

# Función de onda en cadena de Fibonacci incluyendo correlación electrónica

Sergio Molina Valdovinos

Asesor: Dr. Oracio Navarro Chávez

mayo de 2006

# Resumen

En mecánica cuántica determinar la función de onda es un problema fundamental ya que a partir de ésta podemos obtener información importante acerca de las partículas, tal como la amplitud de probabilidad de encontrar a la partícula en determinado elemento de volumen, alrededor de un punto espacial. Encontrar esto para una sola partícula en una cadena unidimensional es complicado debido a la gran cantidad de cálculos que hay que realizar, lo cual nos impide encontrar las soluciones de forma exacta, por lo que las encontramos de manera numérica. En la presente tesis se determinó la función de onda de dos electrones con espines antiparalelos en una cadena unidimensional (la Cadena de Fibonacci), considerando interacción entre las partículas. Para calcular la función de onda se utilizó el modelo de Hubbard, y el método del espacio de estados. En el caso de dos electrones obtuvimos la función de onda para la cadena de Fibonacci de manera numérica, para generación 10 (90 sitios), en las que observamos una mezcla de estados extendidos y localizados, también comparamos nuestros resultados con la cadena lineal (90 sitios) donde los estados son completamente extendidos. Se muestra el caso para  $E = 0$ , donde podemos observar la máxima simetría posible, observamos algunos efectos de la autosimilaridad de la función de onda de la cadena de Fibonacci, esto debido al tamaño de nuestra red.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>2</b>
<b>Introducción</b>	<b>4</b>
<b>1. Propiedades de los sistemas cristalinos</b>	<b>6</b>
1.1. Estructuras Cristalinas . . . . .	6
1.2. Teorema de Bloch . . . . .	8
1.3. Funciones de Wannier . . . . .	11
1.4. Electrones en sólidos . . . . .	16
1.5. Modelo de amarre fuerte . . . . .	17
1.6. Segunda cuantización . . . . .	21
1.7. Modelo de Hubbard . . . . .	28
1.8. Método del espacio de estados y su mapeo . . . . .	30
<b>2. Propiedades de los sistemas cuasiperiódicos</b>	<b>35</b>
2.1. Cuasicristales . . . . .	35
2.1.1. Cuasicristales metaestables . . . . .	36
2.1.2. Cuasicristales estables . . . . .	37
2.1.3. Cadena de Fibonacci . . . . .	38
2.2. Método del espacio de estados aplicado a la cadena de Fibonacci . . . . .	40
<b>3. Análisis y discusión de resultados</b>	<b>43</b>
3.1. Función de onda en la cadena de Fibonacci . . . . .	43
<b>Conclusiones</b>	<b>61</b>

# Introducción

Los cristales se describen en referencia a arreglos perfectos e infinitos de puntos geométricos llamados redes. También sabemos que una estructura cristalina queda completamente determinada por una red de Bravais. Una estructura cristalina tiene ciertas simetrías, tales como rotaciones y reflexiones llamadas puntuales. Restringiendo la rotación de  $2\pi/5$  la cual no nos genera la misma estructura geométrica, en otras palabras es una simetría prohibida.

A partir de esto iniciamos el estudio electrónico de los materiales tomando el caso más sencillo de un sólido cristalino que es la cadena periódica unidimensional. En la cual se trata de encontrar la solución a la ecuación de Schrödinger para el caso más sencillo de un solo electrón. Una forma de hacer esto es utilizando las funciones de Bloch, las cuales son soluciones de la ecuación de Schrödinger para sólidos periódicos, estas soluciones son ondas planas que están determinadas por la periodicidad de la red, estas funciones nos dan información de la red de una forma global. Otra forma de hacerlo es mediante funciones de Wannier que son transformadas de Fourier de las funciones de Bloch, estas funciones nos dan información de la red en una forma más localizada.

En caso de considerar muchos cuerpos utilizamos el formalismo de la segunda cuantización, el cual reformula la ecuación de Schrödinger con la ventaja de que en esta representación se incorpora la estadística de muchas partículas simplificando el estudio de sistemas de muchas partículas idénticas que interactúan entre si. Por otro lado, describir interacciones electrón-electrón ( $e - e$ ) dentro de un sólido es un problema complicado. Una forma general de estudiar la correlación electrónica es utilizando el hamiltoniano de Hubbard, el cual incluye implícitamente las interacciones electrónicas de todo tipo.

Una técnica que utilizamos en esta tesis para al resolver este hamiltoniano es el método del espacio de estados y su mapeo, el cual nos permite diagonalizar en forma exacta el hamiltoniano de Hubbard para redes finitas con pocos electrones, trabajando en el espacio real. Esto lo discutimos con detalle en el primer capítulo siendo una parte fundamental para el resto de la tesis.

En 1984 se anuncio el descubrimiento de la fase cuasicristalina en una aleación de aluminio-manganeso que al ser enfriada rápidamente, presenta simetría icosaedral, además de que tiene orden de largo alcance, lo que representaba un problema para la cristalografía, pues esto violaba uno de sus principios fundamentales (esto

es, no existen rotaciones de  $2\pi/5$ ). Poco después se descubrieron nuevos materiales que presentaban simetrías prohibidas, algunos con los mismos elementos pero con concentraciones diferentes y otros que contienen diversos materiales como el cobalto, hierro o níquel. En un principio, se especuló que estos nuevos materiales eran sólo un artefacto experimental, sin embargo, actualmente es aceptado que representan una nueva forma de agregación a la materia que se suma a las ya conocidas, es decir, los materiales cristalinos y los amorfos, esto debido a que son sistemas energéticamente estables.

El estudio de los sistemas cuasiperiódicos es complicado, debido a que no es un sistema periódico y por lo tanto, no podemos proponer funciones de Bloch como soluciones al problema debido a la ausencia de simetría traslacional, 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, por ejemplo, considerar sistemas de baja dimensionalidad o bien sistemas diluidos. En esta tesis estudiamos la correlación electrónica de los electrones con espines antiparalelos en una red cuasiperiódica unidimensional: La cadena de Fibonacci.

En particular, nos interesa encontrar la función de onda para una cadena de Fibonacci con dos electrones considerando el caso en que existe correlación electrónica, para esto, utilizamos el modelo de Hubbard. Este modelo incluye términos de interacción electrónica en el mismo sitio y en sitios vecinos.

# Capítulo 1

## Propiedades de los sistemas cristalinos

El punto de vista más sencillo de la mecánica cuántica respecto a un electrón contenido en un cristal, es el de un solo electrón que se encuentra en un potencial perfectamente periódico que tiene la periodicidad de la red. En este modelo de un solo electrón, el potencial periódico se puede considerar como resultado de la distribución periódica de carga asociada con los núcleos iónicos situados en los puntos reticulares, más el potencial “extendido” promedio (constante) aportado por todos los demás electrones libres que pertenecen al cristal, de tal manera que se tiene en cuenta la interacción promedio de un solo electrón con todos los demás. En consecuencia, la solución de la ecuación de Schrödinger para un solo electrón dentro de este potencial, proporciona un conjunto de estados de “un solo electrón” que pueden estar ocupados exclusivamente por un electrón y, de hecho, que pueden estar ocupados (de acuerdo con las limitaciones del principio de Pauli) por todos los electrones del cristal, ya que el único electrón que se consideró inicialmente se puede clasificar como típico en todos los electrones del sistema .

El formalismo de segunda cuantización reformula la ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos con la ventaja de que los operadores en esta representación incorporan la estadística de las partículas (bosones o fermiones), simplificando el estudio de sistemas de muchas partículas idénticas que interactúan entre sí. En esta sección revisaremos brevemente la técnica de segunda cuantización para fermiones y más adelante usaremos los resultados para establecer el hamiltoniano de Hubbard. Así, como la técnica del método del espacio de estados y su mapeo que nos permitirá resolver el hamiltoniano de Hubbard de una manera sencilla.

### 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 [1], 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 solo 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, las cuales son llamadas *base* 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 asociados 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 las direcciones de una red se asocia a cada uno de estos 3 números enteros llamados *índices de Miller* [2]. 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 la diferencia de fase 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 identificados 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  $\theta$ , pudiéndose observar claros picos, llamados picos de Bragg, en aquellos ángulos  $\theta$  que satisfacen la ley de Bragg.

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda,$$

donde  $d_{hkl}$  es la distancia interplanar,  $n$  en el orden de difracción y  $\lambda$  es la longitud de onda del haz incidente [3]. Otra característica es la estructura periódica 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 traslaciones que deja inalterada la estructura cristalina. Sin demostrar lo anterior 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  $2\pi$  ( $2\pi/6, 2\pi/4, 2\pi/3, \pi$ ), pero no con pentágonos o heptágonos. Esto nos 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. Teorema de Bloch

La ecuación de Schrödinger esta dada en la forma

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

donde  $V(\mathbf{r})$  es la energía potencial [4]. Para el caso de un potencial  $V(\mathbf{r})$  distinto de cero, nos gustará ver de una manera natural las soluciones de la ecuación de Schrödinger. El primer resultado importante puede deducirse del hecho de que el hamiltoniano en esta ecuación es invariante bajo traslaciones. Para una formulación cuantitativa de esta invarianza asociamos un operador  $T_{\mathbf{R}_l}$ , que da una traslación  $\mathbf{R}_l$  a la ecuación

$$T_{\mathbf{R}_l}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l). \quad (1.2)$$

El operador  $T_{\mathbf{R}_l}$  actúa sobre la función en  $\mathbf{r}$ , en la cual intercambia el vector  $\mathbf{r}$ , en el argumento por  $\mathbf{r} + \mathbf{R}_l$ .

