



00362

18

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE  
MÉXICO**

---

---

**POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS**

**CORRELACION ELECTRÓNICA EN SISTEMAS  
DILUIDOS**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:  
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)**

**P R E S E N T A:  
I.Q. EMMANUEL VALLEJO CASTAÑEDA**

**DIRECTOR DE TESIS:  
DR. HORACIO NAVARRO CHAVEZ**

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

México, D.F.

2002



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

... a la Direccion General de Bibliotecas ...  
... a difundir en formato electrónico e impres...  
... contenido de mi trabajo recepcional...  
NOMBRE: Emmanuel Valero Castañeda

FECHA: 11/11/02  
FIRMA: [Signature]

# Índice General

<b>Resumen</b>	<b>iii</b>
<b>Introducción</b>	<b>iv</b>
<b>1 Generalidades</b>	<b>1</b>
1.1 Sistemas de Partículas . . . . .	1
1.2 Formalismo de segunda cuantización . . . . .	3
1.2.1 Bosones . . . . .	3
1.2.2 Fermiones . . . . .	5
<b>2 Modelo de Hubbard</b>	<b>7</b>
2.1 Hamiltoniano de Hubbard . . . . .	7
2.2 Generalización del método del mapeo. . . . .	9
2.3 Modelo de enlace fuerte . . . . .	11
2.4 Método de proyección . . . . .	12
<b>3 Funciones de Green independientes del tiempo</b>	<b>14</b>
3.1 Teoría de perturbaciones y funciones de Green . . . . .	16
3.2 La expansión renormalizada dentro de la teoría de perturbaciones (RPE) . . . . .	18
<b>4 Sistemas Binarios</b>	<b>20</b>
<b>5 Método de solución vía redes de Bethe</b>	<b>23</b>
<b>6 Resultados</b>	<b>26</b>
6.1 Hubbard generalizado unidimensional . . . . .	26
6.2 Hubbard general unidimensional . . . . .	28
6.3 Hubbard generalizado en $d$ dimensiones . . . . .	29
<b>Conclusiones</b>	<b>36</b>

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

## *Agradecimientos*

Primeramente quiero agradecer a Manuel, Rosa María, Fabiola y a los güitos.  
En seguida a mi tía Azucena y al padre José.  
También al Dr. Oracio Navarro por su gran ayuda en la elaboración de la tesis.  
Después a la UNAM por haberme apoyado con la beca DGEF, al Instituto de Investigaciones en Materiales y al Instituto de Física.  
Mi agradecimiento también a la Dra. Marcela Regina Beltrán Sánchez, al Dr. Gerardo Jorge Vázquez Fonseca, al Dr. Rafael Baquero Parra y al Dr. Eleuterio Castaño Tostado por la revisión de la tesis y finalmente a Jaime.

*Esta tesis está dedicada especialmente a la memoria de la Tía Nena.*

Si tuviera la capacidad de reducir mi tamaño al equivalente de un átomo, creo firmemente que la teoría cuántica no me serviría de mucho para mejorar mi juego de billar.

E. Vallejo

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

# Resumen

El presente trabajo está enfocado a estudiar la correlación fermiónica local de electrones o huecos a través del modelo de Hubbard. La justificación del modelo es que posiblemente podría estar relacionado con el mecanismo de la superconductividad a alta temperatura crítica y con el todavía no explicable proceso de formación de pares. En particular se analiza la energía de amarre de dos partículas con espines opuestos y su condición de apareamiento (específicamente la condición para encontrar estados ligados y no ligados para diferentes parámetros como energías de sitio y salto).

Para obtener los resultados analíticos, se utilizó una representación del hamiltoniano en turno en un espacio de estados y después de haber realizado un análisis en este espacio se resolvió un hamiltoniano equivalente tipo enlace fuerte utilizando la técnica de la función de Green.

Se analizaron dos problemas unidimensionales, uno dentro del hamiltoniano de Hubbard generalizado y el otro en el hamiltoniano de Hubbard general, cuyos límites están en perfecto acuerdo con las soluciones encontradas previamente para el problema de Hubbard generalizado, además, es importante remarcar que estas soluciones son exactas dentro del modelo de Hubbard utilizado. En una segunda parte se resolvió el problema para  $d$  dimensiones dentro del hamiltoniano de Hubbard generalizado donde se propuso un método de solución a partir de redes de Bethe, cuyas soluciones unidimensionales son exactas y aproximadas para una dimensión mayor a uno.

# Introducción

El modelo de Hubbard en una dimensión es el prototipo de un modelo soluble exactamente para partículas fermiónicas, específicamente electrones o huecos en bandas angostas [1, 2], donde se encontró un estado base básicamente antiferromagnético y aislante para un potencial repulsivo. Otra solución exacta para el hamiltoniano de Hubbard es el caso de dimensión infinita [3]. Soluciones exactas usando particularmente el ansatz de Bethe han sido de gran utilidad para entender los sistemas fuertemente correlacionados. Sin embargo, las condiciones de integrabilidad usando el ansatz de Bethe son muy restrictivas y sólo pocos modelos realistas pueden ser resueltos con esta técnica [4], por ejemplo, es difícil incluir interacciones adicionales en el modelo de Hubbard de tal forma que el hamiltoniano resultante sea aun integrable.

El modelo de Hubbard [5] es el más simple usado con el fin de describir correlaciones en sistemas con bandas angostas y ha sido estudiado de forma importante. Sin embargo, aun cuando el modelo de Hubbard es conceptualmente muy simple, este modelo es muy difícil de resolver en general.

El modelo de Hubbard ha sido aplicado exitosamente para describir algunos de los nuevos fenómenos electrónicos donde la correlación electrónica es muy importante, ejemplo de ello es la transición metal-aislante [6], el magnetismo itinerante [7], la densidad de carga, la densidad de ondas de espín [8] y la formación local de pares, que juegan un papel significativo en la explicación de los superconductores de alta temperatura crítica [9, 10] y la superconductividad en sistemas fermiónicos pesados [11].

El modelo de Hubbard ha sido ampliamente estudiado usando diferentes aproximaciones. Una técnica comúnmente utilizada es la aproximación de campo medio, la cual ha sido utilizada para analizar diferentes problemas [9], dado que con esta técnica el problema de muchos cuerpos puede ser reducido a un problema de un cuerpo en un medio efectivo. Sin embargo, es bien conocido que la aproximación de campo medio no es suficiente para describir correlaciones electrónicas, debido a que las fluctuaciones no están incluidas. Otra técnica usada para el modelo de Hubbard es el formalismo de bosones esclavos [8, 12]. Sin embargo, dado que en este formalismo el espacio de Hilbert de estados fermiónicos es reemplazado por un espacio más grande de estados fermiónicos y bosónicos, es necesario usar aproximaciones. Por

otro lado, las técnicas de Monte Carlo [13] incorporan un marco natural para cálculos numéricos en modelos con fuerte interacción fermiónica, pero esas técnicas han sido usadas sólo para pequeños grupos de partículas. El método de renormalización [14] ha sido estudiado para sistemas muy grandes. Este método consiste en construir iterativamente un estado base variacional dividiendo el sistema en pequeñas celdas. Dado que en cada paso sólo los estados de menor energía son tomados en cuenta, algunas veces los resultados están lejos de la solución exacta. Finalmente, el método de diagonalización es el más deseable. Sin embargo, este método es aplicable sólo a pequeños sistemas ya que la dimensión de la matriz del hamiltoniano se incrementa muy rápidamente con el número de sitios y de partículas [15].

El límite diluido dentro del modelo de Hubbard ha sido estudiado anteriormente por métodos analíticos y numéricos [9, 16, 17], incluyendo diferentes clases de desorden [18, 19, 20] y también interacciones de densidad de carga [21, 22, 23, 24].

En el presente trabajo me dirigiré al límite de baja densidad, primeramente dos partículas en una red unidimensional para después terminar con el problema de  $d$  dimensiones. Este trabajo está organizado de tal forma que al principio se da la información básica necesaria para entender los procedimientos utilizados en los resultados, como una introducción acerca del sistema de partículas utilizados, pasando por la descripción del hamiltoniano a utilizar y por la descripción formal de la herramienta matemática, a saber la técnica de la función de Green. Después se propondrá el método utilizado para abordar el problema en  $d$  dimensiones, para concluir con los resultados y conclusiones.

# Capítulo 1

## Generalidades

### 1.1 Sistemas de Partículas

Se puede estudiar un sistema cuántico de partículas a través de un hamiltoniano como:

$$H = H^{(1)} + H^{(n)}, \quad (1.1)$$

donde por comodidad se separa explícitamente la parte del hamiltoniano que afecta a un solo cuerpo  $H^{(1)}$ , dejando para  $H^{(n)}$  toda la información respectiva a la intervención de dos o más partículas. Tomando en cuenta todas las partículas y utilizando la representación de coordenadas, los hamiltonianos respectivos para uno y muchos cuerpos toman la forma:

$$H^{(1)} = \sum_i H_i(\mathbf{r}_i) = \sum_i \left( -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V^e(\mathbf{r}_i) \right), \quad (1.2)$$

$$H^{(n)} = V(\mathbf{r}_i) = \sum_{(m) > 1} \sum_{i > j > \dots > m} V_{ij\dots m}^{(m)}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_m). \quad (1.3)$$

El hamiltoniano (1.2) toma en cuenta, como se puede observar, un potencial externo  $V^e(\mathbf{r}_i)$  que se aplica a la partícula  $i$  y depende únicamente de su posición, en cambio (1.3) se debe entender como la suma de todos los potenciales que resultan de las interacciones internas que toman en cuenta desde dos hasta  $m$  partículas. Los subíndices de  $V_{ij\dots m}^{(m)}$ ,  $ij\dots m$  se refieren a considerar tantos índices como cuerpos ( $m$ ) intervengan.

Como se sabe, el comportamiento dinámico de los valores esperados es:

$$i\hbar \frac{d\langle A \rangle}{dt} = \langle [A, H] \rangle, \quad (1.4)$$

por lo que si un operador conmuta con el hamiltoniano, tendrá un valor esperado constante y por lo tanto será una integral de movimiento, por otro lado si tenemos

un sistema cerrado en el sentido de no considerar campos externos, el momento total se conservará y por lo tanto tomando  $A = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2$ , se tendrá de (1.1):

$$[A, H] = [A, A + H^{(n)}] = [A, H^{(n)}] = 0, \quad (1.5)$$

por lo tanto se puede considerar a  $V(\mathbf{r}_i)$  como dependiente de las coordenadas internas relativas.

Si ahora se considera un sistema donde las partículas son iguales, debido a que el potencial de interacción interna depende de las coordenadas relativas se tendrá:

$$[P_{ij}, H] = 0, \quad (1.6)$$

donde  $P_{ij}$  es el operador que intercambia las partículas  $i, j$ . La consecuencia inmediata de lo anterior es que se pueden construir estados propios (eigenestados) y funciones propias (eigenfunciones) simultáneos de  $P_{ij}$  y  $H$ , donde las eigenfunciones de  $P_{ij}$  son simétricas o antisimétricas con respecto a las partículas  $i, j$ . También se puede observar de (1.4) y (1.6), que el valor esperado del operador de intercambio será una integral de movimiento y entonces se conservará la simetrización de la función de onda a todo tiempo.

En general, las soluciones de la ecuación de Schrödinger para un sistema de partículas iguales no tienen necesariamente simetría bien definida respecto al intercambio de cada pareja de partículas iguales, sin embargo, no es difícil construir funciones de onda totalmente simetrizadas (simétricas  $S$  o antisimétricas  $A$ ) a partir de funciones de onda degeneradas como:

$$\Psi^S = A \sum_P P \Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N), \quad (1.7)$$

$$\Psi^A = A \sum_P (-1)^{r_P} P \Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N). \quad (1.8)$$

Aquí, la suma se realizará sobre todas las posibles permutaciones de parejas de partículas iguales. En las expresiones anteriores  $A$  es una constante de normalización,  $P$  es el operador de paridad,  $r_P$  es el número de parejas de partículas que deben intercambiarse para lograr la permutación  $P$  y  $\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$  son las funciones de onda degeneradas cuyo argumento toma en cuenta tanto las variables espaciales como espinoriales,  $\xi_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ . La razón primordial para construir funciones simetrizadas es que en la naturaleza, sólo se encuentran las totalmente simetrizadas. Este hecho empírico fundamental tiene su reflejo en el tipo de partículas que se considere, es decir, funciones de onda simétricas corresponderán a partículas con espín entero (bosones), entre los cuales tenemos a los piones de espín cero, los fotones de espín uno, etc. Y las partículas con espín semientero (fermiones) asociadas a funciones de onda antisimétricas como por ejemplo los electrones, protones y neutrones con espín  $\frac{1}{2}$  [25].

