

00362
9



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FISICAS

SOLUCION EN FORMA EXACTA DEL PROBLEMA DE
TRES PARTICULAS DENTRO DEL HAMILTONIANO
DE HUBBARD GENERALIZADO.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRA EN CIENCIAS (FISICAS)

P R E S E N T A :

FIS. MARGARITA MAYORAL VILLA

DIRECTOR DE TESIS: DR. ORACIO NAVARRO CHAVEZ



MEXICO, D.F.



2002



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

22300

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA

NO SE PUEDE
REPRODUCIR SIN
PERMISO DE ORIGEN

A mis Padres

A mis hijos Teresa, Arturo y Catalina

मानव संसाधन विकास विभाग, दिल्ली

**La filosofía consiste en detenerse
cuando la antorcha de la física
no nos alumbra.**

Locke

Deseo agradecer a todas aquellas personas que me han apoyado para poder realizar la presente tesis.

Agradezco a mi asesor de tesis, el Dr. Oracio Navarro Chávez, por haberme permitido la experiencia de haber trabajado junto a él, pues ésta ha ayudado a consolidar mi carácter dentro de la investigación.

Agradezco también a los profesores que integran el jurado: Dr. Manuel de Llano de la Garza, Dr Jacques Soullard Santrais, Dr. Gerardo García Naumis, Dr Rafael Baquero Parra, por la revisión y comentarios que realizaron del presente trabajo.

En especial agradezco a mis hermanos, Juan y Estela, pues ellos han estado junto a mí durante el transcurso de mis estudios, siempre dándome comentarios muy importantes para mí, así como agradezco a todos mis demás hermanos Polo, Paty, etc. Pues de alguna u otra forma han estado presentes. Muy especialmente agradezco a Alberto, mi esposo, pues también he tenido mucho apoyo y comprensión de su parte en los momentos más críticos.

Por último y muy especialmente quiero agradecer a mis padres, pues sin ellos no hubiera logrado llegar a este momento tan importante para mí, y que estoy cierta, es igualmente importante para ellos. Les agradezco todo el apoyo que me han brindado, la comprensión, y su fe en mí para poder obtener este trabajo, así como también los consejos y el cariño que siempre me han dado. Gracias Papá. Gracias Mamá. Y por supuesto les agradezco as mis hijos Teresa, Arturo y Catalina todo el cariño que me han dado desde siempre, así como su presencia junto a mí.

Solución en forma exacta del problema de
tres partículas dentro del Hamiltoniano de
Hubbard generalizado.

Fís. Margarita Mayoral Villa

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Handwritten text, likely bleed-through from the reverse side of the page. The text is mostly illegible due to fading and bleed-through.

WCO 21221
MEDICO SU ALLIAT

Índice General

Resumen	iii
Introducción	v
1 Generalidades	1
1.1 Teorema de Bloch	2
1.2 Funciones de Wannier	7
1.3 Modelo de Amarre Fuerte	8
2 Correlación electrónica en sistemas periódicos	15
2.1 Modelo de Hubbard	16
2.2 Solución en el Espacio K	20
2.3 Solución en el Espacio Real	26
2.3.1 Método del Mapeo	27
3 Problema de tres partículas	37
3.1 Extensión del Espacio de Estados	37
3.1.1 Mapeo en el Caso de Tres Partículas	41
3.2 Solución Analítica	49
3.3 Solución numérica	53
4 Conclusiones	57
A Funciones de Green	59
B Problema de impurezas	63

[The following text is extremely faint and illegible, appearing to be a table of contents or index with multiple columns of text.]

Resumen

En esta tesis se estudia la correlación electrónica de tres partículas con espines antiparalelos en una cadena lineal mediante el modelo de Hubbard generalizado, el cual incluye interacciones entre partículas en el mismo sitio y en sitios vecinos, así como una amplitud de salto dependiente de la ocupación. El estudio se lleva a cabo haciendo uso del método del espacio de estados, que consiste en mapear el problema correlacionado de muchos cuerpos en uno equivalente de amarre fuerte con impurezas, tanto de sitio como de enlace, en un espacio tridimensional. A su vez este espacio se puede proyectar a una red bidimensional aprovechando la simetría traslacional de las impurezas y aplicando una generalización matemática del método de proyección. Se analiza la correlación electrónica mediante el cálculo de la energía de amarre, es decir, la diferencia de energías entre el estado ligado y el no ligado de más baja energía, para diferentes valores tanto de las amplitudes de salto como de los potenciales de interacción. Finalmente se calcula numéricamente el diagrama de fase para este sistema, encontrando una clara asimetría electrón-hueco.

RESUMEN

El presente artículo tiene como objetivo principal describir el uso de la metodología de la investigación cualitativa en el estudio de la cultura organizacional. Para ello, se revisa la literatura sobre el tema, se describen los fundamentos teóricos de la metodología cualitativa y se presentan ejemplos de su aplicación en el estudio de la cultura organizacional. Se discute la importancia de la metodología cualitativa para comprender la cultura organizacional y se concluye que esta metodología es una herramienta valiosa para el estudio de la cultura organizacional.

El presente artículo tiene como objetivo principal describir el uso de la metodología de la investigación cualitativa en el estudio de la cultura organizacional. Para ello, se revisa la literatura sobre el tema, se describen los fundamentos teóricos de la metodología cualitativa y se presentan ejemplos de su aplicación en el estudio de la cultura organizacional. Se discute la importancia de la metodología cualitativa para comprender la cultura organizacional y se concluye que esta metodología es una herramienta valiosa para el estudio de la cultura organizacional.

Introducción

El descubrimiento de los superconductores de alta temperatura de transición [1] ha dado lugar a una intensa investigación tanto de los sistemas de baja dimensión como de la correlación electrónica en los sólidos [2, 3, 4]. Los sistemas de baja dimensión se han estudiado históricamente por su simplicidad matemática y por que son útiles como límites analíticos de los sistemas tridimensionales. Estos sistemas han despertado recientemente el interés de muchos físicos debido a sus propiedades peculiares. En primer lugar, los sistemas de baja dimensión son inestables ante perturbaciones, ya que tienen un número reducido de primeros vecinos y en consecuencia presentan las inestabilidades de Peierls [5]. Asimismo, las propiedades de transporte son enteramente diferentes en dichos sistemas, debido a la localización de las excitaciones. Finalmente, se cree que los nuevos cerámicos superconductores de alta T_c son producto de la bidimensionalidad del sistema.

Por otro lado, el comportamiento de los sistemas de muchos cuerpos fuertemente correlacionados sigue siendo un problema abierto y de sumo interés. Dentro de este campo de investigación destaca el estudio de la formación local de pares de electrones, ya que se cree que es relevante para explicar una variedad de fenómenos tales como las propiedades no convencionales en los materiales superconductores cerámicos [6] [3], la existencia de ondas de densidad de carga en sistemas con bandas angostas [7], la conductividad en polímeros y la superconductividad debida a fermiones pesados, por mencionar algunas.

Los pares de electrones pueden formarse en sistemas de bandas angostas debido a una interacción efectiva atractiva de corto alcance, la cual puede explicarse a través de mecanismos microscópicos tales como el acoplamiento de electrones a modos fonónicos locales o bien a grados internos de libertad como lo son los excitones, plasmones u otros subsistemas electrónicos [3].

Estas inestabilidades electrónicas muestran la importancia que tiene la

interacción electrón-electrón. En general, la interacción entre las excitaciones elementales de los sólidos provoca una ruptura de simetría de estos sistemas, es decir, la formación de un nuevo estado base. Dicha ruptura de simetría constituye el tema de mayor importancia dentro del problema de muchos cuerpos.

Describir, en forma completa, la interacción electrón-electrón ($e-e$) dentro de un sólido es un problema complicado, obviamente existe interacción $e-e$ directa de tipo coulombiano. Sin embargo, los electrones en un sólido pueden interactuar *indirectamente* por medio de algunas excitaciones elementales; tal es el caso de la interacción $e-e$ mediada por fonones, la cual puede analizarse a través del Hamiltoniano de Fröhlich [8].

Una de las formas más simples y generales de estudiar la correlación electrónica es a través del modelo de Hubbard [9, 11], puesto que dicho modelo incluye implícitamente los efectos de todo tipo de interacciones electrónicas por medio de los parámetros del hamiltoniano. Cabe mencionar que dicho hamiltoniano considera sólo la interacción entre dos electrones que se encuentran en el mismo sitio, como una aproximación de la situación real del sistema. Cabe señalar que, en algunos casos, se debe incluir una interacción a primeros vecinos con el fin de considerar ciertas propiedades observadas en algunos materiales, como por ejemplo, las propiedades magnéticas del material *NMP - TCNQ* [10]; lo cual da lugar al modelo de Hubbard extendido [11].

En los últimos años el modelo de Hubbard ha sido intensamente estudiado utilizando diferentes aproximaciones: la aproximación del campo medio [6], el método de los bosones esclavos [12, 13], la técnica de Monte Carlo [14] y el grupo de Renormalización [15] entre otras. El hamiltoniano de Hubbard se ha resuelto en forma exacta en el caso de una dimensión [16] en el cual para la banda media llena los resultados muestran que el estado base es un aislante para $U \neq 0$ y un conductor para $U = 0$, es decir, hay una transición de Mott en $U = 0$. También existe solución exacta para el caso de dimensión infinita [18].

La correlación electrónica para el límite de baja densidad, y sobre todo para el caso de dos partículas, ha sido intensamente estudiada por métodos analíticos y numéricos usando el modelo de Hubbard [3, 19, 20], incluyendo diferentes tipos de desorden en este modelo [21, 22], y además incluyendo la interacción de carga ligada [23, 24, 25, 26, 27, 28]. La pregunta inmediata sería cuál es el comportamiento de las propiedades físicas (p. ej. energía de enlace), ante la presencia de un tercer electrón. Esta clase de preguntas

puede ser de gran ayuda para entender el problema de N cuerpos. El caso de la correlación de tres partículas no ha sido tan ampliamente estudiado como el de dos partículas. Mattis [29] consideró este problema en su estudio de estabilidad de pares para el modelo de Hubbard con U atractivo; así mismo, Fabrizio [30] realizó un análisis del caso con U repulsivo en su discusión del estado base por medio de un análisis asintótico.

Con esto en mente, en la presente tesis se investiga con detalle la energía de amarre tanto de tres electrones, como el de tres huecos en una cadena lineal, usando el modelo de Hubbard y el método de mapeo. Dicho método consiste en mapear el problema de Hubbard para un sistema de muchos cuerpos, a un problema equivalente de un solo cuerpo con un hamiltoniano de amarre fuerte pero en un espacio de mayor dimensión, donde el problema se puede resolver de forma exacta.

En particular, usamos el hamiltoniano generalizado de Hubbard el cual contiene un término de salto correlacionado y dos parámetros de interacción, y llevamos a cabo una extensión del método del mapeo con el fin de incluir el término de carga ligada.

El estudio se ha llevado a cabo analizando los estados ligados de tres electrones y el caso de tres huecos, tanto con espines antiparalelos como con espines paralelos. Analizamos el estado ligado de más baja energía, es decir, cuando $k = 0$ para electrones y cuando $k/\sqrt{3} = \pi$ para el caso de huecos. Los resultados que hemos obtenido reflejan una clara asimetría de la energía de enlace entre huecos y electrones.

La presente tesis está organizada de la siguiente forma: En el primer capítulo se revisan algunos conceptos básicos de la teoría cuántica de electrones en sistemas cristalinos y se introduce el modelo de amarre fuerte considerando también el caso de impurezas con el fin de dar un marco general a nuestro problema. En el segundo capítulo se estudia la correlación electrónica, el modelo de Hubbard, su solución en el espacio real y en el espacio K , incluyendo una explicación detallada del método del mapeo. En el tercer capítulo se estudia concretamente el problema de tres partículas, se explica con detalle la extensión del método del mapeo y finalmente se presentan los resultados tanto analíticos como numéricos obtenidos para este caso. En el cuarto y último capítulo se dan las conclusiones obtenidas en este problema.

de las ciencias de la vida y de la medicina. En consecuencia, el uso de la informática en la enseñanza de la física debe ser una herramienta que permita al estudiante comprender los conceptos físicos y aplicarlos en situaciones reales. Este libro pretende ser una guía para el uso de la informática en la enseñanza de la física, ofreciendo ejemplos de cómo utilizar software de simulación y herramientas de análisis de datos para mejorar el aprendizaje de los estudiantes. El libro está dividido en tres partes: la primera parte trata sobre los fundamentos de la informática y su aplicación en la enseñanza de la física; la segunda parte trata sobre el uso de software de simulación para la enseñanza de la física; y la tercera parte trata sobre el uso de herramientas de análisis de datos para la enseñanza de la física. Este libro es una herramienta valiosa para los profesores de física que buscan mejorar su enseñanza y para los estudiantes que buscan comprender mejor los conceptos físicos.

El uso de la informática en la enseñanza de la física ha crecido significativamente en los últimos años, gracias a la disponibilidad de herramientas de simulación y de análisis de datos. Estas herramientas permiten a los estudiantes visualizar conceptos abstractos y aplicarlos en situaciones reales. Sin embargo, el uso de la informática en la enseñanza de la física no debe ser un fin en sí mismo, sino una herramienta que permita al estudiante comprender los conceptos físicos y aplicarlos en situaciones reales. Este libro pretende ser una guía para el uso de la informática en la enseñanza de la física, ofreciendo ejemplos de cómo utilizar software de simulación y herramientas de análisis de datos para mejorar el aprendizaje de los estudiantes.

Este libro está dividido en tres partes: la primera parte trata sobre los fundamentos de la informática y su aplicación en la enseñanza de la física; la segunda parte trata sobre el uso de software de simulación para la enseñanza de la física; y la tercera parte trata sobre el uso de herramientas de análisis de datos para la enseñanza de la física. Este libro es una herramienta valiosa para los profesores de física que buscan mejorar su enseñanza y para los estudiantes que buscan comprender mejor los conceptos físicos. El uso de la informática en la enseñanza de la física ha crecido significativamente en los últimos años, gracias a la disponibilidad de herramientas de simulación y de análisis de datos. Estas herramientas permiten a los estudiantes visualizar conceptos abstractos y aplicarlos en situaciones reales. Sin embargo, el uso de la informática en la enseñanza de la física no debe ser un fin en sí mismo, sino una herramienta que permita al estudiante comprender los conceptos físicos y aplicarlos en situaciones reales.

Capítulo 1

Generalidades

La ecuación de Schrödinger suele ser el punto de partida para muchos de los cálculos de las propiedades de un sólido. El hamiltoniano que describe a un sólido debe contener la energía cinética de todas las partículas que componen al sistema, así como sus energías de interacción. Dentro de una buena aproximación, las propiedades de un sólido pueden separarse en propiedades electrónicas y propiedades dinámicas de la red [31]. Esta aproximación, llamada adiabática, está basada en el siguiente argumento: la masa de los iones es mucho mayor que la de los electrones por lo que los iones sólo pueden responder de manera muy lenta a un cambio en la configuración de los electrones mientras que éstos responden casi instantáneamente a un cambio en las posiciones de los iones. En lo que respecta al movimiento de los electrones, es únicamente la configuración instantánea de los iones la que tiene interés. Así, dentro de la aproximación adiabática, es posible estudiar el movimiento de los electrones en el potencial estático producido por los iones. La dificultad radica en la interacción entre los electrones. Sin embargo, la aproximación de Hartree-Fock [32] permite reducir el problema de muchos electrones al problema de un solo electrón en un potencial efectivo. Este potencial efectivo consiste en el potencial producido por los iones en sus posiciones de equilibrio, más un potencial promedio aportado por todos los demás electrones y que contiene promedios de las interacciones coulombiana y de intercambio. Así, la ecuación de Schrödinger en la aproximación de un sólo electrón puede escribirse como:

$$H\psi(\mathbf{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

donde $V(\mathbf{r})$ es el potencial efectivo para un electrón, \hbar la constante de Planck sobre 2π , m la masa del electrón y E su energía.

En la aproximación en la cual los iones permanecen fijos en sus posiciones de equilibrio, la parte del potencial debida a los iones situados en una red periódica es claramente invariante bajo todas las operaciones del grupo espacial del cristal. Esto también es cierto para el término de interacción de la aproximación de Hartree-Fock [32]. Por consiguiente el hamiltoniano de la Ec. (1.1) es invariante bajo las operaciones del grupo espacial del cristal dado, las propiedades de simetría de dicho hamiltoniano proporcionan información sobre la estructura de las posibles soluciones (funciones propias y valores propios).

1.1 Teorema de Bloch

Algunos resultados importantes pueden deducirse del hecho de que el hamiltoniano en la Ec. (1.1) es invariante bajo traslaciones. Para una formulación cuantitativa de esta invariancia se asocia un operador $T_{\mathbf{R}_i}$ con cada traslación \mathbf{R}_i a través de la ecuación $T_{\mathbf{R}_i}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i)$. En un cristal infinito hay un número infinito de elementos del grupo de traslación. Sin embargo, si el cristal se limita a un volumen V con condiciones periódicas a la frontera, el grupo de traslación se hace finito y tiene el mismo número de elementos que puntos de la red hay en el volumen V . Este grupo es conmutativo por lo que todas sus representaciones irreducibles son unidimensionales [33]. Por consiguiente, los valores propios de los operadores de traslación son no degenerados [34].

Aplicando el operador $T_{\mathbf{R}_i}$ a la ecuación (1.1) obtenemos $T_{\mathbf{R}_i}(H\psi) = T_{\mathbf{R}_i}(E\psi)$, de donde se sigue que $H(T_{\mathbf{R}_i}\psi) = E(T_{\mathbf{R}_i}\psi)$, ya que H es invariante bajo $T_{\mathbf{R}_i}$.

De esta manera todas las funciones $T_{\mathbf{R}_i}\psi$ y ψ son simultáneamente funciones propias del hamiltoniano con el mismo valor propio E . Si E es no degenerado, es decir, tiene asociada una sola función propia ψ , $T_{\mathbf{R}_i}\psi$ debe ser, salvo un factor, igual a ψ . De la condición de normalización de la función de onda en el volumen V y de la igualdad

$$\int_V |T_{\mathbf{R}_i}\psi|^2 d^3r = \int_V |\psi|^2 d^3r, \quad (1.2)$$

se sigue que este factor debe tener valor absoluto igual a 1:

$$T_{\mathbf{R}_l} \psi = \lambda^{(l)} \psi, \text{ con } |\lambda^{(l)}|^2 = 1. \quad (1.3)$$

De la Ec (1.3) se puede observar que los $\lambda^{(l)}$ son los valores propios del operador $T_{\mathbf{R}_l}$. Puesto que $|\lambda^{(l)}|^2 = 1$, $\lambda^{(l)}$ puede escribirse como $\exp(i\alpha_l)$. Como $\mathbf{R}_l + \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_p$ se tiene también que $T_{\mathbf{R}_l} T_{\mathbf{R}_m} = T_{\mathbf{R}_p}$ y $\exp[i(\alpha_l + \alpha_m)] = \exp(i\alpha_p)$, por lo que resulta apropiado escribir las α_l como el producto punto de un vector \mathbf{k} común a todas las α_l con sus vectores \mathbf{R}_l asociados:

$$\lambda^{(l)} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l). \quad (1.4)$$

Hasta ahora \mathbf{k} es un vector arbitrario con dimensiones de $(\text{distancia})^{-1}$.