De la Ec. (1.1)  $H$  es invariante bajo  $T_{\mathbf{R}_l}$ . Aplicando el operador  $T_{\mathbf{R}_l}$  a la Ec. (1.1):

$$T_{\mathbf{R}_l}(H\psi_n) = T_{\mathbf{R}_l}(E_n\psi_n), \quad (1.3)$$

entonces

$$H(T_{\mathbf{R}_l}\psi_n) = E_n(T_{\mathbf{R}_l}\psi_n), \quad (1.4)$$

por lo tanto todos los  $T_{\mathbf{R}_l}\psi_n$  y  $\psi_n$  son simultáneamente eigenfunciones del mismo eigenvalor  $E_n$ . Si  $E_n$  es no degenerada, esto es, esta solo tiene eigenfunciones  $\psi_n$ ,  $T_{\mathbf{R}_l}\psi_n$  tiene el mismo factor igual a  $\psi_n$ . Entonces en otro caso  $|T_{\mathbf{R}_l}\psi_n|^2$  tiene que ser igual a  $|\psi_n|^2$ , este factor tiene que tener el valor absoluto igual a 1.

$$T_{\mathbf{R}_l}\psi_n = \lambda^{(l)}\psi_n, \quad (1.5)$$

con

$$|\lambda^{(l)}|^2 = 1, \quad (1.6)$$

de las ecuaciones anteriores vemos que  $\lambda^{(l)}$  son eigenvalores del operador  $T_{\mathbf{R}_l}\psi_n$ . Entonces  $|\lambda^{(l)}|^2 = 1$ , esto es,  $\lambda^{(l)}$  puede ponerse en la forma  $e^{i\alpha_l}$ . Entonces  $\mathbf{R}_l + \mathbf{R}_m = \mathbf{R}_p$ , obtenemos  $T_{\mathbf{R}_l}T_{\mathbf{R}_m} = T_{\mathbf{R}_p}$  y  $e^{i(\alpha_l+\alpha_m)} = e^{i\alpha_p}$ , esto es apropiado para escribir los  $\alpha_l$  como el producto de un vector  $\mathbf{k}$  común a todos  $\alpha$  y asociado a  $\mathbf{R}_l$ .

$$\lambda^{(l)} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}. \quad (1.7)$$

Aquí  $\mathbf{k}$  relaciona el electrón libre y su vector de onda. Si  $E_n$  es degenerada  $f$ -veces, esto es, el mismo eigenvalor  $E_n$  tiene  $f$  eigenfunciones ortogonales  $\psi_{nk}$ , la función producida por operaciones sobre  $\psi_{nk}$  con  $T_{\mathbf{R}_l}$  pueden ser representadas por una combinación lineal de todos las  $\psi_{nk}$ ,

$$T_{\mathbf{R}_l}\psi_{nk} = \sum_{k'=1}^f \lambda_{kk'}^{(l)} \psi_{nk'}. \quad (1.8)$$

Cada operador  $T_{\mathbf{R}_l}$  del grupo de traslación es asociado con una matriz  $\lambda_{kk'}^{(l)}$  dada en la Ec. (1.8). Estas matrices claramente satisfacen las mismas reglas de multiplicación para  $T_{\mathbf{R}_l}$ ,

$$T_{\mathbf{R}_l}T_{\mathbf{R}_m} = T_{\mathbf{R}_p} \longrightarrow \sum_{k'=1}^f \lambda_{kk'}^{(l)} \lambda_{k'k''}^{(m)} = \lambda_{kk''}^{(p)}. \quad (1.9)$$

Por lo tanto las  $\lambda_{kk''}$  forman un grupo, el cual es llamado una representación  $f$ -dimensional del grupo de traslaciones de la base  $\psi_{nk}$ .

En lugar de las  $f$  eigenfunciones  $\psi_{nk}$ , por medio de combinaciones lineales podemos producir un nuevo conjunto de  $f$  eigenfunciones ortogonales que formen la base en una nueva representación matricial equivalente. De teoría de grupos es conocido que entre todas las representaciones equivalentes de un grupo abeliano (tales como el grupo de traslaciones) uno siempre puede encontrar una con matrices en forma diagonal.

$$\Lambda_{kk'}^{(l)} = \Lambda_{kk}^{(l)} \delta_{kk'}. \quad (1.10)$$

Sustituyendo en Ec. (1.8) obteniendo,

$$T_{\mathbf{R}_l}\psi_{nk} = \sum_{k'} \Lambda_{kk'}^{(l)} \psi_{nk'} = \sum_{k'} \Lambda_{kk}^{(l)} \delta_{kk'} \psi_{nk'} = \Lambda_{kk}^{(l)} \psi_{nk}. \quad (1.11)$$

De consideraciones similares se sigue de Ec. (1.6), que encontramos  $|\Lambda_{kk}^{(l)}|^2 = 1$  y  $\Lambda_{kk}^{(l)} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}$ . Esto para toda  $\psi$  hay siempre un  $\mathbf{k}$  tal que  $\psi$ , es una eigenfunción de  $T_{\mathbf{R}_l}$ , con eigenvalor  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}$ , en este caso  $\psi$  esta determinado por  $\mathbf{k}$ :  $\psi = \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ .

Las soluciones no degeneradas de la ecuación de Schrödinger, así como combinaciones lineales de la solución degenerada, son al mismo tiempo eigenfunciones  $\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ , de el operador de traslación  $T_{\mathbf{R}_l}$  con eigenvalores  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}$ ,

$$T_{\mathbf{R}_l}\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (1.12)$$

Entonces  $\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  son al mismo tiempo eigenfunciones del hamiltoniano, los eigenvalores  $E_n$  también dependen de  $\mathbf{k}$  ( $E_n = E_n(\mathbf{k})$ ). Para  $E_n$  degeneradas, tenemos en este caso  $E_n(\mathbf{k}_k) = E_n(\mathbf{k}_{k'})$ . Teniendo en cuenta la Ec. (1.2)

$$\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1.13)$$

Si insertamos la expresión

$$\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1.14)$$

en Ec. (1.13), tenemos para el lado izquierdo  $e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R}_l)}u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l)$ , y para el lado derecho  $e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R}_l)}u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ . Por lo tanto,

$$u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (1.15)$$

donde  $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  tiene la periodicidad de la red. Las funciones  $\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  son llamadas **funciones de Bloch**.

La forma de las eigenfunciones da la primera pista de el significado físico de la  $\mathbf{k}$ . Si hacemos  $u = const$ ,  $\psi$  esta dada por;  $\psi = ce^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . El electrón en este caso, se tiene que es una partícula libre y es representada por una onda plana con vector de onda  $\mathbf{k}$ . Así tomando el limite del electrón libre, el vector  $\mathbf{k}$  de la Ec. (1.7) se hace igual al vector de onda  $\mathbf{k}$ . Si trasladamos en este sentido al caso cristalino, entonces (1.14) corresponde al estado en el que el electrón de Bloch es representado por una onda plana la cual es modulada por la periodicidad de la red. Explorando esta interpretación, podemos dibujar conclusiones adicionales del teorema de Bloch.

Establecemos la red reciproca  $\mathbf{K}_m$  en el espacio de los vectores  $\mathbf{k}$  (espacio  $k$ ). Donde  $\mathbf{K}_m = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3$  (vector de la red reciproca) también tenemos que  $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ , con  $n_i$  enteros y  $\mathbf{a}_i$  los vectores base de la red, se definen  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  de la siguiente manera,

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3},$$

donde podemos ver que  $\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{R}_l$  es un entero múltiplo de  $2\pi$ .

Operando en  $\psi(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m, \mathbf{r})$  con  $T_{\mathbf{R}_l}$  nos da,

$$T_{\mathbf{R}_l}\psi(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m, \mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_m)\cdot\mathbf{R}_l}\psi(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m, \mathbf{r}). \quad (1.16)$$

Sin embargo  $T_{\mathbf{R}_l}$  no actúa sobre  $\mathbf{k}$ , sino todos los  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}_m$  están asociados con una  $\psi(\mathbf{r})$ . Todos estos puntos en el espacio  $\mathbf{k}$  son equivalentes,

$$\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \psi_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m, \mathbf{r}). \quad (1.17)$$

Interpretamos este resultado como sigue. Una clasificación de las soluciones de Schrödinger en términos del vector  $\mathbf{k}$ , los valores de  $\mathbf{k}$  en la primera zona de Brillouin en el espacio  $\mathbf{k}$  son suficientes. La función  $E_n(\mathbf{k})$  puede corresponder a la primera zona de Brillouin.

Esta representación de la función  $E_n(\mathbf{k})$  el espacio  $\mathbf{k}$  sabemos que es el esquema de la zona reducida. En la zona de Brillouin  $E_n(\mathbf{k})$  nos da para todo vector fijo  $\mathbf{k}$  un espectro de energía discreto ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Para un  $n$  dado,  $E_n(\mathbf{k})$  dentro de la primera zona de Brillouin es una función continua y diferenciable de  $\mathbf{k}$ . Esta es llamada banda de energía. Todas las bandas juntas, esto es, la función  $E_n(\mathbf{k})$  completa, se refiere a toda la estructura de banda.

### 1.3. Funciones de Wannier

En la discusión anterior hemos hecho énfasis en una descripción en la cual las funciones de onda de la forma de Bloch reflejan la periodicidad del potencial cristalino [5]. Veamos ahora una descripción alternativa en términos en términos de orbitales localizados, para ello utilizamos las funciones de Wannier, [6, 7]. Re-definamos la función  $\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \equiv \psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r})$ . Sabemos que  $\psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r})$  es continua en  $\mathbf{k}$  y periódica en la red recíproca.

Equivalentemente  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  puede tener una periodicidad en la red recíproca y podemos escribirla como una serie de Fourier,

$$\psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} w_{\mathbf{R}}^n(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad (1.18)$$

donde

$$w_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega_B} \int_{\Omega_B} \psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d\mathbf{k} = \frac{1}{\Omega_B} \int_{\Omega_B} \psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d\mathbf{k}. \quad (1.19)$$

Este último paso se sigue del teorema de Bloch, donde  $\Omega_B$  denota el volumen de la celda unitaria del espacio recíproco, la cual es llamada la Zona de Brillouin(BZ). La Ec. (1.18) podemos escribirla como:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} w^i(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad (1.20)$$

donde

$$w^i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega_B} \int_{\Omega_B} \psi_{\mathbf{k}}^i(\mathbf{r}) d\mathbf{k}, \quad (1.21)$$

$w^i(\mathbf{r})$  es la función de Wannier para la  $i$ -ésima banda y es una función implícita, la cual da una descripción completa de la banda. Las funciones de Wannier para una banda dada no son únicas, podemos multiplicar todas las  $\psi_{\mathbf{k}}$  en la integral (1.21) por un factor de fase.

En todos los casos, nosotros queremos la forma de las funciones de Wannier encontrando la máxima simetría posible; otro punto de interés es ver si las funciones de Wannier son reales. Las propiedades de transformación de las funciones de onda para  $\mathbf{k} = 0$  son relacionadas con sus funciones de Wannier: tenemos, para todo operador  $\alpha$  de el grupo puntual, con tal que no exista una degeneración esencial en  $\mathbf{k} = 0$

$$\psi_0(\alpha\mathbf{r}) = \chi(\alpha)\psi_0(\mathbf{r}), \quad (1.22)$$

( $|\chi(\alpha)| = 1$ ) y tenemos la situación donde  $w(\mathbf{r})$  tiene las mismas propiedades de transformación de  $\psi_0$ . Esta situación puede ocurrir en bandas simples, las cuales definimos como aquellas para las cuales podemos escribir para todo  $\mathbf{k}$ ,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\alpha\mathbf{r}) = \chi(\alpha)\psi_{\alpha^i\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.23)$$

que corresponde a la Ec. (1.22). Para una  $\mathbf{k}$  en la BZ podemos imponer esta condición en toda la banda de energía, pero no para altos puntos de simetría.