## 1.2 Formalismo de segunda cuantización

Otra representación de la función de onda además de la espacial y momental es la de segunda cuantización. Asimismo, en la representación de segunda cuantización se involucran reglas de conmutación y anticonmutación que contienen información sobre las propiedades de simetría del sistema.

### 1.2.1 Bosones

Si se considera una partícula en un potencial de oscilador armónico unidimensional se tiene el hamiltoniano:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (1.9)$$

donde  $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ . Realizando el cambio de variable  $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi$ , se obtiene de la ecuación anterior:

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega (p_\xi^2 + \xi^2) \quad (1.10)$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + ip_\xi) \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - ip_\xi) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - ip_\xi) \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + ip_\xi) \right] \quad (1.11)$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega (aa^+ + a^+a), \quad (1.12)$$

donde  $p_\xi = -i\partial_\xi = -i\frac{\partial}{\partial \xi}$  y se han definido además los operadores  $a$  y  $a^+$  como:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + ip_\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + \partial_\xi), \quad (1.13)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - ip_\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \partial_\xi). \quad (1.14)$$

Utilizando el conmutador

$$[p_x, x] = \hbar [p_\xi, \xi] = -i\hbar, \quad (1.15)$$

se deducen de las ecuaciones (1.13) y (1.14) las relaciones de conmutación respectivas para los operadores  $a$  y  $a^+$  como:

$$[a, a^+] = 1, \quad (1.16)$$

$$[a, a] = [a^+, a^+] = 0. \quad (1.17)$$

Si se toma en cuenta el conmutador anterior distinto de cero, el hamiltoniano dado en la ecuación (1.12) finalmente se puede escribir como:

$$H = \hbar\omega \left( a^+a + \frac{1}{2} \right). \quad (1.18)$$

A partir de la ecuación (1.18), se pueden encontrar los siguientes conmutadores:

$$[a^+ a, H] = [a a^+, H] = [a a^+, a^+ a] = 0, \quad (1.19)$$

$$[a, H] = \hbar\omega a, \quad (1.20)$$

$$[H, a^+] = \hbar\omega a^+, \quad (1.21)$$

es decir, se pueden encontrar estados comunes para los operadores  $H, a a^+$  y  $a^+ a$ , con valores bien definidos; para este fin, considérese un conjunto ortonormal  $\{|n\rangle\}$  tal que:

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (1.22)$$

$$a^+ a |n\rangle = n |n\rangle, \quad (1.23)$$

$$a a^+ |n\rangle = f |n\rangle, \quad (1.24)$$

aplicando el respectivo bra  $\langle n|$  del lado izquierdo a las ecuaciones (1.23) y (1.24) y restándolas se obtiene con la ecuación (1.16)  $f = n + 1$ , es decir una relación entre los respectivos eigenvalores.

Se puede encontrar también una relación entre los eigenvalores de  $H$  y  $a^+ a$  o  $a a^+$  de la siguiente manera:

$$E_n = \langle n| H |n\rangle = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.25)$$

Si se expresan además los operadores  $a$  y  $a^+$  en la forma general:

$$a |n\rangle = \sum_p b_p |p\rangle, \quad (1.26)$$

$$a^+ |n\rangle = \sum_q d_q |q\rangle \quad (1.27)$$

y considerando los conmutadores (1.20) y (1.21) de tal forma que:

$$\hbar\omega \langle m| a |n\rangle = \langle m| [a, H] |n\rangle = \hbar\omega(n - m) \langle m| a |n\rangle, \quad (1.28)$$

$$(n - (m + 1)) \langle m| a |n\rangle = 0, \quad (1.29)$$

$$\langle m| a |n\rangle = C_m \delta_{n, m+1}, \quad (1.30)$$

$$\hbar\omega \langle m| a^+ |n\rangle = \langle m| [H, a^+] |n\rangle = \hbar\omega(m - n) \langle m| a^+ |n\rangle, \quad (1.31)$$

$$(m - (n + 1)) \langle m| a^+ |n\rangle = 0, \quad (1.32)$$

$$\langle m| a^+ |n\rangle = C_n^* \delta_{m, n+1}, \quad (1.33)$$

se encuentran relaciones específicas para los operadores  $a$  y  $a^+$  como:

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n - 1\rangle, \quad (1.34)$$

$$a^+ |n\rangle = \sqrt{n + 1} |n + 1\rangle. \quad (1.35)$$

A partir de las ecuaciones anteriores se pueden interpretar los operadores  $a$  y  $a^+$ , como de aniquilación  $a$  y creación  $a^+$  debido a su efecto sobre los estados en los cuales se aplican. Además, se puede obtener cualquier otro estado a partir del estado vacío  $|0\rangle$  como:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n |0\rangle. \quad (1.36)$$

El desarrollo para muchos bosones se encuentra extendiendo los resultados anteriores. Por ejemplo, el hamiltoniano (1.18) y las reglas de conmutación (1.16) y (1.17) toman la forma:

$$H = \sum_k \hbar\omega_k \left( a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right), \quad (1.37)$$

$$[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{k,k'}, \quad (1.38)$$

$$[a_k, a_{k'}] = [a_k^+, a_{k'}^+] = 0. \quad (1.39)$$

### 1.2.2 Fermiones

El desarrollo para fermiones es muy similar al realizado para bosones, la única diferencia importante aquí es tomar en cuenta que la función de onda es antisimétrica y los estados de ocupación de fermiones se limitan al estado vacío o al estado de un fermión, con esto en mente, obsérvese la ecuación (1.23) aplicada al estado  $i$  de fermión, con los respectivos operadores para fermiones  $c$  y  $c^+$ :

$$c_i^+ c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (1.40)$$

Aquí los estados  $n_k$  en general pueden estar vacíos o tener un fermión, este operador  $c_i^+ c_i$  como también el análogo para bosones  $a_i^+ a_i$  recibe el nombre de operador de número. Debido a la restricción de ocupación por estado, se tienen las siguientes relaciones importantes de las ecuaciones (1.34) y (1.35):

$$c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \propto n_i |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle = (-1)^{\sum_i (n_i)} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle, \quad (1.41)$$

$$c_i^+ |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \propto (1 - n_i) |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle = (-1)^{\sum_i (1 - n_i)} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \quad (1.42)$$

donde  $(-1)^{\sum_i} = (-1)^{[n_1 + n_2 + \dots + n_{i-1}]}$  [26]. En seguida aplíquese el operador de aniquilación de fermiones al estado  $j$  y el de creación al estado  $i$ , tomando en cuenta las ecuaciones anteriores se tiene:

$$c_i^+ c_j |n_1, \dots, 0_i, 1_j, \dots\rangle \propto |n_1, \dots, 1_i, 0_j, \dots\rangle = |n_1, \dots, 1_i, 0_j, \dots\rangle, \quad (1.43)$$

$$c_j c_i^+ |n_1, \dots, 0_i, 1_j, \dots\rangle \propto |n_1, \dots, 1_i, 0_j, \dots\rangle = - |n_1, \dots, 1_i, 0_j, \dots\rangle. \quad (1.44)$$

Asimismo de (1.40), (1.41), (1.42) y las ecuaciones anteriores se pueden encontrar en general las reglas de anticonmutación de fermiones como:

$$\{c_{i,\sigma}^+, c_{j,\sigma'}\} = c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma'} + c_{j,\sigma'} c_{i,\sigma}^+ = \delta_{ij} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (1.45)$$

$$\{c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma'}\} = \{c_{i,\sigma}^+, c_{j,\sigma'}^+\} = 0. \quad (1.46)$$

En forma similar a la ecuación (1.37), un hamiltoniano con operadores de uno y dos cuerpos en segunda cuantización se puede escribir de la siguiente forma [26]:

$$H = \sum_{k,l} \sum_{\sigma} U_{kl}^{\sigma} c_{k,\sigma}^+ c_{l,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} V_{klmn}^{\sigma,\sigma'} c_{k,\sigma}^+ c_{l,\sigma'}^+ c_{n,\sigma'} c_{m,\sigma}, \quad (1.47)$$

donde se ha incorporado explícitamente el espín  $\sigma, \sigma' = \uparrow$  o  $\downarrow$ .

# Capítulo 2

## Modelo de Hubbard

### 2.1 Hamiltoniano de Hubbard

Si se considera un hamiltoniano como el de la ecuación (1.1), que incorpore operadores tanto de uno como de dos cuerpos, es decir :

$$H = H^{(1)} + H^{(2)}, \quad (2.1)$$

en la representación de las funciones de Wannier, el hamiltoniano escrito dentro del formalismo de números de ocupación tomará la siguiente forma general:

$$H = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij}^{\sigma} f_{i,\sigma}^{+} f_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl}^{\sigma,\sigma'} f_{i,\sigma}^{+} f_{j,\sigma'}^{+} f_{l,\sigma'} f_{k,\sigma}. \quad (2.2)$$

Aquí  $f_{i,\sigma}^{+}$  ( $f_{i,\sigma}$ ) representa los operadores de creación y aniquilación de partículas (en general  $f$  puede referirse a fermiones, huecos o electrones), con espín  $\sigma, \sigma' = \uparrow$  o  $\downarrow$  en el sitio  $i$ ,  $t_{ij}^{\sigma}$  es un parámetro de transferencia entre sitios  $i, j$  y  $V_{ijkl}^{\sigma,\sigma'}$  nos da la interacción general entre dos partículas. Éste es el hamiltoniano general de Hubbard, modelo propuesto con la finalidad de investigar interacciones entre electrones en bandas de energía angostas, donde dicho modelo toma en cuenta la naturaleza atómica del sólido y por facilidad considera un sólido con una sola banda s [5].

En el presente trabajo se considerará la siguiente simplificación del hamiltoniano general de Hubbard dado en la ecuación (2.2):

$$V_{ijkl}^{\sigma,\sigma'} = \begin{cases} E_{|i-j|} & \text{para } k = i \text{ y } l = j \\ \Delta t_m & \text{para } j = l, \langle i, l \rangle_m \text{ o } \langle l, k \rangle_m \text{ y } \langle i, k \rangle, \end{cases} \quad (2.3)$$

$$t_{i,j}^{\sigma} = \begin{cases} t & \text{para } \langle i, j \rangle \\ 0 & \text{para otro caso.} \end{cases} \quad (2.4)$$

En las consideraciones anteriores se ha tomado el caso específico de dos partículas con espines opuestos  $\sigma' = -\sigma$ , donde  $\langle i, j \rangle_m$  se refiere a  $m$  vecinos cercanos, por ejemplo  $m = 0$  implicaría  $i = j$ ,  $m = 1$  implicaría primeros vecinos y se ha definido  $\langle i, k \rangle = \langle i, k \rangle_1$  etc. En general  $E_{|i-j|}$  representa la interacción de dos partículas a  $|i-j|$  sitios vecinos y  $\Delta t_m$  es un parámetro de salto de acuerdo a una densidad de carga. En un enfoque típicamente basado en fuerzas de Coulomb, no todos los parámetros de interacción entre las dos partículas contribuirán de forma semejante, por lo que los parámetros cercanos a la interacción en el mismo sitio serán los que tendrán la mayor contribución, como lo sugirió Hubbard [5]. Con las restricciones anteriores, el hamiltoniano (2.2) toma la forma:

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} f_{i,\sigma}^+ f_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} E_{|i-j|} n_i^f n_j^f + \Delta t_m \sum_{\langle i,k \rangle, l; \langle i,l \rangle_m \text{ o } \langle l,k \rangle_m} \sum_{\sigma} f_{i,\sigma}^+ f_{k,\sigma} n_{l,-\sigma}^f. \quad (2.5)$$

Considerando  $E_0 = U$ ,  $E_1 = V$ ,  $E_m = 0$  para  $m \geq 2$  y sólo el parámetro de salto  $\Delta t_m = \Delta t_0$ , es fácil darse cuenta que el hamiltoniano (2.5) toma la forma del hamiltoniano generalizado de Hubbard [21, 28]:

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} f_{i,\sigma}^+ f_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow}^f n_{i,\downarrow}^f + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^f n_j^f + \Delta t_0 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} f_{i,\sigma}^+ f_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma}^f + n_{j,-\sigma}^f), \quad (2.6)$$

donde  $n_{i,\sigma}^f = f_{i,\sigma}^+ f_{i,\sigma}$  y  $n_i^f = n_{i,\uparrow}^f + n_{i,\downarrow}^f$ . Específicamente para electrones se tiene  $f = c$ ,  $t = t^e$ ,  $n_{i,\sigma}^c = n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}$  y  $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$ , entonces el hamiltoniano anterior tomará la forma:

$$H = t^e \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + \Delta t_0 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma} + n_{j,-\sigma}), \quad (2.7)$$

haciendo  $\Delta t_0 = 0$  en (2.7) se obtiene el hamiltoniano de Hubbard extendido [16]. Si consideramos además de  $\Delta t_0 = 0$ ,  $V = 0$  se encuentra el hamiltoniano de Hubbard original [5].