Si E es f veces degenerada, es decir, el valor propio E tiene asociadas f funciones propias ortogonales ψ_s ($s = 1, \dots, f$), la función que resulta de operar con $T_{\mathbf{R}_l}$ sobre ψ_s puede representarse como una combinación lineal de todas las ψ_s

$$T_{\mathbf{R}_l} \psi_s = \sum_{s'=1}^f \lambda_{ss'}^{(l)} \psi_{s'}. \quad (1.5)$$

Cada operador $T_{\mathbf{R}_l}$ del grupo de traslación está asociado con una matriz $\lambda_{ss'}^{(l)}$, a través de la Ec. (1.5). Estas matrices satisfacen las mismas reglas de multiplicación de los operadores $T_{\mathbf{R}_l}$ [32]:

$$T_{\mathbf{R}_l} T_{\mathbf{R}_m} = T_{\mathbf{R}_p} \rightarrow \sum_{s'=1}^f \lambda_{ss'}^{(l)} \lambda_{s's''}^{(m)} = \lambda_{ss''}^{(p)}. \quad (1.6)$$

Por consiguiente las $\lambda_{ss'}$ también forman un grupo al que se le denomina una representación f -dimensional del grupo de traslación en la base de las funciones ψ_s . En vez de las f funciones propias ψ_s , por medio de combinaciones lineales se puede generar un nuevo conjunto de f funciones propias ortogonales las cuales forman una representación matricial equivalente. De la teoría de grupos se sabe que entre todas las representaciones equivalentes de un grupo abeliano siempre se puede encontrar una con matrices en forma diagonal: $\Lambda_{ss'}^{(l)} = \Lambda_{ss'}^{(l)} \delta_{ss'}$. En esta nueva representación la ecuación (1.5) se puede reescribir como:

$$T_{\mathbf{R}_l} \psi_s = \sum_{s'=1}^f \Lambda_{ss'}^{(l)} \psi_{s'} = \sum_{s'=1}^f \Lambda_{ss'}^{(l)} \delta_{ss'} \psi_{s'} = \Lambda_{ss}^{(l)} \psi_s. \quad (1.7)$$

Con un argumento completamente similar al que precede a la Ec. (1.3), se puede concluir que $|\Lambda_{ss}^{(l)}|^2 = 1$ y entonces podemos escribir $|\Lambda_{ss}^{(l)}| = \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{R}_l)$. Por consiguiente para cada ψ hay siempre un vector \mathbf{k} de tal forma que, siendo ψ una función propia de $T_{\mathbf{R}_l}$, el valor propio correspondiente es $\exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{R}_l)$. De esta forma ψ está clasificada por este vector \mathbf{k} , esto es: $\psi = \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$.

A partir de las Ecs. (1.3) y (1.7), obtenemos el teorema de Bloch. Las soluciones no degeneradas de la ecuación de Schrödinger (Ec. (1.1)) y combinaciones lineales de las soluciones degeneradas escogidas adecuadamente, son simultáneamente funciones propias $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ del operador de traslación $T_{\mathbf{R}_l}$ con valores propios $\exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r})$,

$$T_{\mathbf{R}_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{R}_l) \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (1.8)$$

Puesto que las $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ son también funciones propias del hamiltoniano, los valores propios E también dependen de \mathbf{k} , es decir: $E = E(\mathbf{k})$. Además para E degeneradas se tiene $E(\mathbf{k}_s) = E(\mathbf{k}_s')$.

Del teorema de Bloch se sigue que

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{R}_l) \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1.9)$$

lo cual implica que $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ siempre puede representarse por una función $u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ con la periodicidad de la red multiplicada por una onda plana $\exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_l)$:

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}) u(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (1.10)$$

Para ver esto, insertemos la expresión anterior en la Ec. (1.9) con lo que se obtiene, para el lado izquierdo, $\exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_l)) u(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l)$ y, para el lado derecho, $\exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_l)) u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$. Por lo tanto

$$u(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = u(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1.11)$$

esto es, $u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red. Las $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ se denominan funciones de Bloch. Ahora supóngase que se establece una red periódica \mathbf{G}_l en el espacio asociado al vector \mathbf{k} . De la ecuación $\mathbf{G}_l \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi m$, se tiene que $\mathbf{R}_l \cdot \mathbf{G}_m$ es un múltiplo entero de 2π por lo que si se hace actuar $T_{\mathbf{R}_l}$ sobre $\psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r})$ se obtiene

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}_l} \psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}) &= \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m) \cdot \mathbf{R}_l) \psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}) \\ &= \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l) \psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.12)$$

De esta manera, a través del operador $T_{\mathbf{R}_m}$, no sólo un \mathbf{k} sino todas las $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_m$ están asociadas con una $\psi(\mathbf{r})$. Por otra parte, ya se mencionó que los valores propios de los operadores de traslación son no degenerados por lo que se concluye que

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}). \quad (1.13)$$

Este último resultado puede interpretarse como sigue. Al clasificar las soluciones de la ecuación de Schrödinger en términos del vector \mathbf{k} , los valores de \mathbf{k} en una celda de volumen mínimo son suficientes. Por lo general se elige como tal a la primera zona de Brillouin. Así mismo, la función $E(\mathbf{k})$ puede limitarse a la primera zona de Brillouin. A esta representación de la función $E(\mathbf{k})$ en el espacio K se le conoce como el esquema de la zona reducida.

Como ya se mencionó las condiciones a la frontera periódicas se introdujeron para hacer finito el grupo de traslaciones. El número de diferentes operadores de traslación es entonces igual al número de puntos de la red en el volumen principal V . De esta manera las dos traslaciones \mathbf{R}_i y $\mathbf{R}_i + N_i \mathbf{a}_i$ (donde $N_i \mathbf{a}_i$ es un vector que define una esquina del volumen V) son idénticas. Esto significa que

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (1.14)$$

Por consiguiente

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i)) u(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (1.15)$$

o bien,

$$\exp(iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) = 1. \quad (1.16)$$

Si representamos a \mathbf{k} como un vector en la red recíproca, $\mathbf{k} = \sum_i k_i \mathbf{g}_i$, entonces $\exp(2\pi i (N_1 k_1 + N_2 k_2 + N_3 k_3)) = 1$. Esta última condición se cumple si k_i se restringe a los valores

$$k_i = \frac{n_i}{N_i}, \quad n_i = 1, \dots, N_i \quad (i = 1, 2, 3). \quad (1.17)$$

Por consiguiente, hay $N = N_1 N_2 N_3$ conjuntos diferentes de k_1, k_2, k_3 y por lo tanto N vectores \mathbf{k} permitidos. El vector \mathbf{k} sólo toma valores discretos en el espacio K . Sin embargo, el volumen V puede tomarse tan grande como se desee de tal forma que el vector \mathbf{k} puede considerarse como un vector que toma valores de manera continua. Veamos ahora otro resultado importante. Del teorema de Bloch se sigue que

$$T_{\mathbf{R}_i} \psi_n(-\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \psi_n(-\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1.18)$$

puesto que el teorema de Bloch define la dependencia de \mathbf{k} de la función de onda, $\psi^*(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ es idéntica a $\psi(-\mathbf{k}, \mathbf{r})$. Además, como el hamiltoniano es real ($H = H^*$), a $\psi^*(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ le corresponde la misma energía que a $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, por lo que tenemos el siguiente resultado conocido como *teorema de Kramer* [32]:

$$E(\mathbf{k}) = E(-\mathbf{k}). \quad (1.19)$$

La forma de las funciones de Bloch (ver Ec. (1.10)) da la primera clave del significado físico del vector \mathbf{k} . Si se hace $u = \text{constante}$, ψ viene dada por $\psi = c \cdot \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$. El electrón en este caso se comporta como una partícula libre y está representada por una onda plana con un vector de onda \mathbf{k} . Por consiguiente en el límite de un electrón libre, el vector \mathbf{k} de la Ec. (1.4) es idéntico al vector de onda \mathbf{k} . Si se transfiere este significado al caso del cristal, entonces la Ec. (1.10) corresponde al enunciado de que el electrón de Bloch está representado por una onda plana modulada por la periodicidad de la red.

Por otra parte, si se considera el caso límite en el cual los átomos del cristal tienen una separación infinita, es decir, $|\mathbf{a}_i| \rightarrow \infty$ (donde los vectores \mathbf{a}_i son los vectores base de la red), el espacio recíproco se colapsaría en su origen $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Asimismo el término $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \rightarrow 1$, por lo que la función de Bloch (Ec. (1.10)) tendría que ser igual a la función de onda $u(\mathbf{0}, \mathbf{r})$ de un átomo aislado. Sin embargo, en el límite de átomos aislados, la función de onda debe tender a alguno de los orbitales atómicos φ_n (donde el subíndice n indica uno de los estados $1s, 2s$, etc.) y no a una sola función $u(\mathbf{0}, \mathbf{r})$. Por consiguiente, uno debe de escribir las funciones de las celdas como $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, de tal forma que en el caso límite de átomos aislados se obtenga una función $u_n(\mathbf{0}, \mathbf{r})$, la cual debe coincidir con un orbital atómico φ_n . Este nuevo índice debe introducirse en las funciones de onda $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ así como en la energía, es decir:

$$\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (1.20)$$

$$H\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (1.21)$$

Así, puesto que \mathbf{k} puede tomar N valores (en la primera zona de Brillouin), para cada valor de n se tienen N estados (o $2N$ estados si se considera el espín) los cuales forman la banda n . Lo que caracteriza a esta banda es que, en el límite de átomos separados, todos los estados de la banda se colapsan en un solo estado atómico etiquetado con n .

A la temperatura del cero absoluto, los electrones del sistema ocuparán estos estados, uno por cada estado, como lo requiere el principio de exclusión

de Pauli, a partir del estado más bajo y en forma ascendente, hasta una energía que se determina mediante el número de estados disponibles, su distribución de energía y el número de electrones del cristal. A esta energía, en el caso de los metales, se le llama energía de Fermi.

A los estados vacantes en una banda se les denomina huecos. Si se aplica un campo electromagnético, un hueco se comporta como si tuviera una carga positiva: $+e$ ($-e$ es la carga del electrón) [35]. En una banda llena correspondiente a una red con simetría de inversión, el vector de onda total de los electrones es cero: $\sum \mathbf{k} = 0$, ya que, en este caso, la zona de Brillouin también tiene simetría de inversión. De esta forma si la banda está llena todos los pares de estados \mathbf{k} y $-\mathbf{k}$ están llenos y el vector de onda total del sistema es $-\mathbf{k}_e$ y es atribuido al hueco (h): $\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$. Entre más cerca de la parte inferior de la banda se encuentre el estado donde el electrón haga falta, mayor será la energía del sistema. La energía del hueco tiene signo opuesto a la energía del electrón faltante. Por el teorema de Kramer se tiene que $E_e(\mathbf{k}_e) = E_e(-\mathbf{k}_e)$. Pero $E_e(-\mathbf{k}_e) = -E_h(-\mathbf{k}_e) = -E_h(\mathbf{k}_h)$. Por consiguiente $E_h(\mathbf{k}_h) = -E_e(\mathbf{k}_e)$.

1.2 Funciones de Wannier

De acuerdo con la Ec. (1.13), las funciones de Bloch son periódicas en el espacio K . Por consiguiente, se pueden representar por una serie de Fourier

$$\psi_m(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{n}} a_m(\mathbf{R}_n, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}, \quad (1.22)$$

donde $N^{-\frac{1}{2}}$ es un factor de normalización, siendo N el número de átomos en el cristal. A las funciones $a_m(\mathbf{R}_n, \mathbf{r})$ se les conoce como funciones de Wannier.

Invirtiendo la relación (1.22) obtenemos

$$a_m(\mathbf{R}_n, \mathbf{r}) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \psi_m(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)} u_m(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1.23)$$

donde la suma se realiza sobre todos los vectores \mathbf{k} en la primera zona de Brillouin. Debido a que $u_m(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red, las a_m dependen solamente de la diferencia $\mathbf{r} - \mathbf{R}_n$, es decir, las funciones de Wannier están centradas alrededor del punto \mathbf{R}_n de la red.

Asimismo, tenemos que las funciones de Wannier son ortogonales para diferentes bandas (índice m) y \mathbf{R}_n distintos. Esto se sigue de

$$\begin{aligned}
 \int a_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) a_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'}) d\mathbf{r} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_{n'})] \\
 &\quad \times \int \psi_m^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \psi_{m'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})] \delta_{mm'} \\
 &= \delta_{nn'} \delta_{mm'}. \tag{1.24}
 \end{aligned}$$

Como forman un conjunto completo, estas funciones ofrecen una base alternativa para una descripción exacta del hamiltoniano.

1.3 Modelo de Amarre Fuerte

La función de potencial que se utiliza en el estudio de los cristales reales debe de estar relacionada de algún modo con el potencial real experimentado por un electrón, debido a los iones y a todos los demás electrones del cristal. La solución exacta de este problema, incluso en la aproximación de un solo electrón, sería muy difícil de lograr si no se hacen más aproximaciones, entre las que destacan la aproximación del electrón casi libre y el modelo de amarre fuerte, que veremos a continuación.

Por simplicidad consideremos un cristal cuya base primitiva contiene únicamente un átomo. En el modelo de amarre fuerte se supone que los átomos del cristal están tan separados entre sí que la interacción entre vecinos es relativamente débil de tal forma que los electrones de valencia se encuentran fuertemente ligados a los átomos que conforman el cristal. En este caso las funciones de Wannier $a_i(\mathbf{R}_n, \mathbf{r})$ en la Ec. (1.22) pueden aproximarse mediante las funciones atómicas ϕ_i , esto es, las funciones de Bloch de la Ec. (1.22) vendrán dadas, de la siguiente forma:

$$\psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_n \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}. \tag{1.25}$$

En lo que sigue analizaremos este caso. Antes de continuar, cabe señalar que la utilización de los orbitales atómicos en vez de funciones de Wannier

es el punto de partida de un método aproximado para calcular las bandas de energía en los sólidos conocido como LCAO (*Linear Combination of Atomic Orbitals*), ya que involucra la combinación lineal de orbitales atómicos.

Asumamos que las soluciones a la ecuación de Schrödinger, para los átomos libres que forman el cristal,

$$H_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) = E_i \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (1.26)$$

son conocidas. $H_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ es el hamiltoniano para un átomo libre en la posición de la red \mathbf{R}_n y $\phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ es la función de onda para un electrón en el nivel de energía atómico E_i .

El operador hamiltoniano $H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right]$ de la ecuación de Schrödinger

$$H\psi_k = E\psi_k, \quad (1.27)$$

se puede escribir como la suma de dos partes,

$$H = H_A + H' \quad (1.28)$$

siendo

$$H_A = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (1.29)$$

y

$$H' = V(\mathbf{r}) - V_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \equiv v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (1.30)$$

donde H' representa el hamiltoniano de perturbación para el electrón en el cristal en comparación con el átomo aislado.

La energía $E(\mathbf{k})$ se puede encontrar calculando el valor esperado de H ,

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\int \psi_k^* (H_A + H') \psi_k d\mathbf{r}}{\int \psi_k^* \psi_k d\mathbf{r}} \quad (1.31)$$

Un cálculo aproximado de $E(\mathbf{k})$ puede hacerse insertando en la Ec. (1.31) la función de Bloch aproximada dada por la Ec. (1.25). A partir de $H_A \phi_i = E_i \phi_i$ y de la Ec. (1.25), tenemos que

$$\begin{aligned} H_A \psi_k &= N^{-\frac{1}{2}} \sum_n H_A \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \\ &= E_i N^{-\frac{1}{2}} \sum_n \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \\ &= E_i \psi_k. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Así mismo el denominador en la Ec. (1.31) resulta ser

$$\int \psi_k^* \psi_k d\mathbf{r} = \sum_{n,m} e^{ik(R_n - R_m)} \int \phi_i^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathbf{r}. \quad (1.33)$$

Para un electrón lo suficientemente localizado, $\phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$ sólo tiene valores significativos en la vecindad del punto de la red \mathbf{R}_m . Así, en una primera aproximación, sólo retenemos los términos en la Ec. (1.33) con $n = m$, es decir,

$$\int \psi_k^* \psi_k d\mathbf{r} = \frac{1}{N} \sum_n \int \phi_i^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathbf{r} = 1 \quad (1.34)$$

donde N es el número de átomos en el cristal.

Sustituyendo las Ecs. (1.32) y (1.34) en la Ec. (1.31), se obtiene

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= E_i \\ &+ \frac{1}{N} \sum_m \sum_n e^{ik(R_n - R_m)} \\ &\times \int \phi_i^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Debido a la periodicidad del cristal y a que la suma se realiza sobre todos los valores de n , cada término de la suma sobre m da el mismo valor. El valor de la suma sobre m , por tanto es el valor de cualquier término de la suma (por simplicidad tomaremos $m = 0$) multiplicando por el número (N) de términos de dicha suma. Por consiguiente, la ecuación para la energía se puede escribir como sigue:

$$E(k) = E_i + \sum_n e^{ikR_n} \int \phi_i^*(\mathbf{r}) v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathbf{r}, \quad (1.36)$$

en donde la suma se realiza sobre todos los átomos del cristal. Para el término que contiene la perturbación $v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$, el traslape se incluye hasta primeros vecinos únicamente. Consideraremos el caso más simple en el cual el estado atómico relevante ϕ_i posee simetría esférica (es decir, es un estado s), de tal manera que los elementos de matriz entre primeros vecinos son todos iguales. La extensión a los estados p es directa y puede lograrse sin muchos

problemas. El resultado puede expresarse en términos de las siguientes dos cantidades:

$$\int \phi_i(r) v(r) \phi_i(r) dr = \alpha, \quad (1.37)$$

$$\int \phi_i^*(r) v(r) \phi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) dr = \beta, \quad (1.38)$$

en donde \mathbf{R}_n es un vector que une al átomo situado en el origen con el átomo vecino más cercano. De esta forma podemos escribir la Ec. (1.36) como sigue:

$$E(k) = \epsilon_0 + \beta \sum_n e^{ik \cdot \tau_n}, \quad (1.39)$$

donde $\epsilon_0 = E_i + \alpha$ y la suma se realiza sobre los primeros vecinos.

Para el caso de una dimensión tenemos que la energía está dada por

$$E(k) = \epsilon_0 + 2\beta \cos(ka), \quad (1.40)$$

donde a es la constante de la red. Para una red cuadrada de dos dimensiones

$$E(k) = \epsilon_0 + 2\beta[\cos(k_1a) + \cos(k_2a)], \quad (1.41)$$

y para una red cúbica simple tenemos que

$$E(k) = \epsilon_0 + 2\beta[\cos(k_1a) + \cos(k_2a) + \cos(k_3a)]. \quad (1.42)$$

Es fácil demostrar que los tres casos anteriores producen una banda de energía simétrica que se extiende de $\epsilon_0 - Z\beta$ hasta $\epsilon_0 + Z\beta$, donde Z es el número de vecinos más cercano. Es decir, la cantidad $2Z\beta$ nos da el ancho de la banda para cada caso.

Con el fin de facilitar la discusión en lo que resta del capítulo emplearemos la notación de Dirac. En esta notación y en la representación de las funciones de Wannier el hamiltoniano de la Ec. (1.28) puede escribirse, para el caso de vecinos más cercanos, como:

$$H = \epsilon_0 \sum_i |i\rangle \langle i| + \beta \sum_{ij} |i\rangle \langle j|. \quad (1.43)$$

En donde $|i\rangle$ es la función de Wannier centrada en el sitio i ; el conjunto de sitios $\{i\}$ forman la red.

Los resultados obtenidos para los anchos de banda, en el modelo de amarre fuerte, de redes lineal, cuadrada y cúbica constituyen casos particulares de

un resultado general conocido como *Teorema de Perron-Frobenius*. A continuación deduciremos dicho teorema de manera muy simple. Sean las soluciones de la ecuación de Schrödinger $\psi = \sum_i c_i |i\rangle$, entonces las ecuaciones para los coeficientes c_i son

$$(E - \epsilon_0)c_i = \sum_{i \neq j} \beta c_j, \quad (1.44)$$

así que

$$|E - \epsilon_0| |c_i| = \left| \sum_{i \neq j} \beta c_j \right| \leq \sum_{i \neq j} |\beta| |c_j|. \quad (1.45)$$

En un cristal perfecto $|c_i| = |c_j|$, ya que todos los sitios son idénticos. De esta forma tenemos que

$$|E - \epsilon_0| \leq Z |\beta|. \quad (1.46)$$

Así mismo cabe señalar que el espectro de energías, en el modelo de amarre fuerte, es simétrico respecto a $E = \epsilon_0$ cuando la red es bipartita, es decir, cuando la red puede subdividirse en dos subredes, digamos A y B , de tal forma que todos los primeros vecinos de un sitio de A pertenecen a B y viceversa. De la Ec. (1.44) (donde, en el caso de una red bipartita i pertenece a A y j pertenece a B y viceversa), vemos que si el sistema tiene una energía $E - \epsilon_0$, $\epsilon_0 - E$ también es una energía posible del sistema ya que las funciones de onda correspondientes a estas dos energías difieren únicamente en el signo de la función de onda de una subred.