Con la Ec. (1.23), la simetría de las funciones de Wannier son evidentes. Tenemos que

$$\begin{aligned} \Omega_B w(\alpha\mathbf{r}) &= \int_{\Omega_B} \psi_{\mathbf{k}}(\alpha\mathbf{r}) d\mathbf{k} = \chi(\alpha) \int_{\Omega_B} \psi_{\alpha^i\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{k} \\ &= \chi(\alpha) \int_{\Omega_B} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{k} = \chi(\alpha) \Omega_B w(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.24)$$

En otras palabras, para bandas simples, las funciones de Wannier pueden ser construidas para mostrar la simetría de la función de onda cuando  $\mathbf{k} = 0$ . Ahora consideremos que las funciones de Wannier, son complejas, descomponiendo en sus partes real e imaginaria,

$$w(\mathbf{r}) = w_{Re}(\mathbf{r}) + w_{Im}(\mathbf{r}). \quad (1.25)$$

Si la Ec. (1.24) es verdadera, esto es, es verdadera para  $w_{Re}$  y  $w_{Im}$ . Entonces

$$\psi_{-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} w_{Re}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} + \sum_{\mathbf{R}} w_{Im}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad (1.26)$$

considerando que

$$\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} w_{Re}(\mathbf{r} - \mathbf{R})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} - \sum_{\mathbf{R}} w_{Im}(\mathbf{r} - \mathbf{R})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad (1.27)$$

tal que

$$\psi_{-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} w_{Re}(\mathbf{r} - \mathbf{R})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}. \quad (1.28)$$

En una banda no degenerada,  $\psi_{\mathbf{k}}^*$  y  $\psi_{-\mathbf{k}}$  pueden diferir únicamente por un factor de fase, tal que  $\psi_{-\mathbf{k}} = -\psi_{\mathbf{k}}^*$ , las funciones de Wannier pueden ser reales, y, además, desplegar las propiedades de transformación de la Ec. (1.24) si la banda es simple. En otro caso

$$\psi_{-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = 0. \quad (1.29)$$

las funciones de Wannier son completamente imaginarias, y además, desplegar las propiedades de transformación de la Ec. (1.24) si la banda es simple. Por supuesto nosotros podemos forzar la condición  $\psi_{\mathbf{k}}^* = \psi_{-\mathbf{k}}$ , sino tratamos de imponer otras condiciones. Sin embargo, la carencia de continuidad en  $\mathbf{k}$  de  $\psi_{\mathbf{k}}$ , por ejemplo, puede hacer que  $w(\mathbf{r})$  pierda su característica de ser localizada. Nosotros podemos, además, examinar las propiedades de  $\psi_0(\mathbf{r})$  para resolver la pregunta. Si  $\psi_0(\mathbf{r})$  es tomado puramente real, las funciones de Wannier no pueden ser puramente imaginarias, y viceversa. Suponemos que, por lo menos para una dirección de  $\mathbf{k}$ , existe un operador  $\beta$  tal que  $\beta\mathbf{k} = -\mathbf{k}$ . Ahora de la Ec. (1.22), y (1.23), aplicado a este operador, en la dirección  $\mathbf{k}$ ,

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \psi_{-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \chi(\beta)\psi_0(\mathbf{r}). \quad (1.30)$$

Si tomamos  $\psi_{\mathbf{k}}^* = \psi_{-\mathbf{k}}$ ,

$$\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = \chi(\beta)\psi_0(\mathbf{r}), \quad (1.31)$$

tal que las funciones de Wannier son completamente reales, teniendo que  $\chi(\beta) = 1$ . En otro caso las funciones de Wannier son completamente imaginarias,  $\chi(\beta) = -1$ .  $\chi(\beta)$  puede, de hecho, ser integral si la degeneración en el tiempo no existe para  $\mathbf{k} = 0$ , por lo tanto  $\psi_0^*(\mathbf{r})$  y  $\psi_0(\mathbf{r})$  pueden diferir por un factor de fase, tal que  $\psi_0$  puede ser elegida completamente real o completamente imaginaria.

En resumen, podemos decir, para bandas no degeneradas, las funciones de Wannier se pueden elegir puramente reales o puramente imaginarias. Pero en una banda

simple, donde podemos tomar  $w(\mathbf{r})$  que tiene la simetría de  $\psi_0(\mathbf{r})$ , es enteramente real, si  $\chi(\beta) = 1$ , y puramente imaginario si  $\chi(\beta) = -1$ , en el orden que esto tenga esta simetría.

De la renormalización de las funciones de Bloch,

$$\int_V \psi_{\mathbf{k}_1}^{i*}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_2}^j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \Omega_B \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{ij}. \quad (1.32)$$

tenemos que:

$$\begin{aligned} \int w^{i*}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) w^j(\mathbf{r} - \mathbf{S}) d\mathbf{r} &= \frac{1}{\Omega_B^2} \int \int_{\Omega_B} \psi_{\mathbf{k}_1}^{i*}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \psi_{\mathbf{k}_2}^j(\mathbf{r} - \mathbf{S}) d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{\Omega_B^2} \int d\mathbf{r} \int_{\Omega_B} \psi_{\mathbf{k}_1}^{i*}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_2}^j(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{S}} d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_1 \\ &= \frac{\delta_{ij}}{\Omega_B} \int_{\Omega_B} \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{S}} d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_1 \\ &= \frac{\delta_{ij}}{\Omega_B} \int_{\Omega_B} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{S}} d\mathbf{k}_2 \\ &= \delta_{ij} \delta(\mathbf{R}, \mathbf{S}), \end{aligned} \quad (1.33)$$

donde  $\delta(\mathbf{R}, \mathbf{S})$  es la delta de Kronecker generalizada definida por:

$$\delta(\mathbf{R}, \mathbf{S}) = \begin{cases} 1 & \text{para } \mathbf{R}=\mathbf{S}; \\ 0 & \text{otro caso.} \end{cases}$$

Hemos demostrado que como consecuencia de la Ec. (1.22):

$$\int_V w^{i*}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) w^j(\mathbf{r} - \mathbf{S}) d\mathbf{r} = \delta_{ij} \delta(\mathbf{R}, \mathbf{S}), \quad (1.34)$$

las funciones de Wannier evidentemente forman un conjunto de funciones ortonormal, tal que podemos escribir la relación de completos como:

$$\sum_{R,i} w^{i*}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}) w^i(\mathbf{r} - \mathbf{S}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (1.35)$$

Es importante preguntarse en este punto que la ecuación de Schrödinger para las ondas de Bloch, que implicaciones tiene para las funciones de Wannier. La ecuación de onda

$$H\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.36)$$

sustituyendo la Ec. (1.18),

$$\sum_R Hw(\mathbf{r} - \mathbf{R})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \sum_R E(\mathbf{k})w(\mathbf{r} - \mathbf{R})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}. \quad (1.37)$$

Sustituyendo la expansión  $E(\mathbf{k}) = \sum_R E_{\mathbf{R}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$ ,

$$Hw(\mathbf{r}) = \sum_R E_{\mathbf{R}}w(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (1.38)$$

multiplicando ambos lados por  $w^*(\mathbf{r} - \mathbf{S})$  e integrando sobre todo el espacio, encontrando,

$$E_{\mathbf{S}} = \int w^*(\mathbf{r} - \mathbf{S})Hw(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (1.39)$$

Desafortunadamente la Ec. (1.38) no es la única función de Wannier. Podemos construir cualquier función  $\phi(\mathbf{r})$  tal que:

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_R \xi_{\mathbf{R}}w(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (1.40)$$

la cual se reduce a  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  con el cambio de  $\xi_{\mathbf{R}}$  por  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$ . Pero de la Ec.(1.40) encontramos:

$$H\phi(\mathbf{r}) = \sum_R \xi_{\mathbf{R}}Hw(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \sum_{R,S} E_{\mathbf{R}}\xi_{\mathbf{S}}Hw(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{S}) = \sum_{\mathbf{R}} E_{\mathbf{R}}\phi(\mathbf{r}). \quad (1.41)$$

La cual es idéntica con la forma original (1.38). La solución de la ecuación (1.38) es encontrada claramente sujeta a las relaciones de ortonormalidad (1.34), [8].

Comentemos un poco sobre el significado de las funciones de Wannier. Para electrones limitados fuertemente a los sitios de la red, por ejemplo, los electrones del estado base, requerimos que la función de onda para los electrones se comporte como una partícula libre en cada orbital  $\phi$  de átomo en cada celda. La función tiene que satisfacer el teorema de Bloch, y vemos por inspección que este requerimiento es satisfecho por la función,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}. \quad (1.42)$$

Si la aproximación es buena, la banda puede ser muy estrecha y la energía media  $E(0)$  puede ser dada exactamente por la energía del electrón en el átomo libre. La Ec. (1.42) nos da la interpretación de las funciones de Wannier como una perturbación orbital atómica. Sin embargo, la perturbación puede a menudo ser muy grande en cristales reales como para que ya no valga la utilidad de esta interpretación.

## 1.4. Electrones en sólidos

Existen diversos modelos que intentan describir el comportamiento de los electrones en los sólidos cristalinos. Uno de los primeros fue propuesto por P. Drude en 1900, el cual desprecia las interacciones tanto entre los electrones como entre éstos y los iones positivos. Además, dicho modelo es completamente clásico y no toma en cuenta la geometría del sistema, por lo que describe únicamente ciertas propiedades electrónicas en los metales. Sommerfeld en 1927 mejoró el modelo de Drude considerando los electrones como partículas cuánticas regidas por la estadística de Fermi-Dirac. Sin embargo, este modelo tampoco es capaz de explicar por que los materiales presentan propiedades de conducción que varían más de treinta ordenes de magnitud desde un buen conductor hasta un típico aislante. En la década de los treinta del siglo pasado surgió la teoría de bandas, la cual aborda el problema de un solo electrón sometido a un potencial periódico, el cual incluye la distribución periódica de los iones y el potencial promedio aportado por los demás electrones de valencia. Dentro de esta teoría, las funciones de onda electrónicas son las funciones de Bloch  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ .

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.43)$$

donde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  tiene el mismo periodo ( $\mathbf{R}$ ) de la red cristalina, es decir,  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  estas funciones son soluciones generales de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico [3],

$$H\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.44)$$

Un electrón descrito por estas funciones de Bloch tiene la misma probabilidad de estar en todas las celdas unitarias de la red y consecuentemente a estos estados caracterizados por las funciones de Bloch se les denomina estados extendidos.

