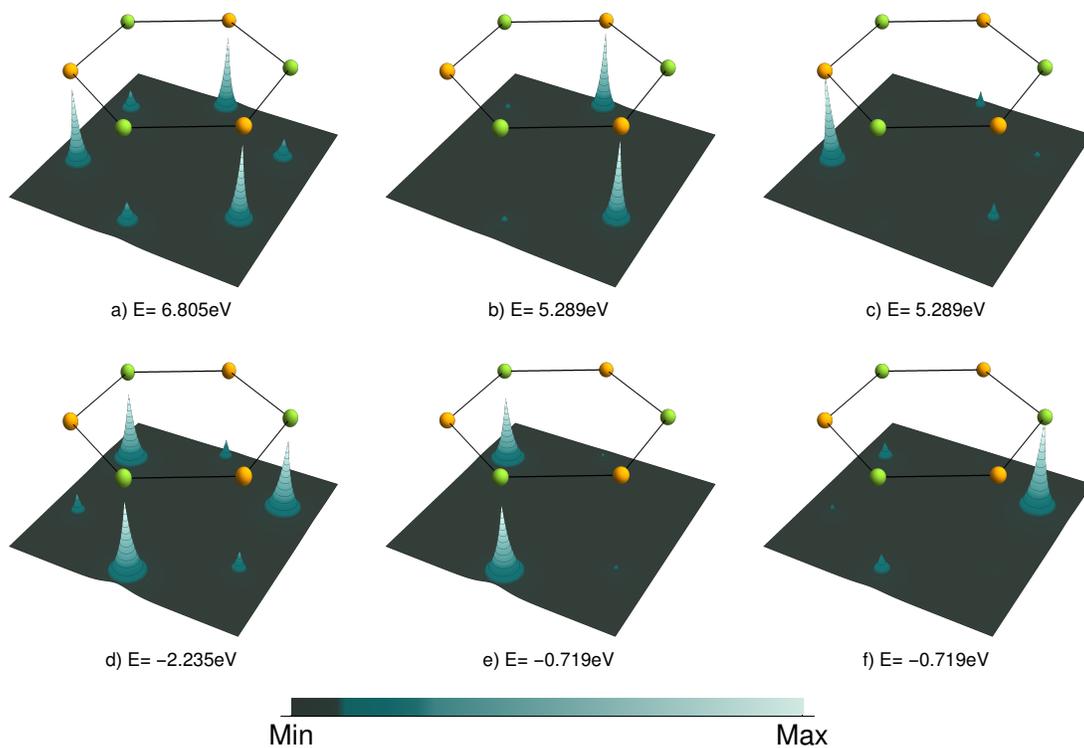


Figura 3.14: Funciones propias del modelo de amarre fuerte a primeros vecinos para de la molécula de boraceno. Las esferas de color amarillo representan los átomos de nitrógeno mientras que las verdes simbolizan los átomos de boro. Las casillas a) y d) muestran los estados singuletes. Mientras que b), c) y e), f) muestran las funciones de los dobletes degenerados.

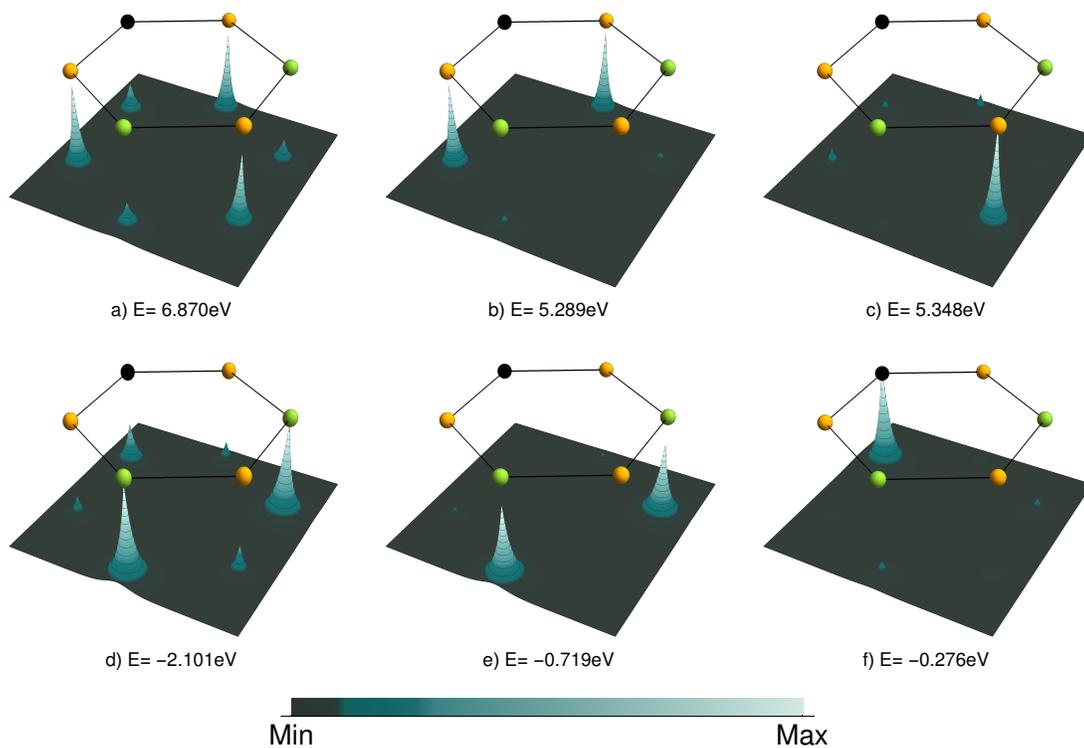


Figura 3.15: Funciones propias del anillo de boraceno con la simetría C_3 rota por la introducción de un defecto de 0.7 eV en uno de los sitios de boro. Las esferas de color amarillo denotan átomos de nitrógeno, las verdes representan átomos de boro y las esferas negras el defecto en sitio. Los recuadros a) y b) muestran los estados singuletes. b),c) y e),f) ilustran la función de onda de los dobletes desdoblados.

así como las energías en sitio se pueden encontrar en [? ? ? ?]. La longitud de evanescencia para N y B son $\lambda_N = 2a_0/7$ y $\lambda_B = 2a_0/5$ respectivamente. El acoplamiento Δ_0 se obtiene del ancho de banda de la relación de dispersión del nitruro de boro.

El espectro del boraceno se muestra en la figura ?? junto con con la relación de dispersión del nitruro de boro como referencia visual. Los recuadros a), b) c) corresponden a primeros, segundos y terceros vecinos del modelo, respectivamente. Las correcciones a las energías debido a la incorporación de todos los acoplamientos a pares son despreciables en comparación al modelo de primeros vecinos. La segunda fila de la figura ?? muestra el desdoblamiento de los dobletes de tres formas diferentes: la casilla d) muestra el espectro del modelo con una deformación en sitio; la casilla e) exhibe la separación de dobletes debido a defectos en los acoplamientos $\Delta_{(1,2)}$, $\Delta_{(1,6)}$, $\Delta_{(6,1)}$ y $\Delta_{(6,1)}$; y finalmente el recuadro f) muestra el desdoblamiento provocado por la introducción de un campo magnético perpendicular al anillo. Las seis funciones propias del anillo se visualizan en la figura ?? para boraceno usando primeros vecinos y en la figura ?? para boraceno con la simetría C_3 rota.

3.9 Supersimetría

Las dos copias del espectro de un triángulo que aparecen reflejados en el benceno y boraceno se pueden explicar encontrando la supersimetría dinámica (SUSY por su nombre en inglés) del anillo. Para el oscilador de Dirac, la supersimetría es conocida, como se puede constatar en las siguientes referencias [? ?]. En nuestro sistema, se puede desarrollar un tratamiento análogo para definir una super álgebra. Comencemos escribiendo el hamiltoniano de la ecuación (??) como se muestra a continuación:

$$H = \hat{\Pi}_+ (\epsilon_1 + \tau\Delta_2^+ + \tau^\dagger\Delta_2^+) + \hat{\Pi}_- (\epsilon_2 + \tau\Delta_2^- + \tau^\dagger\Delta_2^-) + \hat{C}_1 = \hat{\epsilon}_0 + \hat{\mu}\Sigma_3 + \hat{C}_1, \quad (3.86)$$

donde los operadores \hat{C}_1 , $\hat{\epsilon}_0$ y $\hat{\mu}$ se definen como

$$\begin{aligned} \hat{C}_1 &= Q_+ (\Delta_1 + \Delta_1\tau + \Delta_3\tau^\dagger) + Q_- (\Delta_1 + \Delta_1\tau^\dagger + \Delta_3\tau) \\ \hat{\epsilon}_0 &= \frac{1}{2} [(\epsilon_1 + \epsilon_2)\mathbf{1}_{6\times 6} + \tau\Delta_2^+ + \tau^\dagger\Delta_2^+ + \tau\Delta_2^- + \tau^\dagger\Delta_2^-] \\ \hat{\mu} &= \frac{1}{2} [(\epsilon_1 - \epsilon_2)\mathbf{1}_{6\times 6} + \tau\Delta_2^+ + \tau^\dagger\Delta_2^+ - \tau\Delta_2^- - \tau^\dagger\Delta_2^-]. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Siguiendo la referencia [?] definimos el operador \hat{C}_2 :

$$\hat{C}_2 = -iQ_+\hat{a} + iQ_-\hat{a}^\dagger, \quad (3.88)$$

y la definición “bosónica” de los operadores a y a^\dagger como sigue:

$$\hat{a} = \Delta_1 + \Delta_1\tau + \Delta_3\tau^\dagger, \quad \hat{a}^\dagger = \Delta_1 + \Delta_1\tau^\dagger + \Delta_3\tau, \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 0 \quad . \quad (3.89)$$

Podemos verificar las relaciones de (anti)conmutación entre \hat{C}_1 y \hat{C}_2

$$\begin{aligned}
\{\hat{C}_1, \hat{C}_2\} &= 0, \\
\left[\hat{C}_i, \{\hat{C}_j, \hat{C}_k\}\right] &= 0, \quad i, j, k = 1, 2, 3 \\
\{\hat{C}_1, \hat{C}_1\} &= \{\hat{C}_2, \hat{C}_2\} = 2(\hat{a}\hat{a}^\dagger\Pi_+ + \hat{a}^\dagger\hat{a}\Pi_-), \\
\{\hat{\mu}\Sigma_3, \hat{C}_1\} &= \Sigma_3 Q_+ [\hat{\mu}, \hat{a}] + \Sigma_3 Q_- [\hat{\mu}, \hat{a}^\dagger].
\end{aligned} \tag{3.90}$$

Ahora, si \hat{a} y $\hat{\mu}$ conmutan, se puede definir una carga central $(H - \hat{\epsilon}_0)^2 - \hat{\mu}^2$ y se confirma la siguiente supersimetría:

$$\begin{aligned}
(H - \hat{\epsilon}_0)^2 &= (\hat{\mu}\Sigma_3 + \hat{C}_1)^2 = \hat{\mu}^2 + \hat{C}_1^2 \\
(H - \hat{\epsilon}_0)^2 - \hat{\mu}^2 &= a a^\dagger \Pi_+ + a^\dagger a \Pi_- \\
\{\hat{C}_1, \hat{C}_1\} &= \{\hat{C}_2, \hat{C}_2\} = 2[(H - \hat{\epsilon}_0)^2 - \hat{\mu}^2] \\
\{\hat{C}_i, \hat{C}_j\} &= 2\delta_{ij} [(H - \hat{\epsilon}_0)^2 - \hat{\mu}^2].
\end{aligned} \tag{3.91}$$

Dado que esta álgebra $S(2)$ es, no esperamos que las cargas $C_{1,2}$ relacionen los sectores bosónicos y fermiónicos de manera directa. En su lugar, conecta estados de la energía que se encuentren por debajo del nivel central (en el presente caso $\epsilon = 0$) con aquellos estados que se encuentren arriba de dicho nivel. En un sentido general, las supercargas relacionan *estados vestidos (dressed states)*, hechos de dímeros y trímeros. Cuando se busca el operador que relacione sectores bosónicos y fermiónicos *desvestidos*, encontramos que Q_\pm es el responsable de dicha operación. En particular, a, a^\dagger son una realización abeliana de los operadores de escalera que son admisibles en nuestra representación finita 3×3 , mientras que σ_i constituye los sectores *desvestidos*, como se muestra en $\{\Sigma_i, \Sigma_j\} = 2\delta_{i,j} \mathbf{1}_{4 \times 4}$. A continuación estudiamos algunas consecuencias interesantes que se pueden estudiar del modelo propuesto:

- Si $[\hat{\mu}, \hat{a}] \neq 0$ (y como consecuencia $[\hat{\mu}, \hat{a}^\dagger] \neq 0$) entonces las relaciones $\{\hat{C}_i, \hat{C}_j\} = 2\delta_{ij} [(H - \hat{\epsilon}_0)^2 - \hat{\mu}^2]$ se rompen y el término $(H - \hat{\epsilon}_0)^2 - \hat{\mu}^2$ ya no se puede usar como carga central, rompiendo de esta manera SUSY.
- Si $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \neq 0$ (por ejemplo el álgebra de Heisenberg y otras álgebras de Cartan Heisenberg) la supersimetría SUSY dinámica se conserva.
- Para cada subtriángulo, si el grupo de simetría C_3 prevalece entonces $\hat{\mu} \propto \mathbf{1}$ y $[\hat{\mu}, a] = 0$, pero si existen acoplamiento intertriangulares que rompen la simetría C_3 de manera global entonces en general $[a, a^\dagger] \neq 0$. La supersimetría se preserva incluso si C_3 se rompe de manera global, pero no en la simetría de cada subtriángulo.

Debido a $(H - \hat{\epsilon}_0)^2 - \hat{\mu}^2$, la supersimetría dinámica nos lleva a tener una simetría de reflexión entre pares de niveles de energía con centros geométricos variables de acuerdo a $l = 1, 2, 3$. Estos centros siempre suman $3(\epsilon_1 + \epsilon_2)/2$. Dado que C_3 no está roto en

las moléculas de benceno y boraceno, podemos concluir que estos compuestos disfrutan SUSY en su espectro.

Vale la pena notar que una generalización del álgebra (??) para casos de sistemas deformados puede ser de utilidad para tratar con las configuraciones asimétrica de la molécula, por ejemplo, si se aplican vibraciones o estiramientos externos. En este escenario, el sector C_3 ya no es válido. Además, la típica promoción bosónica $[a, a^\dagger] = 1$ no funciona en dimensiones finitas porque el álgebra de Heisenberg es no compacta. Las posibilidades que se pueden considerar en este caso son las formas de Cartan de álgebras compactas como J_\pm para $\mathfrak{su}(2)$ con $j = 1$ o los operadores de hipercarga U_\pm, V_\pm para una de las representaciones irreducibles fundamentales de $\mathfrak{su}(3)$.