La solución del hamiltoniano (2.5) no es fácil, se ha encontrado solución exacta para el caso de una dimensión y para sistemas de pocas partículas. La solución de este último caso en principio puede obtenerse tanto en el espacio real como en el espacio recíproco. En el presente trabajo se abordará la solución en el espacio real realizando una generalización al método del mapeo, misma que a continuación se describe.

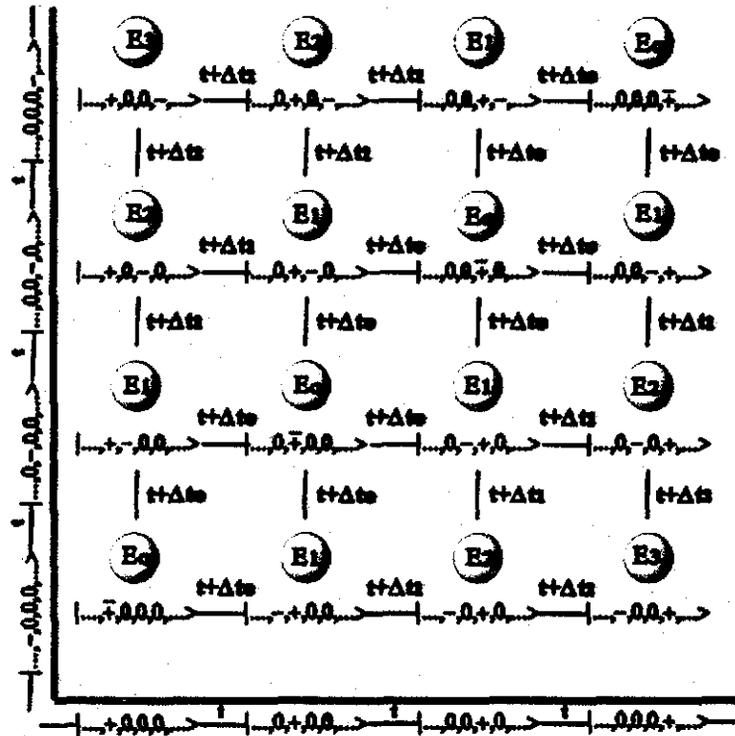


Figura 2.1: Construcción del espacio de estados del hamiltoniano de Hubbard general unidimensional para dos partículas con espines opuestos.

## 2.2 Generalización del método del mapeo.

El hamiltoniano en espacio real dado en la ecuación (2.2), tiene una representación matricial o geométrica que puede ser visualizada en un espacio de  $nd$  dimensiones, siendo  $n$  el número de partículas y  $d$  la dimensión del espacio donde se encuentran las partículas, este espacio puede ser interpretado como un mapeo del problema correlacionado de muchos cuerpos sobre un problema equivalente de enlace fuerte con impurezas de sitio y enlace. Para encontrar el espacio geométrico de estados, considérense dos partículas fermiónicas con espines opuestos denotados por  $+$  y  $-$  en una cadena unidimensional bajo las restricciones al hamiltoniano dadas por (2.3) y (2.4). El espacio de estados será de dos dimensiones y parte de él se construye como sigue.

Considérense por simplicidad una cadena unidimensional de 4 sitios, enseguida colóquense dos ejes perpendiculares y en cada uno ponga explícitamente el movimiento de una partícula independientemente de la otra, como hay 4 sitios cada partícula podrá moverse a 4 lugares de la red y se tendrán entonces 4 estados

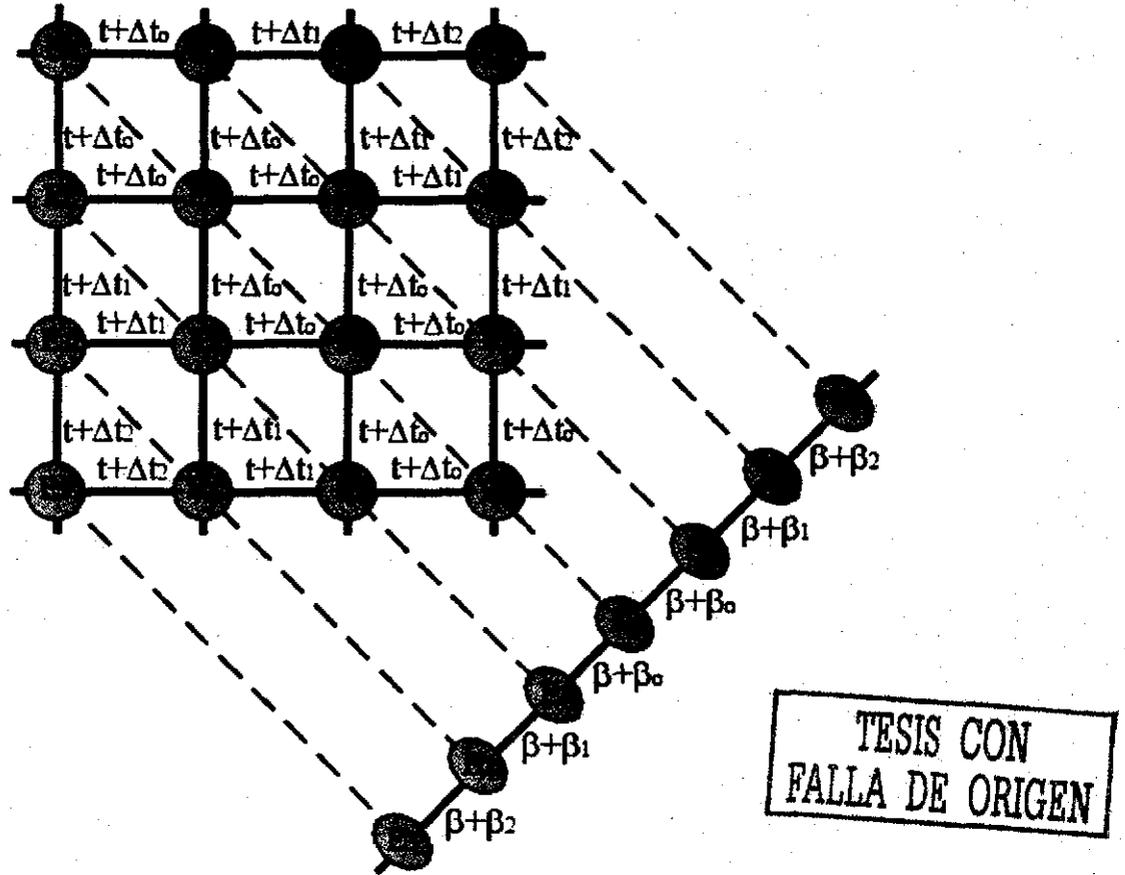


Figura 2.2: Representación de estados del hamiltoniano de Hubbard general unidimensional para dos partículas con espines opuestos, se indica también la proyección sobre un espacio unidimensional y sus parámetros de salto  $\beta = 2t \cos \frac{Ka}{\sqrt{2}}$ ,  $\beta_i = 2\Delta t_i \cos \frac{Ka}{\sqrt{2}}$ .

conectados con el parámetro  $t$  para cada partícula, como se observa en la figura 2.1. El espacio de estados a estudiar será entonces la combinación de los movimientos independientes de las dos partículas, donde ahora cada estado combinado tendrá asociado un parámetro  $E_m$  y  $\Delta t_m$  referidos a la interacción de dos partículas en sitio y al salto de una partícula en presencia de la otra respectivamente. La representación geométrica de estados completa se puede apreciar en la figura 2.2, después de una rotación de  $90^\circ$  sobre la línea o eje donde tenemos los parámetros  $E_0$ . Esta configuración bidimensional final puede ser estudiada bajo un hamiltoniano de enlace fuerte o tight-binding [16, 26].

## 2.3 Modelo de enlace fuerte

El hamiltoniano de enlace fuerte tiene la forma:

$$H = \sum_i |i\rangle \epsilon_i \langle i| + \sum_{i,j} |i\rangle T_{ij} \langle j|, \quad (2.8)$$

donde  $|i\rangle$  es un estado tipo orbital centrado en el sitio  $i$  y el conjunto de sitios  $\{i\}$  forman la red,  $\epsilon_i$  representa la energía del estado  $i$  y  $T_{ij}$  es la transición entre los estados  $i, j$ . En la aproximación de enlace fuerte se considera que la energía potencial de la partícula fermiónica lleva casi toda la energía, por lo que las bandas energéticas permitidas serán más angostas en comparación con las bandas prohibidas. También en este tipo de aproximación se considera que los átomos del cristal están tan separados que la función de onda de las partículas asociadas con átomos vecinos se superponen en menor grado, así la interacción entre átomos cercanos será relativamente débil y las funciones de onda y los niveles de energía permisibles de todo el cristal estarán relacionados con las de los átomos aislados [27]. En lo siguiente se tomará el parámetro de salto como una constante,  $T_{ij} = t$  y solamente se considerarán primeros vecinos. En principio todo el trabajo siguiente será estudiado bajo esta aproximación que está de acuerdo con las ideas originales de Hubbard.

Como se observa en la figura 2.2, hay una simetría traslacional a lo largo de las diagonales del cuadrado que puede ser aprovechada, con este fin resolvamos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (2.9)$$

Proponiendo como solución [29]:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{ik \cdot l} |l\rangle, \quad (2.10)$$

se obtiene la energía:

$$E(k) = \epsilon_0 + t \sum_l e^{ik \cdot l}, \quad (2.11)$$

donde se ha tomado  $\epsilon_i = \epsilon_0$  para todo  $i$ ,  $H$  está dado por la ecuación (2.8), la sumatoria de  $l$  en la ecuación (2.11) se realiza sobre los sitios a primeros vecinos del origen y  $N$  se refiere al número de átomos en la red. En este caso la propagación de la onda se realiza con el vector de onda  $k$ . Con todas estas consideraciones, es sencillo encontrar las energías de acuerdo a la dimensionalidad  $d$  de la red hipercúbica a partir de la ecuación (2.11) como:

$$E = \epsilon_0 + 2t \sum_{i=1}^d \cos(k_i a), \quad (2.12)$$

siendo  $k_i$  el vector de onda en la dirección  $i$  y  $a$  es la constante de la red.

A partir de la ecuación (2.12) se puede encontrar una condición para el ancho de la banda de energía, es decir si:

$$\left| \sum_{i=1}^d \cos(k_i a) \right| \leq d, \quad (2.13)$$

entonces multiplicando la ecuación anterior por  $2|t|$  se obtiene:

$$|E - \epsilon_0| \leq 2d|t|. \quad (2.14)$$

El número de primeros vecinos  $z$  de la red se encuentra fácilmente de la relación  $z = 2d$ .