El potencial que experimenta el electrón en un sólido real es de gran complejidad y las funciones de onda correspondientes no son planas por no ser partículas libres, ni orbitales atómicos por tener movilidad diferente de cero, sino son intermedios de estos dos extremos. Este problema se aborda actualmente por dos aproximaciones diferentes: La aproximación del electrón casi libre y la de amarre

fuerte (tight binding). En la primera se considera que la energía total del electrón es mucho mayor que la energía potencial periódica. En estas condiciones, las bandas permitidas son anchas y las prohibidas angostas. En cambio, en la aproximación de amarre fuerte se considera que la energía potencial del electrón representa casi toda la energía (ver siguiente sección). Las funciones de onda y los niveles de energía permitidos de todo el cristal se asemejan a las funciones de onda y los niveles de energía de los átomos aislados, respectivamente. La aplicabilidad de las aproximaciones a diferentes sistemas depende de la naturaleza del sistema en estudio. En particular, el modelo de amarre fuerte tiene la virtud de poder incluir el desorden estructural en una forma natural.

## 1.5. Modelo de amarre fuerte

Encontrar 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 [3, 5].

Consideremos un cristal cuya base consta de un solo átomo. En el modelo de amarre fuerte se supone que los átomos están muy separados entre si, de manera que la interacción entre vecinos es relativamente débil y los electrones están fuertemente ligados a los átomos. Las funciones de onda del cristal en la aproximación del modelo de amarre fuerte se basan en las funciones de onda de átomos aislados. Si la función de potencial relacionada con un átomo aislado es  $V_0(\mathbf{r})$ , entonces la solución de la ecuación de Schrödinger,

$$H_0\psi = \nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}), \quad (1.45)$$

representa la funciones de onda electrónicas del átomo.

Denotemos por  $\psi_0$  la función de onda del estado base de un electrón en un átomo aislado, que se mueve en un potencial  $V_0(r)$  y cuya energía es  $E_0$ . La función de onda del electrón en el cristal la podemos escribir como una superposición de funciones de onda atómicas,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n a_{kn} \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (1.46)$$

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 átomos del cristal. Las constantes  $a_{kn}$  quedan determinadas por el teorema de Bloch y la condición de normalización:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{T}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.47)$$

$$\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 1. \quad (1.48)$$

Con  $\mathbf{T}$  el vector de traslación del cristal, así:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (1.49)$$

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

Sea  $V_0(\mathbf{r})$  el potencial periódico de la red cristalina. El hamiltoniano total del electrón en el cristal lo podemos escribir como:

$$H = H_0 + H', \quad (1.50)$$

con  $H_0$  el hamiltoniano de un átomo aislado y  $H'$  la diferencia de energías potenciales para el electrón en el átomo aislado y en el cristal:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (1.51)$$

$$H' = V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n). \quad (1.52)$$

De la ecuación de Schrödinger  $H_0\psi_0 = E(0)\psi_0$ , utilizando (1.49),

$$H_0\psi_{\mathbf{k}} = \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} H_0\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) = E_0 \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) = E_0\psi_{\mathbf{k}}. \quad (1.53)$$

También la función de onda debe satisfacer

$$H\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = (H_0 + H')\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.54)$$

donde el valor esperado para la energía del electrón en el cristal esta dada por:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) H \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}. \quad (1.55)$$

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

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= \frac{\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) (H_0 + H') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}} \\ &= E_0 + \frac{\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} (V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) d\mathbf{r}}{\int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Teniendo en cuenta (1.48), tenemos

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \frac{1}{N} \sum_n \left\{ \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)} \int \psi_0^*(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)] \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right\}. \quad (1.57)$$

Debido a la periodicidad del cristal y a causa de la suma sobre todos los valores de  $m$ , cada termino de la suma sobre  $n$  da el mismo valor. El valor de la suma sobre  $n$ , por tanto es el valor de cualquier término de la suma (por ejemplo, para mayor claridad, aquel para el que  $n=0$ ) multiplicando por el número de términos de la suma, que es  $N$ . Podemos escribir la energía como sigue:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \int \psi_0^*(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)] \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.58)$$

donde la suma se toma sobre todos los átomos del cristal. Puesto que la función de onda  $\psi_0$  decae casi siempre de un modo muy rápido con respecto a la distancia y, puesto que las magnitudes de las integrales (1.58)) están gobernadas esencialmente por la cantidad de superposición entre dos funciones de onda centradas en átomos separados por distancias  $r_m$ , las contribuciones de los términos se reducen con rapidez conforme aumenta  $r_m$ . Generalmente se tiene como buena aproximación al considerar los términos del vecino más cercano. También se supondrá que todas las funciones de onda  $\psi_0$  son esféricamente simétricas; en estas condiciones, todas las aportaciones del vecino mas cercano serán idénticas. En este caso, el método se reduce al caso en el que la configuración electrónica del estado basal en el átomo aislado es la de un estado  $s$ .

Para el caso  $m = 0$ , la integral (1.58) se convierte en:

$$\int \psi_0^*(\mathbf{r}) [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})] \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \alpha, \quad (1.59)$$

mientras que, para los átomos más cercanos,

$$\int \psi_0^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) [V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})] \psi_0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = -\beta, \quad (1.60)$$

en donde  $\mathbf{R}_m$  relaciona al átomo en el origen con el átomo vecino más cercano.

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - \alpha - \beta \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}. \quad (1.61)$$

Definimos  $\varepsilon_0 = E_0 - \alpha$ , tal que la suma se realiza para los primeros vecinos.

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - \beta \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}. \quad (1.62)$$

En el caso de un cristal cúbico simple, las componentes del vector  $\mathbf{R}_n$  se puede expresar como

$$\mathbf{R}_n = (\pm a, 0, 0), (0, \pm a, 0), (0, 0, \pm a),$$

en donde  $a$  es la constante de red. La ecuación (1.61) da, entonces,

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - \alpha - 2\beta(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (1.63)$$

De acuerdo con esta ecuación, es evidente que existe un intervalo de valores de energía permisibles correspondientes a varios valores que pueden tener  $k_x$ ,  $k_y$  y  $k_z$ . Los estados permisibles forman una banda de energía. De acuerdo con (1.63), el valor mínimo de la energía, está en el punto, para el cual,  $k_x = k_y = k_z = 0$ , es decir, en el origen de una gráfica con coordenadas ortogonales  $(k_x, k_y, k_z)$  en el espacio  $\mathbf{k}$ . Los valores máximos se producen en los vértices de un cubo dentro del espacio  $\mathbf{k}$  cuyas coordenadas son  $(\pm\pi/a, \pm\pi/a, \pm\pi/a)$ , en donde todas las permutaciones de los signos  $+$  y  $-$  entre las tres coordenadas se toman para generar ocho puntos de los vértices. En estos sitios cada término de coseno toma el valor  $-1$ . La diferencia de energía máxima y mínima es,  $12\beta$ . Esta es la anchura de la banda de energía correspondiente al estado  $s$  del átomo aislado. Si los átomos vecinos más cercanos están muy separados la superposición de funciones de onda  $\psi_0(\mathbf{r})$  y  $\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$ , como lo expresa el producto  $\psi_0(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m)$  en la integral (1.60), se hace muy pequeño como sucede con el valor de  $\beta$  según lo establece dicha ecuación. En el límite donde las distancias atómicas se hacen grandes (es en este límite donde son realmente adecuadas las aproximaciones en las que se basan los cálculos de amarre fuerte), las bandas de energía permisibles se hacen angostas acercándose a un solo valor de la energía discreta, correspondiendo al nivel energético del estado atómico  $s$  conforme la separación se hace infinita.

Con el fin de facilitar la discusión en lo que resta del capítulo emplearemos la notación de Dirac [10]. En esta notación y en la representación de las funciones de Wannier el hamiltoniano de la Ec. (1.50) puede escribirse, para el caso de vecinos más cercanos, como:

$$H = \varepsilon_0 \sum_i |i\rangle\langle j| + \beta \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} |i\rangle\langle j|, \quad (1.64)$$

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

Los resultados obtenidos para los anchos de banda (o banda de energía), en el modelo de amarre fuerte de las redes lineal, cuadrada, cúbica y triangular constituyen casos particulares de un resultado general conocido como *Teorema de Perron-Frobenius*. A continuación probamos dicho teorema de manera muy simple. Sean las soluciones de la ecuación de Schrödinger  $\psi = \sum_i c_i |i\rangle$ , entonces las ecuaciones para los coeficientes  $c_i$  son:

$$(E - \varepsilon_0)c_i = \sum_{i \neq j} \beta c_j. \quad (1.65)$$

Así que,

$$|E - \varepsilon_0||c_i| = \left| \sum_{i \neq j} \beta c_j \right| \leq \sum_{i \neq j} |\beta| |c_j|. \quad (1.66)$$

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

$$|E - \varepsilon_0| \leq Z|\beta|, \quad (1.67)$$

donde  $Z$  es la coordinación local, es decir, el número de primeros vecinos que tiene un sitio del sistema. Así mismo, cabe señalar que el espectro de energías en el modelo de amarre fuerte, es simétrico respecto a  $E = \varepsilon_0$  cuando la red es bipartita, es decir, cuando la red puede subdividirse en dos subredes, digamos A y B, de tal forma que todos los primeros vecinos de un sitio de A pertenecen a B y viceversa. De la Ec. (1.65), donde, en el caso de la red bipartita  $i$  pertenece a A y  $j$  pertenece a B y viceversa, vemos que si el sistema tiene una energía  $E - \varepsilon_0$ ,  $\varepsilon_0 - E$ , también es una energía posible del sistema ya que las funciones de onda correspondientes a estas dos energías difieren únicamente en el signo de la función de onda de la subred.

Cabe mencionar que este teorema no asegura que las bandas de energía sean simétricas con respecto a  $E_0$ . Hay redes cristalinas, tales como la red triangular o la *fcc*, que no tienen dicha simetría debido a la frustración de los estados antienlaces, es decir, estas redes contienen anillos cuyos números de sitio son impares.

## 1.6. Segunda cuantización

En el formalismo del número de ocupación (o segunda cuantización), esta descrita la física de muchos cuerpos, en razón a que, la segunda cuantización nos permite abordar fácilmente problemas en los cuales el número de partículas de una o varias especies cambian como producto de la interacción; además, tiene que ver con las propiedades de simetría, tanto de Fermi como de Bose, es decir, en segunda cuantización los operadores de creación y de destrucción obedecen ciertas reglas de conmutación, las cuales contienen las propiedades de simetría de cada sistema.