3.10 Sistema de trímeros $C_3 \times C_3$

Sabemos que es posible emular el efecto de un flujo de campo magnético de manera efectiva en una red cristalina. Para lograrlo necesitamos que la matriz que describe dicha red contenga elementos de acoplamiento complejo y que no desaparezcan por medio de alguna transformación unitaria. Se han realizado trabajos con sitios de dímeros donde se muestra la posibilidad de generar acoplamientos de signo negativo[?], sin embargo, no es suficiente para nuestro cometido, y necesitamos dar más estructura a cada sitio. En las secciones ?? y ?? se analizaron sistemas con simetría C_6 la cual puede descomponerse en una parte dimérica Z_2 y otra parte correspondiente a la simetría de un triángulo equilátero C_3 ; sin embargo, con estas realizaciones no es posible obtener acoplamientos con fases no removibles mediante transformaciones unitarias. No obstante, sabemos que la transformación que diagonaliza el problema de un triángulo equilátero tiene elementos complejos; por lo cual es una buena idea proponer un sistema cuyos sitios posean simetría C_3 . Siguiendo el espíritu de los modelos estudiados en este capítulo, en esta sección proponemos la construcción de un trímero compuesto de otros tres trímeros, en otras palabras, un sistema $C_3 \times C_3$. La caracterización de este arreglo es útil para el estudio de las emulaciones de campo $SU(3)$ en la sección ??.

El esquema del sistema se muestra en la figura ?? en donde cada sitio A, B y C tiene una estructura propia. El hamiltoniano de este sistema es:

$$H = \begin{pmatrix} H_0 & \Delta_{AB} & \Delta_{AC} \\ \Delta_{AB}^\dagger & H_0 & \Delta_{BC} \\ \Delta_{AC}^\dagger & \Delta_{BC}^\dagger & H_0 \end{pmatrix}, \quad H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & \Delta & \Delta \\ \Delta & E_0 & \Delta \\ \Delta & \Delta & E_0 \end{pmatrix}, \quad (3.92)$$

donde $(\Delta_{lm})_{pq} = \Delta_{(lp,mq)}$ son las matrices de acoplamiento entre sitios de trímeros adyacentes, por ejemplo $\Delta_{(A2,B3)}$ representa el acoplamiento que existe entre el sitio 2 del trímero A con el sitio 3 del trímero B. Las matrices de acoplamientos están determinadas de la siguiente manera:

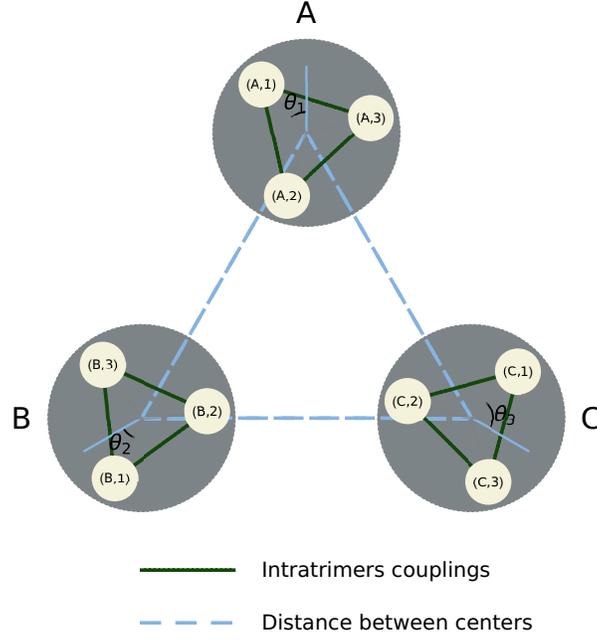


Figura 3.16: Este arreglo $C_3 \times C_3$ consiste en tres trímeros colocados en los vértice de un triángulo equilátero. Los trímeros están denotados por las letras A, B y C; mientras que los sitios internos de cada trímero se numeran del 1 al 3.

$$\Delta_{lm} = \begin{pmatrix} \Delta(l1,m1) & \Delta(l1,m2) & \Delta(l1,m3) \\ \Delta(l2,m1) & \Delta(l2,m2) & \Delta(l2,m3) \\ \Delta(l3,m1) & \Delta(l3,m2) & \Delta(l3,m3) \end{pmatrix} \quad (3.93)$$

La introducción de las fases en los términos de acoplamiento se realiza aplicando la siguiente transformación U sobre el hamiltoniano H :

$$U = \begin{pmatrix} U_{3 \times 3} & 0 & 0 \\ 0 & U_{3 \times 3} & 0 \\ 0 & 0 & U_{3 \times 3} \end{pmatrix}, \quad U_{3 \times 3} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \exp(2\pi i/3) & \exp(4\pi i/3) & 1 \\ \exp(4\pi i/3) & \exp(2\pi i/3) & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.94)$$

donde identificamos que $U_{3 \times 3}$ diagonaliza H_0 de la siguiente manera:

$$\tilde{H}_0 = U_{3 \times 3}^\dagger H_0 U_{3 \times 3} = \begin{pmatrix} \text{Doblete}_1 & 0 & 0 \\ 0 & \text{Doblete}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \text{Singulete} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 - \Delta & 0 & 0 \\ 0 & E_0 - \Delta & 0 \\ 0 & 0 & E_0 + 2\Delta \end{pmatrix}. \quad (3.95)$$

El hamiltoniano transformado \tilde{H} queda como sigue:

$$\tilde{H} = U^\dagger H U = \begin{pmatrix} U^\dagger H_0 U & U^\dagger \Delta_{AB} U & U^\dagger \Delta_{AC} U \\ U^\dagger \Delta_{AB}^\dagger U & U^\dagger H_0 U & U^\dagger \Delta_{BC} U \\ U^\dagger \Delta_{AC}^\dagger U & U^\dagger \Delta_{BC}^\dagger U & U^\dagger H_0 U \end{pmatrix}, \quad (3.96)$$

donde hemos usado la siguiente simplificación de notación $U_{3 \times 3} \rightarrow U$ dentro de la matriz. $U^\dagger H_0 U$ es diagonal y $U^\dagger \Delta_{lm} U$ son matrices con elementos complejos.

El resultado importante de esta sección es la presentación de los niveles de energía del sistema en función del ángulo de rotación de los trímeros. Por cuestiones prácticas, solo presentamos en la figura ?? las energías cuando dos ángulos están fijos y el tercero varía de 0 a $2\pi/3$. Podemos notar que para cierto valor específico del ángulo, ocurre un punto de cruce de niveles. En esta configuración, el ángulo de rotación de uno de los trímeros provoca que la simetría C_3 global se rompa pero al tener cada uno de los trímeros con su estructura interna intacta, esta simetría C_3 interna aún prevalece lo que se manifiesta en las degeneraciones presentes en el espectro. Más adelante en la sección ?? dicha degeneración provoca solapamientos de bandas en los espectros de una cadena de trímeros. Si ahora deformamos la estructura interna del trímero rompiendo su simetría C_3 , aparecen los nueve niveles esperados para un sistema de nueve sitios, como se muestra en la figura ??.

En este capítulo abordamos sistemas con diferentes grados de libertad internos. Estos sistemas se estudiaron bajo el formalismo de modelos de amarre fuerte del estado sólido en donde las funciones de onda localizadas toman el papel de los estados localizados en los sitios del arreglo. La descripción del hamiltoniano descrito en función de acoplamientos y operadores de simetría resulta muy general y esto nos permite tener flexibilidad en cuanto a las aplicaciones posibles: desde descripciones de sistemas moleculares como los casos del benceno y boraceno[?], hasta posibles implementaciones en arreglos artificiales. También estos modelos nos permiten estudiar, usando conceptos de teoría de grupos, propiedades matemáticas que poseen los espectros de estos cristales como la supersimetría en el caso de los anillos de benceno y boraceno y la construcción de un espacio fase de dimensión par que explique las degeneraciones accidentales del sistema $C_3 \times Z_2$. En conclusión, la familiaridad con estos sistemas nos ha permitido construir y entender sistemas más elaborados, los cuales se abordan el siguiente capítulo.

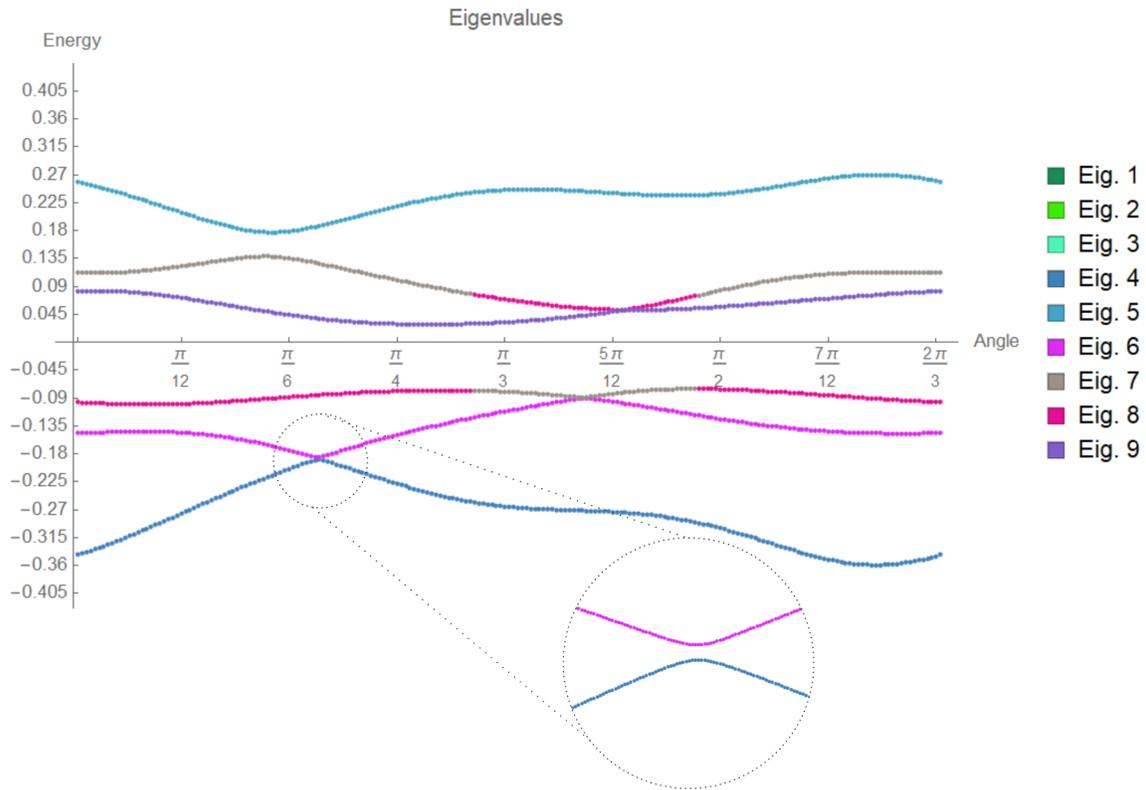


Figura 3.17: Niveles de energía en función del ángulo de rotación. Uno de los trímeros rota, mientras los otros dos permanecen fijos. Podemos ver sólo seis niveles, esto indica la existencia de estados degenerados. Para cierto valor del ángulo, emerge un punto de cruce.

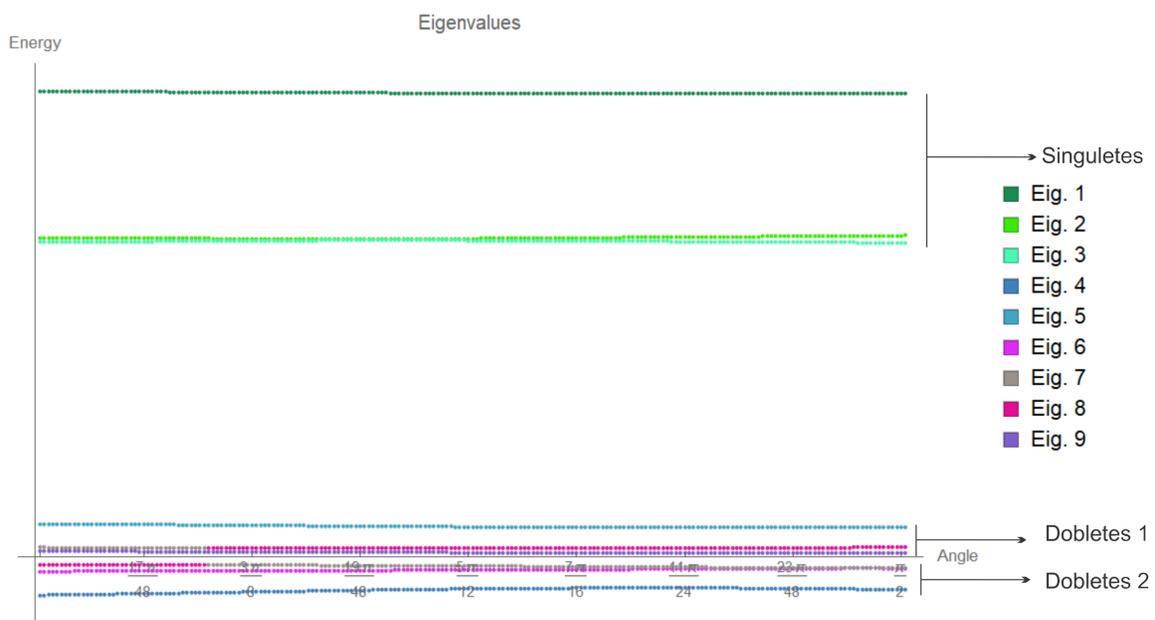


Figura 3.18: Separación de niveles debido al rompimiento de simetría interna C_3 . Nueve niveles de energía emergen.

Capítulo 4

Construcción de redes de amarre fuerte con N grados de libertad: Caso $SU(N)$

La realización de teorías de Yang-Mills es el principal objetivo de las emulaciones espectrales cuánticas. En el modelo estándar de partículas y campos, los grados de libertad internos tales como el color son los responsables de las subestructuras de los nucleones y, en general, de los bariones y mesones. Tangencialmente, *lattice QCD* es una descripción dinámica de tales teorías, donde el trabajo numérico está dedicado a mostrar la aparición del confinamiento del color.

En la literatura encontramos trabajos que muestran experimentos con fuentes atómicas [? ?] que hacen uso de niveles atómicos como grados internos de libertad. También existen artículos de realizaciones de campos de norma abelianos [? ?] en redes ópticas. Hasta donde sabemos, no hay intentos de producir estos modelos en una red homogénea, *i.e.* una discretización del espacio sin ninguna otra suposición que imponer un sólo estado cuántico por sitio. Es necesario enfatizar que los sistemas propuestos en este capítulo son realizables en experimentos con resonadores dieléctricos [? ?] y resonadores mecánicos [?] que sustenten un sólo estado atrapado.