Una forma de resolver la ecuación de Schrödinger correspondiente al hamiltoniano de la Ec. (1.43) es por medio de las funciones de Green (Apéndice A). Este formalismo es muy poderoso ya que todas las cantidades físicas medibles de un sistema se pueden escribir en términos de la función de Green. La función de Green (que se define a través de la ecuación $(z - H)G = 1$) para el hamiltoniano de amarre fuerte (Ec. (1.43)) está dada por [36]:

$$G(z) = \sum_k \frac{|k\rangle \langle k|}{z - E(k)}, \quad (1.47)$$

donde $|k\rangle = N^{-\frac{1}{2}} \sum_l e^{ikl} |l\rangle$ y $E(k) = \epsilon_0 + \beta \sum_l e^{ikl}$. Aquí, $|k\rangle$ y $|l\rangle$ son las funciones de Bloch y de Wannier, respectivamente. Los elementos de matriz

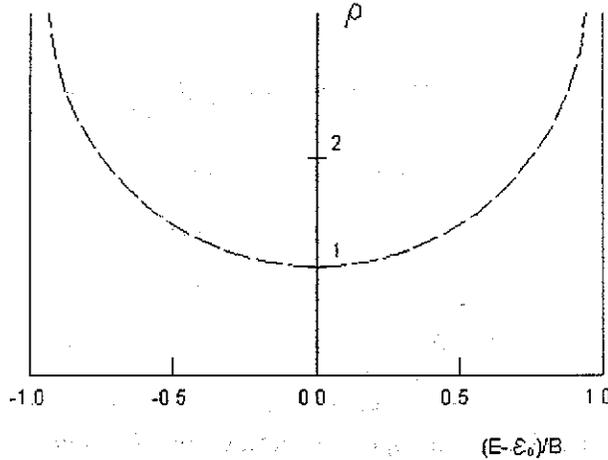


Figura 1.1: Densidad de estados para una red unidimensional.

para $G(z)$ están dados de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 G(l, m; z) &\equiv \langle l | G(z) | m \rangle = \sum_k \frac{\langle l | k \rangle \langle k | m \rangle}{z - E(k)} \\
 &= \frac{\Omega}{2\pi N} \int_{1BZ} dk \frac{e^{ik(l-m)}}{z - E(k)} \quad (1.48)
 \end{aligned}$$

La evaluación de la función de Green permite obtener la densidad de estados electrónicos por sitio, $\rho(E)$. La $\rho(E)$ multiplicada por un incremento de energía da el número de estados que puede tomar un electrón en dicho intervalo de energía. Estos estados pueden estar ocupados o desocupados.

Para el caso de una cadena lineal, sustituimos $E(k)$ dada por la Ec. (1.40) en la Ec. (1.48) con lo cual obtenemos

$$\begin{aligned}
 G(l, m; z) &= \frac{L}{2\pi N} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \frac{e^{ik(l-m)a}}{z - \epsilon_0 - 2\beta \cos \phi} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \frac{e^{i\phi(l-m)}}{z - \epsilon_0 - 2\beta \cos \phi} \quad (1.49)
 \end{aligned}$$

donde $\phi = ka$, la integral depende de $|l - m|$, y se puede transformar mediante el cambio de variable $\varpi = e^{i\phi}$ en una integral de variable compleja sobre un círculo unitario:

$$G(l, m; z) = -\frac{1}{\beta\pi i} \oint d\varpi \frac{\varpi^{|l-m|}}{\varpi^2 - \varpi x + 1} \quad (1.50)$$

con $x = \frac{z - \epsilon_0}{\beta}$. Las dos raíces de $\varpi^2 - \varpi x + 1 = 0$, son:

$$\rho_1 = x - \sqrt{x^2 - 1} \quad (1.51)$$

$$\rho_2 = x + \sqrt{x^2 - 1} \quad (1.52)$$

y se cumple que $\rho_1\rho_2 = 1$. Además $|\rho_1| < 1$ y $|\rho_2| > 1$ a menos que x sea real y satisfaga la relación $-1 \leq x \leq 1$. En este último caso ambas raíces se encuentran sobre el círculo unitario, y la integral (1.50) no está bien definida. Esta condición da el espectro continuo de H el cual se encuentra en el eje real de E entre $\epsilon_0 - \beta$ y $\epsilon_0 + \beta$. Cuando z no coincide con esta línea singular $z \neq E$, obtenemos para $G(l, m; z)$ (usando residuos) la expresión:

$$G(l, m; z) = \frac{-2 \rho_1^{|l-m|}}{\beta \rho_1 - \rho_2} = \frac{1}{\sqrt{(z - \epsilon_0)^2 - \beta^2}} \rho_1^{|l-m|} \quad (1.53)$$

Para $Z = E$, se tiene que (tomando el límite cercano al polo):

$$G^\pm(l, m; E) = \frac{\pm 1}{\sqrt{\beta^2 - (E - \epsilon_0)^2}} \left(x \mp i\sqrt{1 - x^2} \right)^{|l-m|}, \quad (1.54)$$

donde $\epsilon_0 - \beta \leq E \leq \epsilon_0 + \beta$, $x = (E - \epsilon_0)/\beta$ y $\sqrt{1 - x^2}$ denota la raíz cuadrada positiva.

La densidad de estados por sitio está dada como:

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}(G^\pm(l, l; E)) = \frac{\theta(2\beta - |E - \epsilon_0|)}{\pi \sqrt{4\beta^2 - (E - \epsilon_0)^2}}, \quad (1.55)$$

donde $\theta(2\beta - |E - \epsilon_0|)$ es la función escalón. En la Fig. (1.1) se muestra la densidad de estados por sitio de una cadena lineal para $\epsilon_0 = 0$ y $\beta = -1$. Cabe señalar que la densidad de estados para la cadena lineal tiene singularidades en $E = \epsilon_0 \pm 2\beta$ y que los estados permitidos se encuentran dentro de estos límites.

Capítulo 2

Correlación electrónica en sistemas periódicos

Por medio de la aproximación del electrón independiente, la teoría de bandas ha podido explicar muchas propiedades de los sólidos, entre ellas, la diferencia que existe en la conductividad eléctrica entre un metal, un semiconductor y un aislante. Sin embargo, la teoría de bandas no considera la correlación entre los electrones en un cristal, la razón es inherente a la aproximación del electrón independiente. Sin embargo, esta teoría no niega la interacción electrón-electrón sino que la reemplaza por una interacción promedio mediante la aproximación de Hartree-Fock, en la cual se asume que el movimiento de un electrón es estadísticamente independiente a los demás. La aproximación de Hartree-Fock toma un solo electrón y a los restantes los considera como una contribución al potencial promedio en el cual el electrón se mueve, lo cual conduce a una ecuación integro-diferencial autoconsistente.

Describir, en forma completa, la interacción electrón-electrón ($e-e$) dentro de un sólido es un problema complicado, obviamente existe interacción $e-e$ directa de tipo coulombiano. Sin embargo, los electrones en un sólido pueden interactuar "indirectamente" por medio de algunas excitaciones elementales; tal es el caso de la interacción $e-e$ mediada por fonones, la cual puede analizarse a través del Hamiltoniano de Fröhlich [8].

Una de las formas más simples y generales de estudiar la correlación electrónica, es a través del modelo de Hubbard [9], puesto que dicho modelo incluye implícitamente los efectos de todo tipo de interacciones electrónicas por medio de los parámetros del hamiltoniano. Entre la serie de fenómenos, que para su explicación se requiere tomar en cuenta la correlación entre los

electrones podemos mencionar: la formación de ondas de densidad de carga [7], las ondas de densidad de espín [37] y la superconductividad [2], entre otros.

2.1 Modelo de Hubbard

Con el fin de introducir el modelo de Hubbard, analicemos la interacción electrónica en sistemas con bandas de energía angostas. Por simplicidad matemática consideraremos solamente el caso de sistemas con una sola banda (d). En general el hamiltoniano de un sistema de N electrones en una red dada puede escribirse, en el lenguaje de la primera cuantización, como:

$$H = \sum_i h(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \nu(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (2.1)$$

donde la suma va de 1 a N , \mathbf{r}_i indica la posición del i -ésimo electrón y $h(\mathbf{r}_i)$ es el hamiltoniano de "una partícula", es decir, contiene la energía cinética más todos los potenciales de interacción para una partícula, como lo es el potencial de la red entre otros. En el caso más simple, $h(\mathbf{r}_i)$ tiene la forma de $\nabla^2 + \sum_l \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l|}$, donde \mathbf{r}_i y \mathbf{R}_l son las coordenadas del electrón y de los iones, respectivamente. En la Ec. (2.1) el término $\nu(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ contiene la interacción electrón-electrón (interacción de dos cuerpos).

Como estamos estudiando la correlación electrónica en bandas angostas, una descripción local del sistema, resulta más apropiado trabajar nuestro hamiltoniano en la representación de las funciones de Wannier.

Como consideraremos un sistema con una sola banda de energía, necesitaremos solo una función de Wannier $\phi_0(\mathbf{r})$ centrada en el origen. Las demás funciones de Wannier se obtienen de esta mediante una traslación: $\phi_i(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$. Con lo cual, el hamiltoniano de Hubbard en la representación de los números de ocupación se escribe de la siguiente forma:

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l,\sigma,\sigma'} \langle ij | \nu | kl \rangle c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma'}^+ c_{l,\sigma'} c_{k,\sigma}, \quad (2.2)$$

donde

$$t_{ij} \equiv t(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \int \phi_i^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.3)$$

y

$$\langle ij | \nu | kl \rangle = \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') \nu(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}) \phi_l(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad (2.4)$$

Además asumimos que tanto $h(\mathbf{r}_i)$ como $\nu(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_j)$, son independientes del espín. Se acostumbra normalizar la escala de energía de tal forma que $t_{ii} \equiv t(0) = 0$.

Una forma sencilla de trabajar con el hamiltoniano de la Ec. (2.2) es introduciendo las siguientes dos aproximaciones, las cuales, sin embargo, conservan la física de los electrones fuertemente correlacionados. En la primera aproximación se asume que t_{ij} decae rápidamente con la distancia, de esta forma los únicos términos de la matriz que deben considerarse son aquellos que incluyen los sitios vecinos más cercanos. Para sistemas isotrópicos, debemos entonces aproximar a t_{ij} por:

$$t_{ij} \simeq t \text{ para } (i, j) \text{ vecinos más cercanos} \\ 0 \text{ en otro caso.}$$

En la segunda aproximación se supone que la interacción electrón-electrón es apantallada cuando los electrones están muy retirados entre sí. De esta forma, la contribución dominante al segundo término de la Ec. (2.2), aparece cuando los dos electrones se encuentran en el mismo sitio ($i = j = k = l$). Así, la aproximación estará dada de la siguiente forma:

$$\langle ij | \nu | kl \rangle \simeq U \text{ si } i = j = k = l \\ 0 \text{ en otro caso.}$$

El principio de Pauli requiere entonces que, en el segundo término de la Ec. (2.2), $\sigma = -\sigma'$, con lo cual obtenemos finalmente la versión más simple (para una sola banda) del hamiltoniano de Hubbard ([9]; [38]). Considerando solamente interacciones a primeros vecinos, este hamiltoniano está dado por:

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (2.5)$$

donde $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}$ y U representa la interacción de electrones en el mismo sitio. Como ya mencionamos, t_{ij} es la integral de transferencia (*hopping*) entre el sitio i y el sitio j . A primera aproximación se considera sólo la transferencia entre vecinos más cercanos. U representa la energía de interacción

entre dos electrones situados en el mismo sitio. Cabe enfatizar que el hamiltoniano de Hubbard no restringe los tipos de interacción que podrían existir entre los electrones, y los efectos resultantes se caracterizan por medio del parámetro U que se obtiene fenomenológicamente.

El descubrimiento de los materiales superconductores de alta temperatura de transición ha conducido a reconsiderar las propiedades físicas del modelo de Hubbard y sus extensiones, principalmente por la siguiente razón. Los superconductores de alta temperatura crítica pertenecen a la familia de óxidos de los metales de transición, para los cuales se sabe que una descripción de amarre fuerte con fuertes correlaciones electrón-electrón es más apropiada que una descripción en términos del electrón casi libre. El éxito del hamiltoniano de Hubbard se debió a que podía explicar las propiedades magnéticas de los óxidos metálicos de transición [39]. Estos óxidos se caracterizan por que sus átomos contienen electrones d , los cuales forman bandas d relativamente angostas. La banda d está parcialmente llena y es, en principio, la responsable de las propiedades magnéticas de los materiales. La fuerte polarización de los oxígenos que conduce a la formación de pequeños polarones (electrones rodeados por la deformación local que induce en la red y que se extiende sobre una región del orden de la constante de la red) y bipolarones [40] en algunos de los óxidos metálicos de transición, tales como Ti_4O_7 y $Na_xV_3O_5$ ([6]), podría tomarse en cuenta agregando al modelo de Hubbard un acoplamiento entre la red y los electrones. Tal acoplamiento de los electrones con la red da lugar a una interacción atractiva de corto alcance que compite con la repulsión coulombiana y puede conducir a una interacción interatómica atractiva, la cual puede introducirse fácilmente en el modelo de Hubbard. En la aproximación de las interacciones entre primeros vecinos solamente, el nuevo hamiltoniano puede escribirse como:

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j \quad (2.6)$$

donde $n_i = n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}$ es la ocupación electrónica total del sitio i y V es la interacción interatómica entre dos electrones, uno situado en el sitio i y el otro situado en el sitio vecino j . El símbolo $\langle \rangle$ indica que la suma se extiende sobre los primeros vecinos únicamente. Al hamiltoniano dado por la Ec. (2.6) se le conoce como hamiltoniano de Hubbard Extendido.

Con el fin de estudiar la interacción entre huecos se requiere introducir los operadores de estos en la Ec. (2.6), lo cual se obtiene utilizando las

siguientes transformaciones: $c_{i,\sigma}^+ \rightarrow h_{i,\sigma}$ y $c_{i,\sigma} \rightarrow h_{i,\sigma}^+$, donde $h_{i,\sigma}$ y $h_{i,\sigma}^+$ son los operadores de aniquilación y de creación de huecos respectivamente, el hamiltoniano de Hubbard Extendido adquiere la siguiente forma:

$$H = NU - U \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}^h - 2VZ \sum_i n_{i,\sigma}^h + 2NVZ + \\ - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} h_{i,\sigma}^+ h_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow}^h n_{i,\downarrow}^h + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^h n_j^h \quad (2.7)$$

donde $n_i^h = n_{i,\uparrow}^h + n_{i,\downarrow}^h$, $n_{i,\sigma}^h = h_{i,\sigma}^+ h_{i,\sigma}$ y Z es el número de coordinación.

Los primeros cuatro términos de la Ec. (2.7) sólo contribuyen a un corrimiento en la energía total, y por consiguiente los huecos también interactúan a través de un modelo de Hubbard. Sin embargo aparecen dos diferencias importantes con respecto al hamiltoniano de Hubbard extendido para electrones. La primera es que el parámetro de transferencia cambia de signo, y la segunda es que la densidad de huecos es $1 - n$, en términos de la densidad de electrones n . Este mapeo es completamente simétrico sólo cuando $n = 1/2$, de tal forma que el número de huecos es igual al número de electrones, y cuando el signo del parámetro de transferencia es irrelevante, a saber, el caso poco interesante $t_{ij} = 0$ para toda i, j .

Es importante mencionar que aparece una simetría extra cuando consideramos redes bipartitas. Como ya se dijo, una red bipartita es una red que puede descomponerse en dos subredes, de tal forma que todos los primeros vecinos de un sitio de una subred pertenecen a la otra subred. Si cambiamos la fase relativa de los estados en estas dos subredes, no afectamos la física del problema, pero esto cambia el signo del parámetro de transferencia. Por consiguiente, en el caso de redes bipartitas, el comportamiento de huecos es idéntico al comportamiento de electrones.

En los últimos años, el modelo de Hubbard ha sido intensamente estudiado, utilizando diferentes aproximaciones: la aproximación del campo medio [6], el método de los bosones esclavos [12]; [13], la técnica de Monte Carlo [14] y el grupo de Renormalización [15] entre otras. El hamiltoniano de Hubbard, Ec. (2.5), se ha resuelto en forma exacta sólomente en el caso de una dimensión [16], en la cual para la banda semi llena, los resultados muestran que el estado base es un aislante para $U \neq 0$ y un conductor para $U = 0$, es decir, hay una transición de Mott en $U = 0$.

La teoría de campo medio consiste en reducir el problema de muchos cuerpos al de Fock, cuya idea fundamental es sustituir la energía potencial

de la interacción de los electrones por una energía potencial de la forma $\sum_i U_i(r_i)$, que representa la energía de interacción del i -ésimo electrón en cierto campo efectivo, en el cual cada electrón se mueve independientemente. Este campo efectivo caracteriza la acción de todos los demás electrones sobre el i -ésimo electrón. Sin embargo, se sabe que esta aproximación reproduce razonablemente sólo el estado base del sistema, pero no es capaz de describir las fluctuaciones en la correlación electrónica.

El método de los bosones esclavos ha sido un avance importante en el estudio del modelo de Hubbard, a pesar de que sigue perteneciendo al grupo de aproximaciones del tipo de campo medio, excepto que el promedio se realiza en un espacio de Hilbert aumentado [17]. La técnica de Monte Carlo es un método estadístico que está limitado a cúmulos pequeños de átomos [41]. La técnica del Grupo de Renormalización consiste en desprestigiar los estados lejanos al estado base y quedarse solamente con los más cercanos, por consiguiente, muchas veces se aleja de la solución exacta [16]. Finalmente, la diagonalización exacta sigue siendo el método más deseado. Sin embargo, este método se aplica solamente a sistemas de pocos átomos, ya que la dimensión de la matriz del hamiltoniano aumenta exponencialmente con el número de sitios y el número de partículas [42, 43].

2.2 Solución en el Espacio K

En esta sección se considera la solución analítica en el espacio K , del hamiltoniano de Hubbard extendido para dos partículas a temperatura $T = 0$. La solución en el espacio K está restringida a sistemas periódicos, pero es de gran utilidad debido a que es una primera aproximación de un problema real. Introducimos dicha aproximación con el fin de poder comparar sus resultados con los que obtendremos utilizando nuestro método del espacio real, el cual resulta ser más simple y más general debido a que también podemos tratar sistemas no periódicos.

Comenzaremos por considerar el hamiltoniano de Hubbard extendido en el espacio K . Para pasar del espacio real al espacio K , se utilizan las siguientes relaciones [44]:

$$\begin{aligned} c_{i,\sigma}^+ &= N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}^+ \\ c_{i,\sigma} &= N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma} \end{aligned} \quad (2.8)$$

Sustituyendo estas relaciones en la Ec. (2.6) y después de un laborioso cálculo se obtiene el hamiltoniano de Hubbard extendido en el espacio K [45]:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} \\
 & + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', q} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', q} c_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}+\frac{q}{2}}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'+\frac{q}{2}} c_{\mathbf{k}'+\frac{q}{2}} \\
 & - \frac{V}{2t} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma} \epsilon(\mathbf{k} - \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}+\frac{q}{2}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'+\frac{q}{2}, \sigma} c_{-\mathbf{k}+\frac{q}{2}, \sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'+\frac{q}{2}, \sigma}. \quad (2.9)
 \end{aligned}$$

En esta ecuación $\epsilon(\mathbf{k}) = -t \sum_{\gamma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\gamma}}$, donde \mathbf{R}_{γ} es un vector que une a cada sitio i con uno de sus Z sitios vecinos ($\gamma = 1, 2, 3, \dots, Z$) y $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = U - \frac{V}{t} \epsilon(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$.