## 2.4 Método de proyección

Ya que la solución propuesta en (2.10) es general, se puede utilizar como el estado dado por elipses en la figura 2.2, en este caso el vector de proyección será  $K$  en la dirección mostrada por las líneas semicontinuas, el siguiente paso será obtener su estado energético y el parámetro de salto entre dos estados. Por ejemplo para cualquier línea con energía  $E_i$  se tiene el estado energético:

$$|K_{E_i}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{iK \cdot l} |l\rangle, \quad (2.15)$$

$$E_{E_i} \equiv \langle K_{E_i} | H | K_{E_i} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{l,m} e^{iK \cdot (l-m)} \epsilon_l \delta_{l,m} \quad (2.16)$$

$$+ \frac{t}{N} \sum_{\langle i,l \rangle, m} e^{iK \cdot (l-m)} \delta_{i,m}$$

$$E_{E_i} = E_i. \quad (2.17)$$

Aquí  $|K_{E_i}\rangle$  es el estado obtenido de la línea de estados con energía  $E_i$ , figura 2.2. Es importante remarcar que en la figura 2.2 se presenta el parámetro de salto  $t + \Delta t$ ; en lugar del  $t$  ocupado para el método de proyección, esto no limita en nada las conclusiones ya que lo único que hay que hacer es una redefinición del parámetro de salto. Las sumatorias anteriores se realizan sobre todos los átomos en la línea y  $H$  está dado por (2.8). De (2.16) se observa que el término que contiene  $t$  desaparece debido a que en este caso las sumatorias corren en la misma fila por lo que ningún estado será primer vecino a otro (recordar las restricciones sobre  $t$ ). El parámetro

de salto será:

$$\beta_{i,j} = \langle K_{E_i} | H | K_{E_j} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{l,n} e^{iK \cdot (l-n)} \epsilon_l \delta_{l,n} \quad (2.18)$$

$$+ \frac{t}{N} \sum_{(l,n)} e^{iK \cdot (l-n)}, l \neq n$$

$$\beta_{i,j} \equiv \beta = \frac{t}{N} \sum_{(l,n)} e^{iK \cdot (l-n)} = 2t \cos \left( \frac{Ka}{\sqrt{2}} \right), \quad (2.19)$$

entonces proyectando el espacio bidimensional, se obtiene la red lineal de estados efectivos como los dados en la figura 2.2, donde  $\beta = 2t \cos \frac{Ka}{\sqrt{2}}$  y  $\beta_i = 2\Delta t_i \cos \frac{K_i a}{\sqrt{2}}$  [26, 28]. Para el caso de dos partículas en  $d$  dimensiones, tendremos un espacio de estados en un hipercubo de  $2d$  dimensiones, al cual se le puede proyectar bajo las simetrías de traslación respectivas a un espacio de  $d$  dimensiones con parámetros de salto dados en general por  $\beta_j = 2t \cos (fK_j a)$ , donde  $f$  es una constante que depende de la geometría del hipercubo de  $2d$  dimensiones y  $K_j$  es el vector de propagación en la dirección general  $j$ . Para el estado base (donde  $K_j = 0$ ), se obtiene en general que  $\beta_j = 2t$ .

## Capítulo 3

# Funciones de Green independientes del tiempo

Para introducir las funciones de Green independientes del tiempo es útil trabajar en un espacio vectorial abstracto como el propuesto por Dirac, la utilidad de trabajar en este espacio es la facilidad de obtener e intercambiar las representaciones de coordenadas y momenta.

Considérese a continuación la siguiente ecuación en ese espacio [29]:

$$(z - L)G = 1, \quad (3.1)$$

donde  $z$  es en general una variable compleja,  $L$  es un operador hermitiano, linear e independiente del tiempo y  $G$  es el operador de Green. Esta ecuación toma la respectiva forma en la representación de coordenadas como:

$$\langle r | (z - L)G | r' \rangle = \langle r | r' \rangle \quad (3.2)$$

$$(z - L(r))G(r, r') = \delta(r - r'), \quad (3.3)$$

a partir de la ecuación (3.3), las funciones de Green pueden ser definidas como soluciones de ecuaciones diferenciales inhomogéneas. Además, considérese un conjunto completo ortonormal de kets  $\{|n\rangle\}$  que satisface:

$$L|n\rangle = \lambda_n|n\rangle; \quad \{\lambda_n\} \in \text{Re} \quad (3.4)$$

si todos los eigenvalores de  $z - L$  son diferentes de cero, uno puede tomar de (3.1):

$$G = \frac{1}{z - L} \quad (3.5)$$

y utilizando la propiedad de completéz de los eigenvectores de  $L$  se obtiene para la ecuación (3.5):

$$G = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{z - \lambda_n} + \int dn \frac{|n\rangle\langle n|}{z - \lambda_n} = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{z - \lambda_n}, \quad (3.6)$$

donde para obtener la ecuación (3.6), se utilizó tanto el carácter continuo como el discreto de los eigenvectores  $|n\rangle$ , además se utilizó la expansión de potencias  $\sum x^n = \frac{1}{1-x}$  para el operador  $L$ . La sumatoria ( $\prime$ ) entonces se realiza sobre los eigenvectores pertenecientes al espectro discreto y la integral sobre el continuo. Ya que esta ecuación se encuentra en un espacio abstracto, la podemos utilizar para obtener su respectiva representación de coordenadas como:

$$G(r, r') = \sum_n' \frac{\phi_n(r)\phi_n^*(r')}{z - \lambda_n} + \int dn \frac{\phi_n(r)\phi_n^*(r')}{z - \lambda_n}, \quad (3.7)$$

donde se ha utilizado la notación  $\langle r|n\rangle = \phi_n(r)$  y  $\langle n|r'\rangle = \phi_n^*(r')$ . De las ecuaciones anteriores se puede deducir que si la parte imaginaria de  $z$  es distinta de cero, entonces la función de Green será analítica en el plano complejo  $z$  excepto en esos puntos del eje  $z$  real que corresponden a los eigenvalores de  $L$ .  $G$  entonces tienen polos simples en las posiciones de los eigenvalores discretos de  $L$  y lo inverso es también cierto, es decir, los polos de  $G$  dan los eigenvalores discretos de  $L$  [29]. En el caso  $z = \lambda$ , ( $\lambda = \text{Re}(z)$ ) donde  $\lambda$  pertenece al espectro continuo de  $L$ ,  $G$  no está bien definida y se puede encontrar mediante un proceso de límite definiendo:

$$G^\pm(r, r'; \lambda) = \lim_{\text{Im}(z) \rightarrow 0^+} G(r, r'; \lambda \pm i \text{Im}(z)). \quad (3.8)$$

Utilizando la identidad  $\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x)$  (donde  $P\left(\frac{1}{x}\right)$  es la parte principal de  $\frac{1}{x}$  igual a cero para  $x = 0$  e igual a  $\frac{1}{x}$  para  $x \neq 0$ ) y la ecuación (3.7) se puede expresar la discontinuidad:

$$\check{G}(\lambda) = G^+(\lambda) - G^-(\lambda) \quad (3.9)$$

como [29]:

$$\begin{aligned} \check{G}(r, r'; \lambda) &= -2\pi i \sum_n' \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r') \\ &\quad - 2\pi i \int dn \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r'). \end{aligned} \quad (3.10)$$

De la ecuación (3.7) con la definición de suma completa dada en (3.6) y con la identidad anterior se pueden encontrar los elementos diagonales de matriz como:

$$G^\pm(r, r; \lambda) = P \sum_n \frac{\phi_n(r)\phi_n^*(r)}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r)\phi_n^*(r). \quad (3.11)$$

Integrando la ecuación anterior sobre  $r$  y teniendo en mente la propiedad ortonormal de las eigenfunciones de  $L$  se encuentra:

$$\text{Tr} G^\pm(\lambda) = P \sum_n \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n), \quad (3.12)$$

donde  $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$  es la densidad de estados en  $\lambda$  y la densidad de estados por unidad de volumen es definida como:

$$\rho(r; \lambda) \equiv \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r). \quad (3.13)$$

Utilizando la ecuación (3.11) se obtiene:

$$\rho(r; \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} G^\pm(r, r; \lambda). \quad (3.14)$$

La teoría desarrollada anteriormente puede aplicarse directamente a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula, realizando las sustituciones  $L \rightarrow H$ ,  $\lambda \rightarrow E$ , donde  $H$  es el hamiltoniano:

$$(E - H(r)) \psi(r) = 0. \quad (3.15)$$

La función de Green respectiva será utilizando (3.3):

$$(E - H(r)) G(r, r'; E) = \delta(r - r'). \quad (3.16)$$

Aquí la función de Green satisface las mismas condiciones de frontera que la función  $\psi(r)$ . Aplicando las sustituciones en las ecuaciones anteriores, se pueden encontrar algunas características importantes de las funciones de Green:

(1) La posición de los polos de la función de Green coincide con las eigenenergías del hamiltoniano  $H$  y viceversa.

(2) El residuo en cada polo  $E_n$  de  $G(r, r'; z)$  es igual a  $\sum_i \phi_i(r) \phi_i^*(r')$  donde la sumatoria se aplica sobre los eigenestados degenerados  $f_n$  correspondiendo a la eigenenergía discreta  $E_n$ .

(3) La degeneración  $f_n$  puede ser encontrada como  $f_n = \int dr \text{Re} s \{G(r, r; E_n)\} = \text{Tr} \{\text{Re} s \{G(E_n)\}\}$ , para un eigenestado no degenerado  $f_n = 1$  y entonces:

$\phi_n(r) \phi_n^*(r') = \text{Re} s \{G(r, r'; E_n)\}$ , de donde se deduce  $|\phi_n(r)| = (\text{Re} s \{G(r, r; E_n)\})^{\frac{1}{2}}$ .

(4) Los cortes de  $G(z)$  sobre el eje  $z$  real coincide con el espectro continuo de  $H$  y viceversa.

(5) La densidad de estados por unidad de volumen es  $\rho(r; E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} G^\pm(r, r; E)$ .

(6) Y la densidad de estados es  $N(E) = \int dr \rho(r; E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Tr} \{\text{Im} G^\pm(E)\}$  [29, 30, 31].

### 3.1 Teoría de perturbaciones y funciones de Green

Considérese el hamiltoniano de una partícula  $H$  de la siguiente forma:

$$H = H_0 + H_1, \quad (3.17)$$

formado de una parte  $H_0$ , asociado a un operador de Green  $G_0$ , cuyos eigenvalores y eigenvectores pueden ser obtenidos de forma sencilla, además de  $H_1$  que será considerado como una perturbación. A partir de las ecuaciones (3.5) y (3.17), se puede expresar el operador de Green para  $H$  como:

$$G = \frac{G_0}{1 - G_0 H_1}. \quad (3.18)$$

Utilizando la expansión  $\sum x^n = \frac{1}{1-x}$  es sencillo demostrar la forma cerrada del operador de Green como:

$$G = G_0 + G_0 H_1 G = G_0 + G H_1 G_0. \quad (3.19)$$

A partir de la ecuación anterior se pueden obtener sus respectivas representaciones de coordenadas y de momenta como:

$$\langle r | G | r' \rangle = \langle r | G_0 | r' \rangle + \langle r | G_0 \left( \int dr_1 |r_1\rangle \langle r_1| \right) H_1 \left( \int dr_2 |r_2\rangle \langle r_2| \right) G | r' \rangle. \quad (3.20)$$

$$G(r, r') = G_0(r, r') + \int dr_1 \int dr_2 G_0(r, r_1) H_1(r_1, r_2) G(r_2, r'), \quad (3.21)$$

suponiendo además  $H_1(r_1, r_2) = \delta(r_1 - r_2)V(r_1)$  se tiene:

$$G(r, r') = G_0(r, r') + \int dr_1 G_0(r, r_1) V(r_1) G(r_1, r'). \quad (3.22)$$

Por lo que la función de Green satisface una ecuación integral inhomogénea en la representación de coordenadas. Y para el caso de la representación momental se tiene:

$$\langle k | G | k' \rangle = \langle k | G_0 | k' \rangle + \langle k | G_0 \left( \sum_{k_1} |k_1\rangle \langle k_1| \right) H_1 \left( \sum_{k_2} |k_2\rangle \langle k_2| \right) G | k' \rangle \quad (3.23)$$

$$G(k, k') = G_0(k, k') + \sum_{k_1 k_2} G_0(k, k_1) H_1(k_1, k_2) G(k_2, k'). \quad (3.24)$$

Tomando en cuenta la transformación  $\langle r | k \rangle = \frac{1}{l^{\frac{d}{2}}} e^{ik \cdot r}$  donde  $l^d$  representa una longitud en un espacio de  $d$  dimensiones, es fácil comprobar que (3.24) es la transformada de Fourier de (3.21).

En lo siguiente defínase un operador importante en teoría de dispersión como:

$$T = H_1 G(z - H_0), \quad (3.25)$$

válido para cuando  $z \neq \{E_n\}$  donde  $E_n$  son los eigenvalores de  $H$ , esto le proporciona al operador  $T$  estructuras analíticas parecidas a  $G$ . Para cuando  $z = E$  donde  $E$  pertenece al espectro continuo de  $H$ , se define:

$$T^\pm = H_1 G^\pm(E - H_0) \quad (3.26)$$

y los operadores  $G$  y  $T$  están relacionados como:

$$G = G_o + G_o T G_o, \quad (3.27)$$

a partir de la ecuación (3.15) en un espacio abstracto y de (3.17) se encuentra:

$$(E - H_o) |\psi\rangle = H_1 |\psi\rangle, \quad (3.28)$$

donde  $E$  pertenece al espectro continuo de  $H$  con solución [29]:

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + G_o^\pm H_1 |\psi^\pm\rangle \quad (3.29)$$

y  $|\phi\rangle$  es la solución de  $(E - H_o) |\phi\rangle = 0$  que es básicamente la ecuación de Lippman-Schwinger [29].