4.1 Teoría general general en la red

En variable continua, el tratamiento usual incluye campos no abelianos $A_\mu = A_\mu^\sigma \tau_\sigma$, con el índice de espacio-tiempo μ, σ denotando el índice de grupo y τ representa los generadores de $SU(N)$. La introducción del acoplamiento mínimo para espacio y tiempo, asegura la invariancia de norma de una teoría que involucra partículas cargadas y campos bosónicos dinámicos.

$$p_\mu \mapsto p_\mu + gA_\mu, \quad \mathbf{p} \mapsto \mathbf{p} + g\mathbf{A}. \quad (4.1)$$

Esto se puede delimitar a campos estáticos donde la componente 0 es irrelevante (caso puramente magnético); como se expresa en la segunda relación de la ecuación anterior y es útil cuando consideramos realizaciones estáticas en cristales. Bajo la acción de un grupo unitario $U(N)$ tenemos la siguiente transformación (usamos $\hbar = 1$):

$$p_\mu \mapsto \tilde{p}_\mu = U^\dagger p_\mu U, \quad (4.2)$$

$$A_\mu \mapsto \tilde{A}_\mu = U A_\mu U^\dagger - \frac{i}{g} U \partial_\mu U^\dagger, \quad (4.3)$$

$$|\psi\rangle \mapsto U|\psi\rangle \quad (4.4)$$

y son tales que $p_\mu + gA_\mu \mapsto U^\dagger(p_\mu + g\tilde{A}_\mu)U$ permanece invariante, *i.e.* la transformación de A compensa la transformación unitaria de los operadores y estados físicos. Una formulación hamiltoniana estacionaria en primera cuantización necesita una ecuación tipo Scrödinger que provenga de p_0 , de tal forma que un problema espectral con invariancia de norma involucra la siguiente transformación:

$$\tilde{H} = U^\dagger H U, \quad \partial_0 U = 0 \quad (4.5)$$

y un campo estático tal que

$$A_0 = \text{constante}, \quad \tilde{\mathbf{A}} = U \mathbf{A} U^\dagger - \frac{i}{g} U \nabla U^\dagger. \quad (4.6)$$

Dado que los sistemas que tratamos aquí son redes, debemos considerar operadores de diferencia finita, pero entonces la introducción del acoplamiento mínimo debe ser apropiadamente incorporado en el hamiltoniano, con el objetivo de identificar la dependencia de H con respecto al campo A . Para hamiltonianos que dependen del operador de traslación T_i y vectores sobre la red \mathbf{R} , usamos la siguiente notación:

$$\mathbf{R} = \sum_{i=1}^m n_i \mathbf{a}_i \quad (4.7)$$

$$N_i |n_1, \dots, n_m\rangle = n_i |n_1, \dots, n_m\rangle, \quad (4.8)$$

$$T_i |n_1, \dots, n_i, \dots, n_m\rangle = |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_m\rangle. \quad (4.9)$$

donde \mathbf{a}_i denota los vectores primitivos y m el número de vectores primitivos del arreglo. En nuestras realizaciones, los estados de la red $|n_1, \dots, n_m\rangle$ están representados por las funciones de onda localizadas alrededor de los sitios (*e.g.* los modos atrapados dentro de una cavidad dieléctrica cilíndrica). En este lenguaje, el operador de traslación T tiene una forma diferencial

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | T_i | n_1, \dots, n_2 \rangle &= \langle \mathbf{r} | n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_2 \rangle \\ &= \langle \mathbf{r} - \mathbf{a}_i | n_1, \dots, n_m \rangle \\ &= \exp(-i \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{p}) \langle \mathbf{r} | n_1, \dots, n_m \rangle. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Es fácil adivinar que el acoplamiento mínimo deberá estar determinado por la exponencial compleja enfrente de T . En efecto, bajo una transformación de norma estática

$$\tilde{T}_i = \exp(-i\mathbf{a}_i \cdot U^\dagger \mathbf{p} U) = U^\dagger T_i U. \quad (4.11)$$

Más aún, una dependencia local de la transformación $U(N_1, \dots, N_m) \equiv U(\mathbf{N})$ nos permite escribir lo siguiente

$$\tilde{T}_i = U^\dagger(N_1, \dots, N_2) U(N_1, \dots, N_i - 1, \dots, N_m) T_i, \quad (4.12)$$

o bien $\tilde{T}_i = U^\dagger(\mathbf{N}) U(\mathbf{N} - \mathbf{e}_i) T_i$, las cuales son las transformaciones que deseamos emular. Para compensar esta transformación, el hamiltoniano deberá tener una dependencia particular sobre A . Para redes de amarre fuerte con un número indefinido de vecinos, podemos escribir

$$H = \sum_{k,i} \Delta_{k,i}(\mathbf{N}) (T_i)^k + \text{h.c.} + V(\mathbf{N}), \quad (4.13)$$

donde V es un potencial local, k es el rango de la interacción, y $\Delta_{k,i}$ son las constantes de acoplamiento como funciones de los operadores de sitio; en nuestro caso, son reales y positivas. La invariancia antes mencionada impone una transformación sobre Δ del tipo

$$\tilde{\Delta}_{k,i}(\mathbf{N}) = \Delta_{k,i}(\mathbf{N}) U^\dagger(\mathbf{N} - \mathbf{e}_i) U(\mathbf{N}), \quad (4.14)$$

compensando de esta manera los factores extras que aparecen en la ecuación (??). Si queremos conocer la dependencia explícita de H con respecto a A , para el caso abeliano es

$$\Delta_{k,i}(\mathbf{N}) = |\Delta_{k,i}(\mathbf{N})| \times \exp\{-ig \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{N})\}, \quad (4.15)$$

$$|\Delta_{k,i}(\mathbf{N})| \equiv |\Delta_{k,i}(\mathbf{N})|^\dagger. \quad (4.16)$$

Aquí, la parte hermitiana de Δ se escribió de manera explícita para mostrar que el campo es un operador unitario, mientras que el *modulo* puede aún depender del vector \mathbf{N} . Una transformación de norma se puede realizar al nivel del campo A ; definiendo un conjunto de vectores ortogonales (no necesariamente sobre la red física) $\hat{b}_1 \perp \mathbf{a}_1, \hat{b}_2 \perp \mathbf{a}_2$, el desplazamiento por una derivada discreta

$$\mathbf{A}(\mathbf{N}) \mapsto \mathbf{A}(\mathbf{N}) + \frac{\hat{b}_1}{\hat{b}_1 \cdot \mathbf{a}_2} [\Phi(\mathbf{N} - \mathbf{e}_1) - \Phi(\mathbf{N})] + \frac{\hat{b}_2}{\hat{b}_2 \cdot \mathbf{a}_1} [\Phi(\mathbf{N} - \mathbf{e}_2) - \Phi(\mathbf{N})] \quad (4.17)$$

produce exactamente la transformación (??) cuando se substituye en (??). El operador unitario en este caso es $U(\mathbf{N}) = e^{ig\Phi(\mathbf{N})}$.

Para campos no abelianos, no podemos expresar Δ directamente como una exponencial de A . En vez de eso, debemos resolver una relación del tipo

$$U^\dagger(\mathbf{N})\Delta_{k,i}[\tilde{\mathbf{A}}](T_i)^k U(\mathbf{N}) = \Delta_{k,i}[\mathbf{A}](T_i)^k, \quad (4.18)$$

que debe compensar una vez más (??). Ahora

$$U^\dagger(\mathbf{N})\Delta_{k,i}[\tilde{\mathbf{A}}]U(\mathbf{N}) = \Delta_{k,i}[\mathbf{A}]U^\dagger(\mathbf{N} - \mathbf{e}_i)U(\mathbf{N}), \quad (4.19)$$

y puesto que

$$\tilde{A}_j = U(\mathbf{N}) \left[A_j - \frac{i}{g}(1 - U^\dagger(\mathbf{N} - \mathbf{e}_j)U(\mathbf{N})) \right] U^\dagger(\mathbf{N}), \quad (4.20)$$

llegamos a una relación funcional

$$\begin{aligned} \Delta_{k,i} \left[A_j - \frac{i}{g}(1 - \exp[-ig\Phi(\mathbf{N} - \mathbf{e}_j)] \exp[-ig\Phi(\mathbf{N})]) \right] \\ = \Delta_{k,i}[A_j] \times \exp[-ig\Phi(\mathbf{N} - \mathbf{e}_i)], \end{aligned} \quad (4.21)$$

donde $\Phi = \Phi^\sigma \tau_\sigma$ es no abeliano y arbitrario. Esta relación funcional determina Δ en términos de A , pero dado que depende del grupo de simetría interno, no pretendemos resolverlo. En su lugar, decimos que hay un campo de norma no trivial que actúa sobre una partícula descrita por el hamiltoniano H si no hay alguna transformación U para la cual

$$\Delta_{k,i}[0]U(\mathbf{N} - \mathbf{e}_i) = U(\mathbf{N})\Delta_{k,i}[\mathbf{A}]. \quad (4.22)$$

Aún explorando el caso abeliano, esto requiere el uso de estructuras no triviales como amplitudes de salto complejos y, como consecuencia, espectros singulares vía la ecuación de Harper.

4.2 Descomposición en términos de acoplamientos externos de la red y acoplamientos internos poliméricos

La idea general detrás de la inclusión de un grupo interno $SU(N)$ consiste en la introducción de más estructura alrededor de un sitio de red. Dado que cada sitio contiene un sólo estado, resulta natural pensar que tales sitios (en nuestras realizaciones, un conjunto de resonadores) se coloquen muy juntos y por tanto estos grupos, cuando se visualizan como un único sitio, tiene tantos niveles como sitios en el conjunto. Llamamos a este conjunto polímero. Ver figura ??.

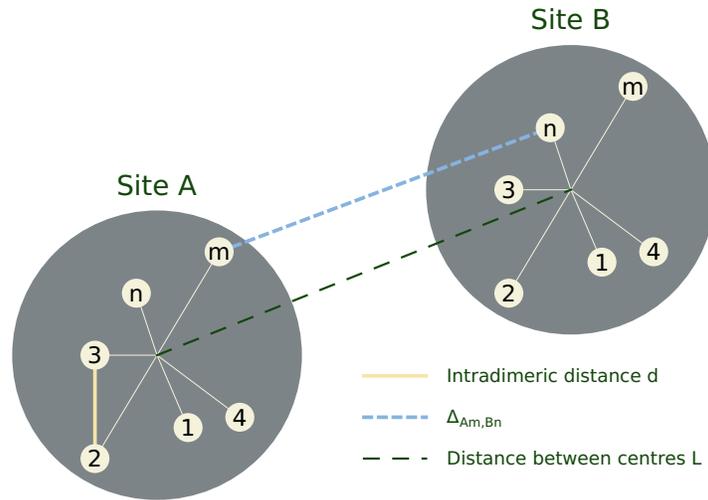


Figura 4.1: Polímeros vecinos. De manera general cada polímero alberga m sitios donde cada sitio contiene un solo estado localizado. La descomposición de los acoplamientos en externos e internos se puede visualizar gráficamente: las líneas azules punteadas representan los acoplamientos externos, mientras que las líneas más claras que conectan sitios del polímero son los acoplamientos internos. La distancia entre los centros del polímero se ilustra con la línea punteada verde.

En conexión con los acoplamientos, resulta razonable descomponerlos en dos partes. Esto es de gran utilidad para rastrear la contribución a toda la red, debido a la localización de cada polímero (o su centro geométrico). La distancia entre centros geométricos está asociada con un acoplamiento Δ que llamamos externo. La distancia entre un centro geométrico y todos los demás sitios del mismo polímero deben ser vistos como distancias internas, por lo tanto llamamos a estos acoplamientos internos. Una vez hecha esta descomposición, estamos listos para usar una base apropiada que describa los estados poliméricos que interactúan con otros estados que pertenecen a polímeros vecinos. En realidad, esto está conectado con los modelos de amarre fuerte aplicados en el estado sólido donde los sitios individuales contienen más de un orbital de conducción. La diagonalización de los polímeros aislados hacen el trabajo, eliminando los acoplamientos internos entre los estados propios poliméricos y revelando nuevos acoplamientos sitio a sitio.

El número de sitios es equivalente a la dimensionalidad del grupo interno. Notamos que la teoría resultante es abeliana, si los estados poliméricos están acoplados sólo a sus contrapartes vecinas con el mismo índice (*i.e.* primer nivel con primer nivel, segundo nivel con segundo nivel y así sucesivamente). Esto da lugar a un número N de teorías abelianas desacopladas sobre la misma red. Por otro lado, si los estados poliméricos están conectados con estados propios vecinos de diferente índice, el respectivo hamiltoniano contiene operadores hermitianos no diagonales definidos sobre el álgebra $su(N)$. Esto da lugar a teorías no abelianas, donde el campo no abeliano entra en las constantes de acoplamiento, en lugar de un potencial local; es precisamente lo que se muestra en la ecuación (??).

4.3 Emulación U(1)

Vamos a aplicar la teoría general al caso magnético, es decir, la emulación de un campo abeliano U(1). Se muestra la construcción de una red hecha por cadenas de dímeros rotantes que generan una teoría U(1) desacoplada.

4.3.1 Operador casi Mathieu

El operador casi Mathieu es una versión discreta del operador de Schrödinger en una dimensión [?]:

$$(H_{\alpha\Lambda k}U)(n) = U(n+1) + U(n-1) + 2\Lambda \cos(2\pi kn + k)U(n). \quad (4.23)$$

Este hamiltoniano describe redes bidimensionales con potencial periódico usando el modelo de amarre fuerte. Dicho potencial puede ser conmensurable si α es racional o inconmensurable si α es irracional. Considerando la norma de Landáu, tomamos la dirección del potencial vectorial paralela a uno de los ejes de la red y perpendicular al eje restante. Con esto conseguimos un sistema que es separable: por una parte tenemos ondas planas como funciones propias en la dirección perpendicular al potencial, mientras que en la dirección paralela obtenemos un hamiltoniano $H_{\alpha\Lambda k}$ [?]. El parámetro α se define como el flujo magnético en una celda unitaria del cristal, k es el número de onda de las funciones propias en la dirección transversal y Λ es la razón entre la longitud de la celda unitaria en la dirección del potencial y la longitud en la dirección transversal. Si $\Lambda = 1$, $H_{\alpha\Lambda k}$ recuperamos el hamiltoniano de Harper [?] el cual describe una red cuadrada bajo la influencia de un campo magnético perpendicular al plano molecular.

Si α es racional *i.e.* $\alpha = p/q$ donde p y q son primos relativos, $H_{\alpha\Lambda k}$ es periódico y la teoría de Bloch-Floquet puede ser aplicada. El espectro $\sigma(\alpha, \Lambda, k)$ consiste en q bandas generalmente separadas por una brecha de energía. Al variar k , las bandas se mueven e incluso su anchura puede modificarse, pero traslapes entre bandas nunca ocurren. Por otra parte, si α es irracional, el espectro será independiente de k .

Mariposa de Hofstadter

En 1972 Hofstadter publicó un trabajo [?] donde mostró un espectro tipo Cantor y de medida cero para una red cuadrada ($\Lambda = 1$) y α irracional. Existen realizaciones experimentales que reproducen este espectro en sistemas mesoscópicos con el uso de arreglos de dispersores en sistemas de microondas [?] o realizaciones con sistemas acústicos [? ?].