Ahora consideremos una función de onda de un par de partículas con momento total cero, $\mathbf{q} = 0$, y espines antiparalelos (estado de singulete). En el espacio real esta función de onda se escribe de la siguiente forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,l} f_l c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i+l,\downarrow}^{\dagger} |0\rangle \quad (2.10)$$

En esta ecuación, $|f_l|^2$ es la probabilidad de que un electrón se encuentre en el sitio $i+l$ si el otro electrón se encuentra en el sitio i .

Utilizando las relaciones (2.8), obtenemos la función de onda del par en el espacio K

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} |0\rangle \quad (2.11)$$

donde $f(\mathbf{k}) \equiv \sum_l f_l e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}$.

Aquí $|f(\mathbf{k})|^2$ se interpreta como la probabilidad de encontrar a una partícula con vector de onda \mathbf{k} y a la otra partícula con vector de onda $-\mathbf{k}$. Además $f(-\mathbf{k}) = f(\mathbf{k})$ ya que la parte espacial de la función de onda correspondiente a un par de electrones con espines opuestos es simétrica.

El resultado de formular la ecuación de Schrödinger

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (2.12)$$

con H y $|\psi\rangle$ dados por las Ecs. (2.9) y (2.11) es

$$[E - 2\epsilon(\mathbf{k})] f(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}') \left[U - \left(\frac{V}{t} \right) \epsilon(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right]. \quad (2.13)$$

como era de esperarse, las componentes con $\mathbf{q} \neq 0$ desaparecen y la parte del hamiltoniano que no corresponde al singulete no contribuye. Consideremos ahora el caso de redes hipercúbicas. Puesto que $f(\mathbf{k}) = f(-\mathbf{k})$ las direcciones en un hipercubo son equivalentes, la Ec. (2.13) se reduce a:

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(E - 2\epsilon(\mathbf{k}))} \left[U f_0 - W \frac{\epsilon(\mathbf{k})}{Zt} f_1 \right], \quad (2.14)$$

donde $W = ZV$, Z es el número de coordinación y

$$f_i = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} f(\mathbf{k}). \quad (2.15)$$

Cabe señalar que la ecuación (2.14) es válida para cualquier red si la parte espacial de la función de onda tiene la simetría rotacional de la red.

Si multiplicamos ambos lados de la Ec. (2.15) por $(-\epsilon(\mathbf{k})/Zt)^i$, $i = 0, 1$ y sumando sobre \mathbf{k} , obtenemos dos ecuaciones con dos incógnitas, f_0 y f_1 :

$$\begin{aligned} (1 + uG_0)f_0 + (wG_1)f_1 &= 0 \\ (uG_1)f_0 + (1 + wG_2)f_1 &= 0, \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde $D = 2Zt$ es el ancho de banda, $u = \frac{U}{D}$, $w = \frac{W}{D}$, y

$$G_i(\rho) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}'})^i}{1 + \rho - \gamma_{\mathbf{k}'}}. \quad (2.17)$$

En la Ec. (2.17), $\gamma_{\mathbf{k}'} = -\epsilon(\mathbf{k}')/(Zt)$ y $\rho = -(1 + \frac{E}{D})$. Para E menor que $(-D)$ existe un estado apareado con energía de amarre $\Delta = D\rho$. De las Ecs. (2.16) la energía de amarre está determinada por la condición de que el determinante del sistema sea cero, es decir

$$1 + uG_0(\rho) + wG_2(\rho) - wu [G_1^2(\rho) - G_0(\rho)G_2(\rho)] = 0. \quad (2.18)$$

Es fácil verificar que $G_1(\rho)$ y $G_2(\rho)$ están relacionadas con $G_0(\rho)$ de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} G_1(\rho) &= (1 + \rho)G_0(\rho) - 1 \\ G_2(\rho) &= (1 + \rho)^2 G_0(\rho) - (1 + \rho). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Sustituyendo las relaciones (2.19) en la Ec. (2.18), obtenemos

$$G_0(\rho) [u + w(1 + \rho)^2 + wu(1 + \rho)] - w(1 + \rho) - wu + 1 = 0. \quad (2.20)$$

Esta última ecuación da, de manera implícita, la energía de amarre normalizada, ρ , como función de U y V . Para un ancho de banda dado la energía de amarre decrece conforme la dimensión crece manteniendo U y V fijos.

Puede observarse que existen valores umbrales de los parámetros U y V para que el apareamiento sea posible. Haciendo $\rho = 0$ en la Ec. (2.20) obtenemos:

$$(1+u)(1+w) - 1 - \frac{(uw - w - 1)}{G_0(0)} = 0. \quad (2.21)$$

En una y dos dimensiones, $G_0 = \infty$, por lo que la condición de apareamiento es

$$(1+u)(1+w) - 1 = 0. \quad (2.22)$$

Las amplitudes f_l de la función de onda del par, pueden obtenerse una vez que la energía de amarre ha sido encontrada. Las amplitudes f_0 y f_1 se obtienen directamente de las Ecs. (2.16). Para las otras amplitudes primero se obtiene $f(\mathbf{k})$ de la Ec. (2.14), para después obtener las amplitudes en el espacio real a través de la relación (2.15).

Con el fin de fijar ideas resolvamos, a manera de ejemplo, el problema de Hubbard simple para dos partículas con espín total cero, en una cadena lineal. En este caso particular tenemos que $V = 0$, por lo que la Ec. (2.20) se reduce a:

$$G_0(\rho)u + 1 = 0.$$

O bien

$$G_0(\rho) = \frac{-1}{u}. \quad (2.23)$$

donde $G_0(\rho)$ viene dada por:

$$G_0(\rho) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{1 + \rho + \frac{\epsilon(k)}{Zt}}. \quad (2.24)$$

En una dimensión tenemos que $\epsilon(k) = -2t \cos(k)$ y $Z = 2$. De esta forma

$$\begin{aligned} G_0(\rho) &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{1 + \rho - \frac{2t \cos(k)}{2t}} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{1 + \rho - \cos(k)} \\ &= \frac{1}{1 + \rho} \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{1 + C \cos k} \end{aligned}$$

donde $C \equiv \frac{-1}{1+\rho}$.

Aproximando la suma sobre k en la primera zona de Brillouin (1ZB) por una integral ($\frac{1}{N} \sum_k \rightarrow \frac{1}{V_{1ZB}} \int_{1ZB} dk$) obtenemos

$$G_0(\rho) = \frac{1}{1+\rho} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{1+C \cos(k)} \quad (2.25)$$

donde hemos considerado el parámetro de red igual a 1. La integral de la ecuación anterior viene dada por [46]:

$$\int \frac{dk}{B+C \cos(Ak)} = \frac{2}{A\sqrt{B^2-C^2}} \tan^{-1} \left[\frac{(B-C) \tan(\frac{Ak}{2})}{\sqrt{B^2-C^2}} \right]$$

para $B^2 > C^2$.

En este caso $B^2 = 1 > (\frac{1}{1+\rho})^2 \equiv C^2$ y $A = 1$. Por lo tanto

$$\begin{aligned} (1+\rho)G_0(\rho) &= \frac{1}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{1-C^2}} \tan^{-1} \left[\frac{(1-C) \tan(\frac{k}{2})}{\sqrt{1-C^2}} \right]_{-\pi}^{\pi} \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{1-C^2}} [\tan^{-1}(\infty) - \tan^{-1}(-\infty)] \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{2}{\sqrt{1-C^2}} \left(\frac{\pi}{2} - \left(-\frac{\pi}{2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-C^2}} = \frac{(1+\rho)}{\sqrt{(1+\rho)^2 - 1}} \end{aligned}$$

donde en el último paso hemos sustituido C por su valor $\frac{-1}{1+\rho}$.

Por consiguiente

$$G_0(\rho) = \frac{1}{\sqrt{(1+\rho)^2 - 1}} \quad (2.26)$$

Sustituyendo la Ec. (2.26) en la Ec. (2.23) obtenemos

$$\frac{1}{\sqrt{(1+\rho)^2 - 1}} = \frac{-1}{u}$$

o bien

$$(1+\rho)^2 - 1 = u^2$$

de donde

$$\rho = \sqrt{u^2 + 1} - 1.$$

Pero $\rho = \frac{\Delta}{D}$ y $u = \frac{U}{D}$, por lo que

$$\Delta = D\left(\sqrt{1 + \left(\frac{U}{D}\right)^2} - 1\right). \quad (2.27)$$

Ahora bien, para encontrar las amplitudes f_n de la función de onda del par en el espacio real aplicamos, como ya se mencionó, una transformada de Fourier a $f(k)$, la cual se obtiene a partir de la Ec. (2.14). En este caso tenemos que $V = 0$ y por lo tanto

$$f(k) = \frac{U f_0}{E - 2\epsilon(k)}. \quad (2.28)$$

Pero $E = -D - \Delta$ y, en una dimensión, $\epsilon(k) = -2t \cos(k)$, por lo que tenemos

$$f(k) = \frac{U f_0}{-(D + \Delta) + 4t \cos(k)}$$

Efectuando la transformada de Fourier de $f(k)$ obtenemos

$$f_n = \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik R_n} f(k) = \frac{U f_0}{N} \sum_k \frac{e^{-ikn}}{-(D + \Delta) + 4t \cos(k)}$$

donde la última igualdad se sigue de que $R_n = na$ donde a es el parámetro de red que hemos considerado igual a 1.

Aproximando la suma sobre k en la primera zona de Brillouin (1ZB) por una integral ($\frac{1}{N} \sum_k \rightarrow \frac{1}{V_{1ZB}} \int_{1ZB} dk$) y considerando la paridad del integrando, obtenemos

$$\begin{aligned} f_n &= \frac{U f_0}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx e^{inx}}{-(D + \Delta) + 4t \cos(x)} = \frac{U f_0}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{dx \cos(nx)}{-(D + \Delta) + 4t \cos(x)} \\ &= \frac{-U f_0}{\pi(D + \Delta)} \int_0^{\pi} \frac{dx \cos(nx)}{1 - \frac{4t}{D + \Delta} \cos(x)} = \frac{-U f_0}{\pi(D + \Delta)} \int_0^{\pi} \frac{dx \cos(nx)}{1 + A \cos(x)}, \end{aligned}$$

donde $A \equiv \frac{-4t}{D + \Delta}$. Pero $D = 4t$ y $\Delta = D\left(\sqrt{1 + \left(\frac{U}{D}\right)^2} - 1\right)$ (ver Ec. (2.27)), por lo que

$$A = \frac{-D}{D + \Delta} = \frac{-D}{D + (D\sqrt{1 + \left(\frac{U}{D}\right)^2} - D)}$$

de donde se sigue que:

$$A = \frac{-1}{\sqrt{1 + (\frac{U}{D})^2}}. \quad (2.29)$$

Por otra parte, utilizando la relación [46]:

$$\int_0^\pi \frac{dx \cos(nx)}{1 + A \cos(x)} = \frac{\pi}{\sqrt{1 - A^2}} \left(\frac{\sqrt{1 - A^2} - 1}{A} \right)^n,$$

obtenemos que:

$$f_n = \frac{-U f_0}{\pi(D + \Delta)} \frac{\pi}{\sqrt{1 - A^2}} \left(\frac{\sqrt{1 - A^2} - 1}{A} \right)^n.$$

Sustituyendo los valores de A y Δ (Ecs. (2.29) y (2.27), respectivamente) en la última relación y considerando que $\sqrt{1 - A^2} = \frac{\frac{|U|}{D}}{\sqrt{1 + (\frac{U}{D})^2}}$, obtenemos

$$f_n = \frac{-U f_0}{D \sqrt{1 + (\frac{U}{D})^2}} \frac{\sqrt{1 + (\frac{U}{D})^2}}{\frac{|U|}{D}} \left[-\sqrt{1 + (\frac{U}{D})^2} \left(\frac{\frac{|U|}{D}}{\sqrt{1 + (\frac{U}{D})^2}} - 1 \right) \right]^n$$

Simplificando y considerando que $-\frac{U}{D} = \frac{|U|}{D}$, llegamos a la siguiente expresión para las amplitudes de la función de onda en el espacio real

$$f_n = f_0 \left[\sqrt{1 + (\frac{U}{D})^2} - \frac{|U|}{D} \right]^n \quad (2.30)$$

Cabe señalar que obtenemos las mismas expresiones para Δ y f_n utilizando el método del espacio de estados y su mapeo, el cual veremos en la siguiente sección.

2.3 Solución en el Espacio Real

En esta sección se presenta en forma detallada el método del espacio de estados y su mapeo [48], que permite diagonalizar en forma exacta el hamiltoniano de Hubbard extendido para redes infinitas con pocos electrones trabajando en el espacio real. Este método consiste esencialmente en mapear el problema de Hubbard a un problema de amarre fuerte en un espacio de dimensión mayor, lo cual nos permite como ya mencionamos, encontrar la solución exacta debido a que el problema de amarre fuerte está resuelto

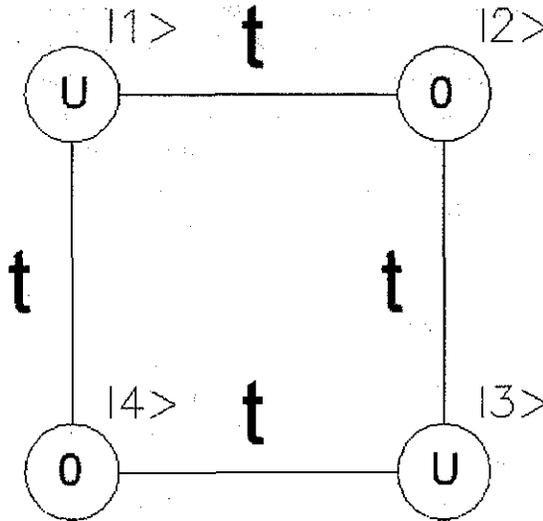


Figura 2.1: Red de estados correspondiente a dos electrones con espín total cero en una cadena lineal de dos sitios.

2.3.1 Método del Mapeo

Con el fin de explicar de una manera sencilla este método y sus fundamentos, analizaremos un sistema unidimensional constituido por dos electrones con espines “opuestos” (es decir, el espín total del sistema es cero) en una cadena lineal de N sitios ($N = 2, 3, 4, \dots$) con interacción en un sitio dada por U y un potencial de interacción de primeros vecinos dado por V ; el número de estados de dos electrones para éste sistema está dado por N^2 .

Para $N = 2$, por ejemplo, los posibles estados de configuración de este sistema serán:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm 0\rangle \\
 |2\rangle &= |+-\rangle \\
 |3\rangle &= |0\pm\rangle \\
 |4\rangle &= |-+\rangle
 \end{aligned}
 \tag{2.31}$$

donde el signo + representa un electrón con espín hacia arriba (es decir, la componente z del espín del electrón es $\frac{1}{2}$), el signo - un electrón con espín

hacia abajo (la componente z del electrón es $-\frac{1}{2}$) y el signo \pm un sitio con dos electrones, uno con espín hacia arriba y otro con espín hacia abajo, finalmente el 0 representa un sitio vacío. Para fijar ideas consideremos que los dos electrones interactúan a través del hamiltoniano de Hubbard simple (más adelante consideraremos el hamiltoniano de Hubbard extendido):

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (2.32)$$

Este hamiltoniano operando sobre el estado $|1\rangle$ lo conecta (esto es, los elementos de matriz correspondientes son distintos de cero) a los estados $|2\rangle$ y $|4\rangle$ (ver Fig. 2.1). La *auto-energía* de los estados $|1\rangle$ y $|3\rangle$ es U mientras que la *auto-energía* de los estados $|2\rangle$ y $|4\rangle$ es 0.

Nótese que el problema de muchos cuerpos (el cual involucra el producto de cuatro operadores fermiónicos) ha sido mapeado al de una sola partícula en un problema de amarre fuerte. Si el operador b_i^{\dagger} crea un estado $|i\rangle$ en la Ec. (2.31), el nuevo hamiltoniano es [47]:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} t_{ij} b_i^{\dagger} b_j + \sum_i \epsilon_i b_i^{\dagger} b_i, \quad (2.33)$$

el cual no tiene interacciones entre partículas de manera explícita.

Sin embargo, los sitios en este problema de amarre fuerte representan estados de muchos cuerpos y no los orbitales atómicos o funciones de Wannier que usualmente se utilizan.

En notación matricial \hat{H} viene dada por:

$$\begin{pmatrix} U & t & 0 & t \\ t & 0 & t & 0 \\ 0 & t & U & t \\ t & 0 & t & 0 \end{pmatrix}$$

Esta matriz puede diagonalizarse de manera exacta. Los cuatro valores propios son:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{U - \sqrt{U^2 + 16t^2}}{2} \\ E_2 &= 0 \\ E_3 &= U \\ E_4 &= \frac{U + \sqrt{U^2 + 16t^2}}{2} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Los vectores propios (sin normalizar) que corresponden a estas energías son:

$$\begin{aligned}
 |\psi_1\rangle &= |2\rangle + |4\rangle - \frac{E_1}{2t} (|1\rangle + |3\rangle) \\
 |\psi_2\rangle &= |2\rangle - |4\rangle \\
 |\psi_3\rangle &= |1\rangle - |3\rangle \\
 |\psi_4\rangle &= |2\rangle + |4\rangle - \frac{E_4}{2t} (|1\rangle + |3\rangle)
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Aquí $|1\rangle$ y $|4\rangle$ corresponden a un estado de singlete mientras que $|2\rangle$ y $|3\rangle$ corresponden a un estado de triplete. Así, en este sencillo ejemplo, hemos podido encontrar una solución exacta al problema de Hubbard mapeándolo a un problema de amarre fuerte.

En general, el número de estados de configuración para una red cualquiera de N sitios con dos electrones con espín total cero es N^2 .

Para el caso de cuatro sitios, los estados de configuración pueden ordenarse de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm 000\rangle & |5\rangle &= |0 + 0-\rangle & |9\rangle &= |-0 + 0\rangle & |13\rangle &= |000\pm\rangle \\
 |2\rangle &= |+ - 00\rangle & |6\rangle &= |0 + -0\rangle & |10\rangle &= |0 - +0\rangle & |14\rangle &= |00 - +\rangle \\
 |3\rangle &= |+0 - 0\rangle & |7\rangle &= |0 \pm 00\rangle & |11\rangle &= |00 \pm 0\rangle & |15\rangle &= |0 - 0+\rangle \\
 |4\rangle &= |+00-\rangle & |8\rangle &= | - + 00\rangle & |12\rangle &= |00 + -\rangle & |16\rangle &= | - 00+\rangle
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

Estos estados tienen una configuración geométrica en una red cuadrada, la cual puede ser descrita por un hamiltoniano de tight-binding de un solo cuerpo (ver Ec. (2.33)), con $(3N - 2)$ impurezas de sitio ordenadas. Entre estas impurezas, N están localizadas en sitios a lo largo de la diagonal principal de la red cuadrada con una autoenergía U correspondiente a un sitio doblemente ocupado y las otras $2(N - 1)$, están localizadas sobre las dos siguientes diagonales con una autoenergía V la cual corresponde a una ocupación sencilla de sitios de primeros vecinos. Una simple forma de obtener la solución es aprovechar la simetría traslacional de las impurezas de sitio y proyectar la red bidimensional de estados en una cadena lineal de estados efectivos.