### 3.2 La expansión renormalizada dentro de la teoría de perturbaciones (RPE)

Tomando en cuenta el hamiltoniano de la ecuación (3.17) con:

$$H_o = \sum_l |l\rangle \epsilon_l \langle l|, \quad (3.30)$$

$$H_1 = t \sum_{\langle l,m \rangle} |l\rangle \langle m|, \quad (3.31)$$

se puede utilizar la teoría de perturbaciones antes expuesta para encontrar la función de Green. Partiendo de (3.19) y desarrollando se tiene

$$G = G_o + G_o H_1 G_o + G_o H_1 G_o H_1 G_o + \dots \quad (3.32)$$

o bien

$$G(l, m) = G_o(l, m) + \sum_{n_1 n_2} G_o(l, n_1) H_1(n_1, n_2) G_o(n_2, m) \quad (3.33)$$

$$+ \sum_{n_1 \dots n_4} G_o(l, n_1) H_1(n_1, n_2) G_o(n_2, n_3) H_1(n_3, n_4) G_o(n_4, m) + \dots$$

De la ecuación (3.30) se obtiene  $G_o(n_1, n_2) = \delta_{n_1 n_2} G_o(n_1)$ , donde  $G_o(n) = \frac{1}{z - \epsilon_n}$ . Además  $H_1(n_1, n_2)$  es diferente de cero sólo si  $n_1$  y  $n_2$  son primeros vecinos, ver la ecuación (3.31), con estas consideraciones (3.33) puede ser simplificado como:

$$G(l, m) = \delta_{l,m} G_o(l) + G_o(l) t G_o(m) \delta_{l,m+1} + \sum_{n_1} G_o(l) t G_o(n_1) t G_o(m) + \dots \quad (3.34)$$

Una forma de simplificar la expansión anterior es considerar todas las posibles trayectorias en la red partiendo de  $l$  y terminando en  $m$  con pasos conectando un sitio de la red con el sitio vecino más próximo. Entonces, hay una correspondencia uno a uno entre los términos de la ecuación (3.34) y el conjunto de todas las trayectorias, donde la trayectoria más general empezando en  $l$  y terminando en  $m$ , es construyendo una trayectoria cerrada auto-permitida, es decir, ningún sitio es visitado en más de una ocasión. Tomando todo ésto en cuenta  $G(l, m)$  toma la forma [29]:

$$G(l, m) = \sum G(l, l) tG(n_1, n_1[l]) tG(n_2, n_2[l, n_1]) t... tG(m, m[l, n_1, n_2, \dots]), \quad (3.35)$$

donde la suma se realiza sobre todas las trayectorias auto-permitidas empezando en  $l$  y terminando en  $m$  ( $l \rightarrow n_1 \rightarrow n_2 \rightarrow \dots \rightarrow m$ ). A partir de la ecuación anterior se pueden encontrar los elementos diagonales:

$$G(l, l) = G_o(l) + \sum G(l, l) tG(n_1, n_1[l]) t... G_o(l). \quad (3.36)$$

En este caso la sumatoria se extiende sobre todas las trayectorias auto-permitidas, empezando y finalizando en  $l$  [29]. La ecuación anterior puede ser escrita como:

$$G(l, l) = G_o(l) + G(l, l) \Delta(l) G_o(l), \quad (3.37)$$

donde

$$\Delta(l) = \sum tG(n_1, n_1[l]) t... \quad (3.38)$$

Resolviendo la ecuación (3.37) para  $G(l, l)$  se tiene finalmente que

$$G(l, l; z) = \frac{G_o(l)}{1 - G_o(l) \Delta(l; z)} = \frac{1}{z - \epsilon_l - \Delta(l; z)}. \quad (3.39)$$

Las expansiones (3.35), (3.36) y (3.38) para  $G(l, m)$ ,  $G(l, l)$  y  $\Delta(l)$  respectivamente, son las llamadas expansiones renormalizadas dentro de la teoría de perturbaciones (RPE) [29].

## Capítulo 4

### Sistemas Binarios

En este capítulo se encontrará la solución para el estado base de una red binaria usando el hamiltoniano de amarre fuerte. Dicha red está compuesta por sitios alternados con auto-energías  $U$  y  $V$  respectivamente y con un parámetro de salto dado por  $t$ , como se puede observar en la figura 4.1.

Para redes donde no haya trayectorias cerradas, el sistema corresponderá a una red de Bethe o un árbol de Cayley, ver figura 4.2, caracterizado por el número de primeros vecinos  $z$ , o su conectividad  $k = z - 1$ . Para resolver tal sistema se puede encontrar la función de Green en algún sitio con auto-energía  $U$  o  $V$ , ya que debido a la simetría del problema las soluciones para el sitio  $V$ , serán exactamente las mismas que las del sitio  $U$  intercambiando  $U$  por  $V$ . Si se calcula la función de Green en el sitio  $(l)$ , correspondiendo a la posición de la auto-energía  $U$  se tiene:

$$G(l, l; E) = \frac{1}{E - U - zt^2 G(l + 1, l + 1[l]; E)} \quad (4.1)$$

$$G(l + 1, l + 1[l]; E) = \frac{1}{E - V - (z - 1)t^2 G(l + 2, l + 2[l + 1]; E)} \quad (4.2)$$

$$G(l + 2, l + 2[l + 1]; E) = \frac{1}{E - U - (z - 1)t^2 G(l + 3, l + 3[l + 2]; E)} \quad (4.3)$$

$$G(l + 3, l + 3[l + 2]; E) = G(l + 1, l + 1[l]; E). \quad (4.4)$$

Si se resuelve el sistema anterior de ecuaciones y se encuentran los polos de la ecuación (4.1) se obtienen los eigenvalores discretos de  $H$  como:

$$E_{\pm}^z = \frac{1}{2} \left( U + V \pm \sqrt{(U - V)^2 + 4z^2 t^2} \right), E = V. \quad (4.5)$$

A partir de la ecuación (4.5), se puede obtener una condición para encontrar al menos dos redes de Bethe con los mismos eigenvalores discretos de  $H$  dependientes del parámetro  $z$  como:

$$z_0 t_0 = z t. \quad (4.6)$$

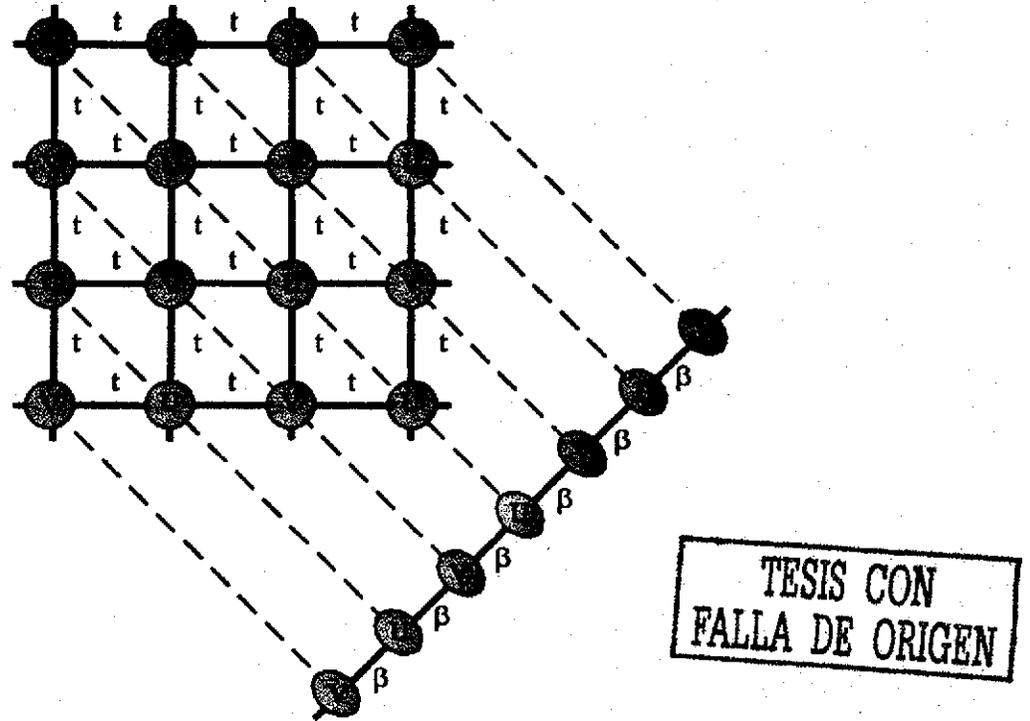


Figura 4.1: Sistema binario ordenado bidimensional y su proyección hacia una red unidimensional. El parámetro de salto en la red proyectada es  $\beta = 2t$ .

Aquí  $z$  y  $t$  se refieren a los parámetros para cualquier red de Bethe y  $z_0, t_0$  a la red de Bethe original, entonces los eigenvalores discretos dependientes del parámetro  $z$  y  $t$  de  $H$  de toda red de Bethe binaria se pueden encontrar analizando un sistema tipo  $z = 1$  y  $t = z_0 t_0$ , es decir en una matriz  $2 \times 2$  como:

$$\begin{pmatrix} U & z_0 t_0 \\ z_0 t_0 & V \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

cuyos eigenvalores corresponden exactamente a los dados por la ecuación (4.5), teniendo en cuenta la ecuación (4.6).

Interesados en encontrar ciertos eigenvalores discretos del hamiltoniano (2.8), en el estado base para redes binarias formadas de hipercubos de  $d$  dimensiones con trayectorias cerradas, se pueden proponer redes de Bethe equivalentes de acuerdo a la dimensionalidad del sistema  $z = 2d$  como:

$$E_{\pm}^d = \frac{1}{2} \left( U + V \pm \sqrt{(U - V)^2 + 16d^2 t^2} \right). \quad (4.8)$$

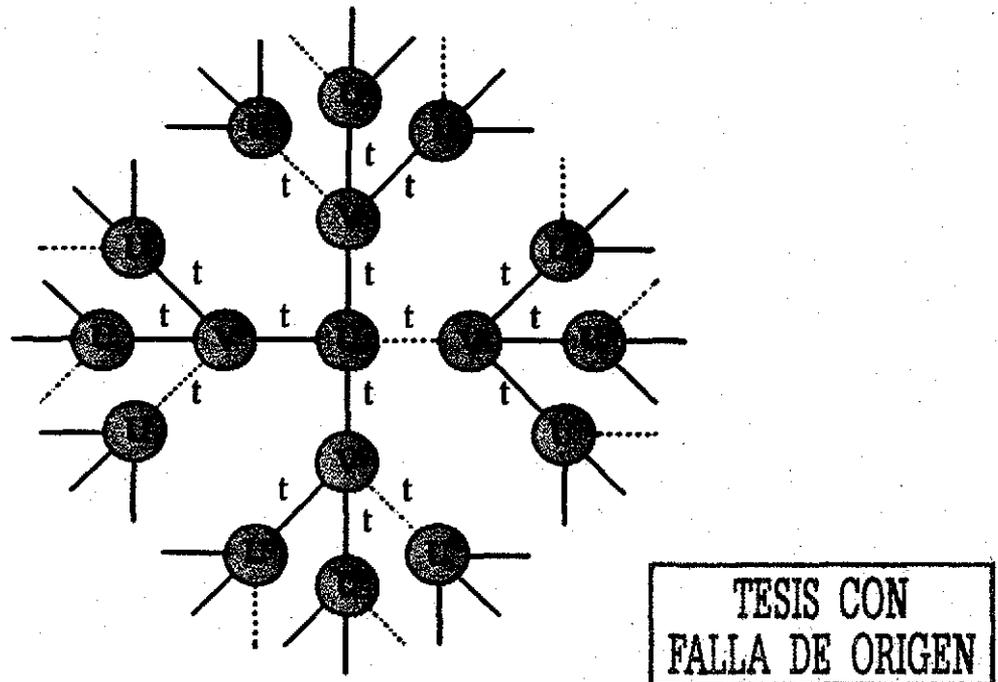


Figura 4.2: Se representa una red de Bethe binaria ordenada con  $z$  primeros vecinos.

Algunos ejemplos podrían aclarar estas ideas:

(1) El plano infinito binario formado de cuadrados, ver figura 4.1, cuya dimensionalidad es 2 y cuyo parámetro de salto es  $t_0$ , puede ser equivalente a una línea binaria, mostrada en la misma figura 4.1, cuya dimensionalidad es 1 y con un parámetro de salto de  $t = \beta = 2t_0$  (4.8) etc.

(2) Una red infinita formada de cubos con una dimensionalidad de 3 y parámetro de salto  $t_0$ , puede ser equivalente a un plano formado de cuadrados con un parámetro de salto  $t = \frac{3}{2}t_0$  etc.