El método de la supercelda es útil para construir un sistema cuasiperiódico que permita acercarnos a la irracionalidad de α a través de valores racionales de la forma $\alpha = p/q$ donde p y q son primos relativos. Escogemos como supercelda una cadena formada por N dímeros donde cada dímero está rotado un ángulo $2\pi p/(N-1)$ con

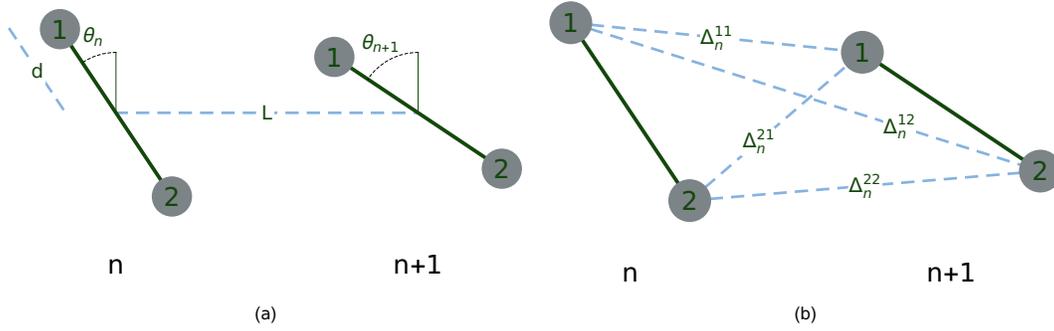


Figura 4.2: (a) Parámetros geométricos de la cadena de dímeros. L representa la distancia entre el centro del dímero y uno de sus sitios. La distancia interdimérica está denotado por d y el ángulo de rotación del dímero es θ_n . (b) Esquema de todos los acoplamientos a pares entre dos dímeros vecinos.

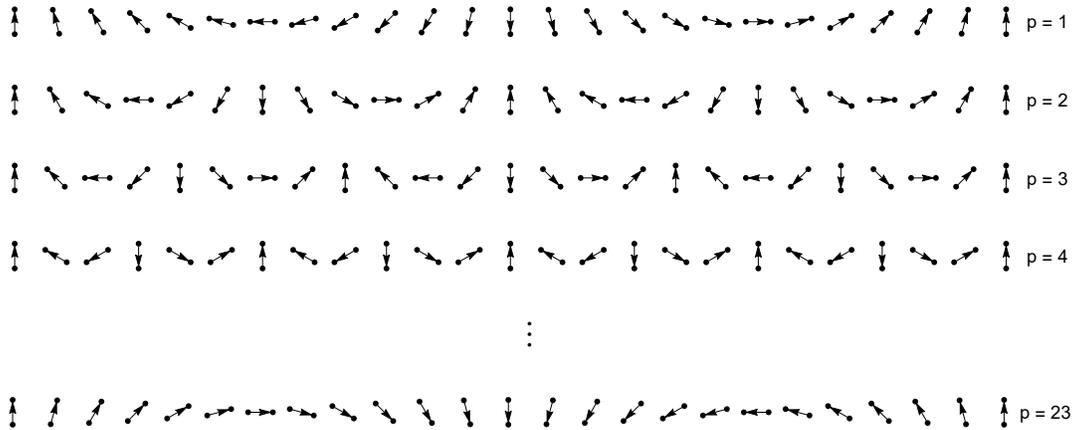


Figura 4.3: Cadena de dímeros rotantes. Las flechas van del sitio intradimérico 1 al sitio intradimérico 2 y sólo son ilustrativas para apreciar el movimiento de rotación a lo largo de la cadena. El parámetro p indica el número de vueltas completas que da el dímero a lo largo de la cadena.

respecto al dímero inmediato anterior; p denota el número de vueltas completas que un dímero da a lo largo de la cadena. Una cadena formada por dímeros corresponde a una teoría $SU(2)$, donde de manera general se considera la base propia del dímero y los traslapes entre los estados simétricos y antisimétricos de sitios vecinos. Sin embargo, al tener acoplamientos dependientes de parámetros geométricos, es posible sintonizar su valor a conveniencia. Es posible encontrar un régimen donde los estados simétrico y antisimétrico se separan generando acoplamientos puramente simétrico-simétrico (S-S), antisimétrico-antisimétrico (A-A). En este caso emergen dos bandas desacopladas y cada una de ellas corresponde a una teoría $U(1)$ efectiva. En la sección siguiente mostramos la construcción de la cadena y la obtención de los espectros correspondientes tanto para el caso $U(1)$ como $SU(2)$.

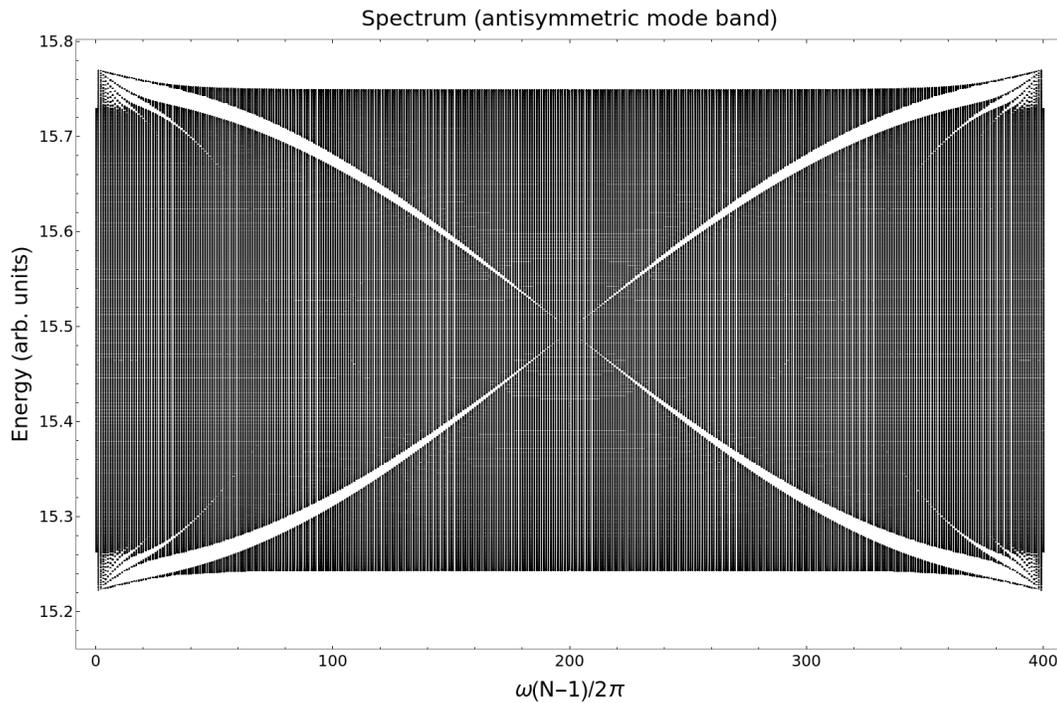
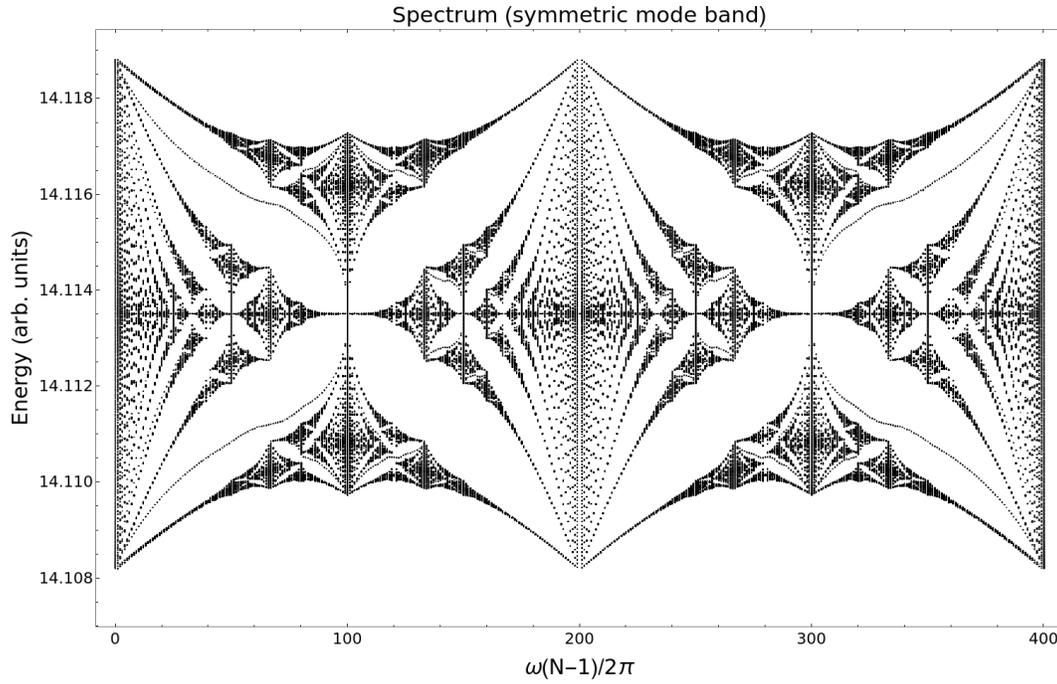
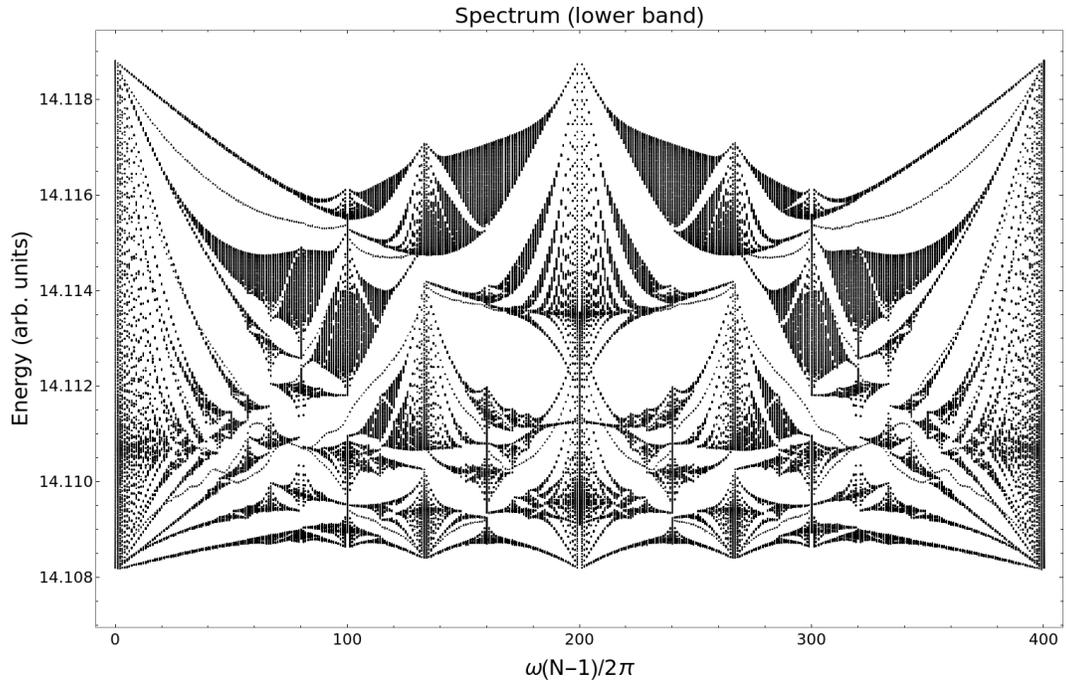
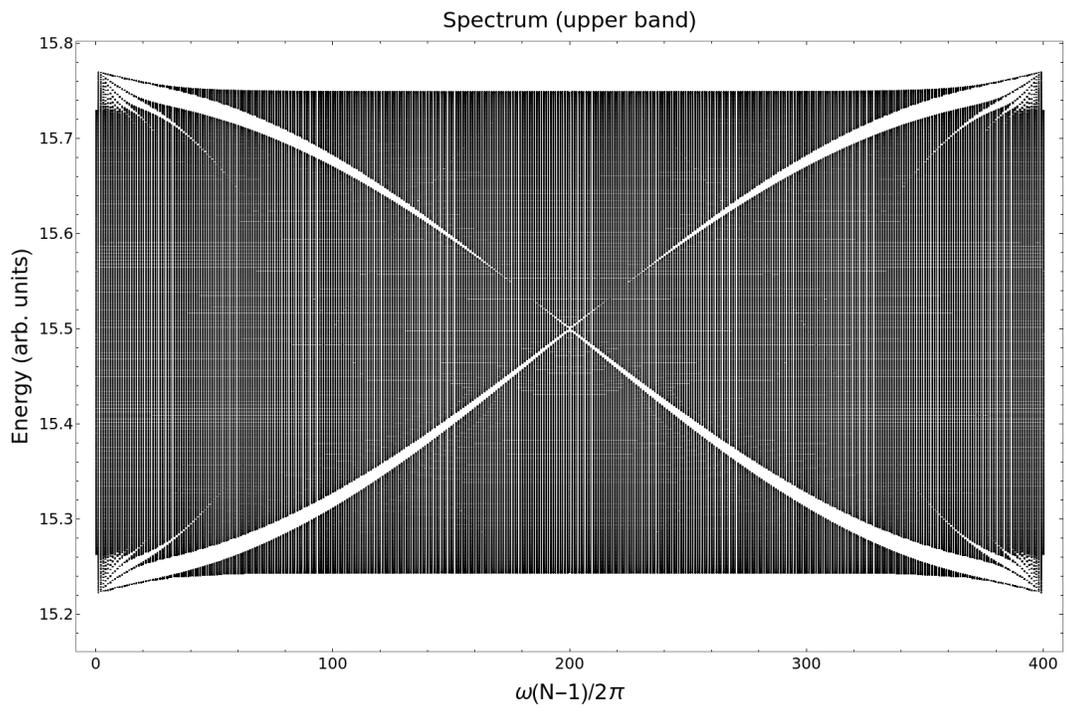


Figura 4.4: (a) Espectro de la banda simétrica desacoplada de una cadena con 400 dímeros. La mariposa de Hofstadter emerge en el primer cuarto del rango de las frecuencias $\omega(N - 1)/2\pi$. Los parámetros geométricos son $L = 1.68$, $d = 0.1$ y $\lambda = 1.66$. El valor estimado de $\Lambda = 1$. (b) Espectro de la banda antisimétrica desacoplada con los parámetros geométricos $L = 2.8$, $d = 0.35$ y $\lambda = 1$. Esta banda es análoga al hamiltoniano de Harper para $\Lambda = 0.08 \cos \omega$.



(a)



(b)

Figura 4.5: Retrato de la bandas de la figura ?? con acoplamiento. (a) Fuertes correcciones a la banda simétrica. (b) Ligeras correcciones a la banda antisimétrica.

