

00362



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

“ESTUDIO DE LA CORRELACIÓN ELECTRÓNICA EN
UNA CADENA DE FIBONACCI”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

P R E S E N T A :

JAIME RAÚL SUÁREZ LÓPEZ

DIRECTOR DE TESIS: DR. ORACIO NAVARRO CHÁVEZ

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. ILYA KAPLAN SAVITSKY

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. GERARDO JORGE VÁZQUEZ FONSECA

MÉXICO, D. F.

2005

m. 344701



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Actores a la Universidad...
UNAM a través de...
contenido de...
NOMBRE: Sorja Lopez Jaime
FECHA: 17 Mayo / 2005
FIRMA: [Signature]

Dedico este trabajo a mi familia:

Mis Padres

Mis Abuelos

Andrés y Débora

Gabino y Albina

Mis Hermanos

Mi Esposa

Andrés

Eva

Romeo

Irasema

Amapola

Martín

Jorge

Marco

Sergio

A todos, GRACIAS...

Agradecimientos:

Al Dr. Oracio Navarro Chávez por su tiempo y esfuerzo al dirigir esta Tesis.

Al Dr. Ilya Kaplan Savitsky y al Dr. Gerardo Vázquez Fonseca por formar parte de mi comité tutorial.

Al Posgrado en Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Autónoma de México por permitirme realizar mis estudios dentro de su programa de Maestría en Ciencias (Física).

Al Instituto de Investigaciones en Materiales por permitirme hacer uso de sus instalaciones durante mis estudios de maestría.

Al CONACyT por el apoyo recibido a través de la beca de excelencia con número de registro 170536.

A la UNAM por el apoyo recibido a través del proyecto PAPIIT con clave IN-102203.

Índice general

Resumen	II
Introducción	III
1. Fundamentos	1
1.1. Estructuras Cristalinas	1
1.2. Cuasicristales	2
1.3. Modelo de Amarre Fuerte	6
1.4. Método de la Función de Green	8
1.4.1. Teoría de Perturbaciones y Funciones de Green	10
1.4.2. Expansión Renormalizada en Teoría de Perturbaciones (RPE)	11
1.4.3. El Método RPE Aplicado a una Red de Bethe	13
2. Modelo de Hubbard	17
2.1. Hamiltoniano de Hubbard	18
2.2. Hamiltoniano de Hubbard Extendido	21
2.3. Modelo Generalizado de Hubbard	22
3. Sistema de Dos Partículas Correlacionadas en una Cadena de Fibonacci	23
3.1. Método del Espacio de Estados y su Mapeo	23
3.2. Método del Espacio de Estados Aplicado a la Cadena Binaria	28
3.3. Método del Espacio de Estados Aplicado a la Cadena de Fibonacci	30
3.4. Resultados y Discusión	37
4. Sistema de Tres Partículas Correlacionadas en una Cadena Lineal	41
4.1. Cadena Periódica	41
4.2. Cadena Binaria	46
4.3. Cadena de Fibonacci	49
4.4. Resultados y Discusión	52
Conclusiones	56

Resumen

La correlación electrónica es un tema de gran interés debido a que explica una variedad de fenómenos en los materiales, tales como las propiedades no convencionales de los materiales superconductores, en las que el apareamiento electrónico juega un papel fundamental. En la presente tesis se estudió la correlación de dos y tres electrones con espines antiparalelos en una cadena cuasiperiódica. En particular se hizo un estudio de la energía de apareamiento haciendo uso del modelo generalizado de Hubbard, el cual incluye potenciales de interacción en el mismo sitio y en sitios vecinos, el método del espacio de estados y su mapeo así como la técnica de la función de Green y su expansión renormalizada en teoría de perturbaciones.

En el caso de dos electrones obtuvimos analíticamente, dentro de la aproximación de amplitudes de salto aproximadamente iguales, el comportamiento de la energía de amarre en función de los potenciales de interacción así como el diagrama de fase, el cuál muestra tanto la zona de apareamiento como de no apareamiento del sistema para valores combinados de los potenciales de interacción. También se hizo una comparación con los resultados obtenidos para una cadena binaria y una periódica.

Para tres electrones obtuvimos numéricamente, y dentro de la aproximación antes mencionada, el comportamiento de la energía de amarre en función de los potenciales de interacción así como el diagrama de fase, haciendo nuevamente una comparación con los casos de la cadena periódica y de Fibonacci.

Tras analizar los resultados obtenidos llegamos a la conclusión de que es más difícil el apareamiento electrónico, tanto en el caso de dos como de tres electrones, en una cadena cuasiperiódica que en una periódica.

Introducción

En 1984 se anunció el descubrimiento de la fase de una aleación de aluminio-manganeso la cual, al ser enfriada rápidamente, presenta simetría icosaedral [1], además de presentar orden de largo alcance, lo que representaba un problema para la cristalografía, pues esto violaba uno de sus principios fundamentales. Poco después se descubrieron nuevos materiales que presentaban simetrías prohibidas, algunos con los mismos elementos pero con concentraciones diferentes y otros que contienen diferentes metales como cobalto, hierro o níquel. En un principio se especuló que estos nuevos materiales eran solo un artefacto experimental, sin embargo actualmente es generalmente aceptado que representan una nueva forma de agregación de la materia que se suma a las ya conocidas, es decir, los materiales cristalinos y los amorfos, esto debido principalmente a que son sistemas energéticamente estables.

Los cuasicristales, a diferencia de sus elementos constituyentes, son generalmente malos conductores de la electricidad, no presentan claras propiedades magnéticas, son más elásticos que los metales comunes a altas temperaturas, son extremadamente duros y resisten bien la deformación. De todas estas propiedades resulta de particular interés la variación de la conductividad eléctrica respecto a la temperatura y el orden del cuasicristal. Para cuasicristales perfectos $\sigma \propto T$ con una desviación $T^{1/2}$ para bajas temperaturas y $T^{3/2}$ para altas temperaturas [2]. Si bien no existe un consenso para explicar este comportamiento, fundamentalmente se le atribuye a dos aspectos, uno es que la densidad de los electrones de valencia en un cuasicristal es menor que en un metal típico y otro es que los estados electrónicos en un cuasicristal se encuentran en un punto intermedio entre ser locales y extendidos [3, 4].

El estudio de este tipo de sistemas se dificulta debido a que, al no ser un sistema periódico, no podemos proponer funciones de onda de Bloch como soluciones del problema, es decir, no podemos hacer uso del espacio recíproco para facilitar los cálculos. Sin embargo, podemos conocer el comportamiento cualitativo de estos materiales haciendo algunas simplificaciones, como por ejemplo, considerar sistemas de baja dimensionalidad o bien sistemas diluidos. En esta tesis se estudia la correlación de dos y tres electrones con espines antiparalelos en una red cuasiperiódica y en una dimensión: la *Cadena de Fibonacci*. En particular estamos interesados en encontrar las condiciones bajo las cuales puede existir apareamiento electrónico, para esto hacemos uso del *Modelo de Hubbard* [5]. Este modelo incluye términos de interacción electrónica en el mismo sitio y en sitios vecinos, además de considerar una amplitud de transferencia entre sitios dependiente de la ocupación de los mismos. También hacemos uso del *Método del Espacio de Estados y su Mapeo* [6], el cual consiste en dar una representación geométrica a la configuración de estados del sistema, pasando de

un problema de muchas partículas descrito por un hamiltoniano de Hubbard a otro de una sola partícula descrito por un hamiltoniano de *Amarre Fuerte*, pero en una dimensión mayor. Se obtiene la condición de apareamiento mediante la *Técnica de la Función de Green y su Expansión Renormalizada en Teoría de Perturbaciones*, para el caso de dos electrones se obtiene la solución analítica, mientras que para el de tres electrones se diagonaliza numéricamente la matriz del sistema.

Capítulo 1

Fundamentos

1.1. Estructuras Cristalinas

Si bien el arreglo atómico en un sólido nunca es perfecto, los cristales se describen en referencia a arreglos perfectos e infinitos de puntos geométricos llamados redes. En una red cada punto tiene alrededores idénticos por lo que todos son equivalentes, así que la red exhibe simetría traslacional perfecta [7], lo que da origen al orden traslacional de largo alcance, puesto que todos los puntos de la red pueden ser accesados mediante operaciones de traslación de ciertos vectores base. Es posible demostrar que sólo existen 14 formas diferentes de arreglar puntos con estas características en un espacio tridimensional, estos 14 arreglos diferentes son las *redes de Bravais*.

Una *estructura cristalina* queda completamente determinada si le asociamos una red de Bravais y además colocamos en cada punto de la red un mismo tipo de átomos o moléculas, los cuales son llamados *bases* de la estructura. Geométricamente una estructura cristalina tiene ciertas simetrías, tales como rotaciones y reflexiones, llamadas puntuales. Cada operación de simetría nos debe dar como resultado exactamente la misma estructura, sin embargo en total existen solo 230 combinaciones de traslaciones y simetrías puntuales que transforman una estructura cristalina en si misma, a estas combinaciones se les conoce como *grupos espaciales*.

Una red de Bravais puede ser considerada como un apilamiento de planos que en conjunto forman una *familia*. Existe un número infinito de diferentes familias de planos paralelos asociadas a una red y cada familia está caracterizada por un arreglo puntual, una densidad, por una distancia interplanar y queda completamente determinada si especificamos un vector unitario normal a un elemento de la familia y la distancia interplanar. Con el fin de identificar de manera precisa los planos y direcciones en una red se asocia a cada uno de estos 3 números enteros, llamados *índices de Miller*. El hecho de que sea finito el número de enteros necesarios para caracterizar un plano de

la red está relacionado con el orden de largo alcance antes mencionado.

En la práctica, el método para analizar la estructura de un cristal se basa en la difracción que sufre un haz de electrones, neutrones o rayos X al incidir en la muestra. Las bases físicas de los experimentos de difracción recaen en la interferencia producida por diferencias de fases en los haces dispersados elásticamente por átomos ubicados en planos paralelos en el cristal, es decir, podemos considerar cada átomo como una fuente de ondas esféricas cuya potencia depende del poder difractor de los átomos. Cada haz difractado está asociado con una familia de planos identificada por sus índices de Miller $\{hkl\}$. En un experimento de este tipo lo que obtenemos es una gráfica de la intensidad del haz difractado en función del ángulo de incidencia θ , pudiéndose observar claros picos, llamados *picos de Bragg*, en aquellos valores de θ que satisfacen la *ley de Bragg*,

$$2d_{hkl}\text{sen}\theta = n\lambda, \quad (1.1)$$

donde d_{hkl} es la distancia interplanar, n es el orden de difracción y λ es la longitud de onda del haz incidente.

Otra característica de las estructuras periódicas es la existencia de simetrías puntuales prohibidas. Como ya se ha mencionado, sólo existen 230 grupos espaciales, lo que significa que un grupo arbitrario de simetrías puntuales no puede ser combinado, en general, con operaciones de traslación y dejar inalterada la estructura cristalina. Sin demostrar lo anterior y sólo a manera de ejemplo consideremos el caso bidimensional. Si nos preguntamos ¿Se puede tomar cualquier figura geométrica y llenar completamente el plano sin traslapes mediante operaciones de traslación de manera que cada punto de la red tenga alrededores idénticos?, la respuesta es no. Podemos llenar el plano, por ejemplo, con triángulos equiláteros, con cuadrados o con hexágonos, cuyos ángulos internos son fracciones enteras de 2π ($2\pi/6$, $2\pi/4$ y $2\pi/3$, respectivamente), pero no con pentágonos o heptágonos [8]. Esto no da una idea de que no cualquier conjunto de simetrías puntuales puede ser combinado con operaciones de traslación y formar un grupo espacial.

1.2. Cuasicristales

En la sección anterior se ha llevado a cabo una revisión general de algunas características de las estructuras cristalinas, entre las que mencionamos la existencia de simetrías prohibidas. Una de estas es la rotación por un ángulo $2\pi/5$, sin embargo, en 1984 se anunció el descubrimiento de la fase de una aleación de aluminio-manganeso la cual, al ser enfriada rápidamente, presenta esta simetría [1]. Dicha aleación tiene el patrón de difracción de electrones mostrado en la Fig. (1.1), de donde podemos ver

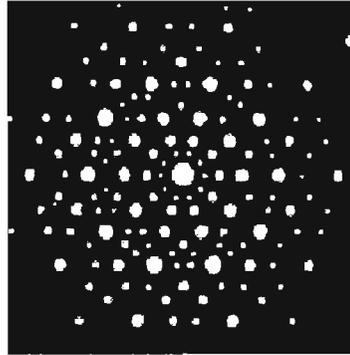


Figura 1.1: Patrón de difracción de la aleación de aluminio- manganeso descubierta en 1984, la cual presenta simetría ante rotaciones por un ángulo $2\pi/5$.

que si se gira el patrón alrededor del centro un ángulo de $2\pi/5$ se recupera el patrón original. Otra característica de esta aleación es que presenta orden de largo alcance, es decir, requiere un número finito de enteros para identificar sus planos, en este caso 6, sin embargo este excede la dimensión espacial de material, 3, lo que representaba un problema para la cristalografía, pues esto violaba uno de sus principios fundamentales, la existencia de simetrías prohibidas. Poco después se descubrieron nuevos materiales que presentaban simetrías prohibidas, algunos con los mismos elementos pero con concentraciones diferentes y otros que contienen diferentes metales como cobalto, hierro o níquel.

En un principio se especuló que estos nuevos materiales eran solo un artefacto experimental, sin embargo actualmente es generalmente aceptado que representan una nueva forma de agregación de la materia que se suma a las ya conocidas, es decir, los materiales cristalinos y los amorfos, esto debido principalmente a que son sistemas energéticamente estables.

La estructura de estos materiales no es periódica, ya que es generada por medio de dos o más celda unitarias, sin embargo sigue reglas claras de crecimiento y esto se ve reflejado en su orden de largo alcance. El nombre que se le dio a este tipo de materiales es el de *Cristales Cuasiperiódicos*, o más brevemente, *Cuasicristales*.

Los cuasicristales, a diferencia de sus elementos constituyentes, son generalmente malos conductores de la electricidad, no presentan claras propiedades magnéticas, son más elásticos que los metales comunes a altas temperaturas, son extremadamente duros y resisten bien la deformación. De todas estas propiedades resulta de particular interés la variación de la conductividad eléctrica σ respecto a la temperatura T y el orden del cuasicristal. Para cuasicristales perfectos $\sigma \propto T$ con una desviación $T^{1/2}$ para bajas temperaturas y $T^{3/2}$ para altas temperaturas [2]. Si bien no existe un consenso para

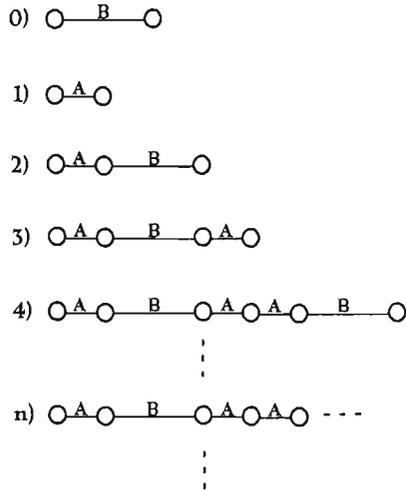


Figura 1.2: Cadena de Fibonacci con diferentes tipos de enlace y átomos idénticos. El número representa la generación de la cadena.

explicar este comportamiento, fundamentalmente se le atribuye a dos aspectos, uno es que la densidad de los electrones de valencia en un cuasicristal es menor que en un metal típico y otro es que los estados electrónicos en un cuasicristal se encuentran en un punto intermedio entre ser locales y extendidos [3]. Además, la conductividad disminuye incrementando el orden de la red cuasiperiódica. Este comportamiento está claramente relacionado con la aperiódicidad atómica de la estructura, por ejemplo, existen aleaciones de aluminio, níquel y cobre cuya estructura es periódica en una dirección y cuasiperiódica en las otras dos, mostrando que el comportamiento antes descrito sólo se presenta en el plano cuasiperiódico, mientras que el transporte eléctrico es normal en la dirección periódica [9].

El estudio teórico del comportamiento electrónico en los cuasicristales es difícil debido principalmente a que, al no ser un sistema periódico, no podemos proponer funciones de onda de Bloch como soluciones del problema, además de que no podemos hacer uso del espacio recíproco para facilitar los cálculos. Sin embargo suelen hacerse algunas simplificaciones para obtener comportamientos cualitativos de estos sistemas, por ejemplo, se consideran sistemas de baja dimensionalidad o bien sistemas con pocas partículas.