Consideremos un conjunto ortonormal de funciones de onda de una sola partícula  $\phi_{k_j}(\mathbf{r})$  donde  $k_j$  denota el estado de una sola partícula mientras que la variable  $\mathbf{r}$  representa todas las coordenadas de la partícula, incluyendo las coordenadas espaciales y la componente  $z$  del espín [9]. Ahora considérese un sistema de fermiones independientes en el que cada partícula está en alguno de los estados  $\phi_{k_j}$  y sea  $n_j$  el número de partículas en dicho estado ( $n_j$  puede ser 0 o 1). Las cantidades  $n_j$  son los llamados números de ocupación y constituyen las variables fundamentales

del formalismo de segunda cuantización, en vez de las coordenadas de las partículas. La función de onda para un sistema de  $N$  fermiones no interactuantes, debe construirse como producto antisimétrico de función de onda de una sola partícula. Tales funciones antisimétricas bajo el intercambio de las coordenadas de dos fermiones, se expresa por medio del determinante de Slater,

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{k_1}(\mathbf{r}_1) & \phi_{k_1}(\mathbf{r}_2) & \dots & \phi_{k_1}(\mathbf{r}_N) \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \phi_{k_N}(\mathbf{r}_1) & \phi_{k_N}(\mathbf{r}_2) & \dots & \phi_{k_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (1.68)$$

El factor  $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ , en la ecuación (1.68), asegura que  $\Phi$  este normalizada. Nótese que dos estados no pueden tener los mismos números cuánticos  $k_i$  ni las coordenadas de dos partículas pueden ser iguales ya que en ambos casos la función de onda se anula (Principio de exclusión de Pauli). Por ejemplo, en un sistema de dos partículas, con una partícula en el estado  $\phi_{p_1}$  ( $\equiv \phi_1$ ), y la otra en  $\phi_3$ , la función de onda es,  $\Phi_{k_1=1, k_2=3}$  ( $\equiv \Phi_{13}$ ) o  $\Phi_{k_1=3, k_2=1}$  ( $\equiv \Phi_{31}$ ). Entonces las partículas son idénticas, esto evidentemente representa el mismo estado, pero por (1.68) esta difiere por un signo menos. Para eliminar esta ambigüedad, siempre escribiremos  $\Phi$  con los  $k$ 's en el orden que se muestra a continuación

$$\Phi_{k_1 < k_2 < \dots < k_N}, \quad (1.69)$$

con signo + asociado. Entonces, así  $\Phi_{31}$  no aparecerá nuevamente.

En forma compacta se puede escribir  $\Phi$  como,

$$\begin{aligned} \Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) &= \Phi_{n_1, \dots, n_i, \dots}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | n_1, n_2, \dots, n_N, \dots \rangle, \end{aligned} \quad (1.70)$$

donde  $n_1$  es el número de partículas en el estado de una sola partícula  $\phi_{k_i}(\mathbf{r})$  de (1.68).

Asumimos por sencillez, que el número de partículas es fijo, por lo tanto:

$$\sum_i n_i = N. \quad (1.71)$$

También, por comodidad, dejaremos fuera de la función de onda la parte en  $r$ , además de que la escribiremos en la notación de Dirac, quedando de la siguiente forma [11]:

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N} = \phi_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} = |n_1, n_2, \dots, n_N, \dots\rangle. \quad (1.72)$$

La última ecuación se llama eigenvector en el espacio abstracto del formalismo de Dirac. Veamos ahora, cómo se representan los operadores en el formalismo de

segunda cuantización [12]. Todos los operadores en este formalismo pueden ser expresados en términos de operadores de creación y de aniquilación,  $c_i^\dagger$  y  $c_i$ , cuya definición esta dada por:

$$c_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_i} (1 - n_i) |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \quad (1.73)$$

$$c_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = (-1)^{\sum_i} n_i |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle, \quad (1.74)$$

donde

$$(-1)^{\sum_i} = (-1)^{[n_1 + n_2 + \dots + n_{i-1}]}, \quad (1.75)$$

esto es,  $c_i^\dagger$  y  $c_i$ , deben tener la propiedad de que si actúan en tal secuencia que su efecto neto es cambiar dos partículas, entonces la función de onda debe contener un cambio de signo, lo cual es necesario debido a la antisimetría de la función de onda.

Un ejemplo de dicha secuencia es la siguiente:

$$|1, 1, 0, 0, \dots\rangle \rightarrow |0, 1, 1, 0, \dots\rangle \rightarrow |1, 0, 1, 0, \dots\rangle \rightarrow |1, 1, 0, 0, \dots\rangle. \quad (1.76)$$

Veamos como actúan los operadores de creación y de aniquilación:

$$c_i | \dots, 0_i, \dots \rangle = 0, \quad c_i^\dagger | \dots, 1_i, \dots \rangle = 0, \quad (1.77)$$

$$\begin{aligned} c_3 |1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_3} |1, 1, 1 - 1, 1, 1, 0, 0, 0, \dots\rangle \\ &= (-1)^{1+1} |1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 0, \dots\rangle \\ &= +|1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 0, \dots\rangle. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_2^\dagger c_3 c_1^\dagger c_2 c_3^\dagger c_1 |1, 1, 0, 0, 0, 0, \dots\rangle &= c_2^\dagger c_3 c_1^\dagger c_2 c_3^\dagger |0, 1, 0, 0, 0, 0, \dots\rangle \\ &= c_2^\dagger c_3 c_1^\dagger c_2 |0, 1, 1, 0, 0, 0, \dots\rangle \\ &= -c_2^\dagger c_3 c_1^\dagger |0, 0, 1, 0, 0, 0, \dots\rangle \\ &= -c_2^\dagger c_3 |1, 0, 1, 0, 0, 0, \dots\rangle \\ &= +c_2^\dagger |1, 0, 0, 0, 0, 0, \dots\rangle \\ &= -|1, 1, 0, 0, 0, 0, \dots\rangle. \end{aligned}$$

Este último ejemplo nos muestra el efecto de un intercambio de partículas. Los operadores  $c_i^\dagger$  y  $c_i$  tienen las siguientes propiedades:

1. Al aplicar el operador  $c_i^+$  repetidamente al vacío (estado sin partículas) es posible generar todos los demás estados, es decir:

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N} = c_{k_1}^+ c_{k_2}^+ \cdots c_{k_N}^+ |0, 0, 0, \dots\rangle, \quad (1.78)$$

o en forma general,

$$|n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle = (c_1^+)^{n_1} (c_2^+)^{n_2} \cdots |0, 0, 0, \dots\rangle. \quad (1.79)$$

Por ejemplo, el estado  $|0, 1, 1, 0, 0, 0, \dots\rangle$ , se puede crear de la siguiente forma,

$$(c_1^+)^0 (c_2^+)^1 (c_3^+)^1 (c_4^+)^0 |0, 0, 0, \dots\rangle = c_2^+ c_3^+ |0, 0, 0, \dots\rangle = |0, 1, 1, 0, 0, \dots\rangle. \quad (1.80)$$

2. El operador  $c_i^+$  es el hermítico adjunto de  $c_i$ , es decir  $c_i^+ = (c_i)^+$ .
3. Los operadores  $c_i^+$  y  $c_i$  no son hermiticos, por consiguiente no son observables. Un operador  $F$  es hermítico si cumple con,  $F = F^+$ , o en forma más general si

$$\int \Psi^+ F \phi dx = \int (F \Psi)^+ \phi dx. \quad (1.81)$$

Sin embargo, el producto de los operadores  $c_i^+$  y  $c_i$  si es hermítico,  $(c_i^+ c_i)^+ = c_i^+ c_i$ , por lo tanto, el producto es un observable y se le conoce como operador número,

$$\hat{n}_i = c_i^+ c_i, \quad (1.82)$$

y

$$\hat{N} = \sum_i c_i^+ c_i, \quad (1.83)$$

donde  $\hat{n}_i$  es el operador de número de una partícula y  $\hat{N}$  es el operador total de número.

Para entender las propiedades de este operador, apliquémoslo sobre algunos eigen-vectores típicos:

$$\begin{aligned} c_i^+ c_i |n_1, \dots, 1_i, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_i} c_i^+ |n_1, \dots, 0, \dots\rangle \\ &= (-1)^i (-1)^i |n_1, \dots, 1_i, \dots\rangle \\ &= + |n_1, \dots, 1_i, \dots\rangle, \end{aligned} \quad (1.84)$$

en forma similar,

$$c_i^+ c_i |n_1, \dots, 0_i, \dots\rangle = 0 |n_1, \dots, 0_i, \dots\rangle, \quad (1.85)$$

por lo que en general:

$$c_i^+ c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle, \quad (1.86)$$

es decir, el eigenvalor del operador número para el estado  $\Phi_i$  es el número de ocupación para ese estado [13].

Los operadores  $c_i^+$  y  $c_i$  obedecen las siguientes reglas de anti-conmutación para fermiones:

$$\{c_l, c_k^+\} = c_l c_k^+ + c_k^+ c_l = \delta_{lk}, \quad (1.87)$$

$$\{c_l, c_k\} = 0, \quad (1.88)$$

$$\{c_l^+, c_k^+\} = 0. \quad (1.89)$$

Veamos ahora como se expresa algunos operadores de la mecánica cuántica en términos de los operadores  $c_i^+$  y  $c_i$ .

En general el hamiltoniano de un sistema de N partículas interactuantes puede escribirse como:

$$H = \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (1.90)$$

donde el operador  $h(\mathbf{r})$  solo depende de las coordenadas de una sola partícula. Al encontrar sistemas de N partículas siempre encontramos sumas de tales operadores iguales entre sí excepto por una coordenada. Entonces definimos el operador de una sola partícula como:

$$H_1 = \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r}_i). \quad (1.91)$$

De manera similar definimos el operador de dos partículas  $H_2$  como la suma de operadores  $v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$  que dependerá de las coordenadas de un par de partículas,

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (1.92)$$

En esta suma se incluyen todos los pares distintos y se excluye el término  $\nu(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i)$  ya que suponemos que una partícula no interactúa consigo misma. Los elementos de matriz de  $H_1$  serán cero a menos que todos los números de ocupación permanezcan inalterados o bien, los estados difieran en un solo número de ocupación. Para el segundo caso se puede demostrar que, para  $i < j$ ,

$$\langle \dots, n_i = 1, \dots, n_j = 0, \dots | H_1 | \dots, n_i = 0, \dots, n_j = 1, \dots \rangle = h_{ij} (-1)^{S(i+1, j-1)}, \quad (1.93)$$

donde

$$h_{ij} = \langle i | h | j \rangle = \int \phi_i^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (1.94)$$

La integración incluye una suma sobre todas las coordenadas de espín, el término  $S(i+1, j-1)$  es la suma de los números de ocupación desde  $i+1$  hasta  $j-1$ . En general,

$$S(m, n) = \sum_{k=m}^n n_k. \quad (1.95)$$

Si  $i > j$  el exponente en (1.93) es  $S(j+1, i-j)$ . Note que siempre contamos el número de estados ocupados entre el estado de menor índice y el estado con mayor índice. La cantidad  $S$  especifica el número de permutaciones de los renglones  $k_i$ , requeridos para que los determinantes (1.68) tengan todos los renglones iguales excepto por el que es afectado por el operador  $h(\mathbf{r}_i)$ . Asimismo, los elementos de matriz diagonales de  $H_1$  son simplemente,

$$\langle \dots, n_k, \dots | H_1 | \dots, n_k, \dots \rangle = \sum_k h_{kk} n_k. \quad (1.96)$$