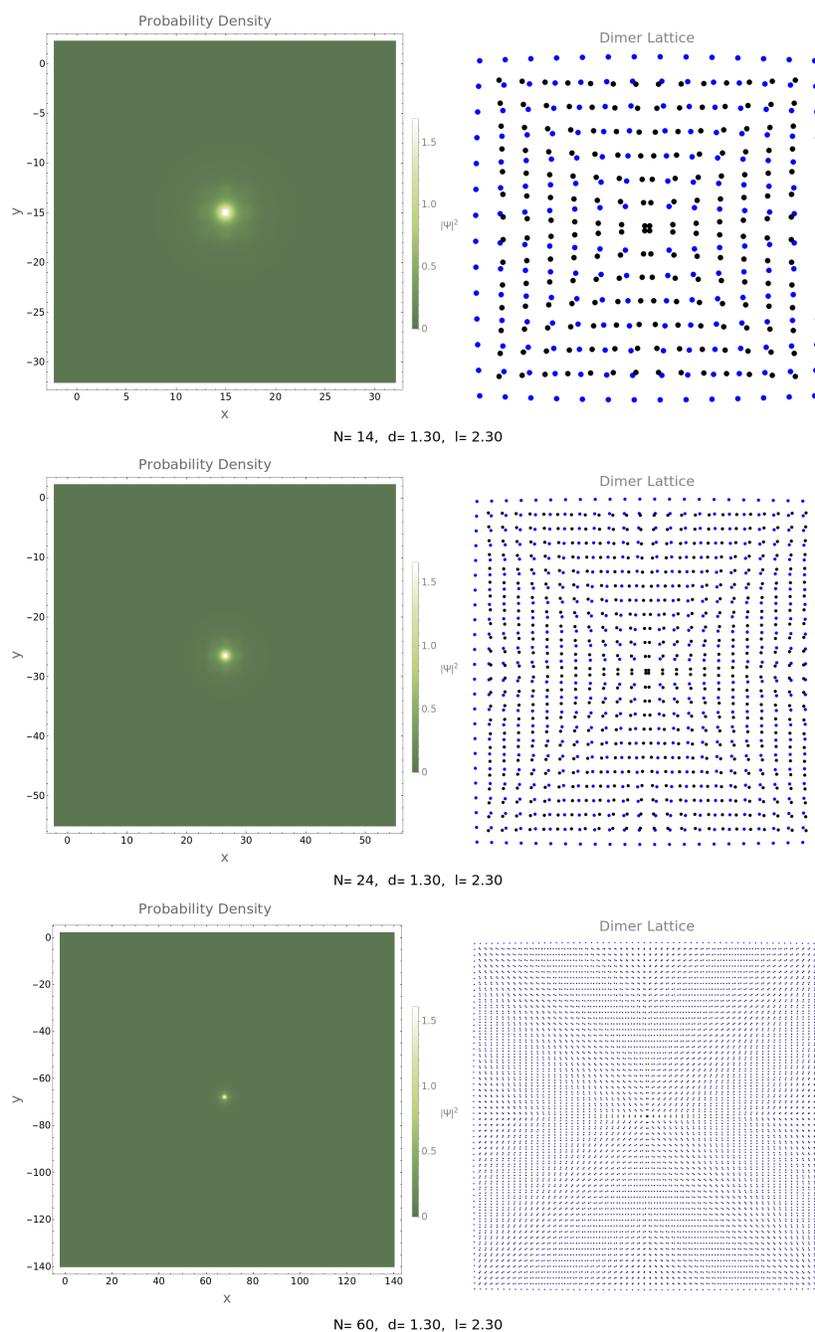


Figura 4.6: Red cuadrada de dímeros con estados localizados. La parte oscura de la gráfica representa las regiones con menor probabilidad de encontrar al electrón mientras que las zonas mas blancas indican una alta probabilidad. El parámetro N denota el número de dímeros a lo largo del eje x , d es la distancia intradimérica mientras que l representa la distancia entre centros de dímeros vecinos.

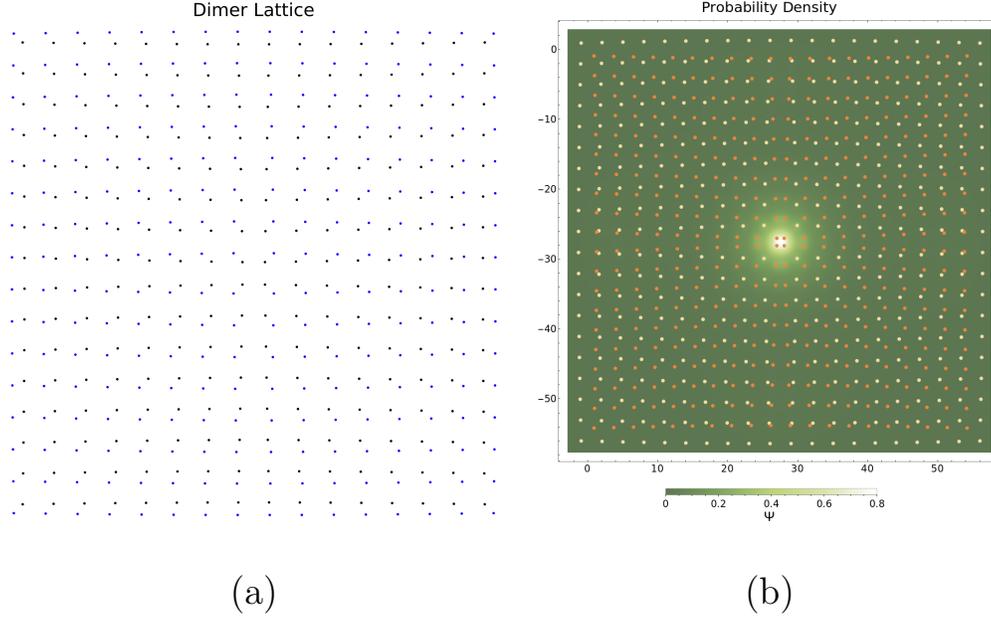


Figura 4.7: (a) Red cuadrada tipo erizo. (b) Red cuadrada con función de onda localizada en el centro. Los dímeros se presentan como guía visual. El estado de mayor energía muestra el efecto de localización. Los dímeros están hechos de puntos naranja y amarillo. Los parámetros son $L = 2.9$, $d = 1.3$ y $\lambda = 1$.

4.3.2 Sistema de dímeros: caso abeliano

La construcción de la cadena de dímeros se visualiza en la figura ???. Cada cadena esta caracterizada por el parámetro p que corresponde al número total de vueltas de un dímero a lo largo del arreglo. Los estados localizados alrededor de cada sitio se denotan como $|n, i\rangle$ donde n representa la posición e i el sitio intradimérico. Los acoplamientos están dados como:

$$\begin{aligned}
 \Delta_{n,m}^{ij} &= \langle n, i | H | m, j \rangle \\
 &= \int \psi_i^*(r) H(-\nabla^2, \mathbf{r}) \psi_j(r) dr \\
 &\sim \Delta_0 \exp(-d_{n,m}^{i,j}/\lambda).
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

donde $d_{n,m}^{i,j}$ es la distancia entre sitios (n, i) y (m, j) con m, n como el número de sitio e i, j como el número de sitio intradimérico, y λ es la longitud de evanescencia. En nuestra descripción, sólo consideramos los primeros vecinos. La notación para los acoplamientos se simplifica como sigue: $\Delta_{n,n+1}^{ij} \mapsto \Delta_n^{i,j}$. Escribimos el hamiltoniano de

una sola cadena:

$$H_p = \begin{pmatrix} H_0 & h_1 & 0 & \cdots & 0 \\ h_1^\dagger & H_0 & h_2 & \ddots & 0 \\ 0 & h_2^\dagger & H_0 & & 0 \\ \vdots & \ddots & & \ddots & 0 \\ 0 & & & & H_0 & h_{n-1} \\ 0 & & & 0 & h_{n-1}^\dagger & H_0 \end{pmatrix}, \quad (4.25)$$

donde

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_0 \\ \Delta_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad h_n = \begin{pmatrix} \Delta_n^{11} & \Delta_n^{12} \\ \Delta_n^{21} & \Delta_n^{22} \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

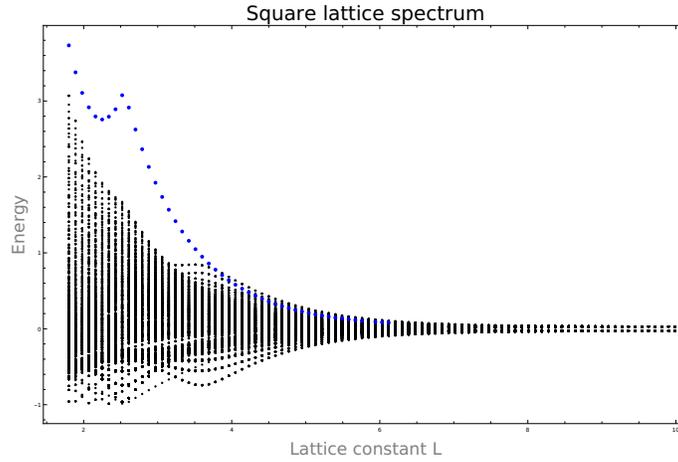


Figura 4.8: Espectro de una red cuadrada tipo erizo como función del parámetro de red L . Los puntos azules representan estados localizados en el centro del arreglo como se muestra en la figura ???. Este estado se funde con una de las bandas conforme la distancia interdimérica incrementa. Las líneas azules representan las distancias entre los centros.

En esta notación, H_0 representa el hamiltoniano de un sólo dímero con su energía en sitio desplazado a cero por simplicidad. Podemos diagonalizar cada bloque dimérico usando la matriz de Hadamard:

$$H_p^{(1)} = (\mathbf{1}_N \otimes U)^\dagger H_p (\mathbf{1}_N \otimes U), \quad U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +1 & +1 \\ +1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

El hamiltoniano transformado en la base de estados simétrico y antisimétrico de cada dímero es:

$$H_p^{(1)} = \begin{pmatrix} H_D & \tilde{h}_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \tilde{h}_1^\dagger & H_D & \tilde{h}_2 & \ddots & 0 \\ 0 & \tilde{h}_2^\dagger & H_D & & 0 \\ \vdots & \ddots & & \ddots & 0 \\ 0 & & & & H_D & \tilde{h}_{n-1} \\ 0 & & & 0 & \tilde{h}_{n-1}^\dagger & H_D \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

con H_D y \tilde{h}_i dados por:

$$H_D = \begin{pmatrix} \Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{h}_n = \begin{pmatrix} \Delta_n^{AA} & \Delta_n^{AS} \\ \Delta_n^{SA} & \Delta_n^{SS} \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

El superíndice de Δ_n en \tilde{h}_n representa los acoplamientos entre estados antisimétricos (A) y estados simétricos (S). Expresamos $\Delta_n^{AA}, \Delta_n^{SA}, \Delta_n^{AS}$ y Δ_n^{SS} en términos de acoplamientos sitio a sitio:

$$\begin{aligned} \Delta_n^{AA} &= \frac{1}{2} (\Delta_n^{11} + \Delta_n^{12} + \Delta_n^{21} + \Delta_n^{22}) \\ \Delta_n^{AS} &= \frac{1}{2} (\Delta_n^{11} - \Delta_n^{12} + \Delta_n^{21} - \Delta_n^{22}) \\ \Delta_n^{SA} &= \frac{1}{2} (\Delta_n^{11} + \Delta_n^{12} - \Delta_n^{21} - \Delta_n^{22}) \\ \Delta_n^{SS} &= \frac{1}{2} (\Delta_n^{11} - \Delta_n^{12} - \Delta_n^{21} + \Delta_n^{22}). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Reordenando el hamiltoniano transformado $H_p^{(1)}$ en bloques A y S obtenemos:

$$H_p^{(2)} = \begin{pmatrix} H_A & \delta_{AS} \\ \delta_{AS}^\dagger & H_S \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

donde H_A y H_S contienen solamente acoplamientos A-A y S-S, respectivamente:

$$H_A = \begin{pmatrix} \Delta_0 & \Delta_1^{AA} & 0 & \dots & 0 \\ \Delta_1^{AA} & \Delta_0 & \Delta_2^{AA} & \ddots & \vdots \\ 0 & \Delta_2^{AA} & \Delta_0 & & \\ \vdots & \ddots & & \ddots & \\ 0 & & & \Delta_0 & \Delta_{n-1}^{AA} \\ & & & \Delta_{n-1}^{AA} & \Delta_0 \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

$$H_S = \begin{pmatrix} \Delta_0 & \Delta_1^{SS} & 0 & \dots & 0 \\ \Delta_1^{SS} & \Delta_0 & \Delta_2^{SS} & \ddots & \vdots \\ 0 & \Delta_2^{SS} & \Delta_0 & & \\ \vdots & \ddots & & \ddots & \\ 0 & & & \Delta_0 & \Delta_{n-1}^{SS} \\ & & & \Delta_{n-1}^{SS} & \Delta_0 \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

$$\delta_{AS} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_1^{AS} & 0 & \dots & 0 \\ \Delta_1^{SA} & 0 & \Delta_2^{AS} & \ddots & \vdots \\ 0 & \Delta_2^{SA} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & & \ddots & \\ 0 & & & 0 & \Delta_{n-1}^{AS} \\ & & & \Delta_{n-1}^{SA} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

Observamos de la ecuación (??) que los elementos de δ_{AS} dependen de los acoplamientos entre sitios vecinos, y esta dependencia es puramente geométrica debido a la definición de $\Delta_{n,m}^{ij}$ in (??).

En general, el hamiltoniano $H_p^{(2)}$ tiene dos bloques acoplados, aunque es posible realizar algunas aproximaciones. Si los elementos de δ_{AS} son más pequeños que los elementos de H_A y H_S , conseguiremos bandas desacopladas con un espectro de Cantor; en el caso más general, la mariposa de Hofstadter aparece deformada, como se visualiza en la figura ??.

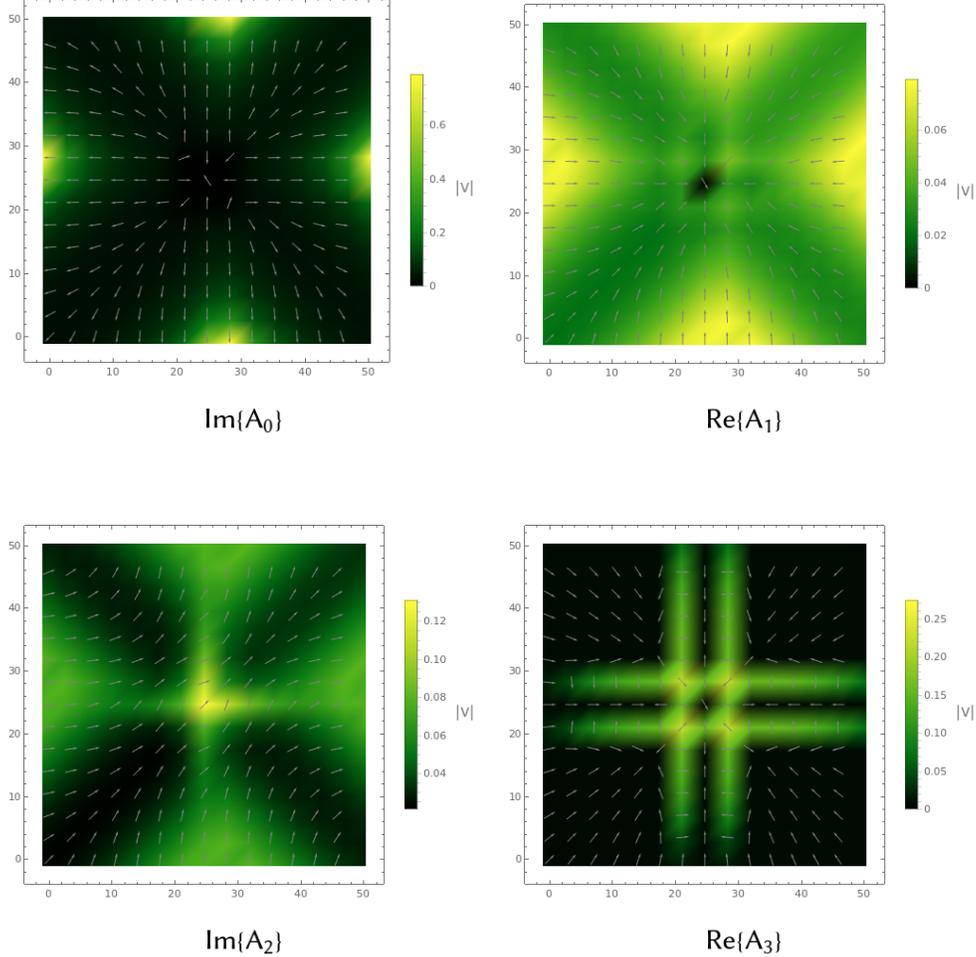


Figura 4.9: Retratos de \mathbf{A} sobre la red cuadrada. Se presentan las componentes $\text{Im}\{A_0\}$, $\text{Im}\{A_2\}$, mientras que $\text{Re}\{A_0\} = \text{Re}\{A_2\} = 0$. De manera similar, se muestran las componentes $\text{Re}\{A_1\}$, $\text{Re}\{A_3\}$ cuyas componentes $\text{Im}\{A_1\} = \text{Im}\{A_3\} = 0$.