Una de las estructuras cuasiperiódicas más estudiadas es la *Cadena de Fibonacci*, de la cual existen dos variedades, una en la que se tienen dos tipos diferentes de átomos unidos por un mismo tipo de enlace y otra en la que se tiene un solo tipo de átomos unidos por dos tipos de enlaces diferentes, en el presente trabajo estudiaremos esta última. La forma de generar la cadena de Fibonacci es mediante la siguiente regla de

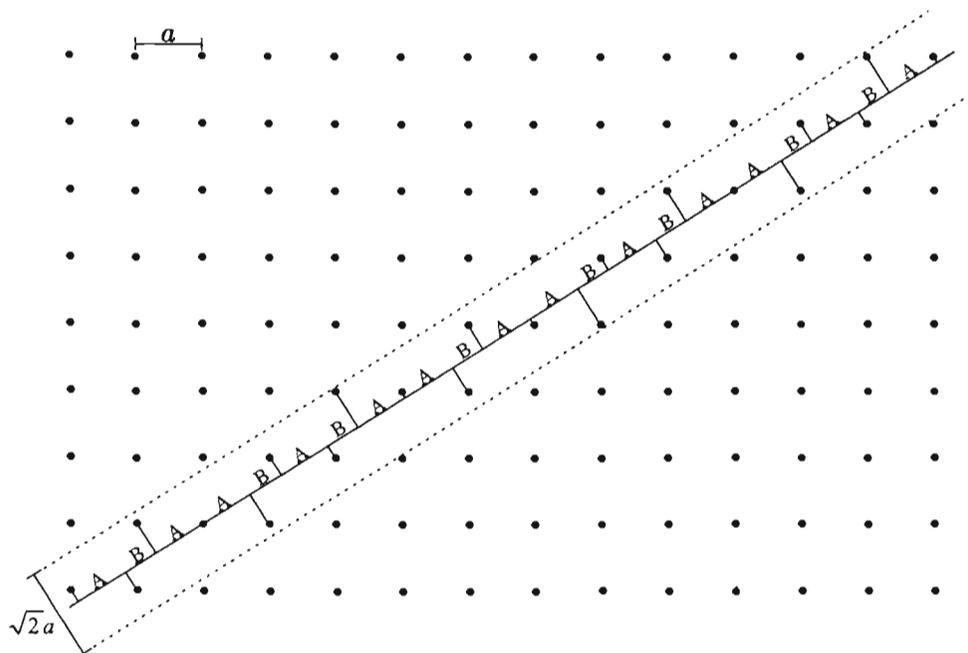


Figura 1.3: Cadena de Fibonacci de generación 7 obtenida a partir de una red bidimensional cuadrada con constante de red a .

iteración: $G_0 = B$, $G_1 = A$, $G_2 = AB$, $G_3 = ABA$, $G_4 = ABAAB$, ..., $G_i = G_{i-1}G_{i-2}$, donde A y B representan los dos tipos de enlace y G_i la i -ésima generación de la cadena. En la Fig. (1.2) se presentan las primeras generaciones de esta cadena. Resulta de particular interés para nuestros cálculos la siguiente propiedad de la cadena de Fibonacci:

Sea N el número total de enlaces, $N = N_A(N) + N_B(N)$, donde $N_A(N)$ es el número de enlaces con amplitud de salto t_A y $N_B(N)$ el número de enlaces con amplitud de salto t_B , entonces se cumple que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_A(N)}{N_B(N)} = \sigma, \quad (1.2)$$

con $\sigma = (\sqrt{5} + 1)/2$ la razón dorada.

Asimismo, es posible obtener la cadena de Fibonacci a partir de una cadena periódica bidimensional, por ejemplo, a partir de una red cuadrada, llevando a cabo la proyección que se muestra en la Fig. (1.3). El procedimiento es el siguiente: se traza una línea principal con pendiente σ^{-1} , luego se trazan dos líneas auxiliares paralelas y a la misma distancia de esta, una a cada lado, pero de manera que la separación entre ellas sea igual a la magnitud de la diagonal de la red cuadrada, finalmente se proyectan sobre la línea principal todos los puntos de la red que queden comprendidos

entre las dos rectas auxiliares, obteniendo así una cadena de Fibonacci.

1.3. Modelo de Amarre Fuerte

Hallar las funciones de onda y los eigenvalores para un electrón en un cristal periódico es un problema difícil de resolver, debido a la interacción del electrón con un gran número de iones y con el resto de los electrones que forman el cristal. Para simplificar el problema se suelen hacer algunas aproximaciones. Una de estas es el modelo de amarre fuerte (tight binding), que a continuación describimos.

Por simplicidad vamos a considerar un cristal cuya base consta de un solo átomo. En el modelo de amarre fuerte se supone que los átomos están muy separados entre sí, de manera que la interacción entre vecinos es relativamente débil y los electrones están fuertemente ligados a los átomos. En este caso las funciones de onda de los electrones entre átomos vecinos prácticamente no se traslapan, así que estas están muy relacionadas con funciones de onda de tipo atómico.

Denotemos por ψ_0 a la función de onda del estado base de un electrón en un átomo aislado, que se mueve en un potencial $V_0(\mathbf{r})$ y cuya energía es E_0 . De acuerdo con esta aproximación, la función de onda del electrón en el cristal la podemos escribir como una superposición de funciones de onda atómicas:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n a_{kn} \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (1.3)$$

donde \mathbf{R}_n es la posición del n-ésimo átomo, \mathbf{k} es el vector de onda y la suma corre sobre todos los puntos de la red. Las constantes a_{kn} quedan determinadas por el Teorema de Bloch y la condición de normalización:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1,$$

con \mathbf{T} un vector de traslación del cristal, así

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (1.5)$$

donde N es el número total de átomos en el cristal.

Representemos por $V(\mathbf{r})$ al potencial periódico de la red cristalina. El hamiltoniano para el electrón en el cristal lo podemos escribir como

$$H = H_0 + H', \quad (1.6)$$

siendo H_0 el hamiltoniano para un átomo aislado y H' la diferencia entre energías potenciales para el electrón en el átomo aislado y en el cristal:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (1.7)$$

$$H' = V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n).$$

La función de onda $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ debe satisfacer la ecuación de Schrödinger

$$H\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = (H_0 + H')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.8)$$

donde el valor esperado para la energía del electrón en el cristal está dado por

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})H\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d\mathbf{r}}{\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d\mathbf{r}}, \quad (1.9)$$

sustituyendo las expresiones para $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ y H obtenemos:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \frac{1}{N} \sum_m \left\{ \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)} \int \psi_0^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)H'\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)d\mathbf{r} \right\}. \quad (1.10)$$

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 nos da el mismo valor. El valor de la suma sobre m es entonces N veces cualquier término de la suma. Tomemos por simplicidad $m = 0$, así

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \int \psi_0^*(\mathbf{r})H'\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)d\mathbf{r}. \quad (1.11)$$

El valor de la integral depende de la superposición de dos funciones de onda de átomos separados una distancia $|\mathbf{R}_n|$. Esto quiere decir que los términos de la suma decaen muy rápidamente al aumentar esta distancia, por lo que sólo tomaremos en cuenta a los primeros vecinos. También supondremos que la función de onda ψ_0 es esféricamente simétrica, como ocurre para metales alcalinos. Entonces podemos expresar los eigenvalores de H como

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - \sum_{\langle n \rangle} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \beta_n, \quad (1.12)$$

con

$$\varepsilon_0 = E_0 - \alpha \quad (1.13)$$

$$\alpha = - \int \psi_0^*(\mathbf{r})H'\psi_0(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (1.14)$$

y

$$\beta_n = - \int \psi_0^*(\mathbf{r})H'\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)d\mathbf{r}, \quad (1.15)$$

donde $\langle n \rangle$ nos indica que la suma se extiende sólo a primeros vecinos.

1.4. Método de la Función 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, hermítico, independiente del tiempo y que además tiene un conjunto completo de funciones propias,

$$L(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n\phi_n(\mathbf{r}), \quad (1.16)$$

que satisfacen la condición de ortonormalidad,

$$\int \phi_n^*(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r}) d^3r = \delta_{nm}, \quad (1.17)$$

así como la relación de completez,

$$\sum_n \phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.18)$$

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

$$[z - L(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.19)$$

donde z es una variable compleja. Con el fin de facilitar los cálculos introducimos las siguientes definiciones en notación de Dirac:

$$\phi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \phi_n \rangle, \quad (1.20)$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')L(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | L | \mathbf{r}' \rangle, \quad (1.21)$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \langle \mathbf{r} | G | \mathbf{r}' \rangle, \quad (1.22)$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle, \quad (1.23)$$

con lo cual podemos escribir

$$L|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle, \quad (1.24)$$

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm} \quad (1.25)$$

y

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle \phi_n| + \int dn' |\phi_{n'}\rangle\langle \phi_{n'}| = 1, \quad (1.26)$$

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

queda la Ec. (1.19),

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

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

$$(z - L)G = 1. \quad (1.27)$$

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

$$G(z) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - \lambda_n} + \int dn' \frac{|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}|}{z - \lambda_{n'}}. \quad (1.28)$$

Ahora, debido a 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. (1.28) tiene un polo. Sin embargo podemos definir $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ por medio del siguiente límite:

$$G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda \pm is), \quad (1.29)$$

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:

$$G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = [G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)]^*. \quad (1.30)$$

Usando la Ec. (1.28) y la siguiente identidad:

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \quad (1.31)$$

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

$$\tilde{G}(\lambda) = -2\pi i \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) |\phi_n\rangle\langle\phi_n| - 2\pi i \int dn' \delta(\lambda - \lambda_{n'}) |\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}|. \quad (1.32)$$

En la representación del vector de posición y usando las Ecs. (1.28) y (1.31), obtenemos los elementos de matriz de la diagonal principal [10]

$$\begin{aligned}
G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \lambda) &= P \left\{ \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r})}{\lambda - \lambda_n} + \int dn' \frac{\phi_{n'}(\mathbf{r})\phi_{n'}^*(\mathbf{r})}{\lambda - \lambda_{n'}} \right\} \\
&\mp i\pi \left\{ \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}) \right. \\
&\left. + \int dn' \delta(\lambda - \lambda_{n'})\phi_{n'}(\mathbf{r})\phi_{n'}^*(\mathbf{r}) \right\}. \tag{1.33}
\end{aligned}$$

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

$$\rho(\mathbf{r}; \lambda) = \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)\phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}) + \int dn' \delta(\lambda - \lambda_{n'})\phi_{n'}(\mathbf{r})\phi_{n'}^*(\mathbf{r}), \tag{1.34}$$

usando las Ecs. (1.32) y (1.33) la podemos expresar finalmente como

$$\rho(\mathbf{r}; \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \lambda)\}. \tag{1.35}$$

1.4.1. Teoría de Perturbaciones y Funciones de Green

La teoría desarrollada en la sección anterior se puede aplicar directamente a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo simplemente realizando las sustituciones $L \rightarrow H$ y $\lambda \rightarrow E$, es decir,

$$[E - H(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}) = 0, \tag{1.36}$$

mientras que la función de Green respectiva satisfecerá la ecuación

$$[E - H(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{1.37}$$

Consideremos el caso en que el hamiltoniano H se puede escribir como la suma de un hamiltoniano H_0 , cuya función de Green es G_0 y es tal que podemos obtener sus eigenvalores y sus eigenfunciones de manera sencilla, y un hamiltoniano H_l que será considerado como una perturbación, es decir,

$$H = H_0 + H_l. \tag{1.38}$$

Denotemos por G_0 y G a los operadores de Green correspondientes a H_0 y H ,

$$G_0 = (z - H_0)^{-1}, \tag{1.39}$$

$$G = (z - H)^{-1}, \tag{1.40}$$

ahora,

$$\begin{aligned}
 G &= (z - H_0 - H_l)^{-1} \\
 &= [1 - (z - H_0)^{-1} H_l]^{-1} (z - H_0)^{-1} \\
 &= [1 - G_0 H_l]^{-1} G_0,
 \end{aligned} \tag{1.41}$$

expandiendo el operador $[1 - G_0 H_l]^{-1}$ en serie de potencias obtenemos

$$\begin{aligned}
 G &= G_0 + G_0 H_l G_0 + G_0 H_l G_0 H_l G_0 + \dots \\
 &= G_0 + G_0 [H_l + H_l G_0 H_l + \dots] G_0 \\
 &= G_0 + G_0 \{H_l [G_0 + G_0 H_l G_0 + \dots] G_0^{-1}\} G_0 \\
 &= G_0 + G_0 \{H_l G G_0^{-1}\} G_0 \\
 &= G_0 + G_0 T G_0,
 \end{aligned} \tag{1.42}$$

donde

$$\begin{aligned}
 T &= H_l G G_0^{-1} \\
 &= H_l G (z - H_0)
 \end{aligned} \tag{1.43}$$

es un operador importante en teoría de dispersión. Esta ecuación es válida siempre que $z \neq E_n$, donde E_n son los eigenvalores de H , esto le proporciona al operador T estructuras analíticas parecidas a las de G . En el caso de que $z = E_n$ se define

$$T^\pm = H_l G^\pm (E - H_0), \tag{1.44}$$

de esta manera, mediante el estudio del operador T podemos obtener tanto los eigenvalores del espectro discreto como la DOS del espectro continuo de H . De la Ec. (1.36) tenemos que

$$(E - H_0) |\Psi^\pm\rangle = H_l |\Psi^\pm\rangle \tag{1.45}$$

con solución

$$|\Psi^\pm\rangle = |\Phi\rangle + G_0^\pm H_l |\Psi^\pm\rangle, \tag{1.46}$$

donde $|\Phi\rangle$ satisface $(E - H_0) |\Phi\rangle = 0$ y que es básicamente la ecuación de Lippman-Schwinger [11].

1.4.2. Expansión Renormalizada en Teoría de Perturbaciones (RPE)

Sea H un hamiltoniano de amarre fuerte,

$$H = H_0 + H_l, \tag{1.47}$$

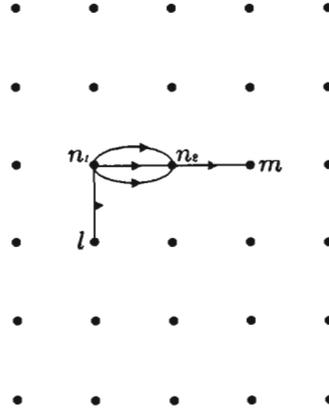


Figura 1.4: Ejemplo de una trayectoria de cinco pasos que conecta los sitios l y m de una red cuadrada.

donde

$$H_0 = \sum_l \varepsilon_l |l\rangle \langle l| \quad (1.48)$$

y

$$H_l = t \sum_{\langle l,m \rangle} |l\rangle \langle m|. \quad (1.49)$$

Considerando H_l como una perturbación podemos hacer uso de los resultados en la sección anterior para la encontrar función de Green de H , para esto, partiremos de la Ec. (1.42)

$$G = G_0 + G_0 H_l G_0 + G_0 H_l G_0 H_l G_0 + \dots,$$

la cual podemos reescribir como

$$\begin{aligned} G(l, m) &= G_0(l, m) + \sum_{n_1, n_2} G_0(l, n_1) H_l(n_1, n_2) G_0(n_2, m) \\ &+ \sum_{n_1, \dots, n_4} G_0(l, n_1) H_l(n_1, n_2) G_0(n_2, n_3) H_l(n_3, n_4) G_0(n_4, m) + \dots, \end{aligned} \quad (1.50)$$

de la Ec. (1.48) obtenemos que

$$G_0(n_1, n_2) = \delta_{n_1, n_2} G_0(n_1), \quad (1.51)$$

donde $G_0(n_1)$ es un elemento de la diagonal principal del operador G_0 correspondiente a H_0 , además, $H_l(n_1, n_2)$ es diferente de cero solo si n_1 y n_2 son primeros vecinos. Con estas consideraciones la Eq. (1.50) puede ser simplificada como

$$G(l, m) = \delta_{l, m} G_0(l) + G_0(l) t G_0(m) \delta_{l, m+1} + \sum_{n_1} G_0(l) t G_0(n_1) t G_0(m) + \dots \quad (1.52)$$

La expansión anterior puede ser más fácilmente visualizada si se escribe en términos de todas las posibles trayectorias en la red empezando de l y terminando en m con pasos conectando un sitio de la red con el sitio vecino más próximo, Fig. (1.4). Entonces hay una correspondencia uno a uno entre los términos en (1.52) y el conjunto de todas las trayectorias, donde la trayectoria más general empezando de l y terminando en m es construyendo una trayectoria cerrada auto-permitida, es decir ningún sitio es visitado en más de una ocasión. Tomando todo esto en cuenta $G(l, m)$ toma la forma:

$$G(l, m) = \sum G(l, l) tG(n_1, n_1[l]) tG(n_2, n_2[l, n_1]) t \dots tG(m, m[l, n_1, n_2, \dots]), \quad (1.53)$$

donde la suma se realiza sobre todas las trayectorias autopermiitidas empezando de l y terminando en m , $l \rightarrow n_1 \rightarrow n_2 \rightarrow \dots \rightarrow m$ y donde el símbolo $[l]$ indica que al evaluar $G(n_1, n_1[l])$ debemos excluir aquellas trayectorias que pasen por el sitio l . A partir de la ecuación anterior se pueden encontrar los elementos diagonales como

$$G(l, l) = G_o(l) + \sum G(l, l) tG(n_1, n_1[l]) t \dots G_o(l), \quad (1.54)$$

en este caso la sumatoria se extiende sobre todas las trayectorias autopermiitidas empezando y finalizando en l [10]. Rescribiendo la ecuación anterior obtenemos que

$$G(l, l) = G_o(l) + G(l, l) \Delta(l) G_o(l), \quad (1.55)$$

donde

$$\Delta(l) = \sum tG(n_1, n_1[l]) t \dots \quad (1.56)$$

así, resolviendo para $G(l, l)$ se tiene finalmente

$$G(l, l; z) = \frac{G_o(l)}{1 - G_o(l) \Delta(l; z)} = \frac{1}{z - \varepsilon_l - \Delta(l; z)}. \quad (1.57)$$

Las expansiones (1.53), (1.54), (1.56) y (1.57) para $G(l, m)$, $G(l, l)$ y $\Delta(l)$ son las llamadas expansiones renormalizadas en teoría de perturbaciones (RPE) [10].

1.4.3. El Método RPE Aplicado a una Red de Bethe

Como ejemplo de la aplicación del método RPE calculemos la función de Green para un sitio l de una red de Bethe. Las redes de Bethe son artefactos matemáticos que se emplean para estudiar las propiedades de diversos sistemas físicos. Estas redes se caracterizan por no presentar trayectorias cerradas y por preservar la coordinación local Z , o bien la conectividad $K = Z - 1$. En la Fig.(1.5) se muestra un ejemplo de una red de Bethe con coordinación $Z = 4$. Consideremos una red de Bethe con dos tipos de sitios con energías ε_1 y ε_2 respectivamente, podremos calcular la función de

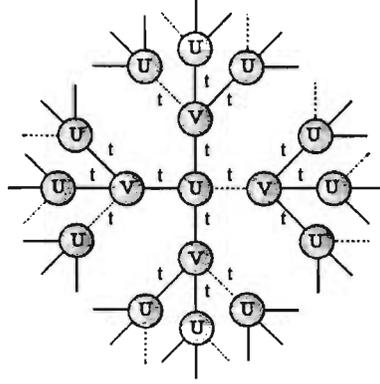


Figura 1.5: Representación de una red de Bethe con coordinación $Z = 4$ y con dos tipos de sitios cuyas energías son $\varepsilon_1 = U$ y $\varepsilon_2 = V$, respectivamente.