En la Fig. (??) se muestra la representación geométrica de los 16 estados anteriores, donde los círculos indican los estados de configuración y la numeración corresponde a cada uno de los estados de la Ec. (2.36). La forma

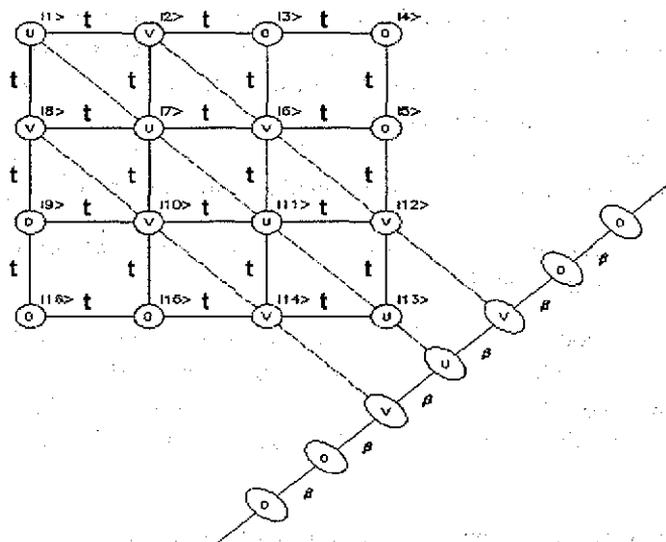


Figura 2.2: Espacio de estados y proyección a los estados efectivos para dos partículas en una cadena lineal.

de colocar cada uno de los estados, dentro de la representación geométrica del espacio de estados, es tomando en cuenta que habrá un enlace entre dos estados siempre y cuando la forma de pasar de uno de los estados al otro, sea mediante el salto de un electrón de un sitio a otro sitio vecino, ya que estamos considerando solamente interacciones a primeros vecinos. En cualquier otro caso no habrá enlaces.

Dentro del hamiltoniano de Hubbard extendido, la existencia de un estado con un sitio ocupado por dos electrones requiere de una energía U , como es el caso de los estados $|1\rangle$, $|7\rangle$, $|11\rangle$ y $|13\rangle$. Asimismo, un estado en el cual los dos electrones se encuentran en sitios vecinos más próximos, demanda una energía V . Por ejemplo, en la Ec. (2.36) los estados $|2\rangle$, $|6\rangle$, $|8\rangle$, $|10\rangle$, $|12\rangle$ y $|14\rangle$ tienen una auto-energía V . En cambio, un estado con dos electrones situados en sitios lejanos no exige ninguna energía, dentro del hamiltoniano de Hubbard extendido. La amplitud de la probabilidad de transición entre los estados vecinos de la figura es t , ya que la diferencia entre estos dos estados es simplemente el salto (*hopping*) de un electrón de un sitio a otro sitio vecino (ver Ec. (2.36)). Por lo tanto, el problema original del hamiltoniano de Hubbard extendido en una cadena lineal con dos electrones con espín total cero es equivalente a un problema de amarre fuerte de una red bidimensional que contiene impurezas cuyas auto-energías pueden ser U o V .

En general, éste método mapeará el problema original de muchas partículas con una impureza de sitio e interacción de primeros vecinos dentro de una red d -dimensional, en uno que contiene únicamente una partícula con algunas impurezas de sitio ordenadas en una red nd -dimensional, siendo n el número de electrones y d la dimensión del sistema original. En ésta red en el hiperespacio, las interacciones de sitio (U) y de primeros vecinos (V) a partir del hamiltoniano de Hubbard original llegan a ser las auto-energías de las impurezas de sitio. Aprovechando la simetría traslacional de las impurezas de sitio, el problema puede ser mapeado en un problema $(n-1)d$ -dimensional de estados efectivos con un número finito de impurezas efectivas el cual es frecuentemente más fácil de resolver.

Por simplicidad déjenos considerar dos electrones con espines opuestos en una cadena de N -sitios ($N = 2, 3, 4, \dots$) Por ejemplo, para $N = 4$ la configuración de estados es la dada en la Ec. (2.36), donde $+$ y $-$ representan a un electrón con espín hacia arriba y con espín hacia abajo, respectivamente, y 0 representa un sitio vacío. Además \pm representa un sitio doblemente ocupado. En general cuando el número de sitios es N , la configuración de estados está

dada por N^2 . En la Ec. (2.36) podemos observar que estos estados tienen una simetría traslacional en una dirección. Entonces podemos agrupar los estados con esta simetría traslacional y representarlos por un estado efectivo $|\alpha\rangle$. De hecho los estados con un sitio ocupado por dos electrones $|1\rangle$, $|7\rangle$, $|11\rangle$, y $|13\rangle$ pueden ser representados por el estado efectivo $|\alpha_1\rangle$, los estados en los cuales dos electrones están situados en sitios de primeros vecinos; por un lado los estados $|2\rangle$, $|6\rangle$, y $|12\rangle$ por $|\alpha_2\rangle$, y por el otro lado los estados $|8\rangle$, $|10\rangle$, $|14\rangle$ por $|\alpha_3\rangle$. Los estados con dos electrones colocados en los siguientes primeros vecinos; por un lado los estados $|3\rangle$ y $|5\rangle$ por $|\alpha_4\rangle$ y por el otro lado los estados $|9\rangle$ y $|15\rangle$ por $|\alpha_5\rangle$. Finalmente, los estados donde los dos electrones están situados en sitios distantes; por un lado tenemos el estado $|4\rangle$ por $|\alpha_6\rangle$, y por el otro lado el estado $|16\rangle$ por $|\alpha_7\rangle$.

Entonces es conveniente construir ondas de Bloch, para cada uno de aquellos estados efectivos, etiquetados por K y definidos por:

$$\begin{aligned}
 |\alpha_1\rangle &= |\uparrow, \downarrow, 0; K\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iKmb} |\uparrow_m, \downarrow_m\rangle, \\
 |\alpha_2\rangle &= |\uparrow, \downarrow, a; K\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iK(m+\frac{1}{2})b} |\uparrow_m, \downarrow_{m+1}\rangle, \\
 |\alpha_3\rangle &= |\downarrow, \uparrow, a; K\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iK(m+\frac{1}{2})b} |\uparrow_m, \downarrow_{m+1}\rangle, \\
 |\alpha_4\rangle &= |\uparrow, \downarrow, 2a; K\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iKmb} |\uparrow_m, \downarrow_{m+2}\rangle, \\
 |\alpha_5\rangle &= |\downarrow, \uparrow, 2a; K\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iKmb} |\uparrow_m, \downarrow_{m+2}\rangle, \\
 |\alpha_6\rangle &= |\uparrow, \downarrow, 3a; K\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iK(m+\frac{1}{2})b} |\uparrow_m, \downarrow_{m+3}\rangle, \\
 |\alpha_7\rangle &= |\downarrow, \uparrow, 3a; K\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iK(m+\frac{1}{2})b} |\uparrow_m, \downarrow_{m+3}\rangle
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

donde K es el vector de onda en la dirección de proyección. En general, podemos escribir el estado efectivo de dos electrones localizados en sitios que se encuentran separados por una distancia δa como sigue:

$$|\alpha\rangle = |\uparrow, \downarrow, \delta a; K\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m^{N-\delta} e^{iKmb} |\uparrow_m, \downarrow_{m+\delta}\rangle,$$

donde a es el parámetro de la red. El parámetro b , es la distancia entre los estados de primeros vecinos a lo largo de la dirección de proyección K . De hecho, los estados asociados a la cadena lineal y aquellos de la red cuadrada tienen $b = \sqrt{2}a$. La auto-energía asociada a éstos estados efectivos está dada por U , V o 0 , si los dos electrones están localizados en $\delta = 0$, $\delta = a$ o $\delta > a$ respectivamente.

Los estados efectivos en la Ec. (2.37) tienen una representación geométrica dada en la Fig. (??), donde las elipses representan los estados efectivos con su auto-energía indicada dentro, y la β representa el parámetro de salto efectivo entre dos estados efectivos.

Para encontrar el parámetro de hopping, se tiene que calcular los elementos de matriz de el hamiltoniano entre los estados efectivos de primeros vecinos. Por ejemplo, el parámetro de hopping para el caso de una red lineal está dado por:

$$\begin{aligned}
 \beta &= \langle \alpha_2 | \alpha_1 \rangle = \langle \uparrow, \downarrow, a; K | H | \uparrow, \downarrow, 0; K \rangle \\
 &= \left\langle \uparrow, \downarrow, a; K \left| H \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iKmb} \right| \uparrow_m, \downarrow_m \right\rangle \\
 &= \frac{t}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iKmb} \langle \uparrow, \downarrow, a; K | (|\uparrow_m, \downarrow_{m+1}\rangle + |\uparrow_{m-1}, \downarrow_m\rangle) \\
 &= \frac{t}{\sqrt{N}} \sum_{m,m'} e^{-iK(m'+\frac{1}{2})b} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{iKmb} \langle \uparrow_{n'}, \downarrow_{n'+1} | (|\uparrow_m, \downarrow_{m+1}\rangle + |\uparrow_{m-1}, \downarrow_m\rangle) \\
 &= 2t \cos(Ka/\sqrt{2}). \tag{2.38}
 \end{aligned}$$

Usando éste parámetro de hopping efectivo y los estados efectivos representados en la Fig. (??), es simple obtener la solución ya que como hemos mencionado, se ha mapeado el problema de muchos cuerpos en un problema de un solo cuerpo. La solución analítica para la energía de enlace y la longitud de coherencia de dos electrones opuestos en una cadena lineal infinita para $V = 0$ puede ser fácilmente obtenida usando la técnica de la función de Green. La expresión para la energía de enlace (gap) está dada por:

$$\Delta = B \left(\sqrt{1 + \left(\frac{U}{B}\right)^2} - 1 \right) \tag{2.39}$$

y la longitud de coherencia es:

$$\xi = \frac{-1}{2 \ln \left(\sqrt{1 + \left(\frac{U}{B}\right)^2} - \left|\frac{U}{B}\right| \right)}$$

Ahora bien, cuando el hamiltoniano no depende del espín, la función de onda de un sistema de partículas puede escribirse en forma de producto

$$\psi(\zeta_1, \zeta_2, \dots) = \varphi(r_1, r_2, \dots) \chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots) \quad (2.40)$$

donde ζ_i representa el conjunto de tres coordenadas espaciales y la proyección del espín de la partícula i . La función φ depende únicamente de las coordenadas de las partículas, y la función χ , sólo de sus espines; a la primera función se le llama función de onda espacial u orbital y a la segunda función de onda de espín. En este caso, en el que el hamiltoniano no depende del espín, la ecuación de Schrödinger sólo determina la función de onda espacial φ , dejando la función χ arbitraria.

No obstante, a pesar de la independencia del hamiltoniano respecto del espín, existe una dependencia de la energía con respecto al espín total del sistema, la cual procede, a fin de cuentas, de la indistinguibilidad de las partículas idénticas. Consideremos un sistema constituido por dos partículas idénticas. Después de resolver la ecuación de Schrödinger hallamos una serie de niveles de energía a cada uno de los cuales corresponde una determinada función de onda espacial $\varphi(r_1, r_2)$ simétrica o antisimétrica. Efectivamente, en virtud de la identidad de las partículas, el hamiltoniano (y con él la ecuación de Schrödinger) del sistema es invariante respecto de la permutación de aquellas. Si los niveles de energía son no degenerados, al permutar las coordenadas r_1 y r_2 la función $\varphi(r_1, r_2)$ sólo puede cambiar en un factor constante; pero si se hace de nuevo la permutación se comprueba que este factor puede ser igual únicamente a ± 1 . Cuando existe degeneración siempre es posible elegir combinaciones lineales de las funciones, relativas al nivel de energía dado, que también cumplan esta condición. Si el sistema consta de dos electrones, la función de onda total del sistema (o sea, el producto de la función de onda espacial y la función de onda de espín) debe ser antisimétrica bajo el intercambio de los dos electrones. Por esto, si la función de onda espacial es simétrica, la función de espín debe ser antisimétrica y viceversa. Aquellos niveles de energía a los cuales corresponden soluciones simétricas $\varphi(r_1, r_2)$ de la ecuación de Schrödinger pueden realmente existir para un espín total del sistema igual a cero (estado singulete), es decir,

cuando los espines de ambos electrones son "antiparalelos", dando una suma nula. Pero los valores de la energía ligados a funciones antisimétricas $\varphi(r_1, r_2)$ exigen un espín total igual a la unidad (estado de triplete), es decir, los electrones deben de ser "paralelos".

La antisimetría de la función de onda total asegura que dos de los electrones con el mismo valor de la proyección del espín, no pueden ocupar el mismo estado (Principio de Exclusión de Pauli), lo cual significa, dentro del modelo de Hubbard, el mismo sitio. En el caso de dos electrones asociamos las combinaciones de singulete y triplete con las soluciones simétricas y antisimétricas del problema de amarre fuerte en el espacio de estados sin restricciones estadísticas debidas al Principio de Exclusión de Pauli. Esto es, al resolver el problema de amarre fuerte en el espacio de estados, se obtendrá un conjunto de soluciones. De este conjunto de soluciones, las funciones de onda simétricas corresponden al singulete mientras que las funciones de onda antisimétricas corresponden al triplete.

Para el caso de dos electrones en una cadena lineal con un número infinito de sitios, la red de estados tiene la forma de un arreglo cuadrático bidimensional infinito con un número infinito de impurezas, localizadas en las cadenas diagonales. Esta red de estados tiene solución exacta, puesto que, como ya mencionamos el hamiltoniano para dicha red es de amarre fuerte. Una forma simple de encontrar la solución consiste en aprovechar la simetría traslacional de las impurezas y mapear la red bidimensional a una cadena lineal [49], como se muestra en la Fig. (??), donde $\beta = 2t \cos(Ka/\sqrt{2})$ es el parámetro de transferencia efectivo entre dos estados efectivos vecinos, siendo $a = 1$ la distancia de la red de estados y K el vector de onda en la dirección de la proyección. En otras palabras, estamos tratando la red bidimensional en un espacio combinado, una dirección en el espacio real y la otra en el espacio recíproco. Para cada K dada, tenemos una red unidimensional que puede resolverse por medio de la técnica de la matriz de transferencia [49]. Finalmente, el resultado de una dimensión se tiene que integrar con respecto a K sobre la primera zona de Brillouin.

En el caso de dos electrones con espín total cero en una red cuadrada infinita, tenemos que $n = 2$ y $d = 2$, y los estados forman una red hiper-cúbica en un espacio de cuatro dimensiones. La manera de encontrar la solución es similar al caso unidimensional. Primero, se realiza un mapeo del arreglo de estados de cuatro dimensiones a una red de dos dimensiones, solamente que ahora se tienen dos parámetros de transferencia efectivos: $\beta_x = 2t \cos(K_x a/\sqrt{2})$ y $\beta_y = 2t \cos(K_y a/\sqrt{2})$, donde K_x y K_y son los vectores

de onda en el plano de proyección xy . Para cada par (K_x, K_y) se tiene una red cuadrática bidimensional de estados con una impureza cuya auto-energía es U , rodeada por cuatro estados cuya auto-energía es V y los demás estados con auto-energía igual a cero. Dicha red se resuelve dentro del hamiltoniano de amarre fuerte, el resultado bidimensional se integra con respecto a K_x y a K_y sobre toda la primera zona de Brillouin.

Para el caso general de n electrones en un cristal de d dimensiones, el arreglo geométrico del conjunto de estados corresponde a una red de nd -dimensiones, donde el principio de exclusión de Pauli determina la forma geométrica de dicha red. Este arreglo de estados puede ser descrito por medio de un hamiltoniano de amarre fuerte, donde la auto-energía de los estados con un sitio doblemente ocupado estará dada por U , la auto-energía para los estados con sitios vecinos que estén simplemente ocupados estará dada por V y los demás estados tendrán auto-energía igual a cero. La integral de transferencia entre dos estados vecinos será t .

Capítulo 3

Problema de tres partículas

La correlación electrónica para el límite de baja densidad, y sobre todo para el caso de dos partículas, ha sido intensamente estudiada por métodos analíticos y numéricos usando el modelo de Hubbard [3, 19, 20], incluyendo diferentes tipos de desorden en este modelo [21, 22], y además incluyendo la interacción de carga ligada [45, 50, 51, 52]. La pregunta inmediata sería cuál es el comportamiento de las propiedades físicas (p. ej. energía de enlace), ante la presencia de un tercer electrón. Esta clase de preguntas puede ser de gran ayuda para entender el problema de N cuerpos. El caso de la correlación de tres partículas no ha sido tan ampliamente estudiado como el de dos partículas. Mattis [29] consideró este problema en su estudio de estabilidad de pares para el modelo de Hubbard con U atractivo, así mismo, Fabrizio [30] realizó un análisis del caso con U repulsivo en su discusión del estado base por medio de un análisis asintótico.

3.1 Extensión del Espacio de Estados

Las investigaciones en superconductores de alta T_c sugieren que la correlación electrónica puede jugar un papel significativo en la formación de pares [4]. Aunque el interés principal es en la física de sistemas bidimensionales altamente correlacionados, los modelos unidimensionales relacionados con la superconductividad de alta T_c son muy populares debido a la conjetura [53] de que las propiedades de 1D y 2D de ciertos modelos tienen aspectos en común. Dentro de los modelos para sistemas electrónicos correlacionados, que intentan capturar la física de los superconductores de alta temperatu-

ra crítica y compuestos emparentados, el modelo de Hubbard [3, 11], es la aproximación más simple con la cual podemos incluir la interacción electrónica entre electrones de banda angosta, mediante la retención de la interacción en el mismo sitio (U). Este modelo asigna la misma amplitud de transferencia t , a tres procesos diferentes sin importar la ocupación de los dos sitios involucrados.

Además de la interacción en el mismo sitio, existen otras interacciones electrón-electrón que son importantes [23], como la interacción electrónica a primeros vecinos y el término de interacción de carga ligada (bond-charge interaction). El hamiltoniano que incluye este tipo de interacciones se conoce como hamiltoniano generalizado de Hubbard, el cual ha sido estudiado previamente por varios autores [24, 25, 26, 27]. Este hamiltoniano se puede escribir como:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j}^{\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + c.h.) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \quad (3.1)$$

donde $\langle i, j \rangle$ representa a los sitios de los primeros vecinos, $c_{i,\sigma}^{\dagger} (c_{i,\sigma})$ es el operador de creación (aniquilación) con espín $\sigma = \downarrow$ o \uparrow en el sitio i , y $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$ donde $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}$. Es importante mencionar que en principio los parámetros U y V son positivos pues ellos son integrales de Coulomb directas. Sin embargo, U y V pueden ser negativas si una interacción indirecta atractiva a través de fonones o de otras excitaciones bosónicas son incluidas de tal forma que sean más fuertes que la repulsión Coulombiana directa. En la ecuación (3.1), la amplitud de transferencia dependiente de la ocupación, $t_{i,j}^{\sigma}$, está dada por

$$t_{i,j}^{\sigma} = t_A (1 - n_{i,-\sigma}) (1 - n_{j,-\sigma}) + t_B n_{i,-\sigma} n_{j,-\sigma} + t_{AB} [n_{j,-\sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) + n_{i,-\sigma} (1 - n_{j,-\sigma})]. \quad (3.2)$$

Los tres parámetros t_A , t_B y t_{AB} son las amplitudes de transferencia de un sitio con ocupación simple a un sitio vacío, de un sitio doblemente ocupado a uno con ocupación simple y de un sitio doblemente ocupado a un sitio vacío, respectivamente (Fig. 3.1).

El caso especial $t_A = t_B = t_{AB} = t$ corresponde al modelo de Hubbard extendido $t - U - V$, el cual ha sido estudiado intensamente por medio de métodos analíticos y numéricos [3, 11]. La Ec. (3.2) se puede escribir también

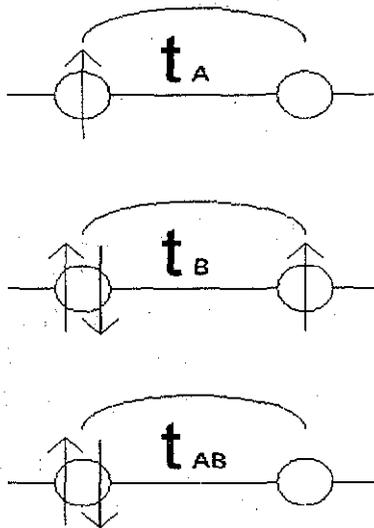


Figura 3.1: En ésta figura se muestran los tres tipos de parámetros de transferencia de un sitio a otro.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

de la siguiente forma:

$$t_{i,j}^{\sigma} = t_A + (t_{AB} - t_A)(n_{i,-\sigma} + n_{j,-\sigma}) + (t_A + t_B - 2t_{AB})n_{i,-\sigma}n_{j,-\sigma} \quad (3.3)$$

de manera que se enfatice la contribución de los operadores de dos y cuatro fermiones. Estas nuevas interacciones dan origen a nuevos efectos dinámicos, ausentes en el modelo de Hubbard simple.