Como lo hemos venido mencionando trabajaremos en el espacio de Hilbert utilizando los vectores base  $|n_1, \dots, n_k\rangle$ , también tendremos en cuenta las propiedades (1.73) y (1.74) de los operadores de creación y aniquilación, recordemos que estos operadores agregan o remueven una partícula al estado  $j$ . Usando estas relaciones se puede verificar que, para  $i < j$ ,

$$\langle \dots, n_i = 1, \dots, n_j = 0, \dots | c_i^+ c_j | \dots, n_i = 0, \dots, n_j = 1, \dots \rangle = (-1)^{S(i+1, j-1)}, \quad (1.97)$$

si consideramos los operadores en orden opuesto, el estado  $\varepsilon_i$  está presente cuando  $c_j$  actúa y un signo negativo adicional es obtenido,

$$\langle \dots, n_i = 1, \dots, n_j = 0, \dots | c_j c_i^+ | \dots, n_i = 0, \dots, n_j = 1, \dots \rangle = -(-1)^{S(i+1, j-1)}. \quad (1.98)$$

Finalmente, para el caso  $i = j$ , es fácil comprobar que,

$$\langle \dots, n_i, \dots | c_i^\dagger c_j | \dots, n_i, \dots \rangle = n_i, \quad (1.99)$$

y

$$\langle \dots, n_i, \dots | c_i c_i^\dagger | \dots, n_i, \dots \rangle = 1 - n_i. \quad (1.100)$$

Todas estas propiedades se resumen en las reglas de anticonmutación vistas anteriormente. Comparando (1.93) y (1.97), es claro que el operador  $H_1$  puede expresarse como:

$$H_1 = \sum_{i,j} \langle i|h|j \rangle c_i^\dagger c_j. \quad (1.101)$$

Los resultados para el operador  $H_2$  son similares, resultando,

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i,j|v|k,l \rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k, \quad (1.102)$$

donde el elemento de matriz  $\langle i,j|v|k,l \rangle$  está dado por,

$$\langle i,j|v|k,l \rangle = \int \phi_i^*(\mathbf{r}_1) \phi_j^*(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_k(\mathbf{r}_1) \phi_l(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (1.103)$$

Es importante mencionar que el orden de los operadores  $(i, j, k, l)$  en la ecuación (1.102) es distinto del que aparece en los elementos de matriz  $(i, j, l, k)$ . De esta manera el hamiltoniano más general de un sistema de  $N$  partículas interactuantes puede escribirse, dentro del formalismo de segunda cuantización, como:

$$H = H_1 + H_2 = \sum_{i,j} \langle i|h|j \rangle c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i,j|v|k,l \rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k. \quad (1.104)$$

Por lo general  $h$  esta dado por  $h(\mathbf{r}) = \frac{p^2}{2m} + u(\mathbf{r})$  con eigenvalor  $\varepsilon_k$ , entonces,

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{i,j} \langle i|h|j \rangle c_i^\dagger c_j = \sum_{i,j} \langle i | \frac{p^2}{2m} + u(\mathbf{r}) | j \rangle c_i^\dagger c_j \\ &= \sum_{i,j} \varepsilon_i \langle i|j \rangle c_i^\dagger c_j = \sum_{i,j} \varepsilon_i \delta_{ij} c_i^\dagger c_j = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i, \end{aligned} \quad (1.105)$$

de igual forma para  $H_2$ . Por lo tanto, podemos escribir el hamiltoniano total en segunda cuantización como:

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle i,j|v|k,l \rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k. \quad (1.106)$$

## 1.7. Modelo de Hubbard

Describir, en forma completa, la interacción electrón-electrón ( $e - e$ ) dentro de un sólido es un problema complicado, obviamente existe la interacción  $e - e$  directa de tipo coulombiano, sin embargo, los electrones en un sólido pueden actuar “indirectamente” por medio de algunas excitaciones elementales, tal es el caso de la interacción e-e mediada por fonones, la cual puede cuantizarse a través del hamiltoniano de Fröhlich. Una de las formas más simples y generales de estudiar la correlación electrónica es a través del modelo de Hubbard [14], puesto que dicho modelo incluye implícitamente los efectos de todo tipo de interacciones electrónicas por medio de los parámetros de su hamiltoniano [15].

Analicemos la interacción para sistemas con banda de energía angostas, por simplicidad matemática veamos el caso de una sola banda electrónica  $s$ . Consideremos ahora nuestro sistema de  $N$  electrones dentro de una red cristalina. De acuerdo al 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, en la representación de los números de ocupación.

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k,\sigma}^+ c_{k,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, k'_1, k'_2} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle k_1, k_2 | \nu | k'_1, k'_2 \rangle c_{k_1, \sigma}^+ c_{k_2, \sigma'}^+ c_{k'_1, \sigma'} c_{k'_2, \sigma}, \quad (1.107)$$

donde  $c_{k,\sigma}^+$  ( $c_{k,\sigma}$ ) es el operador de creación (aniquilación) de un electrón con espín  $\sigma$  ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ) en el sitio  $i$  de la red,  $\varepsilon_k$  es el valor propio de  $h(r)$ , la función propia es  $\psi_k(\mathbf{r})$ , también

$$\langle k_1, k_2 | \nu | k'_1, k'_2 \rangle = \int \psi_{k_1}^*(\mathbf{r}) \psi_{k_2}^*(\mathbf{r}') \nu(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{k'_1}(\mathbf{r}) \psi_{k'_2}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (1.108)$$

Como estamos estudiando la correlación electrónica en bandas angostas una descripción local del sistema, resultaría más apropiado, trabajar con el hamiltoniano en la representación de las funciones de Wannier en lugar de la representación de las funciones de Bloch. Las funciones de Wannier son funciones centradas en el sitio  $i$ , parecidas a las funciones orbitales, pero ortogonales entre sí (estas se obtienen a partir de las funciones de Bloch mediante la transformada de Fourier).

Introduciendo los operadores de creación ( $c_{k,\sigma}^+$ ) y de aniquilación ( $c_{k,\sigma}$ ) para un electrón de espín  $\sigma$  en el estado  $\phi_n(\mathbf{r})$  y usando las transformaciones,

$$\begin{aligned} c_{k,\sigma}^+ &= N^{-1/2} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} c_{j,\sigma}^+ \\ c_{k,\sigma} &= N^{-1/2} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} c_{j,\sigma}. \end{aligned} \quad (1.109)$$

Por lo tanto podemos escribir el hamiltoniano de (1.107) como:

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} \langle i,j|\nu|k,l \rangle c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma'}^+ c_{k,\sigma'} c_{l,\sigma}, \quad (1.110)$$

donde

$$t_{ij} = \langle i|h|j \rangle = t(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \int \phi_i^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}), \quad (1.111)$$

y

$$\langle i,j|\nu|k,l \rangle = \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') \nu(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}') \phi_l(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (1.112)$$

También podemos escribir el hamiltoniano (1.110) en la siguiente forma equivalente:

$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma} + \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ i \neq j}} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} \langle i,j|\nu|k,l \rangle c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma'}^+ c_{k,\sigma'} c_{l,\sigma}, \quad (1.113)$$

en este caso tenemos  $\varepsilon_i = t_{ii}$ , los otros dos términos se definen igual que arriba.

Aquí,  $h(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 + u(\mathbf{r})$ , donde  $u(\mathbf{r})$  es el potencial que siente el electrón debido a todos los iones y  $\nu(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = e^2/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  como la interacción coulombiana de largo alcance entre dos electrones.

Una forma sencilla de trabajar con el hamiltoniano de (1.110) es introduciendo la siguientes aproximaciones. En la primera aproximación se asume que  $t_{ij}$  decae rápidamente con la distancia, de esta manera forma los únicos términos de la matriz que deben considerar son aquellos que incluyen los sitios vecinos más cercanos. Para sistemas isotrópicos, debemos entonces aproximar a  $t_{ij}$  por:

$$t_{ij} = \begin{cases} t & \text{para } (i,j) \text{ vecinos mas cercanos;} \\ 0 & \text{otro caso.} \end{cases} \quad (1.114)$$

La segunda aproximación que se hace es para el término que contiene la interacción electrón-electrón, es decir, se asume que esta interacción es apantallada cuando los electrones están muy retirados, por lo tanto, la contribución más importante es cuando los dos electrones se encuentran en el mismo sitio ( $i = j = k = l$ ). La aproximación estára, dada de la siguiente forma:

$$\langle i,j|\nu|k,l \rangle \simeq \begin{cases} U & \text{si } (i = j = k = l); \\ 0 & \text{otro caso.} \end{cases}$$

El principio de exclusión de Pauli requiere que  $\sigma = -\sigma'$ , con lo cual obtenemos finalmente la versión mas simple del *hamiltoniano de Hubbard*. Considerando solamente interacciones a primeros vecinos, este hamiltoniano esta dado por:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (1.115)$$

donde  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$  es el operador número y  $U$  representa la interacción de electrones en el mismo sitio,  $t_{ij}$  es la integral de transferencia (hopping) entre el sitio  $i$  y el sitio  $j$ , a primera aproximación se considera sólo la transferencia entre vecinos más cercanos. El hamiltoniano de Hubbard no restringe los tipos de interacciones que podrían existir entre los electrones y los efectos resultantes se caracterizan por medio del parámetro  $U$  que se obtiene fenomenológicamente.

Otra aproximación muy importante es la que da origen al *hamiltoniano de Hubbard extendido*, esta aproximación se realiza para bandas angostas, considerando que los elementos de matriz dominantes de la interacción electrón-electrón son

$$\begin{aligned} U &= \langle i, i | \nu | i, i \rangle \\ V &= \langle i, j | \nu | i, j \rangle \quad \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j \text{ primeros vecinos.} \end{aligned}$$

De esta manera  $U$  y  $V$  parametrizan la interacción de dos electrones situados en un mismo sitio y en sitios vecinos, respectivamente. Estas interacciones siempre están presentes en un sólido real aunque sus contribuciones pueden ser muy diferentes. Por ejemplo, para los electrones en la banda  $3d$  de los metales de transición  $U$  y  $V$  son del orden de 20 y 3eV respectivamente. Considerando únicamente estos elementos de matriz del potencial de interacción  $\nu$ , y despreciando los demás términos, se obtiene el *hamiltoniano de Hubbard extendido* que puede escribirse como:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \quad (1.116)$$

donde  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$  es el operador número, y la ocupación electrónica total en el sitio  $i$  es  $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$ . El símbolo  $\langle i, j \rangle$  indica que la suma se extiende sobre los primeros vecinos. De esta manera hemos deducido el hamiltoniano de Hubbard extendido, el cual es útil para estudiar, por ejemplo, la competencia entre ondas de densidad de espín y ondas de densidad de carga, también nos será útil para determinar la función de onda en cuasicristales en particular en una cadena de Fibonacci (esto lo veremos en secciones posteriores).