Green en un sitio l de la red (con energía ε_l) usando el método RPE de la siguiente manera:

$$G(l, l; E) = \frac{1}{E - \varepsilon_l - \Delta(l; E)}, \quad (1.58)$$

donde, de la Ec. (1.56), tenemos que

$$\Delta(l; E) = (K + 1)t^2 G(l + 1, l + 1[l]; E), \quad (1.59)$$

análogamente,

$$G(l + 1, l + 1[l]; E) = \frac{1}{E - \varepsilon_{l+1} - Kt^2 G(l + 2, l + 2[l + 1]; E)}, \quad (1.60)$$

y

$$G(l + 2, l + 2[l + 1]; E) = \frac{1}{E - \varepsilon_{l+2} - Kt^2 G(l + 3, l + 3[l + 2]; E)}, \quad (1.61)$$

ahora nos preguntamos lo siguiente, considerando que la red es infinita, ¿que es lo que ve el sitio $l + 3$ en la dirección libre?, la respuesta es que será exactamente lo mismo que ve el sitio $l + 1$ en la misma dirección, por lo que ambos sitios serán equivalentes y entonces tendrán la misma función de Green, es decir,

$$G(l + 3, l + 3[l + 2]; E) = G(l + 1, l + 1[l]; E), \quad (1.62)$$

así, tendremos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$G(l+1, l+1[l]; E) = \frac{1}{E - \varepsilon_{l+1} - Kt^2 G(l+2, l+2[l+1]; E)}, \quad (1.63)$$

$$G(l+2, l+2[l+1]; E) = \frac{1}{E - \varepsilon_{l+2} - Kt^2 G(l+1, l+1[l]; E)}. \quad (1.64)$$

Para facilitar la notación y resolver este sistema de ecuaciones hagamos $G_{l+1} = G(l+1, l+1[l]; E)$ y $G_{l+2} = G(l+2, l+2[l+1]; E)$. De esta manera, el sistema a resolver será:

$$G_{l+1}(E - \varepsilon_{l+1} - Kt^2 G_{l+2}) = 1, \quad (1.65)$$

$$G_{l+2}(E - \varepsilon_{l+2} - Kt^2 G_{l+1}) = 1, \quad (1.66)$$

cuya solución es

$$G_{l+1} = \frac{(E - \varepsilon_{l+1})(E - \varepsilon_{l+2})}{2Kt^2(E - \varepsilon_{l+1})} \pm \frac{\sqrt{(E - \varepsilon_{l+1})^2(E - \varepsilon_{l+2})^2 - 4t^2(E - \varepsilon_{l+1})(E - \varepsilon_{l+2})}}{2Kt^2(E - \varepsilon_{l+1})}, \quad (1.67)$$

$$G_{l+2} = \frac{(E - \varepsilon_{l+1})(E - \varepsilon_{l+2})}{2Kt^2(E - \varepsilon_{l+2})} \pm \frac{\sqrt{(E - \varepsilon_{l+1})^2(E - \varepsilon_{l+2})^2 - 4t^2(E - \varepsilon_{l+1})(E - \varepsilon_{l+2})}}{2Kt^2(E - \varepsilon_{l+2})}. \quad (1.68)$$

Sustituyendo G_{l+1} en la Ec. (1.59) obtenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} \Delta(l; E) &= (K+1)t^2 G(l+1, l+1[l]; E) \\ &= \frac{(K+1)}{2K(E - \varepsilon_{l+1})} [(E - \varepsilon_{l+1})(E - \varepsilon_{l+2}) \\ &\quad \pm \sqrt{(E - \varepsilon_{l+1})^2(E - \varepsilon_{l+2})^2 - 4t^2(E - \varepsilon_{l+1})(E - \varepsilon_{l+2})}], \end{aligned} \quad (1.69)$$

por lo que al sustituir esta expresión en la Ec. (1.58) obtenemos la función de Green para el sitio l de la red,

$$G(l, l; E) = 2K(E - \varepsilon_{l+1}) / \{2K(E - \varepsilon_l)(E - \varepsilon_{l+1}) - (K+1)[(E - \varepsilon_{l+1})(E - \varepsilon_{l+2}) \pm \sqrt{(E - \varepsilon_{l+1})^2(E - \varepsilon_{l+2})^2 - 4t^2(E - \varepsilon_{l+1})(E - \varepsilon_{l+2})}]\}. \quad (1.70)$$

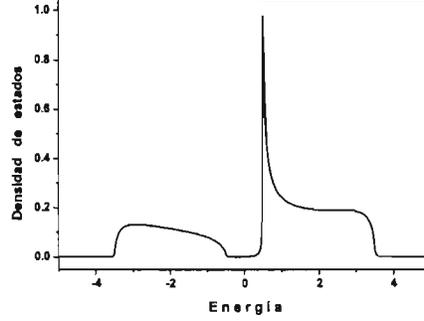


Figura 1.6: Densidad de estados para una red de Bethe donde cada punto tiene cuatro vecinos cercanos. Las auto-energías de sitio son $\varepsilon_1 = 0,5$ y $\varepsilon_2 = 0,5$.)

Ahora, sean $\varepsilon_1 = \varepsilon_{l+2} = \varepsilon_1$ y $\varepsilon_{l+1} = \varepsilon_2$, así finalmente obtenemos que

$$G(l, l; E) = \frac{2K(E - \varepsilon_2)}{\{2K(E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_2) - (K + 1)[(E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_2) \pm \sqrt{(E - \varepsilon_1)^2(E - \varepsilon_2)^2 - 4t^2(E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_2)}]\}}. \quad (1.71)$$

El espectro consistirá en dos sub-bandas cuyos bordes se determinan calculando los ceros de la raíz cuadrada que aparece en la ecuación anterior; la inferior se extenderá desde $\frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) - \sqrt{\frac{1}{4}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4Kt^2}$ hasta ε_2 , mientras que la superior lo hará desde ε_2 hasta $\frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + \sqrt{\frac{1}{4}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4Kt^2}$. La importancia de estos intervalos radica en el hecho de que es en ellos donde existirá una densidad de estados (DOS) diferente de cero, pues es ahí donde la función de Green tendrá parte imaginaria. La DOS correspondiente para los sitios con energía ε_i ($i = 1, 2$) será

$$\rho_i(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G(i, i; E)\}. \quad (1.72)$$

Para el caso periódico en el que $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_0$, la función de Green será

$$G(l, l; E) = \frac{2K}{(K - 1)(E - \varepsilon_0) + (K + 1)\sqrt{(E - \varepsilon_0)^2 - 4t^2}}. \quad (1.73)$$

En la Fig. (1.6) se muestra una gráfica de la DOS en función de la energía para una red de Bethe con $Z = 4$, la cual puede asociarse a una red cuadrada con sitios alternados.

Capítulo 2

Modelo de Hubbard

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 [12].

Una de las formas más simples y generales de estudiar la correlación electrónica es a través del modelo de Hubbard [5], puesto que dicho modelo incluye implícitamente los efectos de todo tipo de interacciones electrónicas por medio de los parámetros de su hamiltoniano. Entre la serie de fenómenos que, para su explicación, requieren tomar en cuenta la correlación entre los electrones podemos mencionar: la formación de ondas de densidad de carga [13], las ondas de densidad de espín [14] y la superconductividad de alta T_c [15], entre otros.

2.1. Hamiltoniano de Hubbard

Con el fin de introducir este modelo, consideremos el hamiltoniano para un sistema de N electrones,

$$\begin{aligned}\hat{h} &= \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r}_i), \\ \hat{v} &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \nu(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \\ H &= \hat{h} + \hat{v},\end{aligned}\tag{2.1}$$

donde \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 de una partícula. El término $\nu(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ contiene la interacción entre dos cuerpos.

Para pasar el hamiltoniano de la Ec. (2.1) al lenguaje de número de ocupación veamos algunos aspectos de este formalismo. En segunda cuantización los estados del sistema son de la siguiente forma [16],

$$\phi_{k_1, \dots, k_N} = |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle,\tag{2.2}$$

donde n_i es el número de partículas en el estado de una sola partícula $\phi_{k_i}(\mathbf{r})$. Es claro que se satisface la relación

$$\sum_i n_i = N.\tag{2.3}$$

Todos los operadores en este formalismo se pueden escribir en términos de operadores de creación y aniquilación, c_i^\dagger y c_i , cuya definición está dada por

$$c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j < i} n_j} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle,\tag{2.4}$$

$$c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{j < i} n_j} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle,\tag{2.5}$$

donde

$$(-1)^{\sum_{j < i} n_j} = (-1)^{[n_1 + n_2 + \dots + n_{i-1}]},\tag{2.6}$$

es decir, c_i^\dagger y c_i tienen la propiedad de que si actúan en tal secuencia que su efecto es el intercambio de dos partículas, la función de onda cambia de signo, como corresponde para el caso de fermiones. Además, estos operadores no son hermíticos ($c_i^\dagger = (c_i)^\dagger$), por consiguiente no son observables, sin embargo su producto sí lo es y se le conoce como operador de número,

$$\hat{n}_i = c_i^\dagger c_i,\tag{2.7}$$

y su eigenvalor es el número de partículas, o número de ocupación, en el estado $\phi_{k_i}(\mathbf{r})$. Los operadores c_i^\dagger y c_i obedecen las siguientes reglas de anticonmutación para fermiones

[17]:

$$\begin{aligned}\{c_i, c_j^\dagger\} &= \delta_{i,j}, \\ \{c_i, c_j\} &= 0, \\ \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} &= 0.\end{aligned}\tag{2.8}$$

Veamos ahora como se expresa el hamiltoniano de la Ec. (2.1) en términos de los operadores que hemos definido. El primer término es la suma de hamiltonianos de una partícula, y sus elementos de matriz están dados por

$$h_{i,j} = \langle \phi_i | \hat{h} | \phi_j \rangle,\tag{2.9}$$

por lo tanto, el hamiltoniano lo podemos escribir en segunda cuantización como

$$\hat{h} = \sum_{i,j} h_{i,j} c_i^\dagger c_j.\tag{2.10}$$

Lo anterior es fácil de verificar, ya que si dos operadores tienen los mismos elementos de matriz, entonces los dos operadores son iguales:

$$\begin{aligned}\langle 0, \dots, 1_i, \dots | \hat{h} | 0, \dots, 1_j, \dots \rangle &= \sum_{i',j'} h_{i',j'} \langle 0, \dots, 1_i, \dots | c_{i'}^\dagger c_{j'} | 0, \dots, 1_j, \dots \rangle \\ &= \sum_{i',j'} h_{i',j'} \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} \\ &= h_{i,j}.\end{aligned}\tag{2.11}$$

De manera muy similar se puede demostrar que el operador de dos cuerpos

$$\hat{v} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\tag{2.12}$$

queda en segunda cuantización de la siguiente forma:

$$\hat{v} = \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} h_{k,l,m,n} c_k^\dagger c_l^\dagger c_m c_n,\tag{2.13}$$

donde

$$h_{k,l,m,n} = \langle \phi_k \phi_l | \hat{v} | \phi_m \phi_n \rangle,\tag{2.14}$$

por lo que finalmente el hamiltoniano de la Ec. (2.1) lo podemos escribir como

$$H = \sum_{l,m} h_{l,m} c_l^\dagger c_m + \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} h_{k,l,m,n} c_k^\dagger c_l^\dagger c_m c_n.\tag{2.15}$$

Consideremos ahora nuestro sistema de N electrones dentro de una red cristalina. De acuerdo con el Principio de Exclusión de Pauli, en cada uno de los sitios de la red

puede haber a lo más dos electrones, necesariamente con espines opuestos. Haciendo explícito este hecho, y mediante una discusión análoga a la anterior obtenemos la siguiente expresión:

$$H = \sum_{l,m,\sigma} h_{l,m} c_{l,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} + \sum_{k,l,m,n,\sigma} h_{k,l,m,n} c_{k,\sigma}^\dagger c_{l,-\sigma}^\dagger c_{m,-\sigma} c_{n,\sigma}, \quad (2.16)$$

donde $c_{i,\sigma}^\dagger$ ($c_{i,\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) de un electrón con espín σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) en el sitio i de la red.

Una forma sencilla de trabajar con este hamiltoniano es haciendo las siguientes dos aproximaciones. En la primera se supone que $h_{l,m}$ decae rápidamente con la distancia, de esta manera, los únicos elementos de matriz que debemos considerar son aquellos que relacionan los sitios vecinos más cercanos,

$$h_{l,m} = \begin{cases} t_{l,m} & \text{para } (l,m) \text{ vecinos más cercanos} \\ 0 & \text{otro caso.} \end{cases} \quad (2.17)$$

En la segunda aproximación suponemos que la interacción electrón-electrón es apantallada cuando los electrones están muy retirados entre sí, de esta forma, la contribución dominante en el segundo término de la Ec. (2.16) aparece cuando los dos electrones se encuentran en el mismo sitio,

$$h_{k,l,m,n} = \begin{cases} U & \text{si } (k = l = m = n) \\ 0 & \text{otro caso.} \end{cases} \quad (2.18)$$

Teniendo en cuenta estas aproximaciones, obtenemos finalmente la versión más simple del hamiltoniano de Hubbard,

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (2.19)$$

donde $\langle \rangle$ indica que la suma se extiende únicamente a primeros vecinos, $t_{i,j}$ es la integral de transferencia entre el sitio i y j , U representa un potencial de interacción entre electrones en el mismo sitio mientras que $n_{i\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ simplemente cuenta el número de electrones con espín σ en el sitio i de la red.

El modelo de Hubbard ha sido intensamente estudiado haciendo uso de la aproximación del campo medio [18], el método de los bosones esclavos [19, 20], la técnica de Monte Carlo [21] y el grupo de Renormalización [22], entre otros métodos, y se ha resuelto en forma exacta solamente para el caso de una dimensión con la banda semillena [23], mostrando 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 a uno 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 que caracteriza la acción de todos los demás electrones y en el cual cada electrón se mueve en forma independiente. 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 [24]. La técnica de Monte Carlo es un método estadístico que está limitado a cúmulos pequeños de átomos [25]. 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 la solución carece de precisión. Finalmente, la diagonalización exacta sigue siendo el método más deseado, sin embargo 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 [26, 27].

2.2. Hamiltoniano de Hubbard Extendido

El descubrimiento de los materiales cerámicos superconductores de alta temperatura de transición ha conducido a reconsiderar las propiedades físicas del modelo de Hubbard, principalmente porque los superconductores de alta temperatura crítica pertenecen a la familia de óxidos de 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 [28]. 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 en algunos óxidos metálicos, tales como Ti_4O_7 y $LiTi_2O_4$, podría tomarse en cuenta agregando al modelo de Hubbard un acoplamiento entre la red y los electrones [29]. 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:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \quad (2.20)$$

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 . Al hamiltoniano dado por la Ec. (2.20) se le conoce como hamiltoniano de Hubbard Extendido.

2.3. Modelo Generalizado de Hubbard

Además de las interacciones mencionadas anteriormente, resulta natural esperar que la amplitud de salto $t_{i,j}$ dependa de la ocupación de los sitios i y j , esto lo podemos hacer explícito en el hamiltoniano agregando un término de transferencia que sea diferente de cero cuando alguno de los sitios, o ambos, esté ocupado por un electrón necesariamente con espín opuesto al que se está moviendo. El hamiltoniano generalizado de Hubbard considera esta dependencia y se escribe como [30]:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + \Delta t_0 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma} + n_{j,-\sigma}), \quad (2.21)$$

donde Δt_0 es la energía extra que nos cuesta llevar un electrón del sitio l al sitio m cuando la ocupación de alguno de estos es diferente de cero. Este hamiltoniano ha sido resuelto por distintos métodos, por ejemplo se ha aplicado el *Método del espacio de Estados y su Mapeo* a sistemas diluidos y de baja dimensionalidad [31, 32, 33]. Este método consiste en dar una representación geométrica de la configuración de estados del sistema, donde se trabaja con un hamiltoniano de amarre fuerte, la cual se proyecta en una dirección en la que exista simetría traslacional de las impurezas, logrando así reducir la dimensionalidad del sistema.

Capítulo 3

Sistema de Dos Partículas Correlacionadas en una Cadena de Fibonacci

La correlación electrónica en los sólidos es un problema de gran interés y de suma complejidad. 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 en los materiales, tales como las propiedades no convencionales de los materiales superconductores. De hecho, la existencia de pares de Cooper, en los cuales dos electrones con vectores de onda y espines opuestos forman un estado apareado, es la base de la teoría BCS de la superconductividad.

Si bien solo consideramos un sistema diluido con una dimensionalidad baja, el objetivo es obtener el comportamiento cualitativo del apareamiento electrónico en una cadena cuasiperiódica y comparar los resultados con los correspondientes para una cadena periódica y una binaria. En particular vamos a analizar la interacción de un sistema de dos electrones antiparalelos ($\uparrow\downarrow$) en una cadena lineal infinita estudiando la energía de amarre (Δ), la cual se calcula a partir de la diferencia entre el estado ligado de más baja energía y el estado no ligado localizado en el borde de la banda, y haciendo uso del modelo generalizado de Hubbard. Este estudio se lleva a cabo usando el método del espacio de estados y su mapeo así como de la técnica de la función de Green y su expansión renormalizada en teoría de perturbaciones (RPE) [34].