Cuando se hace una transformación electrón-hueco en el hamiltoniano de Hubbard generalizado, es decir, los operadores de electrones se mapean a operadores de huecos vía $c_{i,\sigma}^+ \rightarrow h_{i,\sigma}$, el hamiltoniano toma la siguiente forma:

$$H = (U + 2ZV)(N - \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}^h) - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j}^{\sigma,h} h_{j,\sigma}^+ h_{i,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow}^h n_{i,\downarrow}^h + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^h n_j^h, \quad (3.4)$$

donde N es el número total de sitios, Z es el número de coordinación de la red, $h_{j,\sigma}^+$ ($h_{i,\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) de huecos y $n_i^h = n_{i,\uparrow}^h + n_{i,\downarrow}^h$ con $n_{i,\sigma}^h = h_{i,\sigma}^+ h_{i,\sigma}$. La expresión para $t_{i,j}^{\sigma,h}$ es la siguiente:

$$t_{i,j}^{\sigma,h} = t_B(1 - n_{i,-\sigma}^h)(1 - n_{j,-\sigma}^h) + t_A n_{i,-\sigma}^h n_{j,-\sigma}^h + t_{AB} [n_{j,-\sigma}^h(1 - n_{i,-\sigma}^h) + n_{i,-\sigma}^h(1 - n_{j,-\sigma}^h)], \quad (3.5)$$

donde la diferencia principal con el hopping de electrones es que t_A cambia por t_B y entonces los huecos también interactúan vía el modelo de Hubbard. Sin embargo, como ya mencionamos anteriormente, hay otras dos diferencias entre electrones y huecos que son importantes: la densidad de huecos es $1 - n$ en términos de la densidad de electrones (n) y el signo del parámetro de hopping es opuesto.

Para $t_A + t_B - 2t_{AB} = 0$ la amplitud de hopping generalizado se reduce al modelo que Hirsch y Marsiglio propusieron como posible mecanismo para la superconductividad [54]. El término de hopping, dependiente de la ocupación, Ec. (3.2) aparece de manera natural como el resultado de mapear el hamiltoniano de Hubbard multibanda sobre uno de una sola banda [55]. Recientemente Hirsch [56] discutió la inaplicabilidad del modelo de Hubbard para la descripción de electrones fuertemente correlacionados y propuso en

su lugar usar la forma generalizada Ec. (3.2), basada en cálculos de primeros principios de la magnitud de parámetros de hopping [57]. Sin embargo, no hay consenso sobre la amplitud de dichos parámetros de hopping en sistemas reales [58]. Por lo tanto, para mantener el modelo tan general como sea posible no se tomarán restricciones en los valores de los términos de hopping.

Como ya habíamos mencionado, el problema de tres partículas no ha sido tan ampliamente estudiado como el caso de dos partículas, por lo que es de gran importancia conocer algunas de sus propiedades físicas tales como la energía de enlace debida a la presencia de un tercer electrón, lo cual es útil para entender el problema de N cuerpos.

Para el caso de dos partículas el término $(t_A + t_B - 2t_{AB})n_{i,-\sigma}n_{j,-\sigma}$ es inefectivo, ya que la información que contiene corresponde al caso de tres partículas. Si consideramos que $t_A > t_{AB} > t_B$, el hopping se reduce a:

$$t_{i,j}^{\sigma} = t_A - (t_A - t_{AB})(n_{i,-\sigma} + n_{j,-\sigma}) \quad (3.6)$$

y

$$t_{i,j}^{\sigma,h} = t_B + (t_{AB} - t_B)(n_{i,-\sigma}^h + n_{j,-\sigma}^h) \quad (3.7)$$

implicando que el hopping de un hueco se incrementa en presencia de otro hueco y puede llevar al apareamiento de huecos pero no de electrones [57]. El término $(t_A + t_B - 2t_{AB})n_{i,-\sigma}n_{j,-\sigma}$ ahora se vuelve efectivo para el problema de tres partículas y puede modificar la aseveración anterior como se verá en los resultados posteriores.

A continuación, se analizará el apareamiento de tres electrones en una red unidimensional usando el hamiltoniano de Hubbard generalizado Ec. (3.1). El análisis se hace extendiendo el método del mapeo con el fin de incluir el hopping correlacionado. Veamos primeramente cómo se hace la extensión de este método del mapeo, para después discutir el problema que nos interesa.

3.1.1 Mapeo en el Caso de Tres Partículas

Para poder ver las modificaciones que debemos hacer en el método del mapeo analizamos el problema de tres electrones, dos con espín hacia arriba y uno con espín hacia abajo en una cadena lineal.

El caso más sencillo que podemos analizar primero es el caso de tres partículas y tres sitios (Fig. 3.2). En este caso, los eigenestados que encontramos son los siguientes:

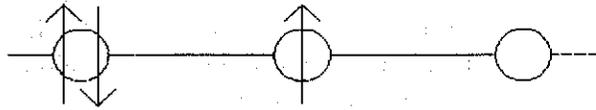


Figura 3.2: Tres partículas en una cadena lineal de tres sitios.

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm + 0\rangle_{(U+2V)} & |4\rangle &= |+\pm 0\rangle_{(U+2V)} & |7\rangle &= |++-\rangle_{(2V)} \\
 |2\rangle &= |\pm 0+\rangle_{(U)} & |5\rangle &= |+-+\rangle_{(2V)} & |8\rangle &= |+0\pm\rangle_{(U)} \\
 |3\rangle &= |-++\rangle_{(2V)} & |6\rangle &= |0\pm+\rangle_{(U+2V)} & |9\rangle &= |0+\pm\rangle_{(U+2V)}
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

En donde los subíndices nos indican las autoenergías correspondientes en cada estado. Para el caso anterior y usando el hamiltoniano generalizado de Hubbard, tenemos que un estado con un sitio ocupado por dos electrones y sin electrones en sitios vecinos requiere una autoenergía U (p. ej. el estado $|2\rangle$). Los estados con un sitio ocupado por dos electrones y un electrón situado en un sitio de primeros vecinos, requieren una energía $U + 2V$, (p. ej. el estado $|1\rangle$). Si tenemos estados como el estado $|7\rangle$, en el que tenemos tres partículas distribuidas en tres sitios vecinos, entonces vamos a tener una autoenergía $2V$ ya que la partícula intermedia siente tanto la presencia de la partícula de su izquierda como la de su derecha.

La amplitud de la probabilidad de transición entre estados de primeros vecinos dependerá de la ocupación del sitio y estará dada por t_A , t_B y t_{AB} ; ver Fig. (3.1).

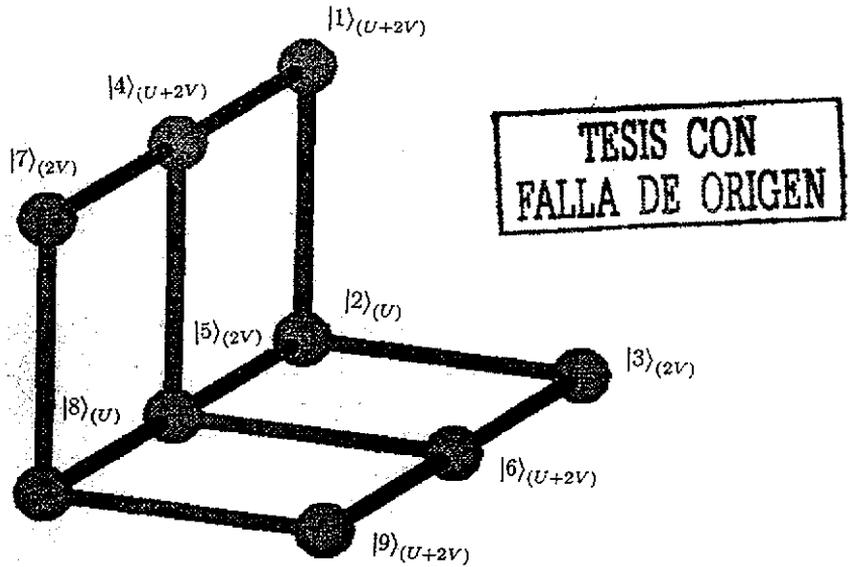


Figura 3.3: Representación geométrica de los estados de tres partículas en una cadena lineal de tres sitios.

Con el fin de encontrar una representación geométrica de éstos estados en la cual tengamos uniones entre ellos por medio de enlaces que compartan la misma energía, hay que recordar que el método del mapeo que utilizaremos mapea el problema original de muchas partículas con interacciones que se encuentran en una red d -dimensional hacia una red nd -dimensional de una sola partícula en donde n es el número de partículas y d la dimensionalidad del sistema original. Por lo que en nuestro caso de tres partículas en una cadena lineal obtendríamos una red de tres dimensiones. En la búsqueda de este espacio de estados de tres dimensiones, encontramos que el eigenestado $|1\rangle$ tiene conexión con los estados $|2\rangle$ y $|4\rangle$, mientras que el eigenestado $|2\rangle$ tiene conexión con los estados $|1\rangle$, $|3\rangle$ y $|5\rangle$. Siguiendo estos enlaces, podemos construir una red tridimensional, la cual finalmente queda como se muestra en la Fig. (3.3).

Siguiendo éste mismo método, encontramos que para el caso de tres partículas en una cadena lineal de cuatro sitios (Fig. 3.4) los posibles eigen-

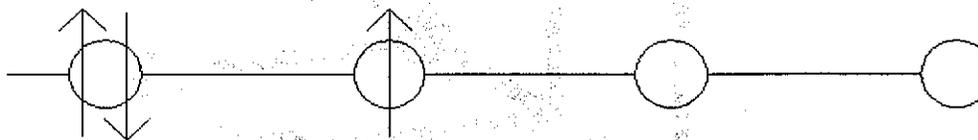
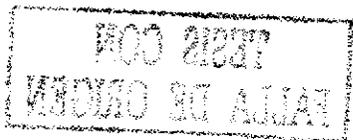


Figura 3.4: Tres partículas en una cadena lineal de cuatro sitios.

estados son los siguientes:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm + 00\rangle, & |9\rangle &= |+ - 0+\rangle, & |17\rangle &= |0 + -+\rangle \\
 |2\rangle &= |\pm 0 + 0\rangle, & |10\rangle &= |0 \pm + 0\rangle, & |18\rangle &= |00 \pm +\rangle \\
 |3\rangle &= |\pm 00 +\rangle, & |11\rangle &= |0 \pm 0 +\rangle, & |19\rangle &= |+ + 0-\rangle \\
 |4\rangle &= |- + + 0\rangle, & |12\rangle &= |0 - ++\rangle, & |20\rangle &= |+ 0 + -\rangle \\
 |5\rangle &= |- + 0 +\rangle, & |13\rangle &= |+ + - 0\rangle, & |21\rangle &= |+ 00 \pm\rangle \\
 |6\rangle &= |- 0 + +\rangle, & |14\rangle &= |+ 0 \pm 0\rangle, & |22\rangle &= |0 + +- \rangle \\
 |7\rangle &= |+ \pm 0 0\rangle, & |15\rangle &= |+ 0 - +\rangle, & |23\rangle &= |0 + 0 \pm\rangle \\
 |8\rangle &= |+ - + 0\rangle, & |16\rangle &= |0 + \pm 0\rangle, & |24\rangle &= |00 + \pm\rangle
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Cuya representación geométrica en éstos dos casos es la que se muestra en la Fig. (3.5).

Las autoenergías correspondientes a los círculos rojos son $U + 2V$, las correspondientes a los círculos azules son $2V$, los círculos de color amarillo tienen una autoenergía dada por V , mientras que los círculos verdes representan una autoenergía U .

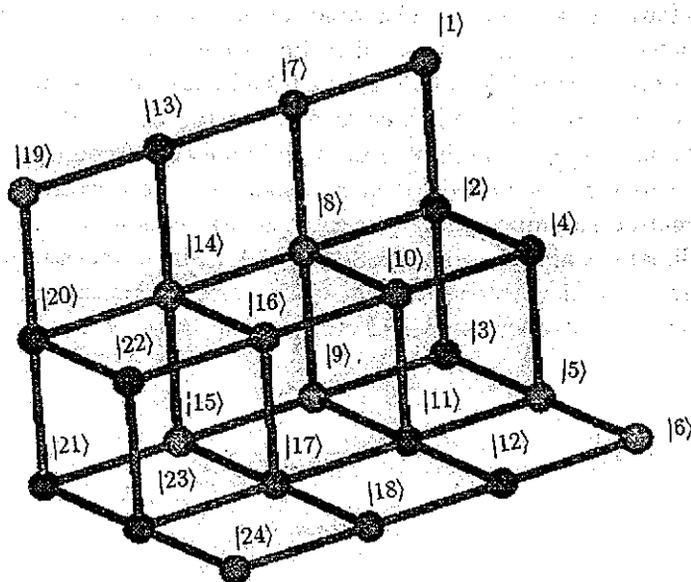


Figura 3.5: Representación geométrica de los estados de tres partículas en una cadena lineal de cuatro sitios.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Como ya se ha mencionado, el hopping entre estos estados depende de la ocupación de cada sitio. Es importante remarcar que la diferencia entre dos estados conectados es solamente el hopping de un electrón. De hecho en la Fig. (3.3), la amplitud de hopping entre el estado $|1\rangle$ y el estado $|2\rangle$ es t_A , la amplitud del hopping entre los estados $|2\rangle$ y $|4\rangle$ es t_{AB} y la amplitud del hopping entre el estado $|1\rangle$ y el estado $|7\rangle$ está dada por t_B , etc. Debido a esto, la red de estados (la red tridimensional) puede ser descrita por un hamiltoniano de tight-binding con impurezas de sitio e impurezas de enlace.

Para el caso de tres electrones en una cadena lineal infinita, la red de estados corresponde a una red tridimensional con un número infinito de impurezas de sitio y de enlace ordenadas a lo largo de las diagonales principales de cada uno de los cubos en la red. La red de estados tiene una solución exacta, ya que el hamiltoniano es un hamiltoniano de tipo tight-binding.

Una forma simple de obtener la solución, es aprovechar la simetría traslacional de las impurezas y proyectar la red de estados en una red triangular bidimensional de estados efectivos ($|\alpha_i\rangle$), como se muestra en la Figura (3.6), para así poder obtener la Fig. (3.7). Los diferentes parámetros de saltos efectivos, entre los estados efectivos están dados por:

$$\beta_A^+ = t_A e^{i\frac{K}{\sqrt{3}}a}, \quad (3.10)$$

$$\beta_A^- = t_A e^{-i\frac{K}{\sqrt{3}}a}, \quad (3.11)$$

$$\beta_B^+ = t_B e^{i\frac{K}{\sqrt{3}}a}, \quad (3.12)$$

$$\beta_B^- = t_B e^{-i\frac{K}{\sqrt{3}}a}, \quad (3.13)$$

$$\beta_{AB}^+ = t_{AB} e^{i\frac{K}{\sqrt{3}}a}, \quad (3.14)$$

$$\beta_{AB}^- = t_{AB} e^{-i\frac{K}{\sqrt{3}}a}, \quad (3.15)$$

siendo K el vector de onda y a el parámetro de la red. Los parámetros efectivos satisfacen la igualdad: $\beta^+ = (\beta^-)^*$. Finalmente, los resultados bidimensionales deben ser integrados con respecto a K dentro de la primera zona de Brillouin.

A partir de esta red bidimensional, obtenemos la matriz para un hamiltoniano de tight-binding, de la cual podemos obtener las soluciones numéricas para diferentes valores de los parámetros.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

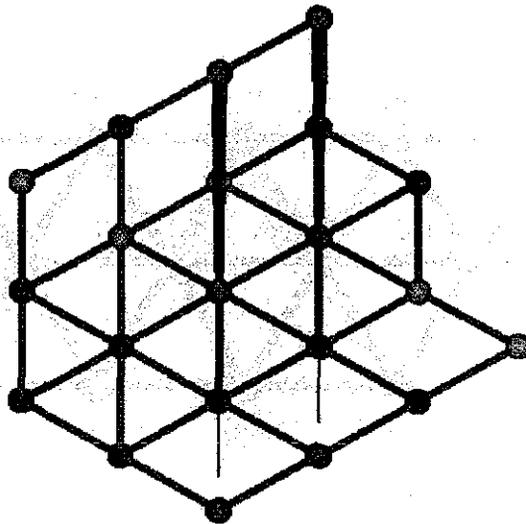


Figura 3.6: Proyección de los estados de tres partículas en una cadena lineal de cuatro sitios.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

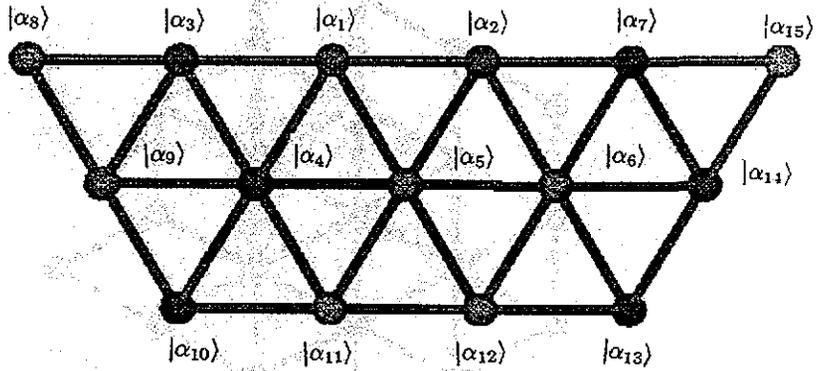
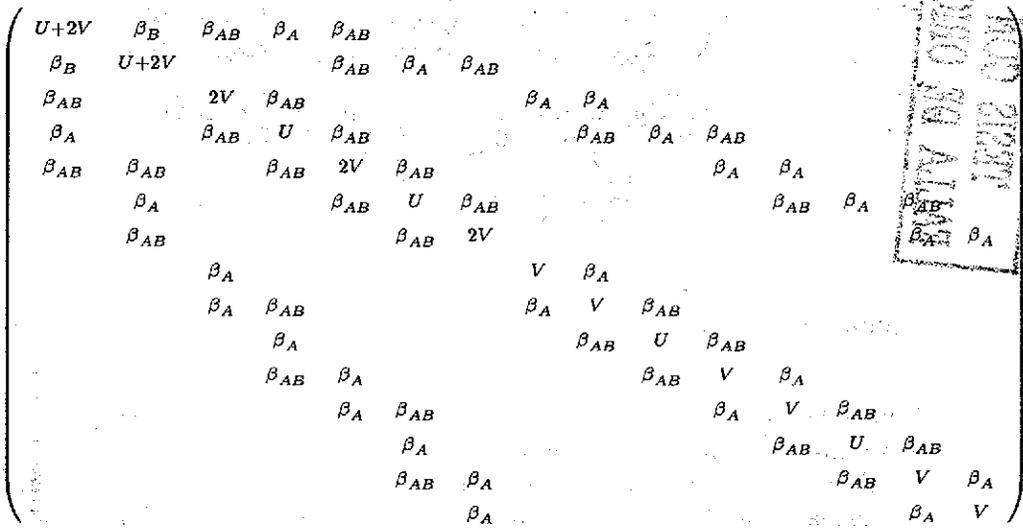


Figura 3.7: Espacio de estados efectivos para el caso de tres partículas en una cadena lineal de cuatro sitios.

En este caso, la matriz es la siguiente:



En la matriz anterior podemos observar cierta periodicidad en su estructura, la cual tomamos en cuenta, para que por medio de un algoritmo podamos generar las matrices que representen casos en los que la cadena lineal es grande, para después poderla diagonalizar y obtener el resultado de una cadena lineal infinita con tres partículas.