## 1.8. Método del espacio de estados y su mapeo

En esta sección presentamos de manera detallada el método del espacio de estados, que permite diagonalizar en forma exacta el hamiltoniano de Hubbard para redes infinitas con pocos electrones, trabajando en el espacio real [16, 17]. Este método consiste en mapear el problema de Hubbard a un problema de amarre fuerte con impurezas en un espacio de mayor dimensión [18]. Analizaremos la interacción de un sistema de dos electrones con espines antiparalelos ( $\uparrow\downarrow$ ) en una cadena lineal de  $N$  sitios ( $N = 1, 2, 3, \dots$ ). Para  $N = 2$ , por ejemplo, los posibles

estados de configuración de este sistema serán:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm 0\rangle, \\
 |2\rangle &= |+-\rangle, \\
 |3\rangle &= |0\pm\rangle, \\
 |4\rangle &= |-+\rangle,
 \end{aligned} \tag{1.117}$$

donde el signo + representa un electrón con espín hacia arriba (es decir, la componente  $z$  del espín del electrón es  $\hbar/2$ ), el signo (-) representa un electrón con espín hacia abajo (es decir, la componente  $z$  del espín del electrón es  $-\hbar/2$ ), el signo  $\pm$  representa un sitio con dos electrones, uno con espín hacia arriba y otro con espín hacia abajo y el 0 representa un sitio vacío. Esta red de estados se muestra en la Fig. (1.1),

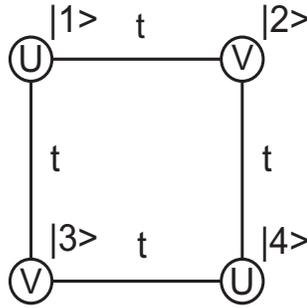


Figura 1.1: Representación geométrica de los estados de dos partículas con espines opuestos en una cadena de dos sitios. Los estados de configuración están representados por círculos con las auto-energías y los parámetros de salto indicados dentro de ellos, respectivamente.

En la base de estados de configuración los elementos de matriz del hamiltoniano están dados por:

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \langle 1|H|1\rangle & \langle 1|H|2\rangle & \langle 1|H|3\rangle & \langle 1|H|4\rangle \\ \langle 2|H|1\rangle & \langle 2|H|2\rangle & \langle 2|H|3\rangle & \langle 2|H|4\rangle \\ \langle 3|H|1\rangle & \langle 3|H|2\rangle & \langle 3|H|3\rangle & \langle 3|H|4\rangle \\ \langle 4|H|1\rangle & \langle 4|H|2\rangle & \langle 4|H|3\rangle & \langle 4|H|4\rangle \end{pmatrix}. \tag{1.118}$$

En este espacio de estados, la auto energía de los estados con elementos de matriz distintos de cero son

$$\begin{aligned}
 \langle 1|H|1\rangle &= \langle 3|H|3\rangle = U, \\
 \langle 2|H|2\rangle &= \langle 4|H|4\rangle = V, \\
 \langle 2|H|1\rangle &= \langle 1|H|2\rangle = t,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 4|H|1\rangle &= \langle 1|H|4\rangle = t, \\
 \langle 3|H|2\rangle &= \langle 2|H|3\rangle = t, \\
 \langle 4|H|3\rangle &= \langle 3|H|4\rangle = t.
 \end{aligned} \tag{1.119}$$

La auto-energía de los estados  $|1\rangle$  y  $|3\rangle$  es  $U$  mientras que la auto-energía de los electrones en sitios vecinos es  $V$ . De esta manera, el problema de dos partículas interactuando entre sí ha sido mapeado al de una sola partícula en un problema de amarre fuerte [19]. La dinámica del sistema queda descrita por el siguiente hamiltoniano,

$$H = \sum_i \varepsilon_i b_i^\dagger b_i + \sum_{i,j} t_{ij} b_i^\dagger b_j, \tag{1.120}$$

donde  $t_{ij}$  es la amplitud de salto entre el estado  $|i\rangle$  y  $|j\rangle$ , el operador  $b_i^\dagger$  crea el estado  $|i\rangle$  mientras que  $b_i$  lo destruye, finalmente  $\varepsilon_i$  es la auto energía del estado  $|i\rangle$  toma los valores  $U$ ,  $V$  y  $0$  ( $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = U$  y  $\varepsilon_2 = \varepsilon_4 = V$ ). Sin embargo, los sitios de este problema de amarre fuerte representan estados de muchos cuerpos y no las funciones de Wannier que usualmente se utilizan. En la notación matricial  $H$  viene dada por

$$H = \begin{pmatrix} U & t & 0 & t \\ t & V & t & 0 \\ 0 & t & U & t \\ t & 0 & t & V \end{pmatrix}. \tag{1.121}$$

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

$$\begin{aligned}
 E_1 &= U, \\
 E_2 &= V, \\
 E_3 &= -\frac{1}{2}(U + V) + \frac{1}{2}\sqrt{(U - V)^2 + 16t^2}, \\
 E_4 &= -\frac{1}{2}(U + V) - \frac{1}{2}\sqrt{(U - V)^2 + 16t^2},
 \end{aligned} \tag{1.122}$$

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

$$\begin{aligned}
 |\psi_1\rangle &= -|1\rangle + |3\rangle, \\
 |\psi_2\rangle &= -|2\rangle + |4\rangle, \\
 |\psi_3\rangle &= \left( \frac{U - V}{4t} - \sqrt{\left(\frac{U - V}{4t}\right)^2 + 1} \right) (|1\rangle + |3\rangle) + |2\rangle + |4\rangle, \\
 |\psi_4\rangle &= \left( \frac{U - V}{4t} + \sqrt{\left(\frac{U - V}{4t}\right)^2 + 1} \right) (|1\rangle + |3\rangle) + |2\rangle + |4\rangle.
 \end{aligned} \tag{1.123}$$

Así, hemos podido encontrar una solución exacta al problema de Hubbard mapeándolo a un problema de amarre fuerte. El número de estados de configuración para una red cualquiera de  $N$  sitios con dos electrones con espines opuestos es  $N^2$ . Para el caso de dos electrones en una cadena lineal con un número infinito de sitios, la red de estados tiene la forma de un arreglo cuadrático bidimensional infinito con un número de impurezas, localizadas en las cadenas diagonales.

La Fig. (1.2) muestra una representación geométrica de los estados en el caso más general, donde los números que aparecen en esta figura indican el orden de los estados.

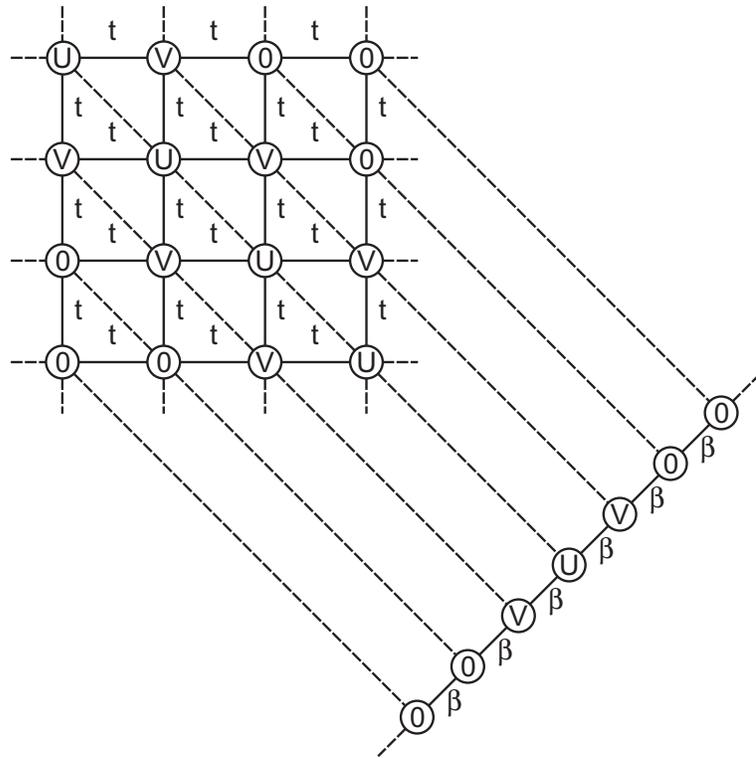


Figura 1.2: Red de estados para un sistema unidimensional compuesto por dos electrones con espín opuesto y cuatro sitios. Dicha red se mapea en una cadena lineal con impurezas en la que el parámetro de *hopping* efectivo está dado por  $\beta = 2t \cos(Ka/\sqrt{2})$

Recordemos que la existencia de un estado con un sitio ocupado por dos electrones requiere una energía  $U$ , mientras que, un estado cuyos dos electrones se encuentran en sitios vecinos más próximos, demanda una energía  $V$ . Un estado con dos electrones situados en sitios lejanos no exige ninguna energía, dentro del hamiltoniano de Hubbard extendido (1.111). La amplitud de la probabilidad de transición entre los estados vecinos es precisamente la  $t$ , ya que la diferencia entre estos dos estados es simplemente el salto de un electrón. Por lo tanto, nuestro

problema original del hamiltoniano de Hubbard extendido en una red de  $d$  dimensiones es equivalente al problema de amarre fuerte de una red con impurezas de  $2d$  dimensiones, es decir, el arreglo de estados (1.117) puede escribirse por medio de un hamiltoniano de amarre fuerte.

Esta red de estados tiene solución exacta, puesto que el hamiltoniano de dicha red es el de amarre fuerte. Una manera simple de encontrar la solución consiste en aprovechar la simetría traslacional de las impurezas y mapear la red bidimensional a una cadena lineal [16], como se muestra en la figura anterior, donde  $\beta = 2t \cos(Ka/\sqrt{2})$ , siendo  $a = 1$  la distancia de la red de estados y  $K$  el vector de onda en la dirección de la proyección. En otras palabras, estamos tratando la red bidimensional en un espacio combinado, una dirección en el espacio real y la otra en el espacio recíproco.