3.1. Método del Espacio de Estados y su Mapeo

Con el fin de dar una descripción del método del espacio de estados, consideremos el caso particular de un sistema de dos electrones antiparalelos en una cadena periódica



Figura 3.1: Dos electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal periódica con 4 sitios.

finita, en este caso con cuatro sitios, Fig. (3.1). Los posibles estados de este sistema son los siguientes,

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm 000\rangle, & |9\rangle &= |-0+0\rangle, \\
 |2\rangle &= |+ - 00\rangle, & |10\rangle &= |0 - +0\rangle, \\
 |3\rangle &= |+0 - 0\rangle, & |11\rangle &= |00 \pm 0\rangle, \\
 |4\rangle &= |+00 - \rangle, & |12\rangle &= |00 + - \rangle, \\
 |5\rangle &= |- + 00\rangle, & |13\rangle &= |-00 + \rangle, \\
 |6\rangle &= |0 \pm 00\rangle, & |14\rangle &= |0 - 0 + \rangle, \\
 |7\rangle &= |0 + - 0\rangle, & |15\rangle &= |00 - + \rangle, \\
 |8\rangle &= |0 + 0 - \rangle, & |16\rangle &= |000 \pm \rangle,
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

donde el signo + (-) representa un sitio con un electrón con espín hacia arriba (hacia abajo), es decir, la componente z del espín del electrón es $1/2$ ($-1/2$), el signo \pm representa un sitio con dos electrones, uno con espín hacia arriba y otro con espín hacia abajo, mientras que 0 representa un sitio vacío.

El modelo generalizado de Hubbard, Eq. (2.21), asocia a cada uno de los estados del sistema una autoenergía que depende de la configuración electrónica. La contribución de dos electrones en el mismo sitio es U , mientras que la de dos electrones en sitios vecinos es V . A continuación se dan algunos ejemplos de estados posibles del sistema y de sus autoenergías asociadas,

$$\begin{aligned}
 |+0 - 0\rangle &\longrightarrow 0, \\
 |+ - 00\rangle &\longrightarrow V, \\
 |\pm 000\rangle &\longrightarrow U.
 \end{aligned}$$

El modelo generalizado de Hubbard también establece una conexión entre estados del sistema cuando la forma de pasar de uno a otro sea mediante el salto de un electrón a un sitio vecino, por ejemplo,

$$\begin{aligned}
 |0 + 0 - \rangle &\longleftrightarrow |0 + - 0\rangle \quad \text{con amplitud de salto } t, \\
 |0 + - 0\rangle &\longleftrightarrow |0 \pm 00\rangle \quad \text{con amplitud de salto } t + \Delta t_0.
 \end{aligned}$$

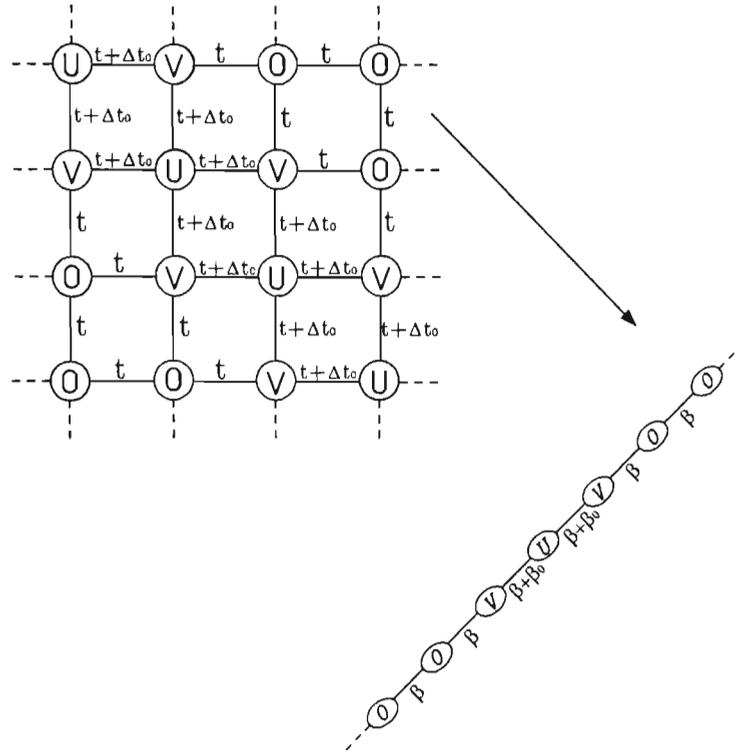


Figura 3.2: Espacio de estados para el sistema de dos electrones en una cadena lineal periódica con 4 sitios. También se muestra su proyección a una cadena lineal con amplitudes de salto efectivas.

El método del espacio de estados y su mapeo consiste en dar una representación geométrica de la configuración de estados, Ec. (3.1), mapeando el problema de muchos cuerpos a uno de un solo cuerpo, pero en una dimensión mayor. Esto lo podemos hacer colocando cada uno de los estados del sistema en una red bidimensional, donde los estados están conectados entre sí. En la Fig. (3.2) se muestra la red de estados para el sistema de dos electrones en una cadena lineal con 4 sitios. En esta red la única energía potencial es la debida a la configuración interna de cada estado, mientras que las únicas amplitudes de transición posibles entre estados son t y $t + \Delta t_0$, de manera que la dinámica del sistema queda descrita por el siguiente hamiltoniano:

$$H_{AF} = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} b_i^\dagger b_j + \sum_i \varepsilon_i b_i^\dagger b_i, \quad (3.2)$$

donde $t_{i,j}$ es la amplitud de salto entra el estado $|i\rangle$ y el $|j\rangle$, el operador b_i^\dagger crea el estado de muchos cuerpos $|i\rangle$ mientras que b_i lo destruye y finalmente ε_i es la autoenergía del estado $|i\rangle$ y toma los valores U, V y 0 . El hamiltoniano de la Ec. (3.2) tiene la forma

de un hamiltoniano de amarre fuerte para una sola partícula, de manera que hemos pasado de un sistema de dos partículas en una cadena lineal con cuatro sitios descrito por el modelo generalizado de Hubbard, a un sistema de una sola partícula en una red bidimensional descrito por un hamiltoniano de amarre fuerte.

En general el método del espacio de estados mapea el problema original de muchos cuerpos con interacciones entre partículas en el mismo sitio, en sitios vecinos y en una red d -dimensional, a un problema de una sola partícula pero en una red nd -dimensional con impurezas, siendo n el número de electrones en el sistema original [6].

Una forma de trabajar con la red de estados es proyectándola en alguna dirección en que exista simetría traslacional de las impurezas, obteniendo una red de menor dimensión pero con estados y parámetros de salto efectivos. En la Fig. (3.2) podemos ver la dirección que cuenta con estas características así como la cadena lineal con autoenergías y amplitudes de salto efectivas. Para calcular las autoenergías consideremos el siguiente estado efectivo (representado por elipses) a lo largo de una diagonal con energía ε_i ,

$$|\Psi_{\varepsilon_i}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{K}\cdot l} |l\rangle, \quad (3.3)$$

por lo que para encontrar las autoenergías efectivas calculamos el elemento de matriz diagonal del hamiltoniano de la Ec. (3.2) obteniendo lo siguiente:

$$\begin{aligned} E_{\varepsilon_i} &\equiv \langle \Psi_{\varepsilon_i} | H_{AF} | \Psi_{\varepsilon_i} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}\cdot(l-m)} \varepsilon_l \delta_{l,m} + \frac{1}{N} \sum_{\langle i,l \rangle, m} t_{i,l} e^{i\mathbf{K}\cdot(l-m)} \delta_{i,m} \\ &= \varepsilon_i. \end{aligned} \quad (3.4)$$

En la ecuación anterior podemos observar que el término que contiene las amplitudes de salto desaparece, esto debido a que las sumas corren sobre todos los N estados de una misma línea por lo que ninguno será vecino del otro. De manera similar encontramos las amplitudes de salto efectivas calculando ahora el elemento de matriz del hamiltoniano de amarre fuerte entre estados efectivos de líneas vecinas:

$$\begin{aligned} \beta_{i,j} &\equiv \langle \Psi_{\varepsilon_i} | H_{AF} | \Psi_{\varepsilon_j} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}\cdot(l-m)} \varepsilon_l \delta_{l,m} + \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} t_{l,m} e^{i\mathbf{K}\cdot(l-m)}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde ahora el primer término es cero debido a que las sumas se realizan sobre líneas vecinas, por lo que l y m nunca coinciden. Para el estado base del sistema $\mathbf{K} = 0$, por lo que sumando sobre las amplitudes de salto obtenemos la siguiente expresión para la amplitud de salto efectiva entre la diagonal principal y una de las líneas adyacentes:

$$\begin{aligned}
 \beta_{i,j} &\equiv \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} t_{l,m} \\
 &= \frac{1}{N} [(t + \Delta t_0) + (t + \Delta t_0) + (t + \Delta t_0) + (t + \Delta t_0) \\
 &\quad + (t + \Delta t_0) + (t + \Delta t_0)] \\
 &= 2t + 2\Delta t_0 \\
 &= \beta + \beta_0,
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

donde $\beta = 2t$ y $\beta_0 = 2\Delta t_0$.

Hasta ahora hemos considerado una cadena con solo cuatro sitios, sin embargo, la consecuencia al considerar cadenas mas grandes es darle al sistema un número mayor de estados posibles por lo que el espacio de estados aumentará su tamaño y en consecuencia también lo hará la cadena de estados efectivos, sin embargo, los estados que se agregan se sumarán a los ya existentes respetando el orden y las características de crecimiento de la red aquí estudiada.

Utilizando el método RPE, Eq. (1.56,1.57), se puede encontrar la función de Green en el sitio (l) ocupado con la energía U en el estado base de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 G(l, l; E) &= \frac{1}{E - U - 2(\beta + \beta_0)^2 G(l+1, l+1 [l]; E)} \\
 &= \frac{1}{E - U - \frac{2(\beta + \beta_0)^2}{E - V - \frac{1}{2}(E \pm \sqrt{E^2 - 4\beta^2})}},
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

donde

$$\begin{aligned}
 G(l+1, l+1 [l]; E) &= \frac{1}{E - V - \beta^2 G(l+2, l+2 [l+1]; E)} \\
 &= \frac{1}{E - V - \frac{1}{2}(E \pm \sqrt{E^2 - 4\beta^2})},
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

$$\begin{aligned}
 G(l+2, l+2 [l+1]; E) &= \frac{1}{E - \beta^2 G(l+3, l+3 [l+2]; E)} \\
 &= \frac{E \pm \sqrt{E^2 - 4\beta^2}}{2\beta^2}
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

y

$$G(l+3, l+3 [l+2]; E) = G(l+2, l+2 [l+1]; E). \tag{3.10}$$

A partir de los polos de la Ec. (3.7) y utilizando la condición $E^2 > 4\beta^2$ se puede obtener una ecuación para las energías de los estados ligados como

$$x - u - \frac{(1 + k_0)^2}{x - w \mp \sqrt{x^2 - 1}} = 0, \text{ para } x^2 > 1, \tag{3.11}$$

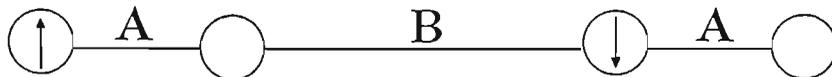


Figura 3.3: Dos electrones con espines antiparalelos en una cadena binaria.

donde se realizaron algunos cambios de variable como $x = \frac{E}{B}$, $u = \frac{U}{B}$, $w = \frac{2V}{B}$, $B = 2\beta$ y $k_o = \frac{\beta_0}{\beta}$. Dentro de la condición $t < 0$ se puede definir la energía de amarre como $\Delta = -1 - x$ para obtener

$$1 + \Delta + u - \frac{(1 + k_o)^2}{1 + \Delta + w \pm \sqrt{(1 + \Delta)^2 - 1}} = 0; \quad \Delta > 0. \quad (3.12)$$

Tomando como referencia $\Delta = 0$ se puede encontrar la siguiente condición de apareamiento:

$$\sqrt{(1 + u)(1 + w)} - 1 < k_o. \quad (3.13)$$

Esta condición de apareamiento coincide con la obtenida para una temperatura crítica distinta de cero en la teoría BCS para un modelo de estados de densidad constante en el límite de baja densidad [30, 35].

3.2. Método del Espacio de Estados Aplicado a la Cadena Binaria

En esta sección calcularemos la condición de apareamiento para dos electrones en una cadena binaria, la cual tiene dos tipos de amplitudes de salto, t_A y t_B , alternadas entre sí. Para esto usaremos el modelo generalizado de Hubbard, el método del espacio de estados así como RPE. Sólo con el fin de visualizar el problema consideremos una cadena binaria con cuatro sitios, Fig. (3.3), la cual tendrá una configuración de estados electrónicos igual a la Ec. (3.1), la diferencia con el caso periódico la encontraremos en el espacio de estados, Fig. (3.4), donde podemos observar los dos tipos de amplitudes de salto.

Es importante recalcar que la dinámica del espacio de estados ya no es gobernada por el hamiltoniano generalizado de Hubbard, sino por un hamiltoniano de amarre fuerte, por lo que hemos pasado de un sistema de dos electrones en una dimensión a otro de una partícula pero en dos dimensiones. Para resolver el inconveniente del incremento en la dimensionalidad del sistema proyectamos la red en una dirección en la cuál exista simetría traslacional en las impurezas de sitio. Estrictamente hablando tal dirección no existe para nuestro sistema, esto debido a que tenemos dos amplitudes

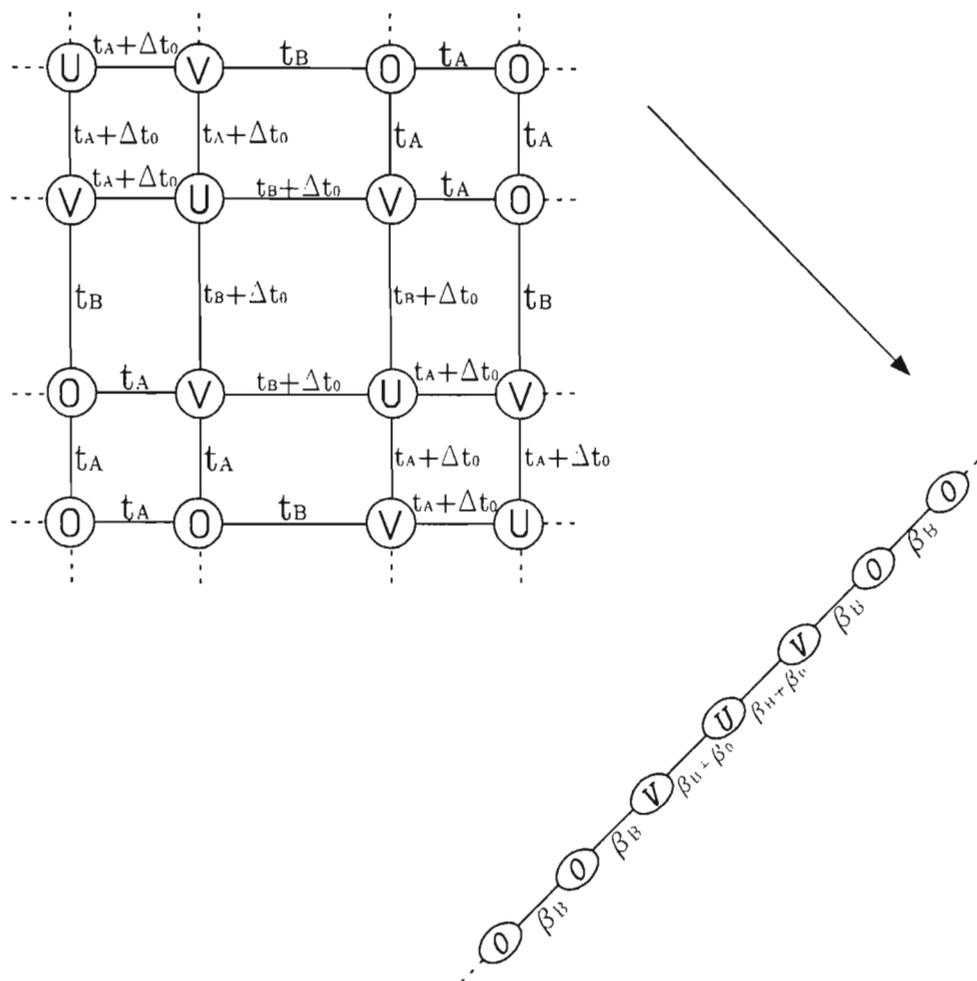


Figura 3.4: Red de estados para el sistema de dos electrones con espines antiparalelos en una cadena binaria de cuatro sitios. En esta se muestran tanto las autoenergías como las amplitudes de salto entre estados. La flecha indica la dirección en que existe, para $t_A \approx t_B$, simetría traslacional en las impurezas de sitio, por lo que al proyectar la red de estados en esta dirección obtenemos la cadena lineal que se muestra, la cual contiene impurezas tanto de salto como de sitio.

de salto distintas, sin embargo, bajo la condición $t_A \approx t_B$ tenemos, aproximadamente, una dirección que cuenta con simetría traslacional, la cuál se indica con una flecha.

El problema ahora es encontrar las amplitudes de salto efectivas, para lo cual consideremos el siguiente calculo:

$$\begin{aligned}
 \beta_{i,j} &\equiv \langle \Psi_{\varepsilon_i} | H_{AF} | \Psi_{\varepsilon_j} \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K} \cdot (1-m)} \varepsilon_l \delta_{l,m} + \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} t_{l,m} e^{i\mathbf{K} \cdot (1-m)} \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} t_{l,m} \\
 &= \frac{1}{N} [(t_A + \Delta t_0) + (t_A + \Delta t_0) + (t_B + \Delta t_0) + (t_B + \Delta t_0) \\
 &\quad + (t_A + \Delta t_0) + (t_A + \Delta t_0) + \dots] \\
 &= t_A + t_B + 2\Delta t_0 \\
 &= \beta_B + \beta_0,
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

donde $\beta_B = t_A + t_B$ y $\beta_0 = 2\Delta t_0$.

Lo que sigue es calcular la condición de apareamiento para la red de estados y amplitudes de salto efectivas, para lo cual usamos el método RPE. Siguiendo un procedimiento completamente análogo al que llevamos a cabo para el caso periódico obtenemos la siguiente condición:

$$\sqrt{(1+u)(1+w)} - 1 < k_o. \tag{3.15}$$

donde $u = \frac{U}{B}$, $w = \frac{2V}{B}$, $B = 2\beta_B$ y $k_o = \frac{\beta_0}{\beta_B}$. Es importante mencionar que este resultado es válido solo bajo la condición $t_A \approx t_B$ y que, además, para $t_A = t_B$ se logra reproducir el resultado para la cadena periódica, Eq. (3.13).