En la Fig. (3.8) mostramos la red de estados efectivos para el caso de tres electrones en una cadena lineal de cinco sitios. En esta figura mostramos con todo detalle tanto las impurezas de sitio como de enlace.

3.2 Solución Analítica

En esta sección estudiaremos la solución analítica para algunos casos particulares del estado base de tres electrones ($K = 0$) en una cadena lineal, por lo tanto, de las ecuaciones (3.10 - 3.15); tendremos que, $\beta_A^+ = \beta_A^- = t_A$, $\beta_B^+ = \beta_B^- = t_B$, $\beta_{AB}^+ = \beta_{AB}^- = t_{AB}$. En particular, las soluciones analíticas las obtenemos estudiando la red de estados efectivos de la Fig. (3.8) para dos límites importantes: cuando la amplitud de salto de un sitio doblemente

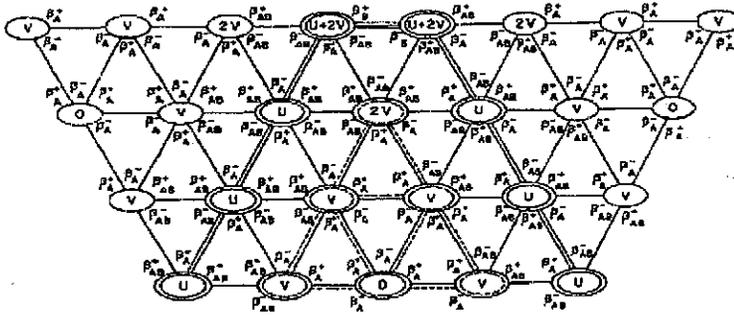


Figura 3.8: Espacio de estados efectivos con los parámetros de salto efectivos

ocupado a un sitio vacío está prohibida $t_{AB} = 0$, y cuando las amplitudes de salto $t_{AB} = 0$ y $t_B = 0$ están prohibidas.

En el primer caso ($t_{AB} = 0$) tenemos que hay una competencia entre la cadena lineal de estados efectivos con dos impurezas de sitio (mostrados en la Fig. (3.8) por líneas dobles) y la red triangular de estados efectivos (mostrada en la Fig. (3.8) por líneas con guiones). Esta última es en efecto la red de estados proyectada para el problema de tres electrones con espín paralelo ($\uparrow\uparrow\uparrow$) en una cadena lineal [52]. Para $t_A = t_B$ la cadena lineal de estados efectivos con dos sitios de impureza iguales localizadas en posición de primeros vecinos con energía $2V$, tiene una solución analítica para la energía. Con el fin de analizar esta solución, consideremos dos impurezas sustitucionales introducidas en dos sitios que son vecinos próximos en una cadena lineal periódica, descritos por un hamiltoniano de enlace fuerte. La solución para la energía del estado base se puede encontrar usando la técnica de funciones de Green. En una cadena lineal, la función de Green para dos impurezas está dada por [36]:

$$G(n, l; E) = \langle n | G_{0p} | l \rangle + \frac{\epsilon_2 \langle n | G_{0p} | m \rangle \langle m | G_{0p} | l \rangle}{1 - \epsilon_2 G_{0p}(m, m; E)}, \quad (3.16)$$

con ϵ_2 la energía de sitio de la segunda impureza en el sitio m y G_{0p} es la función de Green para una sola impureza con energía de sitio ϵ_1 . Para una cadena lineal con una impureza localizada en el sitio central ($p = 0$), la función de Green G_{0p} evaluada en la posición de la segunda impureza ($m = 1$)

está dada por:

$$G_{0p}(1, 1; E_{imp}) = \frac{D^2 + 2\epsilon_1 \sqrt{E_{imp}^2 - D^2} - 2\epsilon_1 E_{imp}}{D^2 (\sqrt{E_{imp}^2 - D^2} - \epsilon_1)}, \quad (3.17)$$

donde $D = |zt_A|$ es el semiancho de banda para el caso de dos partículas dentro de la aproximación de partícula independiente, y z es el número de primeros vecinos. En el presente caso de dos impurezas, los polos de $G(n, l; E)$ en la Ec. (3.16) están dados por

$$G_{0p}(m, m; E_{imp}) = \frac{1}{\epsilon_2}. \quad (3.18)$$

Cuando la segunda impureza se localiza en el sitio 1 ($m = 1$), se obtiene

$$G_{0p}(1, 1; E_{imp}) = \frac{1}{\epsilon_2} = \frac{D^2 + 2\epsilon_1 \sqrt{E_{imp}^2 - D^2} - 2\epsilon_1 E_{imp}}{D^2 (\sqrt{E_{imp}^2 - D^2} - \epsilon_1)}. \quad (3.19)$$

De la ecuación anterior se obtiene la ecuación de segundo orden:

$$E^2(D^4 - 4D^2\epsilon_1\epsilon_2) + E4D^2\epsilon_1\epsilon_2(\epsilon_1 + \epsilon_2) - D^6 - D^4(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 - 4D^2\epsilon_1^2\epsilon_2^2 = 0, \quad (3.20)$$

cuya solución nos da la energía del estado base, es decir:

$$E_{imp} = \frac{-2\epsilon_1\epsilon_2(\epsilon_1 + \epsilon_2) \pm (2\epsilon_1\epsilon_2 - D^2) \sqrt{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + D^2}}{D^2 - 4\epsilon_1\epsilon_2} \quad (3.21)$$

la cual es válida sólo para energías mayores que D .

Con la solución de la Ec. (3.16) tenemos que, cuando $t_A = t_B$ en la cadena lineal de estados efectivos con dos impurezas de sitio iguales (de autoenergía $2V$), la energía E_{imp} está dada como:

$$E_{imp} = \frac{1}{D^2 - 16V^2} \{-32V^3 \pm D(8V^2 - D^2)\}. \quad (3.22)$$

En la Ec. (3.22), E_{imp} da la energía de los estados localizados para las dos impurezas de sitio iguales. Puesto que la cadena lineal es una red bipartita y el hopping entre sitios vecinos es el mismo a lo largo de la cadena, existe una simetría en estas dos energías, esto significa que para $V > 0$ se tiene que

los dos valores de energía son iguales a aquellos dados para $V < 0$ pero con signo opuesto. La energía de amarre está dada por $\Delta \equiv \max(|E_{imp}| - D)$.

Para el segundo caso ($t_{AB} = 0$ y $t_B = 0$), la competencia es entre la cadena lineal semi-infinita de estados efectivos con una impureza de sitio $2V$ localizada en la superficie y la red triangular de estados efectivos. La cadena lineal semi-infinita, también tiene solución analítica. Para analizar dicha solución analítica, se usa la aproximación de enlace fuerte con un orbital s por átomo. Se considera que estos forman un conjunto ortonormal. Los elementos de matriz del Hamiltoniano son de la forma:

$$\langle \Phi_l | H | \Phi_l \rangle = 0 \text{ para } l \neq 0 \quad (3.23)$$

$$\langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle = 2V \quad (3.24)$$

$$\langle \Phi_l | H | \Phi_{l+1} \rangle = -t_A, \quad (3.25)$$

donde Φ_l es el orbital s centrado en el átomo l . Esto significa que se usa una aproximación de primeros vecinos y se toma el cuerpo de los elementos de la diagonal como el origen de las energías. En las ecuaciones anteriores se ha permitido al átomo terminal tener un término diagonal diferente. Esto simula el efecto de una posible capa dipolar en la superficie, inducida ya sea por la superficie libre misma o por una simulación de una capa quimisorbida.

Se puede considerar la posibilidad de existencia de estados localizados. Para esto se escribe la función de onda Ψ en la forma

$$\Psi = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \Phi_l. \quad (3.26)$$

para resolver este problema, se escriben las ecuaciones

$$\langle \Phi_l | E - H | \Psi \rangle = 0 \quad (3.27)$$

para cualquier valor de l . Lo cual es equivalente al siguiente conjunto de ecuaciones

$$\begin{aligned} (E - 2V)a_0 &= -t_A a_1 \\ E a_1 &= -t_A (a_0 + a_2) \\ E a_k &= -t_A (a_{k-1} + a_{k+1}). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Si se busca la posibilidad de tener un estado localizado con una función de onda que tenga un decaimiento exponencial, se puede probar con una solución a_l de la forma

$$a_l = a_0 K^l. \quad (3.29)$$

El conjunto de ecuaciones (3.27) se reduce a

$$E = 2V - t_A K \quad (3.30)$$

$$E = t_A \left(K + \frac{1}{K} \right), \quad (3.31)$$

de donde

$$K = -\frac{t_A}{2V}, \quad (3.32)$$

por lo tanto

$$E_{imp} = 2V + \frac{t_A^2}{2V}, \quad (3.33)$$

la cual es válida sólo para $|2V| > |t_A|$ lo que nos lleva a $|E_{imp}| > 2|t_A|$, es decir, esta solución corresponde a los estados localizados fuera de la banda. Para $V > 0$ (potencial repulsivo) el estado se encuentra por arriba de la banda, lo contrario es válido para potenciales atractivos ($V < 0$).

3.3 Solución numérica

En esta sección se presenta la solución numérica dentro del modelo de Hubbard generalizado, para variaciones en los parámetros de hopping y en los términos de interacción, para el caso de tres electrones no paralelos ($\uparrow\downarrow\uparrow$) y para el caso de tres huecos no paralelos ($\uparrow\downarrow\uparrow$) en una red unidimensional infinita [59].

Como ya mencionamos, la diferencia fundamental entre electrones y huecos dentro del hamiltoniano generalizado de Hubbard es que la amplitud de hopping t_A para electrones debe cambiarse a t_B para huecos. El resultado para huecos se obtiene en forma simple a partir del problema de electrones intercambiando t_A y t_B . Esto produce una asimetría entre el aparcamiento de electrones y el de huecos, que debe tomarse en cuenta a la hora de realizar los cálculos numéricos. La diagonalización numérica final se realizó en una red triangular de 551 estados efectivos. El tamaño de la matriz a diagonalizar se escogió de tal forma que fuera el tamaño mínimo a partir del cual las propiedades físicas ya no tienen un cambio importante.

En la Fig. (3.9), se muestran los resultados numéricos del diagrama de fases para el caso especial de $t_A = t_B = t_{AB} = t$. Este es el caso del modelo de Hubbard sin interacción de impurezas de enlace y el cual se va a considerar como referencia para comparar con los otros resultados en los que

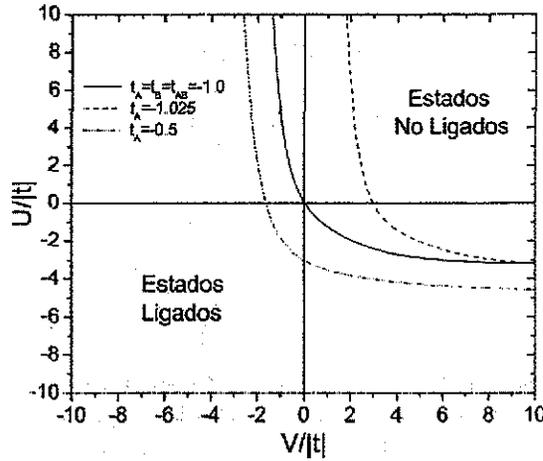


Figura 3.9: Diagrama de fase para tres electrones en una cadena lineal.

se ha modificado un parámetro de hopping, dejando los otros dos constantes iguales a -1 . En este caso particular podemos observar la simetría electrón-hueco y la ausencia de apareamiento para U y V positivas, lo anterior es un hecho que esta bien establecido.

También es claro, a partir de la Fig. (3.9), que con un incremento muy pequeño de t_A , los estados ligados de los electrones se favorecen a pesar de que $t_A > t_{AB}$, a diferencia del caso de dos partículas. Esto muestra que el término adicional $(t_A - t_{AB})n_{i,-\sigma}n_{j-\sigma}$, juega un papel muy importante en el caso de tres partículas.

En la Fig (3.10) encontramos que el parámetro de hopping t_{AB} que va de un sitio doblemente ocupado a un sitio vacío, tiene una probabilidad muy alta, lo cual favorece a los estados ligados, y la simetría electrón-hueco se preserva, ya que $t_A = t_B$ para este caso.

En la Fig. (3.11) se puede observar que el efecto de t_B es mucho más débil que el de t_A , ya que en este caso necesitamos valores mucho más grandes del parámetro de hopping t_B que en el caso de t_A , para obtener estados ligados de los electrones.

Como se ha mencionado los resultados para huecos se obtienen de manera

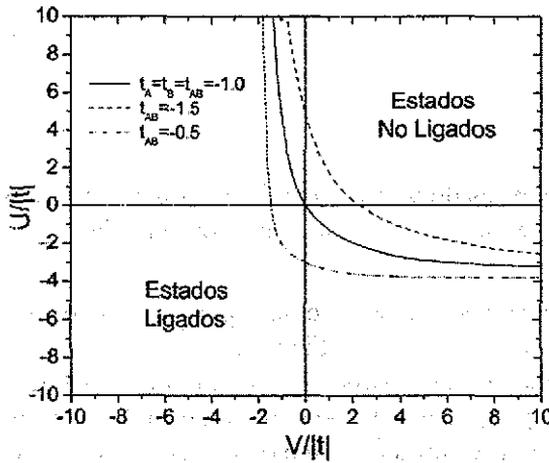


Figura 3.10: Igual que en la Fig. 3.9 pero con la variando el parámetro de transferencia de un sitio doblemente ocupado a uno vacío.

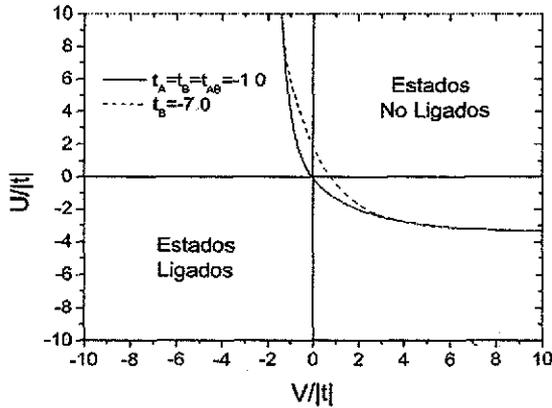


Figura 3.11: Resultados de la variación del parámetro de transferencia de un sitio doblemente ocupado a uno con ocupación sencilla.

simple a partir de los resultados obtenidos para electrones mediante el intercambio de t_A y t_B . Entonces, de las Figs. (3.9, 3.10 y 3.11), podemos observar claramente la asimetría del apareamiento de electrones y de huecos cuando los parámetros t_A y t_B tienen valores diferentes a 1. Aquí el apareamiento de huecos no es siempre tan fácil como en el caso de los electrones.

Capítulo 4

Conclusiones

En esta tesis hemos analizado los estados ligados de tres electrones en una cadena lineal infinita. El análisis se realizó utilizando el hamiltoniano de Hubbard generalizado y extendiendo el método del mapeo en el espacio real para incluir el término de interacción carga-enlace, tanto en el caso de electrones como en el de huecos. Se estudió la interacción de los tres electrones considerando éstos tanto con espines paralelos como antiparalelos. Observamos claramente una asimetría entre los estados ligados de electrones y de huecos, esta asimetría es debida al término de interacción carga-enlace.

Análíticamente se analizaron dos casos límites importantes: (a) Cuando la amplitud de transferencia de un sitio doblemente ocupado a un sitio vacío está prohibida, así mismo, se permite que las transferencias de un sitio con ocupación simple a un sitio vacío y de un sitio doblemente ocupado a uno con ocupación simple, sean iguales y distintas de cero. (b) Cuando las amplitudes de transferencia de un sitio doblemente ocupado a uno con ocupación simple y de un sitio doblemente ocupado a un sitio vacío están prohibidas, de igual forma se permite la transferencia de un sitio con ocupación simple a un sitio vacío.

De los resultados analíticos para la energía de amarre encontrados en los incisos (a) y (b), se puede observar que obtendremos estados ligados cuando el potencial de interacción sea negativo, es decir, para una fuerza asociada de tipo atractivo.

En los cálculos numéricos obtuvimos el diagrama de fase para el estado base tanto de electrones como de huecos, en donde consideramos diferentes valores para los parámetros de salto, con lo cual obtuvimos la solución en diferentes casos, en particular para los siguientes: para t_A , dejando los otros

dos parámetros constantes iguales a -1.0 , para t_B , dejando igualmente las otras dos constantes iguales a -1.0 y en el caso de t_{AB} manteniendo las otras dos constantes iguales a -1.0 .

Los resultados para huecos se obtuvieron intercambiando los parámetros de salto t_A por t_B , con lo cual podemos observar una clara asimetría en la energía de amarre entre huecos y electrones. Asimismo, podemos ver que obtener estados ligados para huecos no es siempre tan fácil como para electrones, a diferencia del problema de dos partículas.

Es importante mencionar que este método es general, en el sentido de que puede ser extendido a problemas de mayor dimensión, particularmente a dos y tres dimensiones. Dicha extensión se está llevando a cabo.

Finalmente, debemos decir que el método del mapeo tiene la gran virtud de ser simple, además de trabajar en el espacio real, lo cual nos permite abordar problemas de gran complejidad como el caso de sistemas no periódicos o con algún tipo de desorden.

Apéndice A

Funciones de Green

A continuación veremos, con algunos detalles, el método de la Función de Green. Este método nos permite obtener información acerca de los eigenvalores y los eigenvectores de un operador lineal, hermitico, independiente del tiempo, y que además tiene un conjunto completo de funciones propias

$$L(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n\phi_n(\mathbf{r}). \quad (\text{A.1})$$

La función de Green independiente del tiempo puede definirse como la solución de la ecuación diferencial inhomogénea del tipo

$$[z - L(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (\text{A.2})$$

donde z es una variable compleja.