Proseguimos caracterizando los acoplamientos entre sitios, para ello necesitamos conocer las distancias en función de los parámetros geométricos de la cadena. Denotemos $\mathbf{r}_n^{(i)}$ con $i = 1, 2$ el vector posición del sitio i -ésimo del dímero n , y para dos sitios adyacentes tenemos:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}_n^{(1)} &= (-d \sin \theta_n, d \cos \theta_n) \\
 \mathbf{r}_n^{(2)} &= (d \sin \theta_n, -d \cos \theta_n) \\
 \mathbf{r}_{n+1}^{(1)} &= (L - d \sin \theta_{n+1}, d \cos \theta_{n+1}) \\
 \mathbf{r}_{n+1}^{(2)} &= (L + d \sin \theta_{n+1}, -d \cos \theta_{n+1}).
 \end{aligned} \tag{4.35}$$

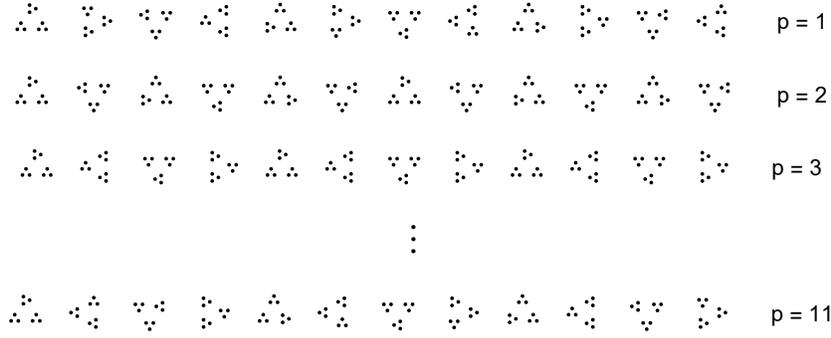


Figura 4.10: Cadena lineal hecha de trimeros. La celda unitaria rota un número p de vueltas completas. La simetría global C_3 se rompe si un trimero interno es rotado con respecto a los otros dos. Cuando la simetría C_3 se restablece, bandas planas aparecen en la parte inferior del espectro. El rompimiento de simetría provoca un desdoblamiento de las bandas.

Las distancias entre todos los sitios a pares es:

$$d_n^{ij} = |\mathbf{r}_n^{(i)} - \mathbf{r}_{n+1}^{(j)}| = L \{1 + 2\alpha^2 A_n^{ij} - 2\alpha B_n^{ij}\}^{1/2}, \quad (4.36)$$

donde $\theta_n = 2\pi p(n-1)/(N-1)$, $\alpha = d/L$ y A_n^{ij} , B_n^{ij} contienen información de las rotaciones de cada dímero:

$$\begin{aligned} A_n^{ij} &= 1 - (-1)^{i+j} \cos(\theta_n - \theta_{n+1}) \\ B_n^{ij} &= (-1)^i \sin \theta_n - (-1)^j \sin \theta_{n+1}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

De esta manera los acoplamientos son los siguientes:

$$\Delta_n^{ij} \simeq \left\{ 1 + B_n^{ij} \frac{d\alpha}{\lambda} + \left[\frac{B_n^{ij^2}}{2} \left(1 + \frac{L}{\lambda} \right) - A_n^{ij} \right] \frac{d\alpha^2}{\lambda} \right\} \Delta_L, \quad (4.38)$$

con $\Delta_L = \Delta_0 \exp(-L/\lambda)$. Si tomamos la distancia intradimérica d pequeña en comparación a la distancia L entre centros de dímeros, entonces $\alpha \ll 1$ y por tanto es posible hacer la siguiente aproximación para la banda simétrica a segundo orden en α :

$$\Delta_n^{SS} = \frac{2d^2}{\lambda L} \left\{ \cos \theta_n \cos \theta_{n+1} - \frac{L}{\lambda} \sin \theta_n \sin \theta_{n+1} \right\} \Delta_L. \quad (4.39)$$

Analizando el caso especial cuando $L/\lambda = 1$, obtenemos la siguiente expresión:

$$\Delta_n^{SS} = \frac{2d^2}{L^2} \cos [\omega(2n-1)] \Delta_L, \quad (4.40)$$

donde hemos definido la frecuencia angular ω como $2\pi p/(N-1)$. Se puede demostrar que existe un mapeo unitario entre el hamiltoniano de Harper y un modelo de amarre fuerte sin potencial y con acoplamientos dependientes de la posición como el obtenido en (??). Este mapeo unitario es muy importante y se incluye en el Apéndice ??.

El parámetro efectivo $\Lambda = 1$ para la banda simétrica. Para la banda antisimétrica obtenemos lo siguiente:

$$\Delta_n^{AA} = 2\gamma \left\{ 1 - \frac{\beta\alpha^2(\beta+1)}{\gamma} \cos\omega \cos[\omega(2n-1)] \right\} \Delta_L. \quad (4.41)$$

donde

$$\begin{aligned} \gamma &= 2 + \beta\alpha^2(\beta-1), \\ \beta &= \frac{d}{\lambda}, \quad \alpha = \frac{L}{d}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Para esta banda, el parámetro Λ del modelo de Harper se supone pequeña. El valor de Λ efectiva es $\Lambda = 0.08 \cos\omega$. Notamos que tiene una dependencia de la frecuencia no removible. La medida de Lebesgue para el operador Casi-Mathieu es $|4 - 4\Lambda|$ [? ?]. La medida de Lebesgue estimada para la banda simétrica es cero y para la banda antisimétrica es $3.68 \cos\omega$.

Finalmente, para completar la caracterización de los espectros calculamos la dimensiones fractales con el método de conteo de cajas. Para la banda simétrica estos valores están reportados en la tabla ???. Notamos que el valor de la dimensión fractal es menor que 1. Por otra parte, las dimensiones fractales para la banda antisimétrica están reportadas en la figura

Un tratamiento más general de los acoplamientos como funciones del número de sitio, consiste en la descomposición de \tilde{h}_n en la forma polar como:

$$\begin{aligned} \tilde{h}_n &= UP = \exp(i\sigma_2\phi)P \\ &= \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^\theta \cosh\chi & \sinh\chi \\ \sinh\chi & e^{-\theta} \cosh\chi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.43)$$

obteniendo las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} \Delta_n^{AA} &= e^\theta \cos\phi \cosh\chi + \sin\phi \sinh\chi \\ \Delta_n^{AS} &= e^{-\theta} \sin\phi \cosh\chi + \cos\phi \sinh\chi \\ \Delta_n^{SA} &= -e^\theta \sin\phi \cosh\chi + \cos\phi \sinh\chi \\ \Delta_n^{SS} &= e^{-\theta} \cos\phi \cosh\chi - \sin\phi \sinh\chi. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Tabla 4.1: Dimensiones fractales obtenidas del conteo de cajas para la banda simétrica.

$\omega 2\pi/(N-1)$	Dimensión fractal	$\omega 2\pi/(N-1)$	Dimensión fractal
0	0.9606	13	0.6995
1	0.9601	17	0.6941
2	0.4980	19	0.7010
3	0.4884	23	0.7233
5	0.4244	29	0.6897
7	0.6525	31	0.7308
11	0.6848	37	0.7516

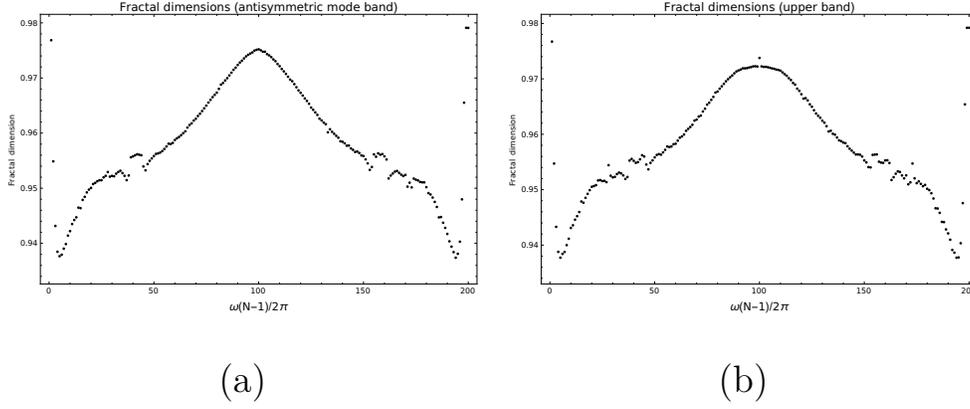


Figura 4.11: Dimensiones fractales para la banda antisimétrica. El recuadro (a) corresponde al caso desacoplado mientras que el recuadro (b) para el caso acoplado.

donde los parámetros χ , ϕ y θ están dados en términos de los acoplamientos como:

$$e^{\theta} \cosh \chi = \frac{2(\Delta_n^{11} \Delta_n^{12} + \Delta_n^{21} \Delta_n^{22}) + \gamma}{2\gamma^{1/2}}, \quad (4.45)$$

$$e^{-\theta} \cosh \chi = \frac{-2(\Delta_n^{11} \Delta_n^{12} + \Delta_n^{21} \Delta_n^{22}) + \gamma}{2\gamma^{1/2}}, \quad (4.46)$$

$$\gamma = (\Delta_n^{12} - \Delta_n^{21})^2 + (\Delta_n^{11} + \Delta_n^{22})^2. \quad (4.47)$$

Hemos visto como obtener un hamiltoniano equivalente al modelo de Harper en un sector abeliano de la teoría. Esto produce una mariposa lo cual esta en completa correspondencia a lo predicho por el operador casi Mathieu.

4.4 Estados confinados de SU(2)

Un problema abierto en física de partículas y puntualmente en cromodinámica cuántica es el fenómeno de confinamiento. Por una parte, los estados confinados de los quarks que constituyen los nucleones impiden que un quark pueda ser aislado de los otros dos debido a que a grandes distancias la interacción fuerte se vuelve más intensa; y por otra lado la hipótesis del confinamiento de color dicta que multipletes de color neutro de SU(3) son los únicos que pueden ser observados. En este trabajo no se intenta dar una demostración del fenómeno de confinamiento, el objetivo es emularlo en un sistema bidimensional, y con manipulaciones puramente geométricas poder localizar en una región de la red la función de onda del sistema. La existencia de estados localizados en redes se ha estudiado en sistemas desordenados como es el caso de la localización de Anderson [?], sin embargo, es posible construir una red que globalmente sea periódica pero que cada sitio tenga estructura interna que exhiba el mismo comportamiento de localización.

Se persigue la construcción de una red cuadrada hecha de dímeros cuyos acoplamientos en el centro del arreglo constituyan los más predominantes. Para lograr esto se

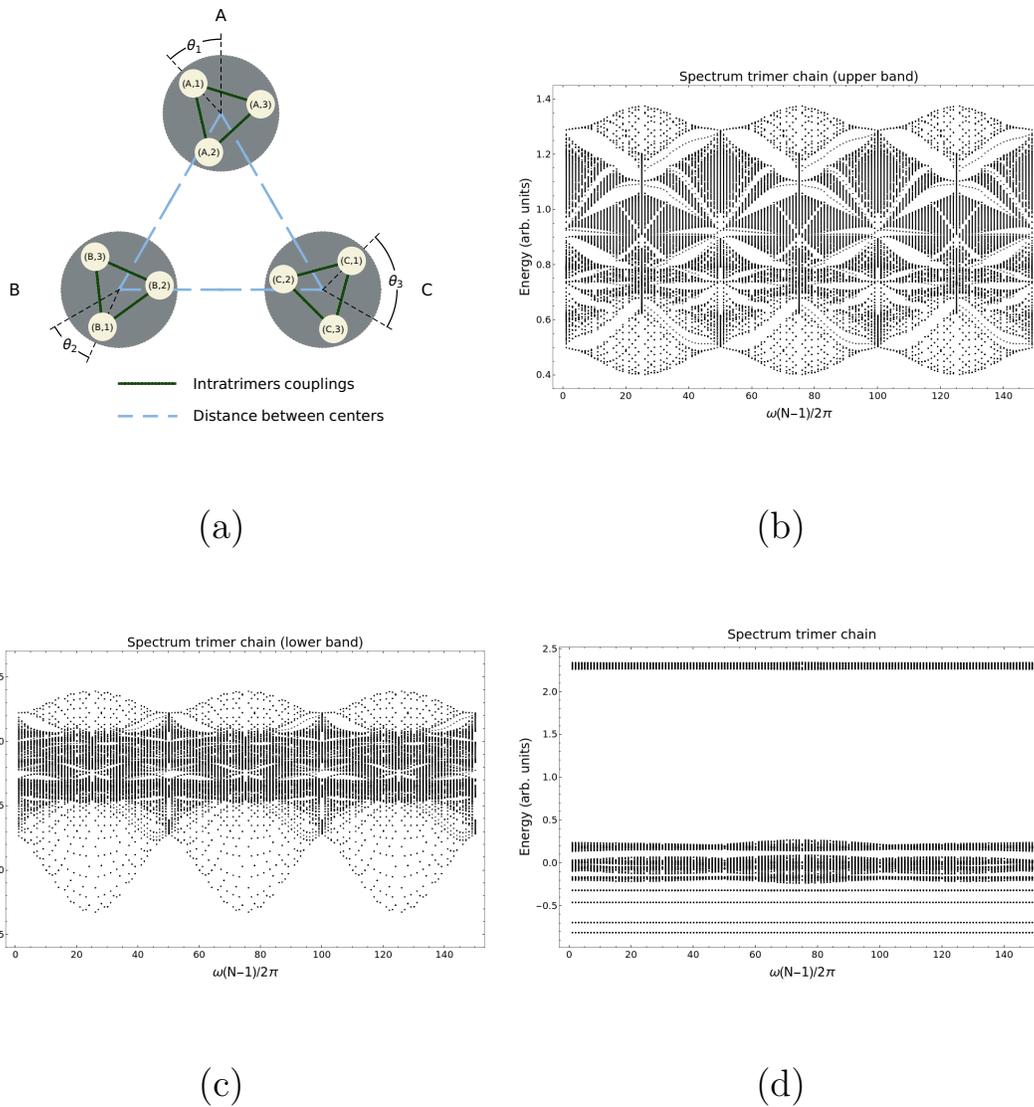


Figura 4.12: Espectros de una cadena lineal hecha de trímeros. (a) Celda unitaria para la cadena de trímeros. Cada triángulo interno puede rotar independientemente con ángulos θ_1 , θ_2 y θ_3 . (b) El espectro superior está compuesto por dos bandas solapadas. Se puede distinguir una estructura fractal que hace referencia a la ,mariposa de Hofstadter. (c) Parte baja del espectro. La banda es densa y no muestra estructura reconocible. (d) Espectro con simetría interna y global C_3 rota. Podemos notar la aparición de bandas planas en la parte inferior.

disponemos los dímeros de la parte central de tal forma que los acoplamientos simétrico-simétrico, antisimétrico-antisimétrico prevalezcan en comparación con los acoplamientos simétrico-antisimétrico. Los demás acoplamientos se construyen alrededor de estos cuatro dímeros variando el ángulo de rotación de tal manera que dos dímeros contiguos sobre una fila sean casi paralelos. La red resultante es tipo erizo (hedgehog) con la característica de poseer en su borde exterior dímeros que generan una vuelta completa al cristal, ver figura ??.