3.3. Método del Espacio de Estados Aplicado a la Cadena de Fibonacci

Ahora nos ocuparemos del problema de dos electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal cuasiperiódica infinita. Para esto, aplicaremos el procedimiento antes desarrollado adaptándolo a este nuevo problema. Nuevamente, con el fin de visualizar el problema, nos restringiremos a una cadena finita de generación 4, la cual cuenta con seis sitios, Fig. (3.5). Los posibles estados de este sistema son los siguientes,



Figura 3.5: Dos electrones con espines antiparalelos en una cadena de Fibonacci con seis sitios.

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm 00000\rangle, & |13\rangle &= |-0 + 000\rangle, & |25\rangle &= |-000 + 0\rangle, \\
 |2\rangle &= |+ - 0000\rangle, & |14\rangle &= |0 - +000\rangle, & |26\rangle &= |0 - 00 + 0\rangle, \\
 |3\rangle &= |+0 - 000\rangle, & |15\rangle &= |00 \pm 000\rangle, & |27\rangle &= |00 - 0 + 0\rangle, \\
 |4\rangle &= |+00 - 00\rangle, & |16\rangle &= |00 + -00\rangle, & |28\rangle &= |000 - +0\rangle, \\
 |5\rangle &= |+000 - 0\rangle, & |17\rangle &= |00 + 0 - 0\rangle, & |29\rangle &= |0000 \pm 0\rangle, \\
 |6\rangle &= |+0000 -\rangle, & |18\rangle &= |00 + 00 -\rangle, & |30\rangle &= |0000 + -\rangle, \\
 |7\rangle &= |- + 0000\rangle, & |19\rangle &= |-00 + 00\rangle, & |31\rangle &= |-0000 +\rangle, \\
 |8\rangle &= |0 \pm 0000\rangle, & |20\rangle &= |0 - 0 + 00\rangle, & |32\rangle &= |0 - 000 +\rangle, \\
 |9\rangle &= |0 + -000\rangle, & |21\rangle &= |00 - +00\rangle, & |33\rangle &= |00 - 00 +\rangle, \\
 |10\rangle &= |0 + 0 - 00\rangle, & |22\rangle &= |000 \pm 00\rangle, & |34\rangle &= |000 - 0 +\rangle, \\
 |11\rangle &= |0 + 00 - 0\rangle, & |23\rangle &= |000 + -0\rangle, & |35\rangle &= |0000 - +\rangle, \\
 |12\rangle &= |0 + 000 -\rangle, & |24\rangle &= |000 + 0 -\rangle, & |36\rangle &= |00000 \pm\rangle,
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

El modelo generalizado de Hubbard asocia una autoenergía a cada estado dependiendo de su configuración electrónica, por ejemplo,

$$\begin{aligned}
 |00 + 0 - 0\rangle &\longrightarrow 0, \\
 |00 + -00\rangle &\longrightarrow V, \\
 |00 \pm 000\rangle &\longrightarrow U,
 \end{aligned}$$

y también establece una conexión entre estados del sistema cuando la forma de pasar de uno a otro sea mediante el salto de un electrón a un sitio vecino, por ejemplo,

$$\begin{aligned}
 |00 + 0 - 0\rangle &\longleftrightarrow |00 + -00\rangle \quad \text{con amplitud de salto } t_A, \\
 |00 + -00\rangle &\longleftrightarrow |00 \pm 000\rangle \quad \text{con amplitud de salto } t_A + \Delta t_0, \\
 |+0 - 000\rangle &\longleftrightarrow |+ - 0000\rangle \quad \text{con amplitud de salto } t_B, \\
 |0 + -000\rangle &\longleftrightarrow |0 \pm 0000\rangle \quad \text{con amplitud de salto } t_B + \Delta t_0.
 \end{aligned}$$

Como ya hemos mencionado, el método del espacio de estados y su mapeo consiste en dar una representación geométrica de la configuración de estados, Ec. (3.16), pasando de un problema de muchos cuerpos a uno de una sola partícula. En la Fig.

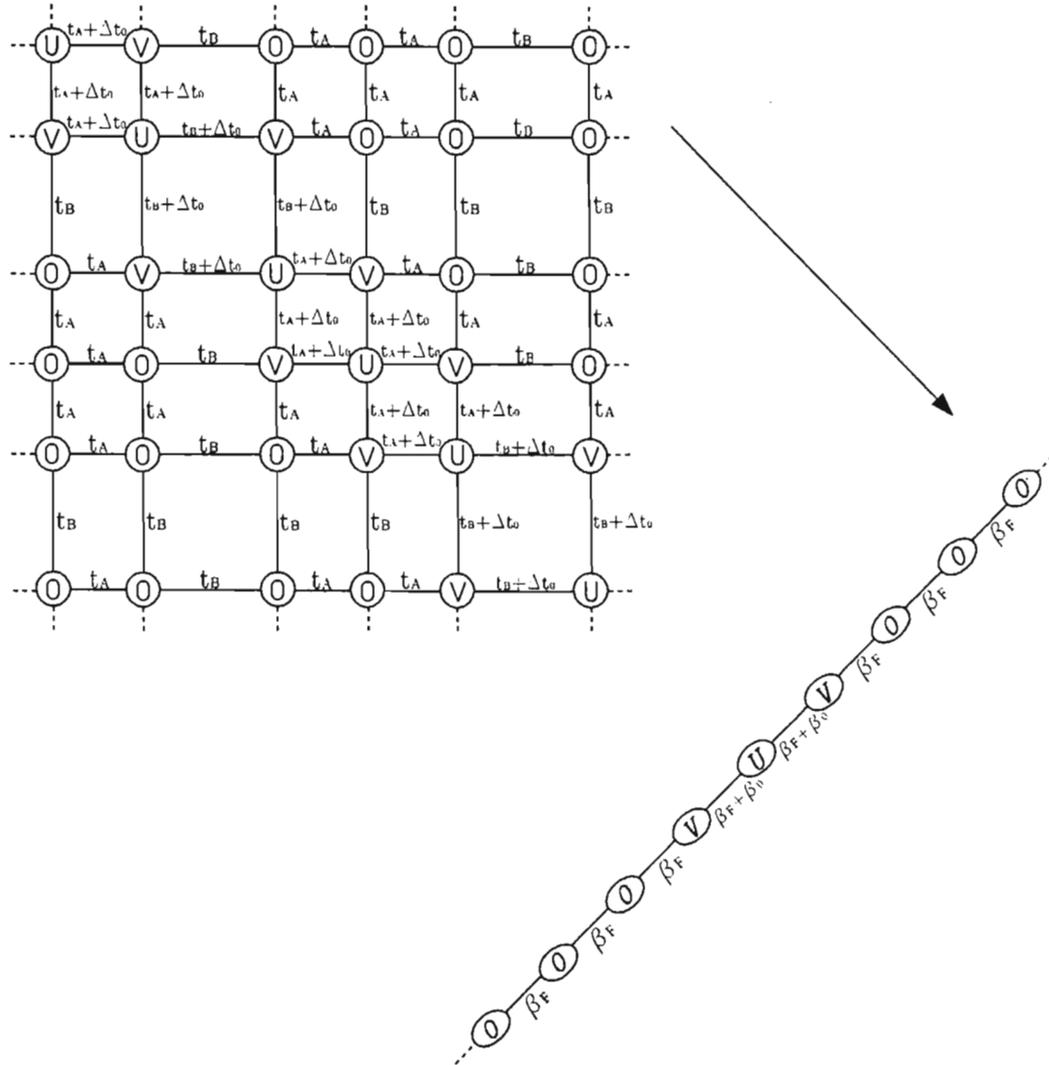


Figura 3.6: Red de estados para el sistema de dos electrones con espines antiparalelos en una cadena de Fibonacci de seis sitios. En esta se muestran tanto las autoenergías como las amplitudes de salto entre estados. La flecha indica la dirección en que existe, para $t_A \approx t_B$, simetría traslacional en las impurezas de sitio, por lo que al proyectar la red de estados en esta dirección obtenemos la cadena lineal que se muestra, la cual contiene impurezas tanto de salto como de sitio.

(3.6) se muestra la red de estados para el sistema de dos electrones en una cadena de Fibonacci con seis sitios. En esta red la única energía potencial es la debida a la configuración interna de cada estado, mientras que las únicas amplitudes de transición posibles entre estados son t_A , $t_A + \Delta t_0$, t_B y $t_B + \Delta t_0$, de manera que la dinámica del sistema queda descrita por el siguiente hamiltoniano:

$$H_{AF} = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} b_i^\dagger b_j + \sum_i \varepsilon_i b_i^\dagger b_i, \quad (3.17)$$

donde $t_{i,j}$ es la amplitud de salto entra el estado $|i\rangle$ y el $|j\rangle$, el operador b_i^\dagger crea el estado de muchos cuerpos $|i\rangle$ mientras que b_i lo destruye y finalmente ε_i es la autoenergía del estado $|i\rangle$ y toma los valores U , V y 0 . El hamiltoniano de la Ec. (3.17) tiene la forma de un hamiltoniano de amarre fuerte para una sola partícula, de manera que hemos pasado de un sistema de dos partículas en una cadena lineal con seis sitios descrito por el modelo generalizado de Hubbard, a un sistema de una sola partícula en una red bidimensional descrito por un hamiltoniano de amarre fuerte.

Ahora proyectaremos la red de estados a lo largo de una dirección que presenta simetría traslacional en las impurezas de sitio. Estrictamente hablando tal dirección no existe para nuestro sistema, esto debido a que tenemos dos amplitudes de salto distintas, sin embargo, bajo la condición $t_A \approx t_B$ tenemos, aproximadamente, una dirección que cuenta con simetría traslacional. En la Fig. (3.6) podemos ver la dirección que cuenta con estas características así como la cadena lineal con autoenergías y amplitudes de salto efectivas. Para calcular las autoenergías consideremos el siguiente estado efectivo (representado por elipses) a lo largo de una diagonal con energía ε_i ,

$$|\Psi_{\varepsilon_i}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} |l\rangle, \quad (3.18)$$

por lo que para encontrar las autoenergías efectivas calculamos el elemento de matriz diagonal del hamiltoniano de la Ec. (3.17) obteniendo lo siguiente:

$$\begin{aligned} E_{\varepsilon_i} &\equiv \langle \Psi_{\varepsilon_i} | H_{AF} | \Psi_{\varepsilon_i} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{l}-\mathbf{m})} \varepsilon_l \delta_{l,m} + \frac{1}{N} \sum_{\langle i,l \rangle, m} t_{i,l} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{l}-\mathbf{m})} \delta_{i,m} \\ &= \varepsilon_i. \end{aligned} \quad (3.19)$$

De manera similar encontramos las amplitudes de salto efectivas calculando ahora el elemento de matriz del hamiltoniano de amarre fuerte entre estados efectivos de líneas

vecinas:

$$\begin{aligned}\beta_{i,j} &\equiv \langle \Psi_{\varepsilon_i} | H_{AF} | \Psi_{\varepsilon_j} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{l,m} e^{i\mathbf{K} \cdot (l-m)} \varepsilon_l \delta_{l,m} + \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} t_{l,m} e^{i\mathbf{K} \cdot (l-m)},\end{aligned}\quad (3.20)$$

Ahora nos restringiremos al estado base del sistema, por lo que haremos $\mathbf{K} = \mathbf{0}$, así, sumando sobre las amplitudes de salto obtenemos la siguiente expresión para la amplitud de salto efectiva entre la diagonal principal y una de las líneas adyacentes:

$$\begin{aligned}\beta_{i,j} &\equiv \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} t_{l,m} \\ &= \frac{1}{N} [(t_A + \Delta t_0) + (t_A + \Delta t_0) + (t_B + \Delta t_0) + (t_B + \Delta t_0) + (t_A + \Delta t_0) + (t_A + \Delta t_0) \\ &\quad + (t_A + \Delta t_0) + (t_A + \Delta t_0) + (t_B + \Delta t_0) + (t_B + \Delta t_0)] \\ &= \frac{2}{N} [t_A + t_B + t_A + t_A + t_B] + \frac{2}{N} [N_A \Delta t_0 + N_B \Delta t_0] \\ &= \frac{2}{N} [N_A t_A + N_B t_B] + 2\Delta t_0,\end{aligned}\quad (3.21)$$

donde $2N_A$ es el número de amplitudes de salto t_A , $2N_B$ es el número de amplitudes de salto t_B y $N = N_A + N_B$. Es importante notar que el orden en que aparecen los dos tipos de amplitudes de salto corresponde a una secuencia de Fibonacci ya descrita anteriormente.

Hasta ahora hemos considerado una cadena con solo seis sitios, sin embargo, la consecuencia al considerar cadenas mas grandes es darle al sistema un número mayor de estados posibles por lo que el espacio de estados aumentará su tamaño y en consecuencia también lo hará la cadena de estados efectivos, sin embargo los estados que se agregan se sumarán a los ya existentes respetando el orden y las características de crecimiento que en el caso de seis sitios.

Retomemos el caso de una cadena de Fibonacci infinita, la cual sabemos que tiene la siguiente propiedad:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_A(N)}{N_B(N)} = \sigma, \quad (3.22)$$

supongamos además que $t_A = f t_B$, con f una constante, así obtenemos la siguiente expresión para la amplitud de salto efectiva:

$$\beta_{i,j} = 2t_B \left(\frac{\sigma f + 1}{\sigma + 1} \right) + 2\Delta t_0. \quad (3.23)$$

Definiendo

$$\beta_F = 2t_B \left(\frac{\sigma f + 1}{\sigma + 1} \right) \quad (3.24)$$

y

$$\beta_0 = 2\Delta t_0 \quad (3.25)$$

obtenemos finalmente que

$$\beta_{i,j} = \beta_F + \beta_0. \quad (3.26)$$

Para líneas vecinas no adyacentes a la diagonal principal obtenemos el siguiente resultado:

$$\beta_{i,j} = 2t_B \left(\frac{\sigma f + 1}{\sigma + 1} \right) \quad (3.27)$$

$$= \beta_F. \quad (3.28)$$

De las ecuaciones anteriores podemos ver que si $f = 1$ obtenemos los resultados correctos para el caso periódico [36]. Cabe señalar que la proyección realizada es exacta sólo para el caso periódico, $f = 1$, y es una aproximación para $f \neq 1$.

Con el fin de encontrar la condición de apareamiento en la cadena de estados efectivos hacemos uso de la técnica de la función de Green y su expansión renormalizada, Eq. (1.57), tomando como origen el sitio con autoenergía U , al cual llamaremos l ,

$$G(l, l; E) = \frac{1}{E - U - 2(\beta_F + \beta_0)^2 G(l + 1, l + 1[l]; E)}, \quad (3.29)$$

$$G(l + 1, l + 1[l]; E) = \frac{1}{E - V - \beta_F^2 G(l + 2, l + 2[l + 1]; E)}, \quad (3.30)$$

$$G(l + 2, l + 2[l + 1]; E) = \frac{1}{E - \beta_F^2 G(l + 3, l + 3[l + 2]; E)}, \quad (3.31)$$

$$G(l + 3, l + 3[l + 2]; E) = G(l + 2, l + 2[l + 1]; E), \quad (3.32)$$

la última igualdad se debe a que los sitios $l+2$ y $l+3$ tienen en la dirección libre la misma cadena lineal semi-infinita. Así, resolviendo este sistema de ecuaciones obtenemos las siguientes expresiones:

$$G(l, l; E) = \frac{1}{E - U - \frac{2(\beta_F + \beta_0)^2}{E - V - \frac{1}{2}(E \pm \sqrt{E^2 - 4\beta_F^2})}}, \quad (3.33)$$

$$G(l+1, l+1[l]; E) = \frac{1}{E - V - \frac{1}{2}(E \pm \sqrt{E^2 - 4\beta_F^2})}, \quad (3.34)$$

$$G(l+2, l+2[l+1]; E) = \frac{E \pm \sqrt{E^2 - 4\beta_F^2}}{2\beta_F^2}, \quad (3.35)$$

$$G(l+3, l+3[l+2]; E) = G(l+2, l+2[l+1]; E). \quad (3.36)$$

Recordemos que $G(l, l; E)$ es una función analítica en el plano complejo con excepción de los puntos sobre el eje real que corresponden a los valores propios del hamiltoniano efectivo, es decir, los valores posibles de la energía del sistema. Estos puntos son los polos de la Ec. (3.33), por lo que igualando el denominador a cero tendremos la siguiente ecuación:

$$x - u - \frac{(1 + k_0)^2}{x - w \mp \sqrt{x^2 - 1}} = 0, \quad (3.37)$$

donde $x = \frac{E}{B}$, $u = \frac{U}{B}$, $w = \frac{2V}{B}$, $B = 2\beta_F$, $k_0 = \frac{\beta_0}{\beta_F}$ y además se cumple la condición $x^2 > 1$.

La energía de amarre se calcula a partir de la diferencia entre el estado ligado de más baja energía y el estado no ligado localizado en el borde de la banda, en este caso podemos escribirla como

$$\Delta = -1 - x, \quad (3.38)$$

por lo que la Ec. (3.37) nos queda de la siguiente manera:

$$1 + \Delta + u - \frac{(1 + k_0)^2}{1 + \Delta + w \pm \sqrt{(1 + \Delta)^2 - 1}} = 0, \quad (3.39)$$

donde Δ satisface la condición $\Delta > 0$. De esta ecuación obtenemos finalmente la condición de apareamiento

$$\sqrt{(1 + u)(1 + w)} - 1 < k_0, \quad (3.40)$$

la cual nos da el diagrama de fase para las regiones de apareamiento y no apareamiento entre los electrones en función de todos los parámetros del hamiltoniano generalizado de Hubbard. Los efectos de la cuasiperiodicidad de la cadena de Fibonacci se introducen por medio de la amplitud de salto efectiva, β_F , la cual reproduce el caso periódico para $f = 1$. Es importante mencionar que el método que hemos seguido para encontrar la condición de apareamiento es exacta para el caso periódico, mientras que es una aproximación para el caso cuasiperiódico.