(3) Una red infinita formada de hipercubos de 4 dimensiones y parámetro de salto  $t_0$ , puede ser relacionada a un plano infinito formado de cuadrados con un salto  $t = 2t_0$ , o a una red de 10 dimensiones formada de hipercubos de 10 dimensiones con un salto  $t = \frac{2}{5}t_0$  etc.

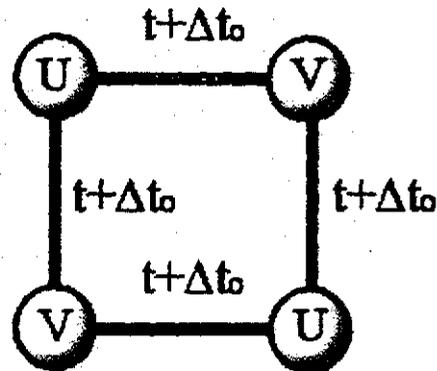
## Capítulo 5

# Método de solución vía redes de Bethe

Una vez resuelto el problema de correlación de dos partículas dentro del modelo de Hubbard extendido en una red unidimensional utilizando el método del mapeo y en particular haber obtenido la solución analítica de la energía de amarre de las partículas (Vallejo y Navarro 2002), se trató de dar el siguiente paso con el fin de encontrar soluciones analíticas a los problemas de dos partículas en más dimensiones. El primer paso hacia tal fin, fue haber usado el hamiltoniano de Hubbard generalizado y encontrado los estados ligados de dos partículas con espines opuestos en dos sitios, sin recurrir en la solución al método de diagonalización de la matriz resultante. La representación geométrica del espacio de estados de este sistema se puede ver en la figura 5.1 y como se puede apreciar es de dos dimensiones, pero no es una red *ad infinitum* por lo que no es aplicable el método de proyección, la solución a dicho problema está en darse cuenta que tal sistema cuadrado es equivalente a resolver una red de Bethe  $z = 2$  donde  $z$  es el número de primeros vecinos, esto se puede apreciar si por un momento se piensa en un ser puntual que se puede mover solamente por el sistema cuadrado, entonces ¿que ve?, la respuesta a tal pregunta es que si está en un sitio con autoenergía  $U$  verá a lo lejos dos autoenergías  $V$  y viceversa, entonces el sistema será equivalente a una red de Bethe binaria unidimensional infinita, ya que el movimiento periódico en el cuadrado será entonces equivalente a un movimiento unidimensional infinito. La razón principal de no utilizar el método de diagonalización y buscar nuevas formas de solución es más que evidente, conforme aumenta el número de sitios en la red, la matriz aumenta hasta hacerse prácticamente inmanejable.

### *Solución por el método de diagonalización*

La matriz que se obtiene al utilizar el hamiltoniano de Hubbard generalizado, (2.6) para el problema de dos partículas con espines opuestos en dos sitios en la



TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

Figura 5.1: Representación del espacio de estados del problema de dos partículas en dos sitios dentro del hamiltoniano de Hubbard generalizado.

representación de estados, es como se observa en la figura 5.1:

$$\begin{pmatrix} U & t + \Delta t_0 & 0 & t + \Delta t_0 \\ t + \Delta t_0 & V & t + \Delta t_0 & 0 \\ 0 & t + \Delta t_0 & U & t + \Delta t_0 \\ t + \Delta t_0 & 0 & t + \Delta t_0 & V \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

Diagonalizando la matriz (5.1) se encuentran los eigenvalores discretos que dependen del parámetro  $t$  como:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left( V + U \pm \sqrt{(U - V)^2 + 16(t + \Delta t_0)^2} \right) \quad (5.2)$$

#### *Solución por redes de Bethe*

La solución por este método será entonces resolver una red de Bethe binaria tipo  $z = 2$ . De la ecuación (4.5) se tiene

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left( V + U \pm \sqrt{(U - V)^2 + 16(t + \Delta t_0)^2} \right) \quad (5.3)$$

y como se observa de las soluciones dadas en (5.3) y (5.2) son las mismas. Los resultados anteriores comprueban las suposiciones y entonces permiten proponer como un método de solución analítica en espacio real para el problema de correlación dentro del hamiltoniano de Hubbard generalizado para dos partículas en  $d$ -dimensiones,

redes de Bethe con una conectividad adecuada. En algunos casos la red de Bethe será exacta al problema planteado como en el caso unidimensional y aproximada para una dimensionalidad mayor a uno.

# Capítulo 6

## Resultados

En este capítulo se presenta la solución analítica para el estado base del problema de dos partículas con espines opuestos. En primer lugar, se resuelve el problema en una red unidimensional usando el hamiltoniano generalizado de Hubbard y en segundo lugar se obtiene la solución para un caso más general del modelo de Hubbard. Finalmente se realiza una extensión de los resultados para redes en  $d$ -dimensiones dentro del hamiltoniano de Hubbard generalizado. Las soluciones se obtienen utilizando la técnica de la función de Green y las expansiones renormalizadas dentro de la teoría de perturbaciones.

### 6.1 Hubbard generalizado unidimensional

El hamiltoniano de Hubbard generalizado HHG, tiene una representación en el espacio de estados como se puede apreciar en la figura 6.1, utilizando la simetría traslacional de la representación, el problema a resolver será entonces una cadena lineal infinita con impurezas dentro del hamiltoniano de amarre fuerte. Utilizando el método RPE se puede encontrar la función de Green en el sitio  $l$  ocupado con la energía  $U$  en el estado base  $K = 0$  como sigue:

$$G(l, l; E) = \frac{1}{E - U - 2(\beta + \beta_0)^2 G(l+1, l+1 [l]; E)} \quad (6.1)$$

$$= \frac{1}{E - U - \frac{2(\beta + \beta_0)^2}{E - V - \frac{1}{2}(E \pm \sqrt{E^2 - 4\beta^2})}}, \quad (6.2)$$

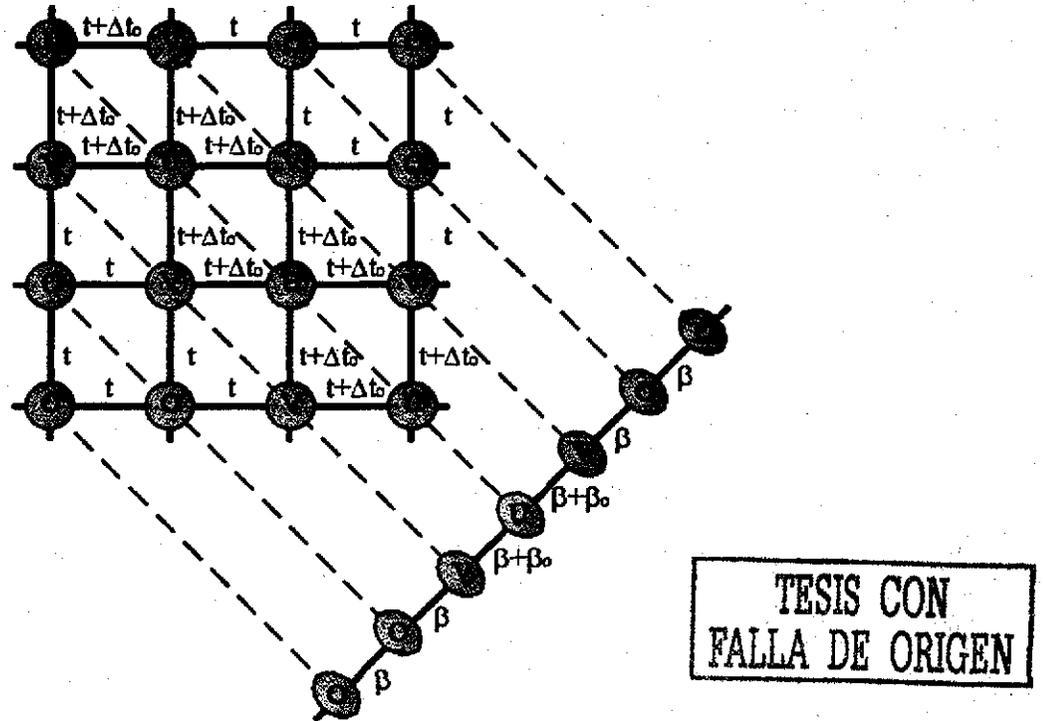


Figura 6.1: Representación de estados del hamiltoniano de Hubbard generalizado para el problema unidimensional de dos partículas con espines opuestos. Se muestra además la proyección sobre un espacio unidimensional donde los parámetros de salto proyectados toman la forma  $\beta = 2t \cos \frac{K_0}{\sqrt{2}}$  y  $\beta_0 = 2\Delta t_0 \cos \frac{K_0}{\sqrt{2}}$ .

donde

$$G(l+1, l+1 [l]; E) = \frac{1}{E - V - \beta^2 G(l+2, l+2 [l+1]; E)} \quad (6.3)$$

$$= \frac{1}{E - V - \frac{1}{2} (E \pm \sqrt{E^2 - 4\beta^2})}, \quad (6.4)$$

$$G(l+2, l+2 [l+1]; E) = \frac{1}{E - \beta^2 G(l+3, l+3 [l+2]; E)} \quad (6.5)$$

$$= \frac{E \pm \sqrt{E^2 - 4\beta^2}}{2\beta^2} \quad (6.6)$$

y

$$G(l+3, l+3 [l+2]; E) = G(l+2, l+2 [l+1]; E). \quad (6.7)$$

A partir de los polos de la ecuación (6.2) y utilizando la condición  $E^2 > 4\beta^2$  se puede obtener una ecuación para las energías de los estados ligados como:

$$x - u - \frac{(1 + k_0)^2}{x - w \mp \sqrt{x^2 - 1}} = 0 \text{ para } x^2 > 1, \quad (6.8)$$

donde se realizaron algunos cambios de variable como  $x = \frac{E}{B}$ ,  $u = \frac{U}{B}$ ,  $w = \frac{2V}{B}$ ,  $B = 2\beta$ ,  $\beta = 2t$  y en general  $k_i = \frac{\Delta t_i}{t}$  y  $\beta_i = 2\Delta t_i$  para  $i = 0, 1, 2, \dots$ . Dentro de la condición  $t < 0$  se puede definir una energía de amarre como  $gap = -B - E$ , donde se ha utilizado explícitamente el signo de  $t$ , es decir  $B > 0$ . Dividiendo el gap entre  $B$  se llega a  $\Delta = \frac{gap}{B} = -1 - x$ , para obtener:

$$1 + \Delta + u - \frac{(1 + k_0)^2}{1 + \Delta + w \pm \sqrt{(1 + \Delta)^2 - 1}} = 0; \quad \Delta > 0. \quad (6.9)$$

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

$$\sqrt{(1 + u)(1 + w)} - 1 < k_0. \quad (6.10)$$

Esta condición de apareamiento coincide con la obtenida para una temperatura crítica distinta de cero en la teoría BCS, usando un modelo con densidad de estados constante en el límite de baja densidad [21, 32]. Tomando  $k_0 = 0$  en la ecuación (6.10), se llega a la condición de apareamiento para el hamiltoniano de Hubbard extendido [34].

## 6.2 Hubbard general unidimensional

La ventaja de tener el hamiltoniano de Hubbard general (2.5), es que se puede analizar el problema unidimensional de una forma más completa. El hamiltoniano de Hubbard general tiene una representación geométrica de estados como se puede apreciar en la figura 2.2. En general, se pueden tomar  $n$  parámetros tanto de salto que depende de la densidad de carga como de la energía de interacción  $\Delta t_n$  y  $E_n$  respectivamente, de tal forma que la condición general de tomar  $n$  parámetros será:

$$\beta_i = E_i = 0, \text{ para } i \geq n + 1. \quad (6.11)$$

La función de Green en el sitio  $l$  con una energía  $E_0$ , una vez proyectado el espacio de estados es [35]:

$$BG(l, l; x) = \frac{1}{x - \epsilon_0 - \frac{\frac{1}{2}(1+k_0)^2}{x - \frac{1}{2}\epsilon_1 - \frac{\frac{1}{4}(1+k_1)^2}{x - \frac{1}{2}\epsilon_2 - \frac{\frac{1}{8}(1+k_2)^2}{\vdots} - \frac{\frac{1}{p}\epsilon_n - \frac{1}{2}(1+k_n)^2(x \pm \sqrt{x^2 - 1})}}}}, \quad (6.12)$$

donde  $p = 1$  y  $m = 2$  para  $n = 0$ ;  $p = 2$  y  $m = 1$  para  $n > 0$ . Debido a la generalidad de la solución se han cambiado las energías  $U$  y  $V$  del HHG por  $E_n$ , en el caso particular del HHG se tiene  $U = E_0$ ,  $V = E_1$  y  $k_i = 0$  para  $i > 0$ . Las variables involucradas en la solución anterior están dadas por:

$$\epsilon_0 = \frac{E_0}{B} \text{ y } \epsilon_i = \frac{2E_i}{B} \text{ para } i > 0. \quad (6.13)$$

Para comprobar la consistencia de las soluciones, si se analiza la solución de (6.12) para el (HHG). En este caso se tiene específicamente que considerar  $n = 1$  en (6.11) además de particularmente  $\beta_1 = 0$ . Bajo estas consideraciones tenemos la ecuación para la función de Green:

$$BG(l, t; x) = \frac{1}{x - \epsilon_0 - \frac{(1+k_0)^2}{x - \epsilon_1 \mp \sqrt{x^2 - 1}}} \quad (6.14)$$

y cuyos estados ligados son dados por:

$$x - \epsilon_0 - \frac{(1+k_0)^2}{x - \epsilon_1 \mp \sqrt{x^2 - 1}} = 0; x^2 > 1. \quad (6.15)$$

La condición de apareamiento es para  $t < 0$ :

$$\sqrt{(1+\epsilon_0)(1+\epsilon_1)} - 1 < k_0. \quad (6.16)$$

Las soluciones dadas en (6.15) y (6.16) son las mismas que las dadas en (6.8) y (6.10). El haber considerado más términos en el hamiltoniano (2.2), se justifica porque siempre habrá interacciones por pequeñas que sean entre partículas a distancias finitas.