Como ya habíamos anticipado, los acoplamientos mas prominentes provienen del centro del arreglo por lo que los dispondremos a una rotación de $\pi/2$ (ver figuras ?? y ??). Los demás acoplamientos deben ser lo más pequeños posibles por lo que dispondremos los dímeros con una pequeña rotación respecto a los cuatro dímeros centrales. Las posiciones para cada sitio están dadas por las siguientes expresiones:

$$\mathbf{a}_1^{(\mathbf{n})} = \left((n_x-1)L-d \sin\left[\frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2(N-2)}\right] (n_y-n_x), -(n_y-1)L-d \cos\left[\frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2(N-2)}\right] (n_y-n_x) \right) \quad (4.48)$$

$$\mathbf{a}_2^{(\mathbf{n})} = \left((n_x-1)L-d \sin\left[\frac{5\pi}{4} + \frac{\pi}{2(N-2)}\right] (n_y-n_x), -(n_y-1)L-d \cos\left[\frac{5\pi}{4} + \frac{\pi}{2(N-2)}\right] (n_y-n_x) \right), \quad (4.49)$$

para uno de los cuadrantes de la red. En esta notación $\mathbf{a}_1^{(\mathbf{n})}$ y $\mathbf{a}_2^{(\mathbf{n})}$ representan las posiciones 1 y 2 del dímero localizado en $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$. La red al tener simetría C_4 , los demás cuadrantes están relacionados por rotaciones de $\pi/2$. Variamos el parámetro de la red y encontramos estados localizados en la parte superior de la banda de energía. Este estado localizado se mueve conforme el parámetro de red incrementa con una distancia intradimérica fija. Notamos que en realidad se funde con la banda de propagación en el límite de distancias intradiméricas despreciables, esto es, muy pequeñas en comparación con la constante de red revelando la naturaleza no abeliana del efecto. Es posible hacer una analogía con solitones ya que el estado localizado se encuentra en una región producida por un campo externo tipo erizo. Esta configuración de dímeros tiene algunas características en común con las soluciones clásicas de ecuaciones no lineales de campo que poseen una energía finita que posee una densidad de energía no dispersiva localizada, es decir, la onda viaja con su forma inalterada[? ?]. Más aún, estas soluciones caen a cero en el infinito. En la teoría no lineal que pretendemos emular, las soluciones perturban nuestra ecuación de Schrödinger.

La evolución de la función de onda para el estado de mayor energía se muestra en la figura ?? (a). Observamos que el estado electrónico está confinado en el centro del arreglo, pero también nos interesa la forma del campo no abeliano que se emula. En la dirección perpendicular al plano de la red, B_z se obtiene como sigue:

$$B_z = \partial_y A_x - \partial_x A_y - i[A_x, A_y], \quad (4.50)$$

donde el conmutador juega un rol importante. Para calcular las componentes de A , primero debemos expresar cada bloque de acoplamiento 2×2 como una exponencial, lo cual se logra de la siguiente manera:

$$\Delta(\mathbf{N}) = \exp(\Phi^{(0)} \mathbf{1} + \Phi \cdot \sigma). \quad (4.51)$$

La componente A_i es la diferencia entre $\Phi(\mathbf{N})$ y $\Phi(\mathbf{N} - \hat{\mathbf{e}}_i)$. Las proyecciones sobre la base de Pauli $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2$ y σ_3 de \mathbf{A} se pueden hallar rápidamente calculando $\text{Tr}(A\sigma_i)$ y están dibujadas en la figura ??. La partes real de $A^{(0)}$, $A^{(2)}$ e imaginaria de $A^{(1)}$, $A^{(3)}$ son cero.

4.5 Cadenas de trímeros y SU(3)

Siguiendo el ejemplo del caso SU(2), podemos extender lo desarrollado hasta ahora para construir una cadena hecha de triángulos. El esquema del sistema se muestra en la figura ???. En esta sección no hacemos un análisis formal como lo desarrollamos para SU(2) pero proporciona las bases de estudios próximos. Nos limitamos a mostrar los resultados numéricos.

La celda unitaria usada para la construcción de esta cadena se ilustra en la figura ?? (b). Los niveles de energía internos de cada trímero representan tres grados de libertad internos en la celda. Conforme el triángulo rota de manera independiente con ángulos de θ_1, θ_2 y θ_3 , es posible romper o restablecer la simetría poligonal local de cada celda y de esta manera manipular la estructura de bandas del espectro. Cuando estos ángulos desaparecen, el sistema tiene una simetría $C_3 \times C_3$. El hamiltoniano del arreglo se escribe en forma matricial como sigue:

$$H = \begin{pmatrix} H_0 & \Delta_{AB} & \Delta_{AC} \\ \Delta_{AB}^\dagger & H_0 & \Delta_{BC} \\ \Delta_{AC}^\dagger & \Delta_{BC}^\dagger & H_0 \end{pmatrix}, \quad (4.52)$$

$$H_0 = \begin{pmatrix} E & \Delta & \Delta \\ \Delta & E & \Delta \\ \Delta & \Delta & E \end{pmatrix}, \quad (4.53)$$

$$\Delta_{mn} = \begin{pmatrix} \Delta_{m1,n1} & \Delta_{m1,n2} & \Delta_{m1,n3} \\ \Delta_{m2,n1} & \Delta_{m2,n2} & \Delta_{m2,n3} \\ \Delta_{m3,n1} & \Delta_{m3,n2} & \Delta_{m3,n3} \end{pmatrix}, \quad (4.54)$$

donde $m, n = A, B, C$ y $\Delta_{ml,nk}$ es el acoplamiento entre el l -ésimo sitio del trímero m con el k -ésimo sitio del trímero n . Un hamiltoniano transformado se obtiene si usamos la matriz 3×3 que diagonaliza H_0 , *i.e.* $\tilde{H} = U^\dagger H_0 U$ donde $U = \mathbf{1} \otimes U_{3 \times 3}$. Los elementos de matriz transformados se pueden calcular analíticamente:

$$(U_{3 \times 3})_{p,q} = \frac{1}{\sqrt{3}} \exp \left[\frac{i2\pi}{3} (2+p)q \right], \quad (4.55)$$

$$\left(\tilde{\Delta}_{mn} \right)_{pq} = \frac{e^{4\pi i(q-p)/3}}{3} \sum_{k,k'=1}^3 e^{2\pi i(k'q-kp)/3} \Delta_{mk,nk'}. \quad (4.56)$$

Ahora, el hamiltoniano se puede expresar en la base propia de C_3 , y reordenando los elementos de matriz nos lleva a un hamiltoniano dividido en tres bloques:

$$H = \begin{pmatrix} S_1 & (\Delta'_{AB})_{33} & (\Delta'_{AC})_{33} & 0 & (\Delta'_{AB})_{31} & (\Delta'_{AC})_{31} & 0 & (\Delta'_{AB})_{32} & (\Delta'_{AC})_{32} \\ (\Delta'_{AB})_{33}^* & S_2 & (\Delta'_{BC})_{33} & (\Delta'_{AC})_{13}^* & 0 & (\Delta'_{BC})_{31} & (\Delta'_{AC})_{23}^* & 0 & (\Delta'_{BC})_{32} \\ (\Delta'_{AC})_{33}^* & (\Delta'_{BC})_{33}^* & S_3 & (\Delta'_{AC})_{13}^* & (\Delta'_{BC})_{13}^* & 0 & (\Delta'_{AC})_{23}^* & (\Delta'_{BC})_{23}^* & 0 \\ 0 & (\Delta'_{AB})_{13} & (\Delta'_{AC})_{13} & D_{11} & (\Delta'_{AB})_{11} & (\Delta'_{AC})_{11} & 0 & (\Delta'_{AB})_{12} & (\Delta'_{AC})_{12} \\ (\Delta'_{AB})_{31}^* & 0 & (\Delta'_{BC})_{13} & (\Delta'_{AB})_{11}^* & D_{21} & (\Delta'_{BC})_{11}^* & (\Delta'_{AB})_{21}^* & 0 & (\Delta'_{BC})_{12}^* \\ (\Delta'_{AC})_{31}^* & (\Delta'_{BC})_{31}^* & 0 & (\Delta'_{AC})_{11}^* & D_{31} & (\Delta'_{BC})_{11}^* & (\Delta'_{AC})_{21}^* & (\Delta'_{BC})_{21}^* & 0 \\ 0 & (\Delta'_{AB})_{23} & (\Delta'_{AC})_{23} & 0 & (\Delta'_{AB})_{21} & (\Delta'_{AC})_{21} & D_{12} & (\Delta'_{AB})_{22} & (\Delta'_{AC})_{22} \\ (\Delta'_{AB})_{32}^* & 0 & (\Delta'_{BC})_{23} & (\Delta'_{AB})_{12}^* & 0 & (\Delta'_{BC})_{21} & (\Delta'_{AB})_{22}^* & D_{22} & (\Delta'_{BC})_{22}^* \\ (\Delta'_{AC})_{32}^* & (\Delta'_{BC})_{32}^* & 0 & (\Delta'_{AC})_{12}^* & (\Delta'_{BC})_{12}^* & 0 & (\Delta'_{AC})_{22}^* & (\Delta'_{BC})_{22}^* & D_{32} \end{pmatrix} \quad (4.57)$$

El rompimiento de la simetría global C_3 de cada trímero se introduce por una rotación de sólo uno de los trímeros internos, y como consecuencia, surgen puntos triples de degeneración. Hay que notar que los dobletes nunca se desdoblan. El rompimiento de simetría C_3 se logra por medio de deformaciones de los triángulos internos del trímero, y en este caso, obtenemos desdoblamiento de dobletes.

Siguiendo el modelo propuesto para $SU(2)$, construimos cadenas lineales hechas de celdas unitarias rotantes. El espectro está conformado por dos bandas, la banda superior mostrado en la figura ?? (a) se exhiben bandas que están aparentemente solapadas. Por otro lado, la banda inferior que se visualiza en la figura ?? (b) es densa. El modelo presenta bandas planas cuando las simetrías C_3 global e interna están rotas, y son de potencial interés debido a estudios recientes en superconductores.

Finalmente, el modelo puede generalizarse para redes bidimensionales, de la misma manera que se realizó para el caso $SU(2)$, con el objetivo de emular el confinamiento debido a campos de color $SU(3)$.

Capítulo 5

Conclusiones

Se estudiaron los sistemas con simetría $C_6, C_3 \times Z_2$ y $C_3 \times C_3$ usando el modelo de amarre fuerte con un hamiltoniano escrito en términos de acoplamientos y operadores de simetría. Dada la generalidad del sistema, se abordaron tanto aspectos aplicados como las propiedades matemáticas de los espectros. Dentro de las aplicaciones prácticas, tenemos la descripción de las moléculas de benceno y boraceno, para las cuales se obtuvieron las funciones propias y un esquema de corrientes cuando un campo magnético es introducido en este tipo de arreglos. Por parte de los espectros de energía, se encontró que los niveles gozan de una super simetría, esto ayuda a explicar algunas peculiaridades del espectro como la simetría bajo reflexión[?]. En un aspecto más matemático, se construyó un espacio fase discreto de dimensión par, lo cual en la literatura no existía hasta entonces. El espacio/d fase de 6×6 se usó para explicar el punto triple de degeneración que emerge cuando se hacen rotar los dímeros en un sistema $C_3 \times Z_2$ [?]. Bajo la misma idea de los dos sistemas anteriores, se construyó un arreglo con simetría $C_3 \times C_3$, para el cuál se obtuvo con cálculos numéricos el espectro cuando dos trímeros permanecen fijos y uno rota entre 0 y $2\pi/3$ rompiendo así la simetría C_3 global. Este espectro está conformado por seis niveles por lo que se concluye que existe degeneración. Al romper C_3 global y C_3 interna modificando los trímero para volverlos equiláteros, se obtienen nueve niveles de energía para algunas configuraciones del ángulo de rotación. Los sistemas antes mencionados sirvieron como base para la entender diferentes estructuras poliméricas de amarre fuerte y usarlas en la construcción de redes con grados de libertad internos para la emulación de teorías de norma $SU(N)$.

Con respecto a la emulación de los campos $U(1)$ y $SU(2)$, se propuso una cadena compuesta de dímeros rotantes con dos parámetros geométricos que modulan los acoplamientos: por una parte la constante de red, representada por la distancia entre centros de dímeros vecinos; y por la otra la distancia intradimérica que modifica el acoplamiento interno del dímero. Existe un conjunto de parámetros para los cuales el espectro contiene dos bandas casi desacopladas, lo que corresponde a dos teorías $U(1)$ desacopladas, y es en este régimen es donde la mariposa de Hofstadter emerge. Por el contrario, cuando estas dos bandas están mezcladas, tenemos una la emulación de una teoría $SU(2)$. Para este último caso, el fenómeno de confinamiento logró mediante una red cuadrada compuesta de dímeros. Usando cálculos numéricos, se mostró la existencia de

estados localizados en el centro del arreglo que coalesce con la banda de propagación en el límite cuando la constante de red es mucho más grande que la longitud de un dímero. Siguiendo el mismo espíritu de $SU(2)$, se propuso una cadena hecha de trímeros para analizar el caso de $SU(3)$, el espectro de energía contiene bandas solapadas lo que está en concordancia con lo obtenido en el espectro degenerado de $C_3 \times C_3$.