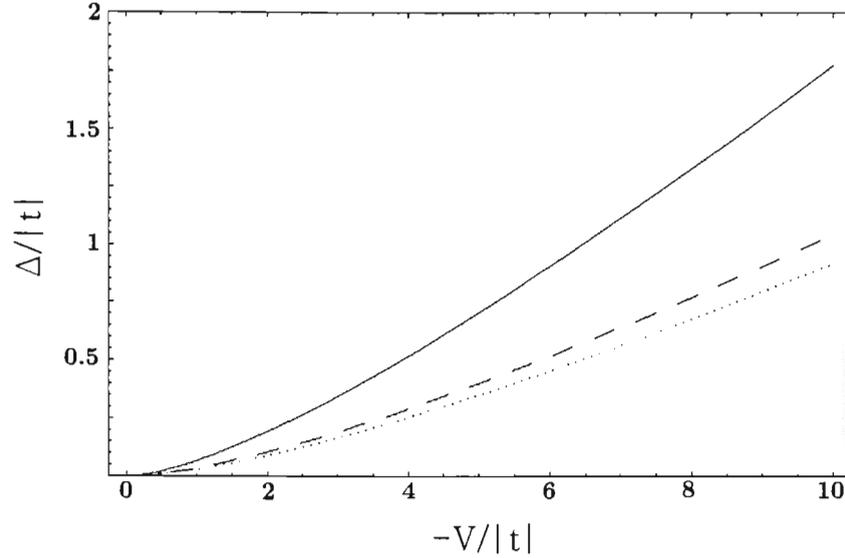


Figura 3.7: Energía de amarre para dos electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal Periódica (línea continua), Binaria (línea discontinua) y de Fibonacci (línea punteada), con los siguientes valores para los parámetros de salto: $\Delta t_0 = 0$, $t = -1$, $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$. El potencial de interacción en el mismo sitio es $U = 0$.

3.4. Resultados y Discusión

En esta sección vamos analizar tanto el comportamiento de la energía de amarre respecto a los potenciales de interacción como los diagramas de fase para los tres sistemas estudiados. En la Fig. (3.7) se muestra la variación de la energía de amarre respecto al potencial de interacción a primeros vecinos para las tres cadenas, esto con los siguientes valores para los parámetros del hamiltoniano: $U = 0$, $t = -1$, $t_B = -1$, $t_A = 2t_B$ y $\Delta t_0 = 0$, esto último reduce el hamiltoniano generalizado de Hubbard al extendido. En la gráfica podemos ver que para la zona de interacción Coulombiana débil, $-V/|t_B| < 1$, las curvas prácticamente se traslapan, por lo que el efecto de la cuasiperiodicidad de la cadena de Fibonacci es despreciable, sin embargo para la zona de de interacción Coulombiana fuerte, $-V/|t_B| > 1$, podemos ver el efecto de la cuasiperiodicidad. Obtenemos que para un cierto valor de la energía de amarre se requiere una mayor energía de interacción en el caso cuasiperiódico que en el periódico (cadena periódica y cadena binaria), o bien, visto de otro modo, dado cierto valor para el potencial de interacción, la energía de amarre para los electrones es menor en el caso cuasiperiódico que en el periódico, es decir, los electrones se encuentran menos amarrados en una cadena cuasiperiódica que en una periódica dado el mismo valor para el potencial de interacción.

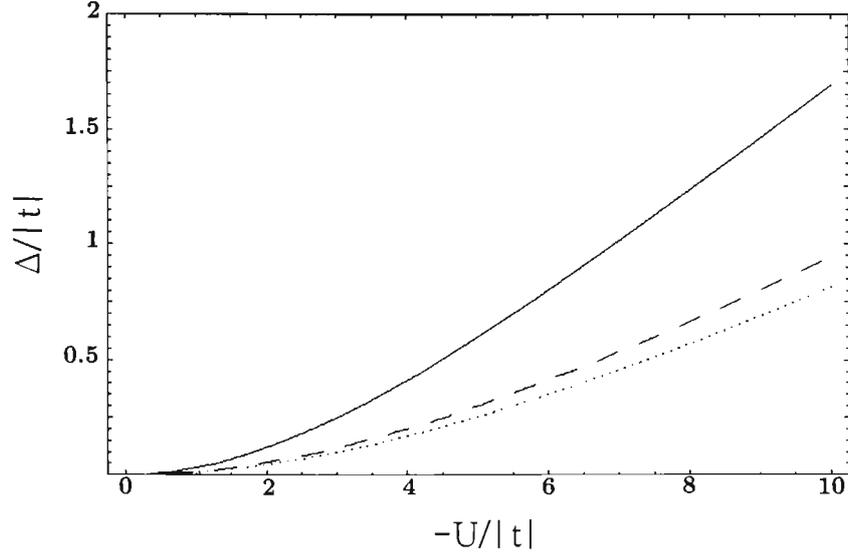


Figura 3.8: Energía de amarre para dos electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal Periódica (línea continua), Binaria (línea discontinua) y de Fibonacci (línea punteada), con los siguientes valores para los parámetros de salto: $\Delta t_0 = 0$, $t = -1$, $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$. El potencial de interacción en sitios vecinos es $V = 0$.

En la Fig. (3.8) se muestra la variación de la energía de amarre respecto al potencial de interacción en el mismo sitio para las tres cadenas, esto con los siguientes valores para los parámetros del hamiltoniano: $V = 0$, $t = -1$, $t_B = -1$, $t_A = 2t_B$ y $\Delta t_0 = 0$, es decir, dentro del modelo de Hubbard extendido. El comportamiento cualitativo de la energía de amarre es semejante respecto al caso anterior, sin embargo, dado un cierto valor para el potencial de interacción en el mismo sitio la energía de amarre es menor que cuando tenemos el mismo valor para el potencial de interacción a primeros vecinos, esto se debe a que, estadísticamente hablando, es más probable encontrar a los dos electrones en sitios vecinos que en el mismo sitio.

En la Fig. (3.9) se muestra el diagrama de fase para el caso en que el término de amplitud de salto correlacionado es cero, $\Delta t_0 = 0$, además con $t = -1$, $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$. En el diagrama podemos ver que las curvas pasan por el origen, hecho bien establecido para cadenas lineales dentro del modelo de Hubbard extendido, lo cual indica que en este punto es suficiente un pequeño potencial atractivo para amarrar electrones en el mismo sitio o en sitios vecinos. También podemos ver la ausencia de apareamiento electrónico para U y V ambos positivos además de los valores combinados de los potenciales de interacción tanto positivos como negativos que resultan en apareamiento electrónico. En la Fig. (3.10) podemos ver los diagramas de fase para los tres sistemas con $\Delta t_0 = 0,5t_B$, en los que es claro que el efecto de una amplitud

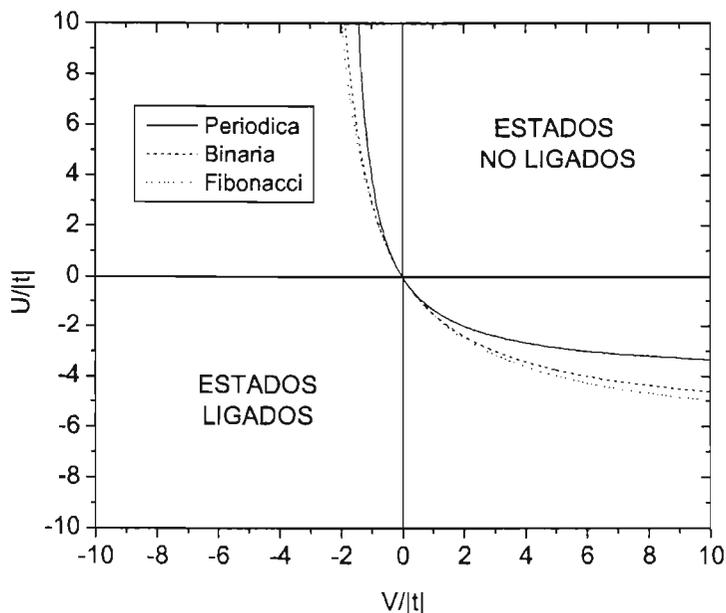


Figura 3.9: Diagrama de fase para dos electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal Periódica, Binaria y de Fibonacci. El término de amplitud de salto correlacionado es $\Delta t_0 = 0$, mientras que los valores de los otros parámetros son: $t = -1$, $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$.

de salto correlacionada diferente de cero es un aumento en la zona de apareamiento electrónico, es decir, induce la formación de pares incluso cuando los potenciales de interacción son ambos positivos. Esto se debe a que este término actúa como un potencial de interacción atractivo a primeros vecinos, lo que hace que cuando, por ejemplo, los potenciales U y V son ambos cero, las partículas se amarren cuando se encuentran en sitios de primeros vecinos.

Ahora, de los diagramas podemos ver que, con término de amplitud de salto correlacionado o no, existe una reducción en la zona de apareamiento para la cadena binaria respecto de la cadena periódica, esto se debe a que estamos considerando dos tipos diferentes de amplitudes de salto de las cuales una es mayor que en el caso periódico, lo que hace que los electrones se encuentren menos localizados y se dificulte la formación local de pares. También podemos ver una reducción en la zona de apareamiento para la cadena de Fibonacci respecto de la binaria. Aun cuando ambas comparten la característica de tener dos tipos de amplitudes de salto, la diferencia es el orden en que

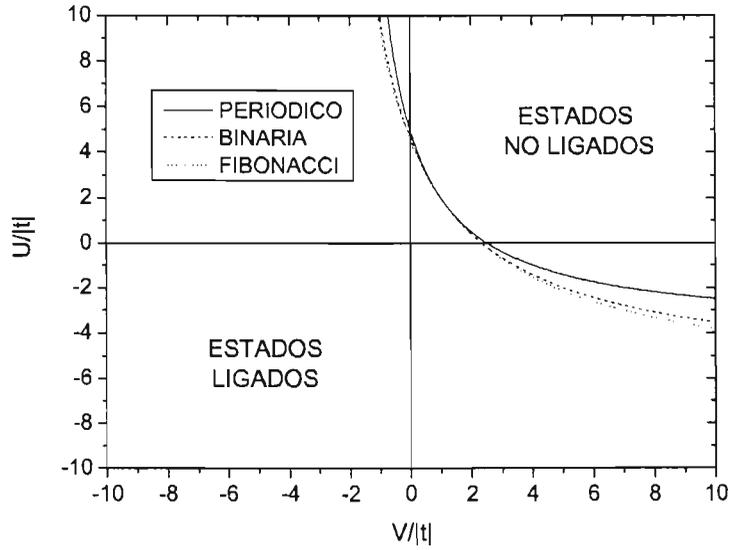


Figura 3.10: Diagrama de fase para dos electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal Periódica, Binaria y de Fibonacci. El término de amplitud de salto correlacionado es $\Delta t_0 = -0,5$, mientras que los valores de los otros parámetros son: $t = -1$, $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$.

se encuentran dispuestas a lo largo de la cadena, por lo que esta reducción en la zona de apareamiento debemos asociarla a la cuasiperiodicidad de la cadena de Fibonacci. Si bien la diferencia entre los diagramas de fase para los tres sistemas estudiados no es muy marcada, esto se debe a que estamos dentro de la aproximación $t_A \approx t_B$, lo que hace que las cadenas sean parecidas entre si.

Capítulo 4

Sistema de Tres Partículas Correlacionadas en una Cadena Lineal

En este capítulo vamos a analizar la interacción de un sistema de tres electrones con espines antiparalelos ($\uparrow\downarrow\uparrow$) en una Cadena Lineal, tanto Periódica como Binaria y de Fibonacci, estudiando la energía de amarre (Δ) haciendo uso del hamiltoniano de Hubbard extendido. Este estudio se lleva a cabo usando el método del espacio de estados y su mapeo. Sin embargo, dada la complejidad de los diferentes sistemas, los resultados se obtienen de manera numérica. De esta manera obtenemos tanto la relación entre la energía de amarre y los potenciales de interacción U y V como los diagramas de fase para cada caso. Debido a que el procedimiento para los tres sistemas es muy parecido, presentaremos con detalle el seguido para la Cadena Periódica y sólo los aspectos fundamentales de los correspondientes para los casos de la Cadena Binaria y la de Fibonacci.

4.1. Cadena Periódica

Con el fin de describir la manera en que aplicamos el método del espacio de estados para este sistema, consideremos el caso de tres electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal de 4 sitios [37]. Los posibles estados de este sistema son los siguientes,

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm 00\rangle & |7\rangle &= |+\pm 00\rangle, & |13\rangle &= |++-0\rangle, & |19\rangle &= |++0-\rangle, \\
 |2\rangle &= |\pm 0+0\rangle, & |8\rangle &= |+-+0\rangle, & |14\rangle &= |+0\pm 0\rangle, & |20\rangle &= |+0+-\rangle, \\
 |3\rangle &= |\pm 00+\rangle, & |9\rangle &= |+-0+\rangle, & |15\rangle &= |+0-+\rangle, & |21\rangle &= |+00\pm\rangle, \\
 |4\rangle &= |-\++0\rangle, & |10\rangle &= |0\pm+0\rangle, & |16\rangle &= |0+\pm 0\rangle, & |22\rangle &= |0++-\rangle, \\
 |5\rangle &= |-\+0+\rangle, & |11\rangle &= |0\pm 0+\rangle, & |17\rangle &= |0+--\rangle, & |23\rangle &= |0+0\pm\rangle, \\
 |6\rangle &= |-\+0++\rangle, & |12\rangle &= |0-++\rangle, & |18\rangle &= |00\pm+\rangle, & |24\rangle &= |00+\pm\rangle, \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

donde el signo + (-) representa un sitio con un electrón con espín hacia arriba (hacia abajo), es decir, la componente z del espín del electrón es $1/2$ ($-1/2$), el signo \pm representa un sitio con dos electrones, uno con espín hacia arriba y otro con espín hacia abajo, mientras que 0 representa un sitio vacío. Recordemos que el hamiltoniano de Hubbard extendido,

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \quad (4.2)$$

asocia a cada uno de los estados de la Ec. (4.1) una autoenergía que depende de la configuración de los electrones en el sistema. La contribución de dos electrones en el mismo sitio es U , mientras que la de dos electrones en sitios vecinos es V . A continuación se dan algunos ejemplos de estados posibles del sistema y de sus autoenergías asociadas,

$$\begin{aligned}
 |\pm 0+0\rangle &\longrightarrow U, \\
 |+-0+\rangle &\longrightarrow V, \\
 |0+--\rangle &\longrightarrow 2V, \\
 |0\pm+0\rangle &\longrightarrow U + 2V.
 \end{aligned}$$

El hamiltoniano de Hubbard extendido también establece una conexión entre estados del sistema cuando la forma de pasar de uno a otro sea mediante el salto de un electrón a un sitio vecino, por ejemplo,

$$|0\pm 0+\rangle \longleftrightarrow |0+--\rangle \quad \text{con amplitud de salto } t.$$

Aplicando el método del espacio de estados y su mapeo obtenemos la Fig. (4.2), donde se muestra la red de estados para el sistema de tres electrones en una cadena lineal con cuatro sitios. En esta red la única energía potencial es la debida a la configuración interna de cada estado, ε_i , mientras que la única amplitud de transición posible entre estados es t , de manera que la dinámica del sistema queda descrita por



Figura 4.1: Sistema de tres electrones con espines antiparalelos en una Cadena Lineal Periódica con cuatro sitios.

el siguiente hamiltoniano:

$$H_{AF} = t \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle\langle j| + \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i|, \quad (4.3)$$

donde $|i\rangle$ representa uno de los estados de muchas partículas de la Ec. (4.1). Este hamiltoniano tiene la forma de un hamiltoniano de amarre fuerte para una sola partícula, de manera que hemos pasado de un sistema de tres partículas en una Cadena Lineal Periódica con cuatro sitios descrito por el hamiltoniano de Hubbard extendido, a un sistema de una sola partícula en una red tridimensional con impurezas descrito por un hamiltoniano de amarre fuerte. En general el método del espacio de estados mapea el problema original de muchos cuerpos con interacciones entre partículas en el mismo sitio, en sitios vecinos y en una red d -dimensional, a un problema de una sola partícula pero en una red nd -dimensional con impurezas, siendo n el número de electrones en el sistema original.