En notación de Dirac tenemos las siguientes definiciones:

$$\phi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \phi_n \rangle, \quad (\text{A.3})$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')L(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | L | \mathbf{r}' \rangle, \quad (\text{A.4})$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \langle \mathbf{r} | G(z) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (\text{A.5})$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle, \quad (\text{A.6})$$

y

$$\int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = 1, \quad (\text{A.7})$$

con lo cual podemos escribir

$$L|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle, \quad (\text{A.8})$$

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (\text{A.9})$$

y

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \int dn' |\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}| = 1, \quad (\text{A.10})$$

donde la suma se extiende sobre las funciones asociadas al espectro discreto de energía y la integral al espectro continuo (si lo tiene). Veamos en esta notación como queda la Ec. A.2

$$\begin{aligned} [z - L(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) &= \langle \mathbf{r} | zG(z) | \mathbf{r}' \rangle - \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') L(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}', \mathbf{r}''; z) d\mathbf{r}'' \\ &= \langle \mathbf{r} | zG(z) | \mathbf{r}' \rangle - \int \langle \mathbf{r} | L | \mathbf{r}'' \rangle \langle \mathbf{r}'' | G(z) | \mathbf{r}' \rangle d\mathbf{r}'' \\ &= \langle \mathbf{r} | (z - L)G(z) | \mathbf{r}' \rangle, \end{aligned}$$

por otra parte

$$[z - L(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle,$$

de donde obtenemos finalmente

$$(z - L)G(z) = 1. \quad (\text{A.11})$$

Si los valores propios de $z - L$ son diferentes de cero ($z \neq \lambda_n$), podemos escribir la Función de Green como:

$$\begin{aligned} G(z) &= \frac{1}{z - L} \\ &= \frac{1}{z - L} \left\{ \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \int dn' |\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}| \right\} \\ &= \sum_n \frac{1}{z - L} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| + \int dn' \frac{1}{z - L} |\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}| \\ &= \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - \lambda_n} + \int dn' \frac{|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}|}{z - \lambda_{n'}} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Por que L es un operador Hermítico, todos los λ_n son reales. Por lo tanto, si $Im\{z\} \neq 0$ tenemos que $z \neq \{\lambda_n\}$, lo que significa que $G(z)$ es una función analítica en el plano complejo con excepción de los puntos sobre el eje real que corresponden a los valores propios de L . Si $z = \lambda$, donde λ

pertenece al espectro continuo de L , $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ no está bien definida, ya que la integral de la Ec. (A.12) tiene un polo. Sin embargo, podemos definir $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ por medio del siguiente límite:

$$G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda \pm is), \quad (\text{A.13})$$

donde λ pertenece al espectro continuo. Las funciones $G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ y $G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ están relacionadas de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) &= \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda - is) \\ &= \lim_{s \rightarrow 0^+} [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda + is)]^* \\ &= [\lim_{s \rightarrow 0^+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda + is)]^* \\ &= [G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)]^*. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Usando la Ec. (A.12) y la siguiente identidad:

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi \delta(x), \quad (\text{A.15})$$

podemos expresar la discontinuidad $\tilde{G}(\lambda) = G^+(\lambda) - G^-(\lambda)$ como:

$$\tilde{G}(\lambda) = -2\pi i \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) |\phi_n\rangle \langle \phi_n| - 2\pi i \int dn' \delta(\lambda - \lambda_{n'}) |\phi_{n'}\rangle \langle \phi_{n'}|. \quad (\text{A.16})$$

En la representación del vector de posición y usando las Ecs. (A.12) y (A.15), obtenemos los elementos de matriz de la diagonal principal

$$\begin{aligned} G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \lambda) &= P \left\{ \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r})}{\lambda - \lambda_n} + \int dn' \frac{\phi_{n'}(\mathbf{r}) \phi_{n'}^*(\mathbf{r})}{\lambda - \lambda_{n'}} \right\} \\ &\mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}) \\ &\mp i\pi \int dn' \delta(\lambda - \lambda_{n'}) \phi_{n'}(\mathbf{r}) \phi_{n'}^*(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

La densidad de estados (DOS) por unidad de volumen está dada por

$$\rho(\mathbf{r}; \lambda) = \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}) + \int dn' \delta(\lambda - \lambda_{n'}) \phi_{n'}(\mathbf{r}) \phi_{n'}^*(\mathbf{r}), \quad (\text{A.18})$$

usando las Ecs. (A.16) y (A.17) la podemos expresar finalmente como:

$$\rho(\mathbf{r}; \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{G^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \lambda)\}. \quad (\text{A.19})$$

Apéndice B

Problema de impurezas

Consideremos un cristal perfecto cuya periodicidad es alterada por una impureza en un sitio l de la red. Con esta situación el Hamiltoniano lo escribimos como:

$$H = H_0 + H_l, \quad (\text{B.1})$$

donde H_0 corresponde a un Hamiltoniano de Amarre Fuerte sin impurezas

$$H_0 = \varepsilon_0 \sum_m |m\rangle\langle m| + \beta \sum_{n,m} |n\rangle\langle m|, \quad (\text{B.2})$$

y H_l es la perturbación debida a la impureza

$$H_l = \varepsilon_l |l\rangle\langle l|. \quad (\text{B.3})$$

Denotemos por $G_0(z)$ y $G_\alpha(z)$ las funciones de Green correspondientes a H_0 y H respectivamente

$$G_0(z) = (z - H_0)^{-1} \quad (\text{B.4})$$

$$G_\alpha(z) = (z - H)^{-1} \quad (\text{B.5})$$

ahora,

$$\begin{aligned} G_\alpha(z) &= (z - H_0 - H_l)^{-1} \\ &= [1 - (z - H_0)^{-1} H_l]^{-1} (z - H_0)^{-1} \\ &= [1 - G_0(z) H_l]^{-1} G_0(z). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Expandiendo el operador $[1 - G_0(z)H_1]^{-1}$ en serie de potencias obtenemos:

$$\begin{aligned}
 G_{01} &= G_0 + G_0 H_1 G_0 + G_0 H_1 G_0 H_1 G_0 + \dots \\
 &= G_0 + G_0 [H_1 + H_1 G_0 H_1 + \dots] G_0 \\
 &= G_0 + G_0 \{H_1 [G_0 + G_0 H_1 G_0 + \dots] G_0^{-1}\} G_0 \\
 &= G_0 + G_0 \{H_1 G_{01} G_0^{-1}\} G_0 \\
 &= G_0 + G_0 T G_0,
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

donde

$$\begin{aligned}
 T &= H_1 G_{01} G_0^{-1} \\
 &= H_1 G_{01} (z - H_0),
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

sustituyendo la expresión para H_1 dada por la Ec. (??) en la expansión en serie para T obtenemos:

$$\begin{aligned}
 T &= \varepsilon_l |l\rangle \langle l| + \varepsilon_l^2 |l\rangle \langle l| G_0 |l\rangle \langle l| + \varepsilon_l^3 |l\rangle \langle l| G_0 |l\rangle \langle l| G_0 |l\rangle \langle l| + \dots \\
 &= \varepsilon_l |l\rangle \{1 + \varepsilon_l G_0(l, l) + [\varepsilon_l G_0(l, l)]^2 + \dots\} \langle l| \\
 &= \frac{\varepsilon_l}{1 - \varepsilon_l G_0(l, l)} |l\rangle \langle l|.
 \end{aligned} \tag{B.9}$$

Sustituyendo esta relación para T en la ecuación (??) obtenemos los elementos de matriz de G_{01}

$$G_{01}(m, n; \varepsilon_l) = G_0(m, n) + \frac{\varepsilon_l G_0(m, l) G_0(l, n)}{1 - \varepsilon_l G_0(l, l)} \tag{B.10}$$

Consideremos ahora el problema de una nueva impureza en el sitio p de la red. El Hamiltoniano está ahora dado por

$$H' = H_0 + H_1 + H_p, \tag{B.11}$$

donde H_p es la perturbación debida a la nueva impureza

$$H_p = \varepsilon_p |p\rangle \langle p|. \tag{B.12}$$

Mediante a un cálculo análogo al realizado para el caso de una impureza, obtenemos la siguiente expresión para los elementos de matriz de la Función de Green:

$$G(q, r; \varepsilon_p, \varepsilon_l) = G_{01}(q, r; \varepsilon_l) + \frac{\varepsilon_p G_{01}(q, p; \varepsilon_l) G_{01}(p, r; \varepsilon_l)}{1 - \varepsilon_p G_{01}(p, p; \varepsilon_l)}, \tag{B.13}$$

con los elementos de matriz de G_{01} dados por la Ec. (??).

Bibliografía

- [1] J. G. Bednorz, K.A. Müller, Z. Phys. B, **64**, 189 (1986).
- [2] W. E. Pickett, Rev. Mod. Phys. **61**, 433 (1989).
- [3] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaskiewicz, Rev. Mod. Phys., **62**, 113 (1990).
- [4] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys., **66**, 763 (1994).
- [5] R. E. Peierls, Quantum Theory of Solids (Oxford University Press), P.108 (1955).
- [6] R. Micnas, J. Ranninger y S. Robaszkiewicz, Journal de Physique **12**, C8-2221 (1988).
- [7] G. Grüner, Rev. Mod. Phys. **60**, 1129 (1988).
- [8] P. L. Taylor A Quantum Approach to the Solid State, (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ) (1970).
- [9] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A276**, 238 (1963).
- [10] D. Cabib y T.A. Kaplan, AIP Conf. Proc. **10** 1504 (1973).
- [11] M. Rosetti, "The Hubbard Model: Recent results", Series on Advances in Statistical Mechanics., World Scientific, Vol. **7** (1992).
- [12] G. Kotliar y A.E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).
- [13] M. Lavagna, Phys. Rev. B **41**, 142 (1991); Inter. J. Mod. Phys. **5**, 885 (1990).

- [14] S. R. White, D.J. Scalapino, R. L. Sugar y N. E. Bickers, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1523 (1989a).
- [15] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **20**, 5259 (1980).
- [16] E. H. Lieb y F Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1362 (1968).
- [17] S. Caprara, M. Avignon and O. Navarro, *Phys. Rev. B* **61**, 15667 (2000).
- [18] W. Metzner y D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).
- [19] O. Navarro, C. Wang, *Solid State Commun.*, **83**, 473 (1992).
- [20] M. W. Long, R. Fehrbacher, *J. Phys. Condens. Matter*, **2**, 2787.
- [21] A. S. Alexandrov, S.V. Traven, P.E. Kornilovitch, *J. Phys. Condens. Matter*, **4**, L89 (1992).
- [22] D. L. Shepelyahsky, *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 2607 (1994).
- [23] J. E. Hirsch, F. Marsiglio, *Phys. Rev. B*, **41**, 2049 (1990).
- [24] R. Strack, D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2637 (1993).
- [25] A. A. Ovchinnikov, *Mod. Phys. Lett. B*, **7** 21 (1993).
- [26] L. Arrachea, A.A. Aligia, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2240 (1994); Gagliano. A.A. Aligia, L. Arrachea, M. Avignon, *Phys. Rev. B*, **51**, 14012 (1995).
- [27] O. Navarro, *Czech. J. Phys.* **46**, S4 1867 (1996); O. Navarro, E. Flores. M. Avignon, "Current Problems in Condensed Matter", editor: J. L. Moran-López. Plenum Press, p. 73 (1998).
- [28] J. E. Espinosa, O. Navarro. M. Avignon, *The European Physical Journal B*, **18**, 9 (2000).
- [29] D. C. Mattis, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 361 (1986).
- [30] M. Fabrizio, A. Parola, E. Tosatti, *Phys. Rev. B* **44**, 1033 (1991).
- [31] H. Ibach y H. Lüth, 1991, *Solid State Physics*, (Springer, Berlín, Heidelberg, New York)

- [32] O. Madelung, Introduction to Solid State Theory, Springer Series in Solid State Sciences 2, (Springer, Berlín, Heidelberg, New York) (1978).
- [33] A. S. Davidov, Teoría del Sólido, (Editorial Mir, Moscú) (1981).
- [34] S. L. Altaman, Band Theory of Solids an Introduction from the Point of View of Symmetry, (Clarendon Press, Oxford) (1991).
- [35] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics 5th edition (John Wiley and Sons, New York) (1976).
- [36] E. N. Economou, Green ts Functions in Quantum Physics, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 7 Segunda Edición, (Springer, Berlín, Heidelberg, New York) (1983).
- [37] E. Fawcett, Rev. Mod. Phys. **60**, 209 (1988).
- [38] A. P. Balanchandra, E. Ercolessi, G. Morandi y A.M. Srivastova, Int. J. Mod. Phys **B4**, 2057 (1990).
- [39] D. Adler, Solid State Physics, Vol. 21, Eds. H. Ehrenreich, F. Seitz y D. Turnbull (Academic Press, New York) (1968).
- [40] A. Alexandrov and J. Ranninger, Phys. Rev. B **24**, 1164 (1981).
- [41] S. R. White, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, E.Y. Loh, J.E. Gubernatis and R.T. Scalettar, Phys. Rev. B **40**, 506 (1989b).
- [42] J. Callaway, D. P. Chen, D. G. Kanhere y Li Qiming, Phys. Rev. B **42**, 465 (1990).
- [43] H. Q. Lin, J.E. Hirsch y D.J. Scalapino, Phys. Rev. B **37**, 7359 (1988).
- [44] C. P. Enz, *A Course on Many-Body Theory Applied to Solid-State Physics*, Lectures Notes in Physics, Vol. 11, (World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong) (1992).
- [45] F. Marsiglio, J. E. Hirsch, Physica C, **171**, 554 (1990).
- [46] I. S. Gradshteyn e I. M. Ryzhik, Table of integrals, series and products, (Academic Press, New York) (1980).

- [47] S. A. Trugman, en *Applications of Statistical and Field Theory Methods to Condensed Matter*, Eds. D. Baeriswyl et al, (Plenum Press, New York) (1990).
- [48] O. Navarro y C. Wang, *Rev. Mex. Fis.* **38**, 553 (1992a).
- [49] L. M. Falicov y F. Yndurain, *J. Phys. C* **8**, 147 (1975).
- [50] H. Q. Lin, J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B*, **52**, 16155 (1995).
- [51] M. Airoidi, A. Parola, *Phys. Rev. B*, **51**, 16327 (1995).
- [52] C. Wang, O. Navarro, R. Oviedo-Roa, *Mat. Res, Soc. Symp. Proc.* **291**, 279 (1993).
- [53] P. W. Anderson, *Science*, **235**, 1196 *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 1839 (1987).
- [54] J. E. Hirsch, F. Marsiglio, *Phys. Rev. B*, **39**, 11515 (1989).
- [55] M. E. Simon and A. A. Aligia, *Phys. Rev. B*, **48**, 7471 (1993).
- [56] J. E. Hirsch *Physica B*, **199-200**, 366 (1994).
- [57] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B*, **48**, 3327 (1993).
- [58] O. Gunnassa and N.E. Christensen, *Phys. Rev. B* **42**, 2363 (1990); AZawadowski *Phys. Rev. B* **39**, 4682 (1989); M. S. Hybestern, E. B. Stechel and D. R. Jennisson, *Phys. Rev. B* **41**, 11068 (1990).
- [59] O. Navarro, M. Mayoral, J.E. Espinosa and J.R. Suárez, *Physica B* **312-313**, 552 (2002).



ELSEVIER

Physica B (2008) 000–000

PHYSICA B

www.elsevier.com/locate/physb

Exact results for three electrons in a linear chain within the Hubbard model

O. Navarro^{a,*}, M. Mayoral^a, J.E. Espinosa^b, J.R. Suárez^b

^aIIM-UNAM, Apartado Postal 70360, 04510 Mexico D.F., Mexico

^bFCFM-BUAP, Posgrado en Optoelectrónica 72370 Puebla Pue Mexico

Abstract

In this work we analyzed the ground-state symmetry for the cases of three particles in a linear chain, using the generalized Hubbard Hamiltonian and a previously developed real-space mapping method. The method is based on mapping the correlated many-body problem onto an equivalent site- and bond-impurity one-body problem in a higher dimensional space, where the problem can be solved exactly. For the case of three particles, it is obtained a ground-state when the correlated hopping interactions are included. A clear asymmetry between electrons and holes is observed due to the bond-charge interactions. The three-particle problem is analyzed by looking at the phase diagram for the bound state. © 2002 Published by Elsevier Science B.V.

Keywords: Hubbard model; Bound states; Fermions in reduced dimensions

The electronic correlation has considerable interest due to its significant role in the formation of pairs suggested by investigations in superconductivity, especially those ones coming from high- T_c superconductors [1]. Although the main study concern to the physics of two-dimensional correlated electron system, the one-dimensional models related to high-temperature superconductivity are very popular due to the conjecture [2] that properties of the one- and two-dimensional variants of certain models have common aspects. Within the models that attempt to capture the essential physics from correlated electrons systems, the simple Hubbard model is the crudest approximation to include electronic interaction between band-electrons. A generalization of this model that include also the nearest-neighbor interactions and the bond-charge interactions is called the generalized Hubbard Hamiltonian (GHH) which can be written as

$$H = \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij}^{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j, \quad (1)$$

where $\langle ij \rangle$ denotes nearest-neighbor sites, $c_{i\sigma}^{\dagger}$ ($c_{i\sigma}$) is the creation (annihilation) operator with spin $\sigma = \downarrow$ or \uparrow at site i , and $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ where $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$. The parameters U and V are the Coulomb integrals. In Eq. (1), the generalized hopping amplitude t_{ij}^{σ} is given by

$$t_{ij}^{\sigma} = t_A + (t_{AB} - t_A)(n_{i-\sigma} + n_{j-\sigma}) + (t_A + t_B - 2t_{AB})n_{i-\sigma}n_{j-\sigma}, \quad (2)$$

written in this form to emphasize the contribution from two- and four-fermion operators. These new interactions may give rise to new dynamical effects, absent in the simple Hubbard model. For the two-particles problem the term $(t_A + t_B - 2t_{AB})n_{i-\sigma}n_{j-\sigma}$ in Eq. (2) is ineffective. In this two-particles case assuming that $t_A > t_{AB} > t_B$, the hopping parameter reduces to $t_{ij}^{\sigma} = t_A - (t_A - t_{AB})(n_{i-\sigma} + n_{j-\sigma})$.

The three parameters t_A , t_B , and t_{AB} are the hopping amplitudes from a singly occupied to an empty site, from a doubly occupied to a singly site and from a doubly occupied to an empty site, respectively. The essential difference between electrons and holes within the GHH besides a minus sign in the generalized hopping term, is that the hopping amplitude t_A for

*Corresponding author. Fax: +52-56161251

E-mail addresses: navarro@servidor.unam.mx (O. Navarro)

SECRET

MOD 21251
MECIBO HQ ALLIAN

1 electrons should be changed by t_B for the case of holes in
Eq. (2) [3].

3 In this paper, we analyzed the bound states of three
5 non-parallel ($\uparrow\downarrow\uparrow$) electrons and also the case of three
7 non-parallel ($\uparrow\downarrow\uparrow$) holes in a one-dimensional lattice
9 using the GHH. The bound-state is the lowest correlated
11 state and this energy is obtained for $K=0$ in the case of
13 electrons and for $K/\sqrt{3}=\pi$ for the hole case. The
15 analysis has been done by extending the mapping
17 method previously reported [4], in order to include the
19 bond-charge interactions. The discussion is done
21 following the paper by Espinosa et al. [3]. Let us see
23 how this modification take place in our problem of three
25 electrons. In this case, the network of the three electron
27 states belongs to a three-dimensional lattice with site-
29 and bond-impurities, where taking advantage of the
31 translational symmetry of this network of states, it can
33 be projected onto a two-dimensional triangular lattice of
35 effective states and effective hopping (β_A^\pm , β_B^\pm and β_{AB}^\pm) [3].

21 In Fig. 1, the ground-state phase diagram for both
23 electron-singlet and hole-singlet is shown. In this figure
25 we show the phase diagrams for different values of the
27 hopping parameters: once the hopping parameter is
29 chosen in each plot the other two parameters are equal
31 to -1 . From Fig. 1, it is clear that with a very small
33 increase of t_A , the bound states of electrons are favored
35 although $t_A > t_{AB}$, in contrast with the two-particles
37 case. This shows the strong effect of the additional term
39 $(t_A - t_{AB})n_i - n_j - n$. The effect of t_B is much weaker as
41 compared to t_A , since in this case we need larger values
of t_B hopping parameter. When the hopping t_{AB} from a
doubly occupied site to an empty site has higher
probability, this favors bound states, and the electron-
hole symmetry is preserved since $t_A = t_B$ for this case.

As we have mentioned above the results for holes are
simply obtained from electrons by interchanging t_A and
 t_B . Thus, from Fig. 1 we can observe clearly the electron-
and hole-asymmetry, where bounding holes are not
always easier than bounding electrons.

In conclusion, we have analyzed the bound states of
three electrons in an infinite linear chain. The analysis

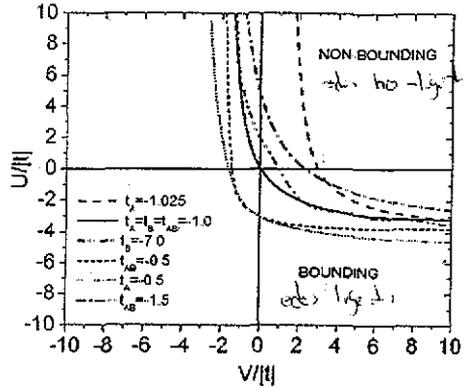


Fig. 1. Bounding phase diagrams for three electron in a linear
chain. When one of the hopping parameter is chosen the other
two are equal to -1 .

was done, using the generalized Hubbard Hamiltonian
and extending the real space mapping method to include
the bond-charge interaction term. We observed clearly
an asymmetry between electron and holes bound states,
this asymmetry being due to the bond-charge interac-
tion.

This work was partially supported by grants from
DGAPA-IN106600 at UNAM and CONACYT 25582-E
and 33630-E.

References

- [1] E Dagotto Rev. Mod Phys. 66 (1994) 763.
- [2] P.W. Anderson, Science 235 (1987) 1196.
P.W. Anderson, Phys. Rev. Lett. 64 (1990) 1839.
- [3] J.E. Espinosa, O. Navarro, M. Avignon, Eur. Phys. J. B 18
(2000) 9.
- [4] O. Navarro, C. Wang, Solid State Commun. 83 (1992) 473.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