### 6.3 Hubbard generalizado en $d$ dimensiones

La representación geométrica del espacio de estados, para un sistema de  $n$  electrones en una red hipercúbica de  $d$  dimensiones y dentro del hamiltoniano de Hubbard generalizado, se encuentra en un espacio de  $nd$  dimensiones. En esta sección se abordará el caso  $n = 2$ , donde se utilizará el método de proyección para reducir el espacio de estados hasta  $d$  dimensiones. La representación geométrica es básicamente como se muestra en las figuras 6.1 y 6.2 para redes de una y dos dimensiones respectivamente. La solución general entonces será proponer redes de Bethe con  $z = 2d$ , que como se puede demostrar fácilmente para  $d > 1$ , la red de Bethe no es exactamente la proyección de la red hipercúbica de  $nd$  dimensiones, sin embargo da un comportamiento aproximado del gap en el estado base. Para el caso  $d = 1$  la solución de la red de Bethe ( $z = 2$ ) será exacta. La red de Bethe propuesta consta de (en

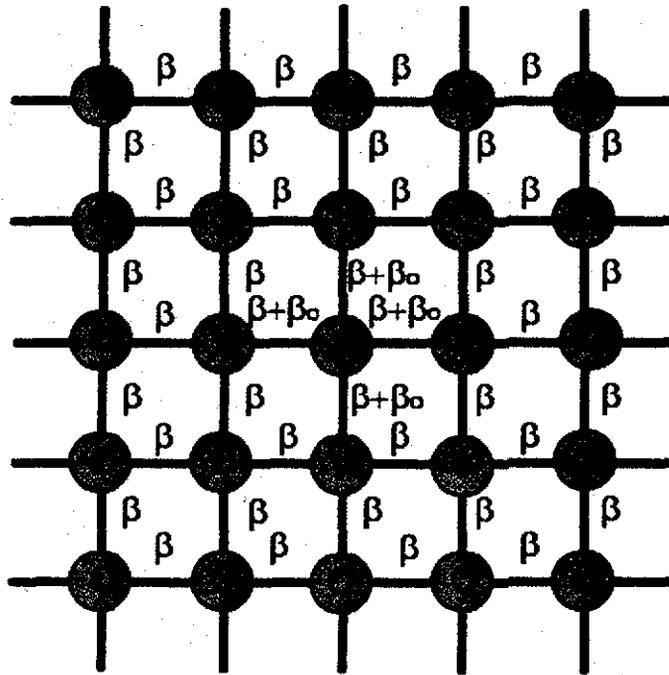


Figura 6.2: En esta figura se muestra la proyección del espacio de estados de 4 dimensiones sobre un espacio de 2 dimensiones, para el problema bidimensional de dos partículas con espines opuestos dentro del hamiltoniano de Hubbard generalizado, se muestran además los parámetros de salto en el estado base como  $\beta = 2t$  y  $\beta_0 = 2\Delta t_0$ .

algún lugar de la red), una energía  $U$  unida a  $z$  energías  $V$  con parámetros de salto  $(\beta + \beta_0)$  y después continua la red con energías cero y parámetros de salto  $\beta$ , como se puede ver en la figura 6.3.

La solución por red de Bethe general dentro del HHG se puede obtener calculando la función de Green en el sitio  $l$  donde se encuentra la energía  $U$  a partir del siguiente

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

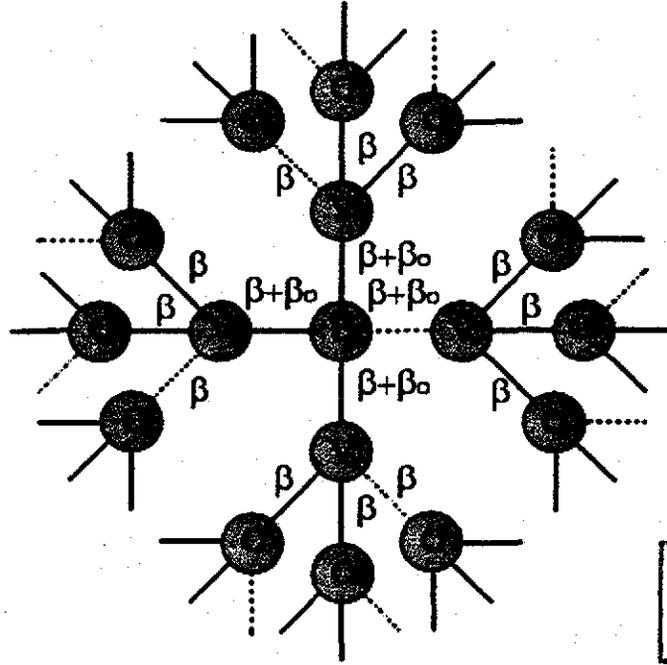


Figura 6.3: Representación de la red de Bethe utilizada para resolver el problema  $d$ -dimensional.

sistema de ecuaciones:

$$G(l, l; E) = \frac{1}{E - U - z(\beta + \beta_0)^2 G(l + 1, l + 1[l]; E)} \quad (6.17)$$

$$= \frac{1}{E - U - \frac{z(\beta + \beta_0)^2}{E - V - \frac{1}{2}(E \pm \sqrt{E^2 - 4(z-1)\beta^2})}}, \quad (6.18)$$

$$G(l + 1, l + 1[l]; E) = \frac{1}{E - V - (z - 1)\beta^2 G(l + 2, l + 2[l + 1]; E)} \quad (6.19)$$

$$= \frac{1}{E - V - \frac{1}{2}(E \pm \sqrt{E^2 - 4(z-1)\beta^2})}, \quad (6.20)$$

$$G(l + 2, l + 2[l + 1]; E) = \frac{1}{E - (z - 1)\beta^2 G(l + 3, l + 3[l + 2]; E)} \quad (6.21)$$

$$= \frac{E \pm \sqrt{E^2 - 4(z-1)\beta^2}}{2(z-1)\beta^2}, \quad (6.22)$$

$$G(l + 3, l + 3[l + 2]; E) = G(l + 2, l + 2[l + 1]; E). \quad (6.23)$$

A partir de los polos de (6.18) se puede en principio encontrar una ecuación para las energías de los estados ligados del HHG. Si se realizan algunos cambios de variable adecuados, los polos de la ecuación (6.18) son:

$$x - u - \frac{(1 + k_o)^2}{dx - w \mp \sqrt{(dx)^2 - 2d + 1}} \cong 0; x^2 > 1, \quad (6.24)$$

donde los cambios de variable utilizados son:

$$x = \frac{E}{B}, u = \frac{U}{B}, w = \frac{zV}{B}, B = 2zt = z\beta, z = 2d, k_o = \frac{\Delta t_o}{t} = \frac{\beta_o}{\beta}. \quad (6.25)$$

Se puede encontrar también la ecuación del gap para  $t < 0$ , como  $gap = -B - E$ , donde se ha utilizado explícitamente el signo de  $t$ , es decir  $B > 0$ . Dividiendo entre  $B$  se llega a  $\Delta = \frac{gap}{B} = -1 - x$ , de donde sustituyendo en la ecuación (6.24) se tiene:

$$1 + \Delta + u - \frac{(1 + k_o)^2}{d(1 + \Delta) + w + \sqrt{d^2(1 + \Delta)^2 - 2d + 1}} \cong 0; \Delta > 0 \quad (6.26)$$

y

$$\sqrt{(1 + u)(2d + w - 1)} - 1 < k_o. \quad (6.27)$$

Las ecuaciones (6.24), (6.26) y (6.27) son exactas en una dimensión y aproximadas para  $d > 1$  [21]. La representación gráfica de la ecuación (6.26), se muestra en las figuras 6.4, 6.5 y 6.6 para algunas variables involucradas y se comparan con los resultados obtenidos en el espacio recíproco [21]. Debido a que el gap es un reflejo de la estructura geométrica de los estados del hamiltoniano, figuras 6.1, 6.2 y 6.3, conforme aumenta la dimensión del espacio aumenta el número de estados con autoenergía cero y esto implica que en general el gap disminuye conforme aumenta la dimensión como se puede comprobar directamente de las figuras 6.4, 6.5 y 6.6. Para el caso de la red de Bethe, debido a que la conexión de cualquier estado con el cuadro central de impurezas figura 6.1 y 6.3, se da únicamente por una de las ramas de la red, el gap deberá ser menor que el obtenido directamente de la estructura exacta, como se observa en las figuras 6.4, 6.5 y 6.6.

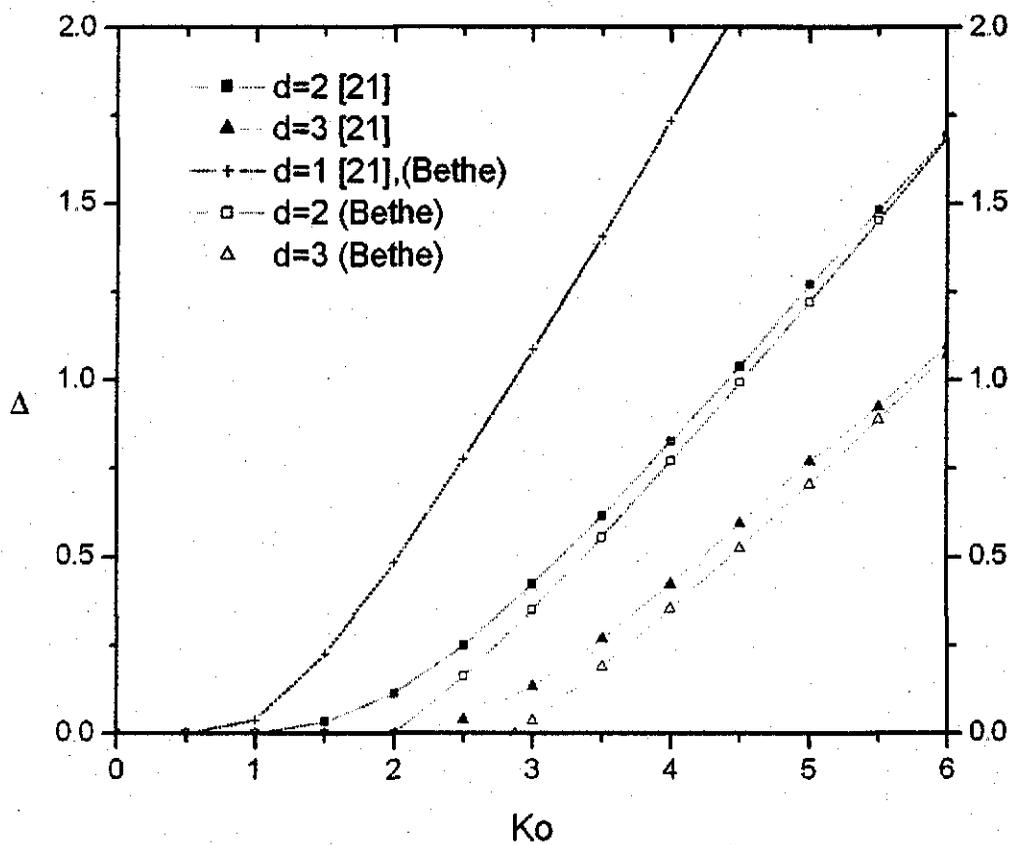


Figura 6.4: Gráfica de  $\Delta$  como función de  $k_0$ , para  $u = 2$  y  $w = 0$ , para  $d=1, 2$  y  $3$  dimensiones.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