Una forma de trabajar con la red de estados es proyectándola en alguna dirección en que exista simetría traslacional de las impurezas, obteniendo una red de menor dimensión pero con estados y amplitudes de salto efectivos. En la Fig. (4.2) se muestra la dirección de proyección que usaremos en este caso, así como la red bidimensional así obtenida. El hamiltoniano, también de amarre fuerte, que describe la proyección del espacio de estados es el siguiente:

$$H_P = \beta \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle\langle j| + \sum_i E_i |i\rangle\langle i|, \quad (4.4)$$

donde $|i\rangle$ representa un estado efectivo del sistema con autoenergía E_i , mientras que β es la amplitud de salto entre estados efectivos vecinos. Con el fin de encontrar el valor de las amplitudes de salto efectivas β , proponemos una función de onda efectiva para el estado base del tipo:

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l |l\rangle, \quad (4.5)$$

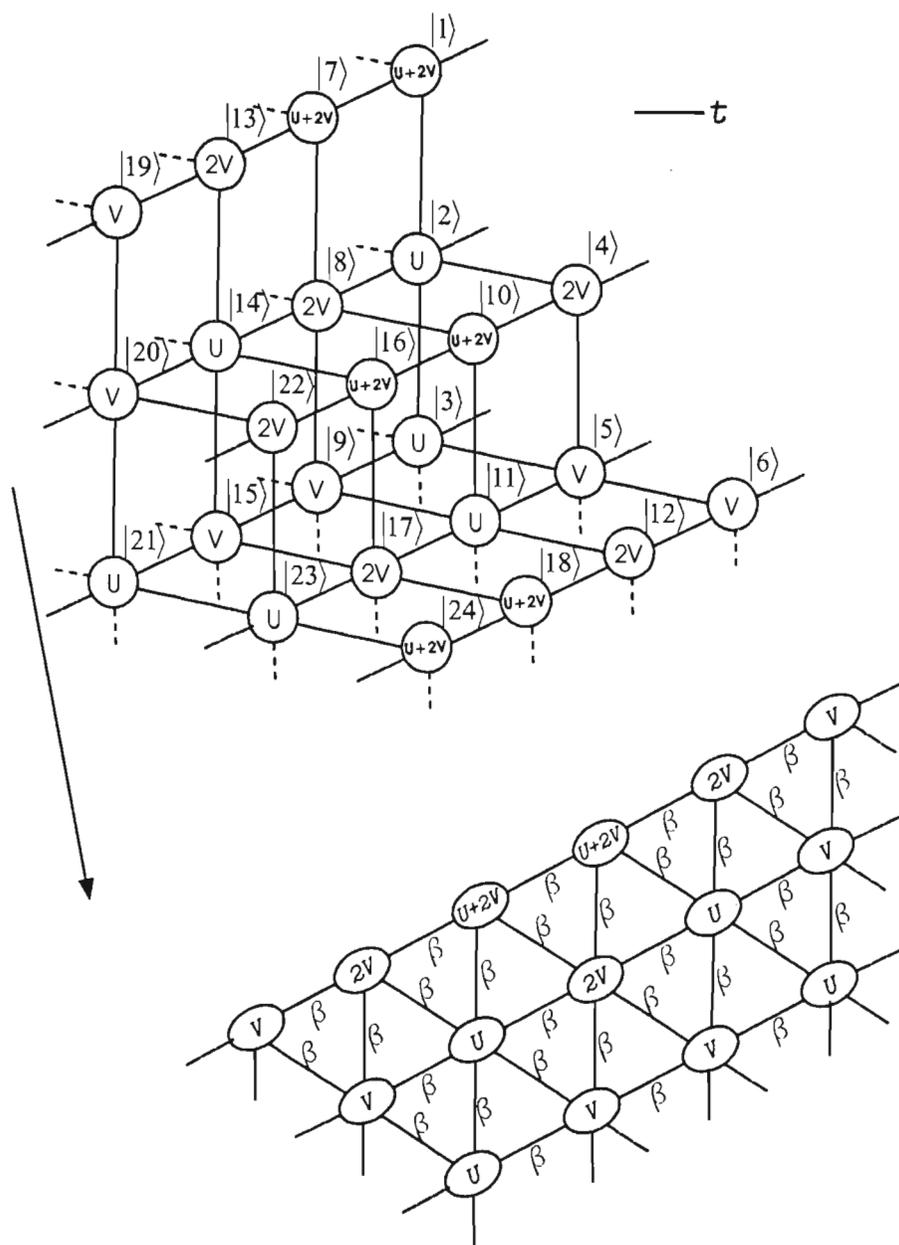


Figura 4.2: Red de estados para tres electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal periódica con cuatro sitios. La red se proyecta a una red bidimensional que contiene impurezas de sitio, la flecha indica la dirección de proyección. La red bidimensional está formada por estados y amplitudes de salto efectivos.

así calculamos el elemento de matriz de H_{AF} entre sitios vecinos,

$$\begin{aligned}
 \beta &= \langle \Psi_{0l} | H_{AF} | \Psi_{0m} \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{(l,m)} \sum_{(i,j)} t \langle l | i \rangle \langle j | m \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{(l,m)} t \langle l | m \rangle \\
 &= t,
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

donde hemos usado la ortogonalidad de los estados del sistema. De manera análoga obtenemos el valor de las autoenergías de los estados efectivos,

$$\begin{aligned}
 E_i &= \langle \Psi_{0l} | H_{AF} | \Psi_{0l} \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_l \sum_i \varepsilon_i \langle l | i \rangle \langle i | l \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_i \varepsilon_i \\
 &= \varepsilon_i.
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Debido a la complejidad de la red de estados efectivos, vamos a obtener el diagrama de fase de forma numérica estudiando la energía de amarre (Δ) para los electrones. La energía de amarre se calcula a partir de la diferencia de energías entre el estado ligado de más baja energía y el estado no ligado localizado en el borde de la banda de tres partículas libres ($U = V = 0$). La diagonalización numérica final se realizó en una red triangular truncada de estados efectivos de 1751 sitios, que corresponden a una red de estados de 20825 sitios que a su vez son generados por una cadena lineal con tres electrones de 35 sitios. El tamaño de la matriz a diagonalizar se escogió de tal manera que fuera el mínimo a partir del cual la energía ya no tiene un cambio importante. En general para tres electrones, si N_{CL} es el número de sitios en la cadena lineal, la red de estados tendrá

$$N_{RE} = \frac{N_{CL}^2(N_{CL} - 1)}{2} \tag{4.8}$$

sitios (estados), mientras que los correspondientes para la proyección (estados efectivos) serán

$$N_{RP} = \frac{1}{2}(3N_{CL}^2 - 5N_{CL} + 2). \tag{4.9}$$

Al final del capítulo se muestran los resultados obtenidos haciendo además una comparación con los correspondientes a los casos de la cadena binaria y de la cadena de Fibonacci.



Figura 4.3: Sistema de tres electrones con espines antiparalelos en una Cadena Lineal Binaria con cuatro sitios.

4.2. Cadena Binaria

El procedimiento para encontrar el diagrama de fase de este sistema es muy parecido al seguido para el caso de la Cadena Lineal. Retomaremos el ejemplo de la cadena de cuatro sitios ahora con dos tipos diferentes de enlaces alternados, t_A y t_B . Nuevamente los posibles estados del sistema están dados por la Ec. (4.1), y de la misma forma el hamiltoniano de Hubbard extendido asocia a cada uno de estos estados la misma autoenergía ε_i que depende de la configuración de los electrones en el sistema. El hamiltoniano de Hubbard también establece una conexión entre estados del sistema cuando la forma de pasar de uno a otro sea mediante el salto de un electrón a un sitio vecino. Esta conexión es la amplitud de salto y puede tomar los valores t_A y t_B dependiendo del tipo de enlace que interviene en el salto, por ejemplo,

$$\begin{aligned} |\pm 0 + 0\rangle &\longleftrightarrow |+ - + 0\rangle && \text{con amplitud de salto } t_A, \\ |0 \pm 0 +\rangle &\longleftrightarrow |0 + - +\rangle && \text{con amplitud de salto } t_B. \end{aligned}$$

Aplicando el método del espacio de estados encontramos la representación tridimensional que se muestra en la Fig. (4.4), en donde la única energía potencial es la debida a la configuración interna de cada estado, ε_i , mientras que la amplitud de transición posible entre estados es t_A o t_B , de manera que la dinámica del sistema queda descrita por el siguiente hamiltoniano:

$$H_{AFB} = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} |i\rangle\langle j| + \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i|. \quad (4.10)$$

Este hamiltoniano tiene la forma de un hamiltoniano de amarre fuerte para una sola partícula, de manera que nuevamente hemos pasado de un sistema de tres partículas en una cadena lineal binaria con cuatro sitios descrito por el hamiltoniano de Hubbard extendido, a un sistema de una sola partícula en una red tridimensional con impurezas descrito por un hamiltoniano de amarre fuerte. Nuevamente aprovechamos la simetría traslacional de las autoenergías para reducir la dimensionalidad del sistema, esto bajo la condición $t_A \approx t_B$. En la Fig. (4.4) se muestra la dirección de proyección que usaremos, así como la red bidimensional así obtenida. El hamiltoniano asociado a la

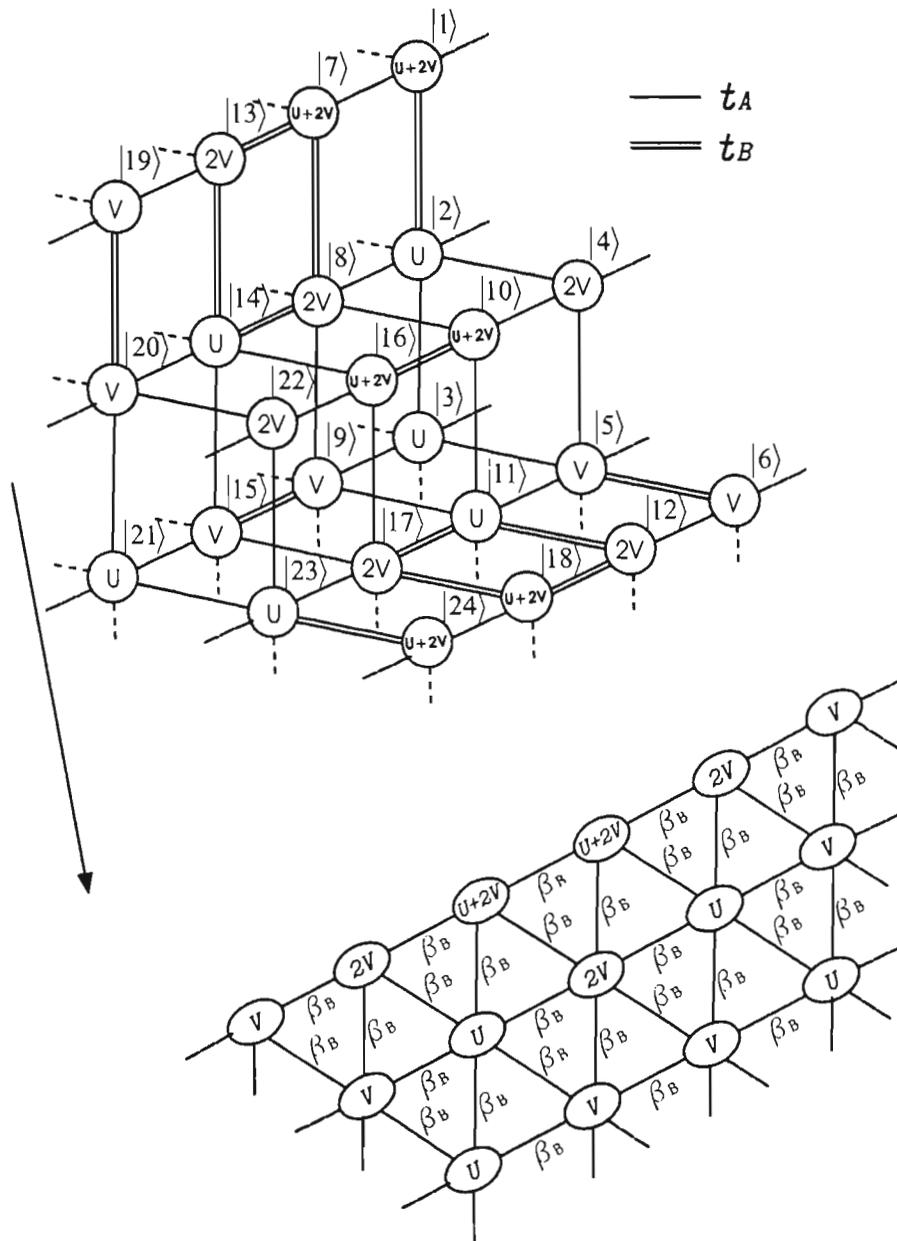


Figura 4.4: Red de estados para tres electrones con espines antiparalelos en una Cadena Lineal Binaria con cuatro sitios. La red se proyecta a una red bidimensional que contiene impurezas de sitio, la flecha indica la dirección de proyección. La red bidimensional está formada por estados y amplitudes de salto efectivos.

nueva red es el siguiente:

$$H_{PB} = \beta_B \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle\langle j| + \sum_i E_i |i\rangle\langle i|, \quad (4.11)$$

con $|i\rangle$ un estado efectivo del sistema de autoenergía E_i y β_B la amplitud de salto entre estados efectivos vecinos. Ahora calcularemos el valor de las amplitudes de salto efectivas β_B , y para esto proponemos una función de onda efectiva para el estado base de la forma

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l |l\rangle, \quad (4.12)$$

así calculamos el elemento de matriz de H_P entre sitios vecinos,

$$\begin{aligned} \beta_B &= \langle \Psi_{0l} | H_{AFB} | \Psi_{0m} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} \langle l | i \rangle \langle j | m \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} t_{l,m} \langle l | m \rangle \\ &= \frac{1}{N} \{t_A + t_B + t_A + t_B + t_A + t_B + \dots\} \\ &= \frac{1}{N} \left\{ \frac{N}{2} t_A + \frac{N}{2} t_B \right\} \\ &= \frac{1}{2} \{f t_B + t_B\} \\ &= \frac{t_B}{2} \{f + 1\} \end{aligned} \quad (4.13)$$

donde hemos supuesto que $t_A = f t_B$ siendo f una constante y además hemos usado la ortogonalidad de los estados del sistema. De manera análoga obtenemos el valor de las auto-energías de los estados efectivos,

$$\begin{aligned} E_i &= \langle \Psi_{0l} | H_{AFB} | \Psi_{0l} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_l \sum_i \varepsilon_i \langle l | i \rangle \langle i | l \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_i \varepsilon_i \\ &= \varepsilon_i. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Finalmente, una vez obtenido el valor de la amplitud de salto efectiva elaboramos un programa que diagonaliza la matriz que representa a H_{AFB} en una red triangular de estados efectivos de 1751 sitios. Los resultados y la discusión de los mismos se presentan al final del capítulo.

4.3. Cadena de Fibonacci

Con el fin de visualizar las diferencias con los sistemas anteriores, aplicaremos el método del espacio de estados a un sistema de tres electrones en una cadena de Fibonacci de generación 4, es decir, con 6 sitios. En este caso también encontramos dos tipos de enlaces que denotaremos por A y B . Esto nos lleva a una configuración de estados mayor que los sistemas anteriores, en este caso de 90 estados posibles del sistema. Algunos de estos estados son los siguientes:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm + 0000\rangle, \\
 |2\rangle &= |\pm 0 + 000\rangle, \\
 |3\rangle &= |\pm 00 + 00\rangle, \\
 &\vdots \\
 |90\rangle &= |0000 + \pm\rangle.
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Estos estados son análogos a los de la Ec. (4.1) y también encuentran una representación en una red tridimensional que se muestra en la Fig. (4.6). En esta podemos observar tanto las autoenergías de los estados como las amplitudes de salto con las que se relacionan por medio del hamiltoniano de Hubbard extendido a lo largo de una diagonal, esto con el fin de hacer evidente el cálculo de la amplitud de salto efectiva. La dinámica de esta red es gobernada por el siguiente hamiltoniano de amarre fuerte:

$$H_{AFF} = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} |i\rangle\langle j| + \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i|, \tag{4.16}$$

donde la amplitud de salto entre sitios vecinos $t_{i,j}$ toma los valores t_A y t_B , mientras que ε_i representa la autoenergía del estado $|i\rangle$. Al llevar a cabo la proyección, válida dentro de la aproximación $t_A \approx t_B$, obtenemos una red bidimensional descrita por el hamiltoniano

$$H_{PF} = \beta_F \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle\langle j| + \sum_i E_i |i\rangle\langle i|, \tag{4.17}$$

con $|i\rangle$ un estado efectivo del sistema de auto-energía ε_i y β_F la amplitud de salto entre estados efectivos vecinos. Ahora obtendremos el valor de la amplitud de salto efectiva, es decir, el valor esperado de H_{AFF} entre sitios vecinos. Para esto observemos que a lo largo de la diagonal de proyección la amplitud de salto toma los valores de t_A y t_B en un orden tal que representan una sucesión de Fibonacci, por lo que haremos uso de la siguiente propiedad de dicha sucesión:

Sea N el número total de enlaces, $N_A(N)$ el número de enlaces con amplitud de salto t_A y $N_B(N)$ el número de enlaces con amplitud de salto t_B ($N = N_A(N) +$

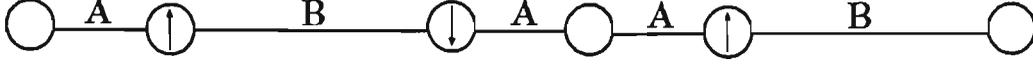


Figura 4.5: Sistema de tres electrones con espines antiparalelos en una Cadena Lineal de Fibonacci con seis sitios.

$N_B(N)$, en el límite $N \rightarrow \infty$ tendremos que $N_A(N)/N_B(N) \rightarrow \sigma$, con $\sigma = (\sqrt{5} + 1)/2$ la razón dorada.