Todos los sistemas abordados en este son realizables en construcciones artificiales. Esto es posible gracias a la construcción de modelos sustentados en principios básicos como los grupos de simetría de un sistema, lo cual permite que su descripción sea general y aplicable en sistemas electromagnéticos, moleculares, acústicos etc. Como trabajo futuro, podemos mencionar la aplicación de las emulaciones del campo magnético en el estudio de propagación de ondas en sistemas mesoscópicos. También podemos mencionar el estudio del efecto Hall cuántico en nuestros modelos de redes deformadas analizando la conductancia usando el método de Landauer-Büttiker[?].

Apéndice A

Mapeo unitario entre los operadores de traslación en 1D. Dualidad de Aubry

Este apéndice está dedicado a mostrar el mapeo unitario que existe entre el hamiltoniano de Harper y un operador de amarre fuerte sin potencial pero con acoplamientos variables. Para facilitar los cálculos, trabajaremos en una representación donde la transformación de el operador de número de sitio actúa sobre funciones suaves, es decir, $T \rightarrow e^{iap}$, $p = -i\hbar\partial_x$, $N \rightarrow x/a$. Si actuamos sobre una base completa de Wannier $\phi_b(x - a)$ no representa ninguna pérdida de generalidad. Debemos ser cuidadosos en construir una transformación que nos lleve de funciones periódicas (periodo a , índice de banda b) a funciones periódicas. Tomemos la siguiente transformación unitaria del hamiltoniano:

$$\tilde{H} = UHU^\dagger, \quad UU^\dagger = \mathbf{1}. \quad (\text{A.1})$$

El operador unitario U se puede expresar como:

$$U = V(N) \exp\{i(\alpha p^2 + \beta p)\}, \quad (\text{A.2})$$

tal que $V(N)V^\dagger(N) = \mathbf{1}$, $\alpha, \beta \in \mathcal{R}$. Podemos ver que U no cambia la naturaleza de la red si α y β se escogen apropiadamente. De esta manera tenemos:

$$T = e^{iap}, \quad E \equiv e^{i\omega N} = e^{i\omega x/a} \quad (\text{A.3})$$

y definiendo $v \equiv \omega/a$, E se puede escribir como $E \equiv e^{ivx}$, donde $x = i\hbar\partial_p$. Con estas definiciones, el hamiltoniano de Harper (operador Casi Mathieu) adquiere la siguiente forma:

$$H = T + T^\dagger + \Lambda (E + E^\dagger), \quad (\text{A.4})$$

para $\nu = 0$, el cual es isoespectral a cualquier $\nu \neq 0$. Una sustitución directa nos lleva a

$$\begin{aligned} UTU^\dagger &= V(N)e^{i(\alpha p^2 + \beta p)}T e^{-i(\alpha p^2 + \beta p)}V^\dagger(N) \\ &= V(N)TV^\dagger(N) = V(x/a)TV^\dagger(x/a) \\ &= V(N)V^\dagger(N+1)T. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Por otra parte tenemos

$$UEU^\dagger = V(N)e^{i(\alpha p^2 + \beta p)} E e^{-i(\alpha p^2 + \beta p)} V^\dagger(N) \quad (\text{A.6})$$

junto con

$$Ef(p) = f(p - v)E, \quad (\text{A.7})$$

lo que nos lleva a la siguiente expresión

$$\begin{aligned} UEU^\dagger &= V(N)e^{i(\alpha p^2 + \beta p)} e^{-i[\alpha(p-v)^2 + \beta(p-v)]} EV^\dagger(N) \\ &= V(N)e^{i(2\alpha vp + \beta v - \alpha v^2)} EV^\dagger(N) \\ &= e^{i(\beta v - \alpha v^2)} V(x/a) e^{i2\alpha vp} EV^\dagger(x/a) \\ &= e^{i(\beta v - \alpha v^2)} V(x/a) e^{i2\alpha vp} EV^\dagger(x/a) \\ &= e^{i\beta v - \alpha v^2} V(x/a) V^\dagger\left(\frac{x + 2\alpha v}{a}i\right) e^{iqap} E. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Esto es un resultado cerrado dentro del espacio de las traslaciones de la red si $2\alpha v = qa$, $q \in \mathcal{Z}$. La transformación de E es:

$$\begin{aligned} UEU^\dagger &= e^{i\beta v - \alpha v^2} V(N) V^\dagger(N + q) T^q E \\ &= e^{i\beta v - \alpha v^2} V(N) V^\dagger(N + q) ET^q e^{ivaq} \\ &= e^{i(\beta v - \alpha v^2 + vaq)} V(N) V(N + q) ET^q \\ &= e^{i(\beta v - qav/2 + vaq)} V(N) V^\dagger(N + q) ET^q \\ &= e^{i\chi_q} V(N) V(N + q) ET^q. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Por lo tanto, el nuevo hamiltoniano será:

$$\tilde{H} = V(N) V^\dagger(N + 1) T + \Lambda e^{i\chi_q} V(N) V^\dagger(N + q) ET^q + h.c. \quad (\text{A.10})$$

Este hamiltoniano representa un operador de amarre fuerte a múltiples vecinos. Dado que los parámetros de U se pueden escoger a voluntad, para $q = 1$ or $q = -1$, H se reduce a un hamiltoniano a primeros vecinos. Por último, reconocemos que cada modelo de amarre fuerte a primeros vecinos en 1D llevarse a la forma de un hamiltoniano con acoplamientos reales y positivos por medio de transformaciones de norma. En general tenemos:

$$\Delta = V(N) V^\dagger(N + 1) (1 + \Lambda e^{\pm i\chi_q} e^{\pm i\omega N}). \quad (\text{A.11})$$

Reconocemos la naturaleza unitaria de $V(N)$ tal que $VV^\dagger = \mathbf{1}$ implica $V = \exp(i\Phi(N))$ y $V(N) V^\dagger(N + 1) = \exp\{i(\Phi(N) - \Phi(N + 1))\} \equiv \exp(-i\delta\Phi(N))$ lo cual representa sólo un factor de fase, entonces

$$\Delta = e^{i\Omega(N)} |\Delta(N)|, \quad \tilde{U} = e^{i\sum_{j=-\infty}^n \Omega(N+j)} \quad (\text{A.12})$$

$$T\tilde{U}^\dagger = e^{-i\sum_{j=\infty}^{n+1} \Omega(N+j)} T \quad (\text{A.13})$$

$$\tilde{U}T\tilde{U}^\dagger = e^{-i\Omega(N+n+1)} T. \quad (\text{A.14})$$

Si escogemos $n = -1$ obtendremos la siguiente expresión para $|\Delta|$

$$|\Delta| = \sqrt{1 + \Lambda^2 + 2\Lambda \cos(\omega N + \chi_\pm)}, \quad (\text{A.15})$$

la cual es la expresión que buscada. Por lo tanto, las deformaciones geométricas son equivalente a energía en sitio cuasiperiódicas.

En el caso de un potencial poco intenso, podemos analizar el límite $\Lambda \ll 1$ y dar una expresión para el acoplamiento:

$$|\Delta| \simeq 1 + \Lambda \cos(\omega N + \chi_{\pm}), \quad \Lambda \ll 1, \quad (\text{A.16})$$

El cual concuerda con correcciones a primer orden en los acoplamientos efectivos del problema de dímeros rotantes.

Referencias

- D. L. Cooper, J. Gerratt, and M. Raimondi, *Nature* **323**, 699 (1986).
- O. T. Benfey, *J. Chem. Educ.* **35**, 21 (1958).
- D. R. Armstrong and D. T. Clark, *J. Chem. Soc. D* , 99 (1970).
- Y. Hernández-Espinosa, R. A. Méndez-Sánchez, and E. Sadurní, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53**, 105101 (2020).
- J. W. Moskowitz and M. P. Barnett, *J. Chem. Phys.* **39**, 1557 (1963).
- B. Kiran, A. K. Phukan, and E. D. Jemmis, *Inorg. Chem.* **40**, 3615 (2001).
- W. Shen, M. Li, Y. Li, and S. Wang, *Inorg. Chim. Acta* **360**, 619 (2007).
- I. D. Clark and D. C. Frost, *J. Am. Chem. Soc.* **89**, 244 (1967).
- E. Sadurní and Y. Hernández-Espinosa, *J. Phys. A: Math. Theor.* **52**, 295204 (2019).
- U. Kuhl, S. Barkhofen, T. Tudorovskiy, H.-J. Stöckmann, T. Hossain, L. de Forges de Parny, and F. Mortessagne, *Phys. Rev. B* **82**, 094308 (2010).
- S. Bittner, B. Dietz, M. Miski-Oglu, P. Oria Iriarte, A. Richter, and F. Schäfer, *Phys. Rev. B* **82**, 014301 (2010).
- M. Bellec, U. Kuhl, G. Montambaux, and F. Mortessagne, *Phys. Rev. B* **88**, 115437 (2013).
- J. A. Franco-Villafañe, E. Sadurní, S. Barkhofen, U. Kuhl, F. Mortessagne, and T. H. Seligman, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 170405 (2013).
- E. Sadurní and J. A. Franco-Villafañe and U. Kuhl and F. Mortessagne and T. H. Seligman, *New J. Phys.* **15**, 123014 (2013).
- E. Sadurní, T. H. Seligman, and F. Mortessagne, *New J. Phys.* **12**, 053014 (2010).
- S. Barkhofen, M. Bellec, U. Kuhl, and F. Mortessagne, *Phys. Rev. B* **87**, 035101 (2013).
- E. Rivera-Mociños and E. Sadurní, *J. Phys. A: Math. Theor.* **49**, 175302 (2016).

- M. Polini, F. Guinea, M. Lewenstein, H. C. Manoharan, and V. Pellegrini, *Nat. Nanotechnol.* **8**, 625 (2013).
- I. Bloch, *Nature Physics* **1**, 23 (2005).
- F. Dreisow, M. Heinrich, R. Keil, A. Tünnermann, S. Nolte, S. Longhi, and A. Szameit, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 143902 (2010).
- F. Ramírez-Ramírez, E. Flores-Olmedo, G. Báez, E. Sadurní, and R. A. Méndez-Sánchez, *Sci. Rep.* **10**, 10229 (2020).
- Y. Hernández-Espinosa, A. S. Rosado, and E. Sadurní, *J. Phys. A: Math. Theor.* **49**, 485201 (2016).
- M. I. Katsnelson, *Eur. Phys. J. B* **51**, 157 (2006).
- M. I. Katsnelson, *Mater. Today* **10**, 20 (2007).
- M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nature Physics* **2**, 620 (2006).
- K. K. Gomes, W. Mar, W. Ko, F. Guinea, and H. C. Manoharan, *Nature* **483**, 306 (2012).
- J. Struck, C. Ölschläger, M. Weinberg, P. Hauke, J. Simonet, A. Eckardt, M. Lewenstein, K. Sengstock, and P. Windpassinger, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 225304 (2012).
- L. Fallani, J. E. Lye, V. Guarrera, C. Fort, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 130404 (2007).
- D. Felbacq and M. Antezza, *SPIE Newsroom* (2012).
- E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2059 (1987).
- P. Bienstman, S. Assefa, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, G. S. Petrich, and L. A. Kolodziejski, *J. Opt. Soc. Am. B* **20**, 1817 (2003).
- G. Roati, M. Zaccanti, C. D’Errico, J. Catani, M. Modugno, A. Simoni, M. Inguscio, and G. Modugno, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 010403 (2007).
- O. Morsch and M. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 179 (2006).
- A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Mater.* **6**, 183 (2007).
- A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- J. J. Engelberts, R. W. A. Havenith, J. H. van Lenthe, L. W. Jenneskens, and P. W. Fowler, *Inorg. Chem.* **44**, 5266 (2005).
- W. k. Wootters, *Ann. Phys.* **1-21**, 176 (1987).
- K. S. Gibbons, M. J. Hoffman, and W. K. Wootters, *Phys. Rev. A* **70**, 062101 (2004).

- A. Vourdas and C. Banderier, *J. Phys. A: Math.Theor.* **43**, 042001 (2010).
- A. Vourdas and C. Banderier, *J. Phys. A: Math. Theor.* **44**, 149501 (2011).
- N. M. Atakishiyev and K. B. Wolf, *J. Opt. Soc. Am. A* **14**, 1467 (1997).
- A. B. Klimov, J. L. Romero, and H. de Guise, *J. Phys. A: Math. Theor.* **50**, 323001 (2017).
- J. P. Dowling, G. S. Agarwal, and W. P. Schleich, *Phys. Rev. A* **49**, 4101 (1994).
- A. B. Klimov and S. M. Chumakov, *Rev. Mex. Fis.* , 317 (2002).
- L. Cohen and M. O. Scully, *Found. Phys.* **16**, 295 (1986).
- N. M. Atakishiyev, S. M. Chumakov, and K. B. Wolf, *J. Math. Phys.* **39**, 6247 (1998).
- K. Zhao, M. Zhao, Z. Wang, and Y. Fan, *Phys. E: Low-dimens. Syst. and Nanostructures* **43**, 440 (2010).
- W. Harshbarger, G. H. Lee, R. F. Porter, and S. H. Bauer, *Inorg. Chem.* **8**, 1683 (1969).
- K. Watanabe, T. Taniguchi, and H. Kanda, *Nature Mater.* **3**, 404 (2004).
- O. Castaños, A. Frank, R. López, and L. F. Urrutia, *Phys. Rev. D* **43**, 544 (1991).
- E. Sadurní, *AIP Conf. Proc.* **1334**, 249 (2011).
- Y. Hernández-Espinosa, A. S. Rosado, and E. Sadurní, *J. Phys. A* **49**, 485201 (2016).
- A. Clairon, C. Salomon, S. Guellati, and W. D. Phillips, *EPL* **16**, 165 (1991).
- M. A. Kasevich, E. Riis, S. Chu, and R. G. DeVoe, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 612 (1989).
- L. Tagliacozzo, A. Celi, P. Orland, M. W. Mitchell, and M. Lewenstein, *Nat. Commun.* **4**, 2615 (2013).
- Y. Last, *Proc. XIth Int. Congress of Mathematical Physics (Paris 1994)* , 366 (1995).
- P. G. Harper, *Proc. Phys. Soc. A* **68**, 874 (1955).
- D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- U. Kuhl and H. J. Stockmann, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3232 (1998).
- O. Richoux and V. Pagneux, *Europhys. Lett.* **59**, 34 (2002).
- X. Ni, K. Chen, M. Weiner, D. J. Apigo, C. Prodan, A. Alù, E. Prodan, and A. B. Khanikaev, *Communications Physics* **2** (2019).

- A. Avila and K. Raphaël, *Annals of Mathematics* **164**, 911 (2006).
- A. Avila and S. Jitomirskaya, in *Mathematical Physics of Quantum Mechanics*, edited by J. Asch and A. Joye (Springer Berlin Heidelberg, 2006) pp. 5–16.
- P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- R. Rajaraman, *Solitons and instantons. An introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory* (North-Holland, 1987).
- A. C. Scott, F. Y. F. Chu, and D. W. McLaughlin, *Proc. IEEE* **61**, 1443 (1973).
- Landauer–Büttiker formalism, in *Scattering Matrix Approach to Non-Stationary Quantum Transport*, pp. 1–33.