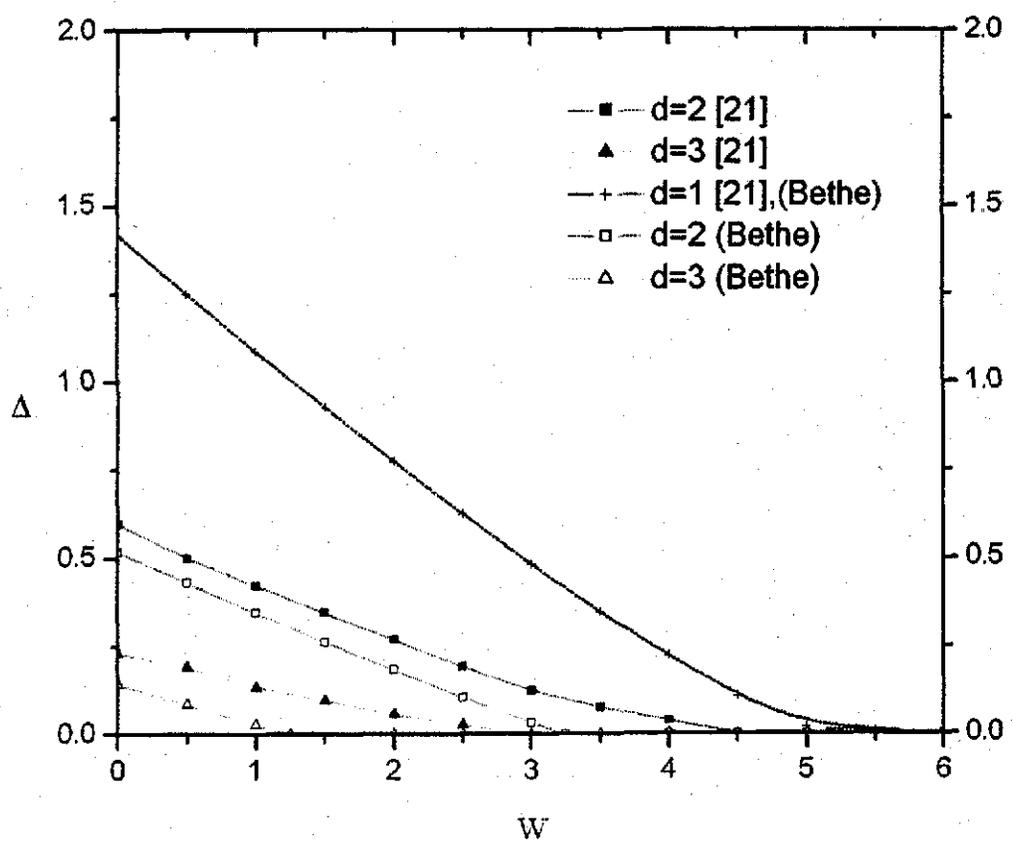


Figura 6.5: Gráfica de  $\Delta$  como función de  $w$  para  $u = 3$  y  $k_0 = 4$ , para  $d=1, 2$  y  $3$  dimensiones.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

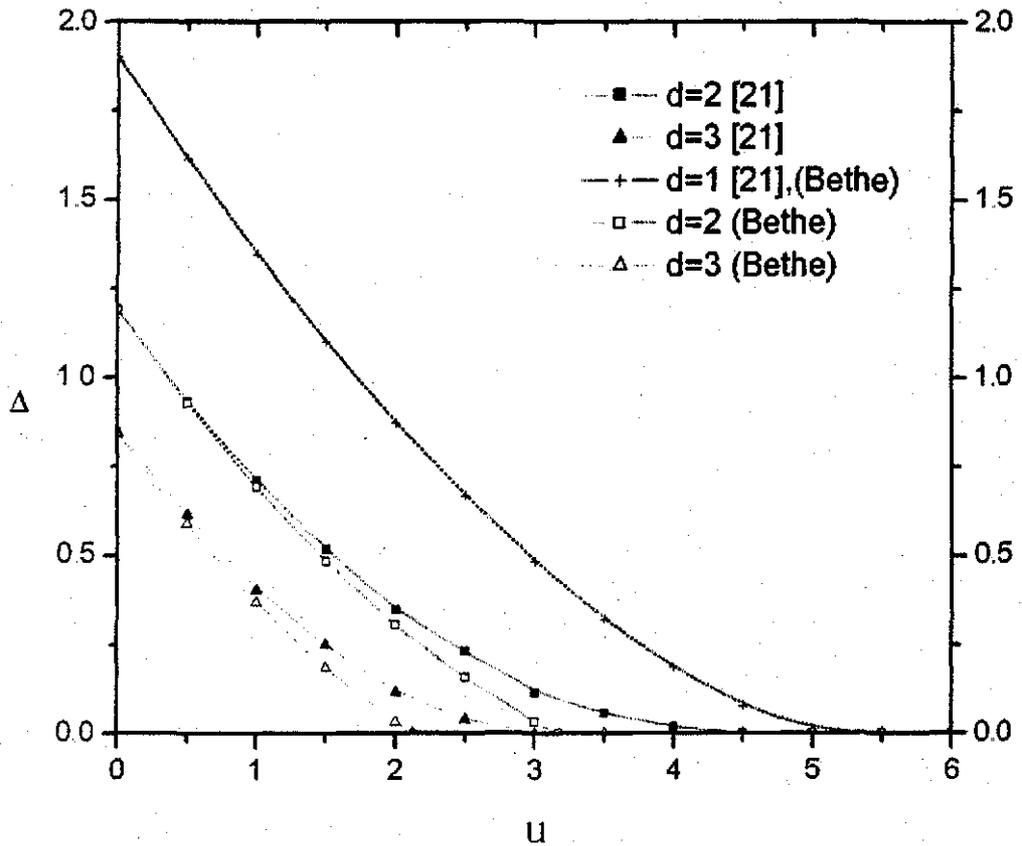


Figura 6.6: Gráfica de  $\Delta$  como función de  $u$  para  $w = 3$  y  $k_0 = 4$ , para  $d=1, 2$  y  $3$  dimensiones.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

# Conclusiones

El método descrito en esta tesis para estudiar correlación electrónica, a partir de redes de Bethe, es una línea de investigación muy general para analizar sistemas cerrados en espacio real, cuando el sistema presente cierto orden y periodicidad, en los casos en que no exista tal, se pueden analizar soluciones aproximadas que den buenos resultados. Los resultados obtenidos para dos partículas con espines opuestos dentro del HHG para 1, 2 y 3 dimensiones, fueron comparadas con cálculos numéricos y también con soluciones en el espacio recíproco (en el espacio  $k$ , donde no existen soluciones analíticas exactas para 2 y 3 dimensiones), obteniéndose buenas aproximaciones, en particular los resultados unidimensionales son exactos en este método.

Las redes de Bethe presentan un mejor comportamiento cuando todos sus parámetros tienden a cero, fuera de este límite y basados únicamente en el análisis de las figuras 6.4, 6.5 y 6.6 se concluye que existe una diferencia máxima de 0.1 sobre el valor de la energía de amarre de las partículas obtenida a través de la solución numérica, esta diferencia se localiza cuando la energía de amarre de las partículas es muy pequeña ( $< 0.1$ ). Es importante comentar que el método utilizando redes de Bethe, se ha utilizado exitosamente para analizar compuestos reales como el caso del compuesto  $Sr_2FeMoO_6$ , donde se realiza actualmente un trabajo de simulación de propiedades electrónicas [33].

Las ventajas de las soluciones en espacio real son que se puede analizar la correlación fermiónica en redes no periódicas o en sistemas desordenados, además, el método de solución en espacio real en sistemas unidimensionales es más sencillo que en cualquier otro, como por ejemplo en el mismo espacio recíproco o con el método de diagonalización. Otra de las ventajas es que se pueden analizar de manera sencilla hamiltonianos más generales que incorporen un mayor número de términos de interacción.

Como perspectivas de esta tesis podemos mencionar el problema cuando ya no se analizan dos partículas sino muchas, el problema en espacio real tendría la limitación de visualizar un espacio de más de 3 dimensiones espaciales. Asimismo, realizar un estudio tanto de sistemas desordenados como cuasiperiódicos. Este último ya se ha iniciado y creo que pronto se tendrán resultados.

# Bibliografía

- [1] E.H. Lieb y F.Y. Wu, Phys. Rev Lett. **20**, 1445 (1968).
- [2] Ver reprints en *Exactly Solvable Models of Strongly Correlated Electrons*, editado por V.E. Korepin y F.H.L. Ebler (World Scientific, Singapore, 1994).
- [3] W. Metzner y D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
- [4] A.M. Tsvelick y P.B. Wiegmann, Adv. Phys. **32**, 453 (1983); A.A. Aligia, C.A. Balseiro y C.R. Proetto, Phys. Rev. B **33**, 6476 (1986).
- [5] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London Ser. A **276**, 238 (1963); M.C. Gutzwiller, Phy. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).
- [6] N.F. Mott, *Metal-Insulator Transition* (Taylor & Francis Inc., London), Segunda Edición 1990.
- [7] P.W. Anderson, Solid State Physics **14**, 99 (1963).
- [8] S. Caprara, M. Avignon y O. Navarro, Phys. Rev. B **61**, 15667 (2000).
- [9] R. Micnas, J. Ranninger y S. Robaszkiewicz, Rev. Mod. Phys. **62** 113 (1990).
- [10] A.S. Blaer, H.C. Ren y O. Tchernyshyov, Phys. Rev. B **55**, 6035 (1997).
- [11] S. Fujimoto, Phys. Rev. B **64**, 85102 (2001).
- [12] G. Kotliar y A.E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362(1986).
- [13] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, y N. E. Bickers, Phys. Rev. Lett. **63**, 1523(1989).
- [14] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **22**, 5259(1980).
- [15] F. López-Urías y G.M. Pastor, Phys. Rev. B **59**, 5223 (1999).

- [16] O. Navarro y C. Wang, *Rev. Mex. Fís.* **38**, 553 (1992); O. Navarro, C. Wang, *Solid State Commun.* **83**, 473 (1992); L.A. Pérez, O. Navarro y C. Wang, *Phys. Rev. B* **53**, 15389 (1996).
- [17] M.W. Long y R. Fehrenbacher, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 10343 (1990).
- [18] A.S. Alexandrov, S.V. Traven y P.E. Kornilovitch, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, L89 (1992).
- [19] D.L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2607 (1994).
- [20] R. Oviedo-Roa, C. Wang y O. Navarro, *J. Low Temp. Phys.* **105**, 651 (1996).
- [21] F. Marsiglio y J.E. Hirsch, *Physica C* **171**, 554 (1990).
- [22] H.Q. Lin y J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **52**, 16155 (1995).
- [23] M. Airoidi y A. Parola, *Phys. Rev. B* **51**, 16327 (1995).
- [24] J.E. Espinosa, O. Navarro y M. Avignon, *Eur. Phys. J. B* **18**, 9 (2000).
- [25] L. de la Peña, *Introducción a la mecánica cuántica*, FCE, Segunda Edición, (1991).
- [26] O. Navarro, *Introducción a la Superconductividad*, Aula Magna UAS, Vol. 11, (1997).
- [27] J.P. Mckelvey, *Física del estado sólido y de semiconductores*, Limusa (1976).
- [28] L. A. Pérez López, *Superconductividad con simetría d en el modelo de Hubbard*, Tesis doctoral, 2002, UNAM.
- [29] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer Series en Solid State Sciences, Vol.7, Segunda edición, 1993).
- [30] P. Dennery, A. Krzywicki, *Mathematics for Physicists*, Harper&Row.
- [31] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Segunda Edición, John Wiley & Sons, (1975).
- [32] J. E. Hirsch, *Physica C* **158** (1989) 326.
- [33] E. Carvajal y O. Navarro, *Propiedades electrónicas de la doble perovskita  $Sr_2FeMoO_6$* , (presentado en el XLV Congreso Nacional de Física).
- [34] E. Vallejo, O. Navarro y J. E. Espinosa, *Two-particle correlations in the one-dimensional Hubbard model: ground-state analytical solution*, (aceptado para su publicación en la revista *Acta Physica Polonica B*).

- [35] E. Vallejo y O. Navarro, *Hubbard model in one dimension with a general bond-charge interaction: Analytical ground-state solution for the pairing of two particles*, (enviado para su publicación a la revista Physical Review B).