Como en los casos anteriores, para encontrar el valor de las amplitudes de salto efectivas β_F , proponemos la siguiente función de onda efectiva para el estado base:

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l |l\rangle, \quad (4.18)$$

así,

$$\begin{aligned} \beta_F &= \langle \Psi_{0l} | H_{AFF} | \Psi_{0m} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} \langle l | i \rangle \langle j | m \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\langle l,m \rangle} t_{l,m} \langle l | m \rangle \\ &= \frac{1}{N} \{t_A + t_B + t_A + t_A + t_B + \dots\} \\ &= \frac{1}{N} \{N_A t_A + N_B t_B\} \\ &= \frac{1}{N} \left\{ \frac{N\sigma}{\sigma+1} t_A + \frac{N}{\sigma+1} t_B \right\} \\ &= t_B \left\{ \frac{\sigma f + 1}{\sigma + 1} \right\} \end{aligned} \quad (4.19)$$

donde hemos propuesto que $t_A = f t_B$ siendo f una constante y además hemos usado la ortogonalidad de los estados del sistema. Además podemos observar que cuando $f = 1$ obtenemos que $\beta_F = t$, es decir, regresamos al caso periódico. De manera similar obtenemos el valor de las autoenergías de los estados efectivos,

$$\begin{aligned} E_i &= \langle \Psi_{0l} | H_{AFF} | \Psi_{0l} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_l \sum_i \varepsilon_i \langle l | i \rangle \langle i | l \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_i \varepsilon_i \\ &= \varepsilon_i. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Finalmente, una vez obtenido el valor de la amplitud de salto efectiva elaboramos un programa que diagonaliza la matriz que representa a H_{AFB} en una red triangular

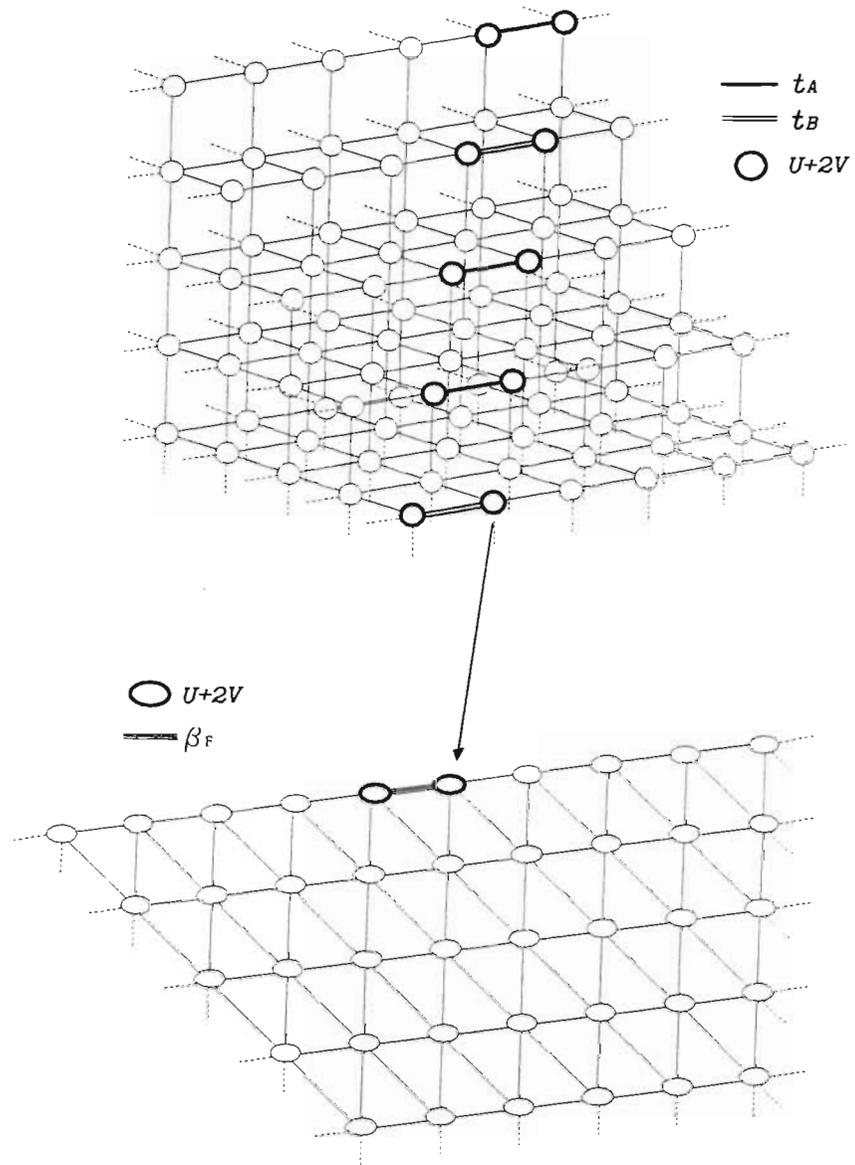


Figura 4.6: Red de estados para tres electrones con espines antiparalelos en una Cadena Lineal de Fibonacci con seis sitios. La red se proyecta a una red bidimensional que contiene impurezas de sitio. Con el fin de hacer evidente la proyección sólo se muestran los estados y amplitudes de salto a lo largo de una diagonal, el resto se obtienen de manera análoga.

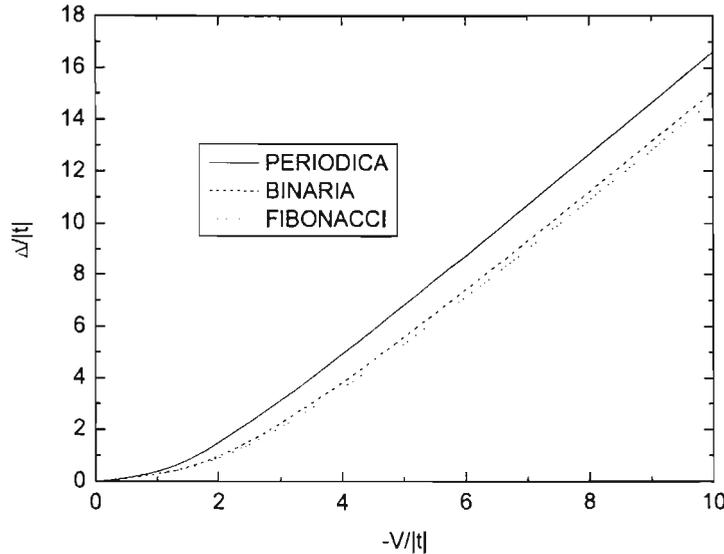


Figura 4.7: Energía de amarre para tres electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal Periódica, Binaria y de Fibonacci, con los siguientes valores para los parámetros de salto: $t = -1$, $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$. El potencial de interacción en el mismo sitio es $U = 0$.

de estados efectivos de 1751 sitios. Los resultados y la discusión de los mismos se presentan en la siguiente sección.

4.4. Resultados y Discusión

A continuación se presentan los resultados de la energía de amarre para el sistema de tres electrones antiparalelos en una cadena lineal, binaria y de Fibonacci [38].

En la Fig. (4.7) se muestra una comparación de los resultados en las tres redes antes mencionadas con los siguientes valores para los parámetros del hamiltoniano de Hubbard extendido: $U = 0$ para todos los sistemas, $t = -1$ para la cadena periódica mientras que $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$ para la cadena binaria y la de Fibonacci. Este caso corresponde a la ausencia de un potencial de interacción entre electrones en el mismo sitio, por lo que la única interacción entre ellos es la que se da cuando se encuentran en sitios primeros vecinos, lo que cuesta una energía V al sistema. También estamos considerando que la amplitud de salto t_A es mayor que t_B , lo que quiere decir que para los electrones es más fácil pasar de un sitio a otro cuando la amplitud de

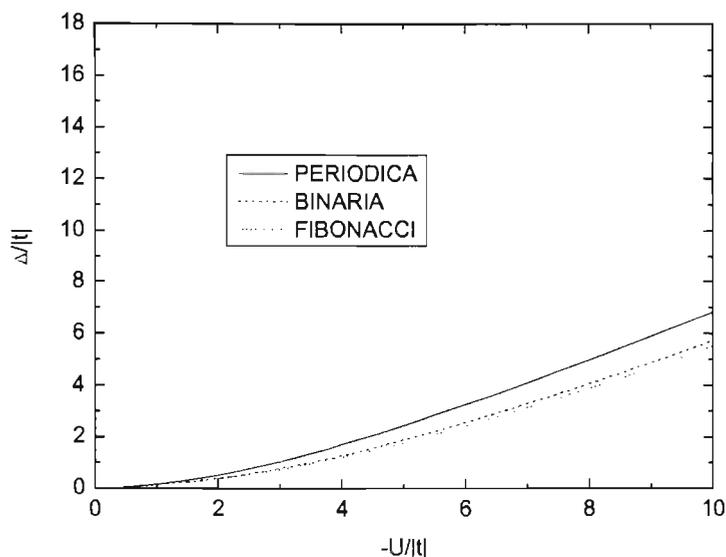


Figura 4.8: Energía de amarre para tres electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal Periódica, Binaria y de Fibonacci, con los siguientes valores para los parámetros de salto: $t = -1$, $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$. El potencial de interacción en sitios vecinos es $V = 0$.

salto entre estos es t_A . En la gráfica podemos ver que para la zona de interacción Coulombiana débil, $-V/|t_B| < 1$, las curvas prácticamente se traslapan, por lo que el efecto de la cuasiperiodicidad de la cadena de Fibonacci es despreciable, sin embargo para la zona de interacción Coulombiana fuerte, $-V/|t_B| > 1$, podemos ver el efecto de la cuasiperiodicidad. Obtenemos que para un cierto valor de la energía de amarre se requiere una mayor energía de interacción en el caso cuasiperiódico que en la cadena periódica. Este comportamiento se mantiene cuando comparamos la cadena binaria con la de Fibonacci, sin embargo la diferencia es menos evidente que en el caso periódico, esto debido a que ambas cadenas comparten la característica de tener dos tipos distintos de amplitudes de salto, sin embargo si podemos ver una corrección asociada a la cuasiperiodicidad de la cadena de Fibonacci.

En la Fig. (4.8) se muestran los resultados para los valores de los parámetros: $V = 0$ para todos los sistemas, $t = -1$ para la cadena periódica mientras que $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$ para la cadena binaria y la de Fibonacci. Ahora estamos considerando que sólo existe una interacción entre electrones cuando estos se encuentran en el mismo sitio, lo que le cuesta al sistema una energía U . En la gráfica podemos ver que si bien

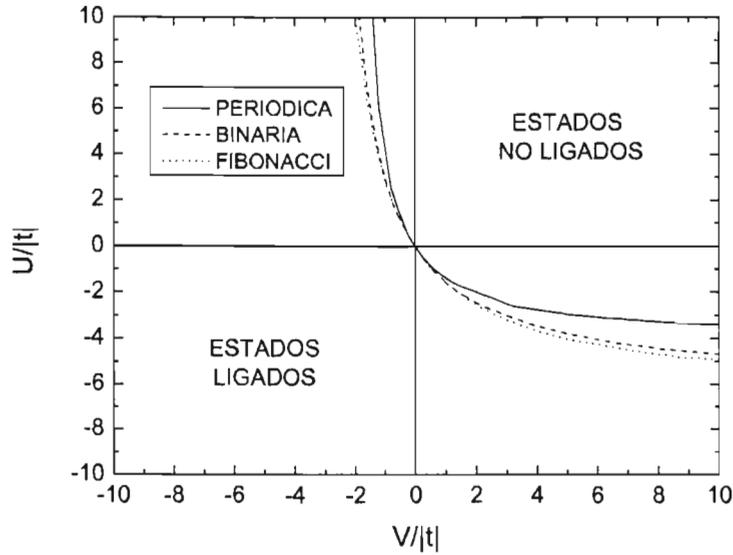


Figura 4.9: Diagrama de fase para tres electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal Periódica, Binaria y de Fibonacci, con los siguientes valores para los parámetros de salto: $t = -1$, $t_B = -1$ y $t_A = 2t_B$.

el comportamiento cualitativo de las curvas respecto al caso anterior es muy parecido, la energía de interacción necesaria para cierto valor de la energía de amarre es mucho mayor, esto independientemente del tipo de red. Esto se debe a que estamos estudiando un sistema en el que el número de sitios es mayor que el número de partículas, por lo que encontrar a dos electrones en el mismo sitio es menos probable que encontrarlos en sitios vecinos.

Hasta ahora hemos calculado la energía de amarre para el estado base haciendo una de las energías de interacción, U o V , igual a cero. En la Fig. (4.9) presentamos el caso general, es decir, el diagrama de fase para cualquier valor de U y V , donde podemos observar tanto la zona donde existe apareamiento electrónico como la zona donde no lo hay. Nuevamente tenemos que en la zona de interacción Coulombiana débil las curvas se traslapan, mientras que en la zona de interacción Coulombiana fuerte se ven algunas diferencias. También podemos ver que para U o V positivos no tenemos apareamiento electrónico para ninguna de las tres cadenas, hecho bien establecido para cadenas lineales dentro del modelo de Hubbard extendido. Respecto a las zonas de apareamiento, hemos obtenido que esta es mayor en el caso Periódico que en el caso de la red Binaria, y que esta a su vez es mayor que en la cadena de

Fibonacci, por lo que podemos concluir que el apareamiento electrónico en nuestra cadena de Fibonacci es más difícil que en la cadena Binaria o Periódica. Si bien la diferencia entre las curvas es apenas apreciable, esto se debe, por un lado, a que la aproximación que estamos utilizando es válida para valores $t_A \approx t_B$, y por otro lado a que los pares están fuertemente correlacionados, y en consecuencia muy localizados, lo cual no permite ver con claridad los efectos tanto de la red binaria como de la cuasiperiódica, sin embargo si logramos ver una corrección al diagrama de fase de la cadena binaria como efecto de la cuasiperiodicidad.

Conclusiones

En esta tesis se realizó un estudio de la correlación electrónica en sistemas con pocas partículas. En particular se estudió la cadena de Fibonacci para los casos de dos y tres electrones, en el primer caso se obtuvo analíticamente, en la aproximación $t_A \approx t_B$, tanto la condición de apareamiento como el diagrama de fase, mientras que para el caso de tres partículas obtuvimos numéricamente y dentro de la misma aproximación el diagrama de fase. Para el cálculo anterior usamos el modelo de Hubbard, el método del espacio de estados y su mapeo así como la técnica de la función de Green y su expansión renormalizada en teoría de perturbaciones.

La solución analítica aproximada para dos electrones en una cadena de Fibonacci está dada por:

$$\sqrt{(1+u)(1+w)} - 1 < k_0,$$

donde $u = U/B$, $w = 2V/B$, $B = 2\beta$, $k_0 = \beta_0/\beta$, $\beta = 2t_B \left(\frac{\sigma f + 1}{\sigma + 1} \right)$ y $\beta_0 = 2\Delta t_0$. Esta condición nos da el diagrama de fase para las regiones de apareamiento y no apareamiento electrónico en función de todos los parámetros del hamiltoniano generalizado de Hubbard. Los efectos de la cuasiperiodicidad de la cadena de Fibonacci se introducen por medio de la amplitud de salto efectiva, β , la cual reproduce el caso periódico para $f = 1$.

Para el problema de tres electrones en una cadena de Fibonacci se obtuvo numéricamente dentro de la aproximación $t_A \approx t_B$ el diagrama de fase, el cual muestra las regiones de apareamiento y no apareamiento electrónico. Nuestros resultados para el diagrama de fase tanto para dos como para tres partículas fueron comparados con los obtenidos para las cadenas periódica y binaria. Lo anterior nos llevó a concluir que es más difícil el apareamiento electrónico en nuestra cadena de Fibonacci que en los otros dos sistemas mencionados. Si bien la diferencia entre la cadena de Fibonacci y la binaria no es muy marcada, si se pueden apreciar los efectos de la cuasiperiodicidad. Lo anterior se puede explicar tomando en cuenta que estamos analizando un sistema fuertemente correlacionado, es decir, los pares están muy localizados, lo cual no permite ver con toda claridad los efectos cuasiperiódicos.

Como perspectivas de este trabajo podemos mencionar el problema de la correlación electrónica en sistemas cuasiperiódicos de mayor dimensión. Asimismo es deseable extender nuestros resultados para un mayor número de partículas.

Bibliografía

- [1] D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias and J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [2] C. Janot, *Phys. Rev. B* **53**, 181 (1996).
- [3] M. Kohmoto and J. R. Banaver 1986, *Phys. Rev. B* **34**, 563 (1986); E. Macia, *Phys. Rev. B* **61**, 8771 (2000); C. Wang, R. Fuentes, O. Navarro, R. A. Barrio and R. G. Barrera, *Journal of Non-Crystalline Solids* **153**, 586 (1993).
- [4] O. Navarro and C. Wang, *Journal of Non-Crystalline Solids* **153**, 586 (1993).
- [5] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
- [6] O. Navarro and C. Wang, *Rev. Mex. Fís.* **38**, 553 (1992).
- [7] C. Giacovazzo, *Fundamentals of Crystallography*, International Union of Crystallography, University of Oxford (1992).
- [8] C. Janot, *Quasicrystals: A Primer*, Oxford: Clarendon (1992).
- [9] S. Martin, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 719 (1991).
- [10] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, 2nd Ed, Springer Series in Solid State Sciences Vol. 7 (1983).
- [11] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Menlo Park, California: Benjamin/Cummings (1985).
- [12] P. L. Taylor, *A Quantum Approach to the Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press (2002).
- [13] G. Grüner, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1129 (1988).
- [14] E. Fawcett, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 209 (1988).
- [15] W. E. Pickett, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 433 (1989).
- [16] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd Ed., John Wiley & Sons (1998).
- [17] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, 2nd Ed., John Wiley & Sons (1987).

-
- [18] R. Micnas, J. Ranninger and S. Robaszkiewicz, *Journal de Physique* **12**, C8-2221 (1988).
- [19] G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1362 (1986).
- [20] M. Lavagna, *Phys. Rev. B* **41**, 142 (1991).
- [21] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar and N. E. Bickers, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1523 (1989).
- [22] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **22**, 5259 (1980).
- [23] E. H. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
- [24] S. Caprara, M. Avignon and O. Navarro, *Phys. Rev. B* **61**, 15667 (2000).
- [25] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis and R. T. Scalettar, *Phys. Rev. B* **40**, 506 (1989).
- [26] J. Callaway, D. P. Chen, D. G. Kanhere and Li Qiming, *Phys. Rev. B* **42**, 465 (1990).
- [27] H. Q. Lin, J. E. Hirsch and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **37**, 7359 (1988).
- [28] D. Adler, *Solid State Physics*, Vol. 21, Eds. H. Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull (Academic Press, New York) (1968).
- [29] A. Alexandrov and J. Ranninger, *Phys. Rev. B* **24**, 1164 (1981).
- [30] F. Marsiglio and J. E. Hirsch, *Physica C* **171**, 554 (1990).
- [31] L. A. Pérez and C. Wang, *Solid State Commun.* **108**, 215 (1998).
- [32] J. E. Espinosa, O. Navarro and M. Avignon, *The European Physical Journal B* **18**, 9 (2000).
- [33] O. Navarro, M. Mayoral, J. E. Espinosa and J. R. Suárez, *Physica B* **312**, 552 (2002).
- [34] E. Vallejo and O. Navarro, *Journal of Non-Crystalline Solids* **329**, 131 (2003); E. Vallejo and O. Navarro, *Phys. Rev. B* **67**, 193105 (2003).
- [35] F. Marsiglio and J. E. Hirsch, *Physica C* **158**, 326 (1989).
- [36] O. Navarro and C. Wang, *Solid State Commun.* **83**, 473 (1992).
- [37] O. Navarro, C. Wang and R. Oviedo-Roa, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **291**, 279 (1993).
- [38] J. R. Suárez and O. Navarro, *Phys. Status Solid* en prensa (2005).