# Capítulo 2

## Propiedades de los sistemas cuasiperiódicos

### 2.1. Cuasicristales

En la sección (1.1), se ha llevado a cabo una revisión general de algunas características de las estructuras cristalinas, entre las que mencionamos la existencia de simetrías prohibidas [20]. Una de estas es la rotación por un ángulo de  $2\pi/5$ . En 1982 trabajando en el National Institute of Standards and technology (NBS), el científico Dan Shechtman estudiando la solidificación abrupta en aleaciones de aluminio-ferro (Al-Fe), tratando de entender la estabilidad cristalográfica de esta fase, observando el sistema aluminio-manganeso (Al-Mn), al ir agregando manganeso en las aleaciones, la microestructura fue cambiando [21]. El 8 de abril de 1982 estudiando con microscopia electrónica una aleación de aluminio rápidamente solidificada con manganeso, 25 % en peso [22]. Al observar el patrón de difracción con simetría de rotación de 10 aristas, posteriormente se descubrieron otras simetrías rotacionales de 8, 10, 12 aristas. Dichas aleaciones tienen patrones de difracción de electrones como el que se muestra en la figura (2.1).

donde podemos ver que si se gira el patrón alrededor del centro un ángulo de  $2\pi/5$  se recupera el patrón original. Otra característica de estas aleaciones que se 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 presentaba 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, con algunos de los mismos elementos pero con concentraciones diferentes.

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

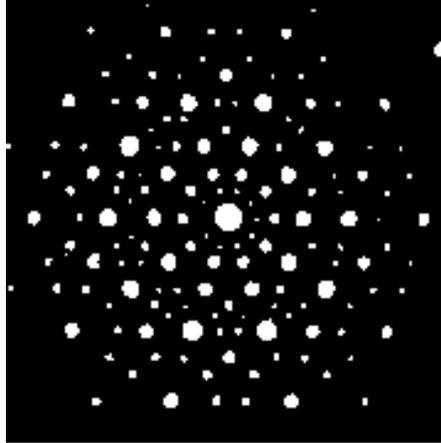


Figura 2.1: Patrón de difracción de la aleación de aluminio-manganeso descubierta en 1984, la cual presenta simetría ante rotaciones por ángulo de  $2\pi/5$ .

mente estables. La estructura de estos materiales no es periódica, ya que es generada por medio de dos o más celdas 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*.

Presentamos una clasificación de aleaciones cuasiperiódicas estables y metaestables (donde RE y TM indican elementos de tierra rara y metales de transición, respectivamente).

### 2.1.1. Cuasicristales metaestables

Estas aleaciones se clasifican de acuerdo a su simetría rotacional, tales como de orden cinco (icosaedral), ocho (octagonal) y doce (decagonal). Empezaremos con la fase icosaedral que son principalmente producidas por solidificación rápida ( $\sim 10^6 K/s$ ), por ejemplo  $Al_{86}Mn_{14}$  dentro del grupo de aleaciones  $Al-(Mn, Fe, Cr)$  [20].

Para el caso de los cuasicristales decagonales, la fase decagonal coexiste con la fase icosaedral y se presenta principalmente en los sistemas del grupo  $Al-TM$ , tales como  $Al-Fe$ ,  $Al-Co$ ,  $Al-Ni$ ,  $Al-Pd$  y  $Al-Rh$ . En general, las fases cuasicristalinas se determinan por la configuración electrónica de los elementos de la aleación. Casi todas las aleaciones binarias de fase decagonal contienen una gran cantidad de desorden que es introducido por la solidificación rápida. En cambio, el desorden se puede removerse cuando se extiende a sistemas ternarios, por ejemplo,  $Al-Ni-Fe$ ,  $Al-Ni-Co$  [23] y  $Al-Cu-Co$  [24]. Dicha extensión conduce al descubrimiento de fases decagonales termodinámicamente estables. Otros cuasicristales metaestables, tales como las aleaciones cristalinas octagonales en dos

dimensiones han sido encontradas en  $Cr - Ni - Si$ ,  $V - Ni - Si$  [25] y  $Mn_4Si$  [26]. Cuasicristales con fase dodecágonal fueron observados en partículas condensadas de  $Cr - Ni$  [27], así como en películas delgadas de  $Bi - Mn$  producidas por vaporización al vacío [28].

### 2.1.2. Cuasicristales estables

Un cuasicristal termodinámicamente estable es un material cuyo estado base estructural es cuasiperiódico independientemente del proceso de separación, es decir, el material puede sufrir tratamientos térmicos sin modificar su orden estructural. El primer cuasicristal estable fue la aleación  $Al_{5,1}Li_3Cu$  [29]. Se cree que la participación del  $Li$  es fundamental para la estabilidad de la aleación, debido a su tamaño atómico. Otras aleaciones icosaedrales estables son  $Zn - Mg - Ga$  [30] y  $Mg - Al - Pd$  [31]. La segunda generación de cuasicristales icosaedrales estables fue encontrada en los sistemas  $Zn - Mg - RE$  [32]. Estos cuasicristales tiene una excelente calidad estructural y poseen momentos magnéticos debido a los electrones  $4f$  localizados en los sitios  $RE$ , en los cuales se puede estudiar el magnetismo en redes cuasiperiódicas. Un grupo de cuasicristales estable que exhiben una red icosaedral centrada en las caras son  $Zn - Mn - RE$  ( $RE = Y, Gd, Tb, Dy, Ho, Er$ ) [33], la cual fue observada por primera vez en la clase de  $Zn - Mg - Al$ .

Los primeros cuasicristales decagonales han sido encontrados en la aleación  $Zn - Mg - RE$  ( $RE = Y, Dy, Ho, Er, Tm, Lu$ ) [34]. Estos materiales altamente anisotrópicos, es decir, periódicos a lo largo de su eje  $Z$  y cuasiperiódicos con simetría rotacional de décimo orden en el plano perpendicular al eje  $Z$ . La fase decagonal puede formarse directamente por una reacción de estado sólido entre las fase icosaedral primaria ( $Zn_{60}Mg_{30}RE_{30}$ ) y una fase monoclinica  $Zn_7Mg_4$ , alrededor de los  $623K$  [35].

Una forma de explicar la resistencia de aleaciones cuasicristalinas estables es por el mecanismo empírico de Hume-Rothery, el cual sugiere que la estabilización de un material ocurre cuando su superficie de Fermi se intersecta o está cercana a la frontera de la zona de Brillouin. Debido a la interacción entre la red y los electrones de valencia, la energía total electrónica disminuye cuando una brecha o una pseudo-brecha de energía es creada alrededor de la energía de Fermi, y la densidad de estados se incrementa arriba y abajo de esta brecha. Una pseudo-brecha energética se forma cuando la densidad de estados en un intervalo de energía es menor por varios ordenes de magnitud que la de su alrededor, y cuando ésta es cero se denomina brecha. Por lo tanto, dentro del mecanismo de Hume-Rothery la fase estructural del material es estabilizada debido a la reconfiguración electrónica, similar a lo que sucede en la inestabilidad de Peierls [36]. Uno de los parámetros más importantes para la formación preferencial de la estructura específica es la razón electrón-por-átomo. En 1994, A. Tsai encontró una regla empírica para los cuasicristales icosaedrales estables de base  $Al$ , es decir,  $Al - TM$  con  $e/a \approx 1,75$  y  $Zn - Mn - Al$  con  $e/a \approx 2,1$ . Esto indica que los cuasicristales icosaedrales

estables pueden ser aleaciones de Hume-Rothery.

Los cuasicristales, a diferencia de sus elementos constituyentes, son generalmente malos conductores de 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  $\sigma$  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. Si bien no existe un consenso para explicar este comportamiento, fundamentalmente se le atribuye a dos aspectos, uno es que la densidad de electrones de valencia en el 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 [37]. Además, la conductividad disminuye incrementando el orden de la red cuasiperiódica.

Este comportamiento está claramente relacionado con la aperiodicidad atómica de la estructura, por ejemplo, existen aleaciones de aluminio, níquel 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 cuasiperiódica [38].

### 2.1.3. Cadena de Fibonacci

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 pueden 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 enlace (problema de sitios) y otra en la que se tiene un solo tipo de átomos unidos por dos tipos de enlaces diferentes (problema de enlaces), en el presente trabajo estudiaremos esta última. La forma de generar la cadena de Fibonacci es de acuerdo a la siguiente regla de iteración;  $G_0 = B$ ,  $G_1 = A$ ,  $G_2 = AB$ ,  $G_3 = ABA$ ,  $G_4 = ABAAB, \dots, G_i = G_{i-1}G_{i-2}$ , donde A y B representan los dos tipos de enlace y  $G_i$  la  $i$ -ésima generación de la cadena. En la Fig. (2.2) se presentan las primeras generaciones.

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

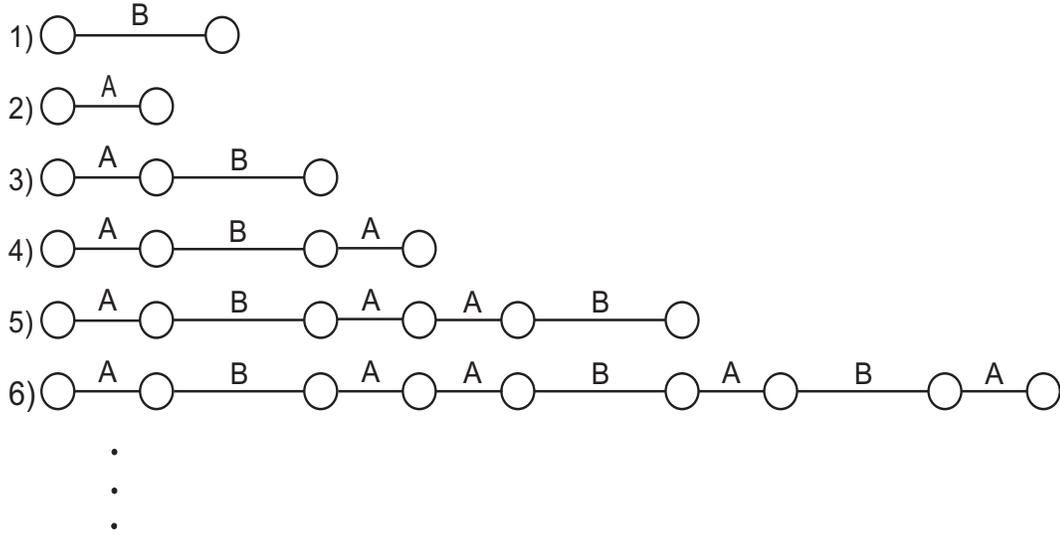


Figura 2.2: Cadena de Fibonacci con diferente tipo de enlace y átomos idénticos. El numero representa la generación de la cadena.

de salto  $t_B$ , entonces se cumple que,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_A(N)}{N_B(N)} = \sigma \tag{2.1}$$

donde  $\sigma = \frac{\sqrt{5}+1}{2} = 1,62803398\dots$ , es la *razón dorada*.

Asímismo, es posible obtener la cadena de Fibonacci a partir de una cadena periódica bidimensional, por ejemplo, a partir de una red cuadrada, llevando acabo la proyección que se muestra en la Fig. (2.3). El procedimiento para obtenerla es el siguiente: se traza una línea principal con pendiente  $\sigma^{-1}$ , 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.

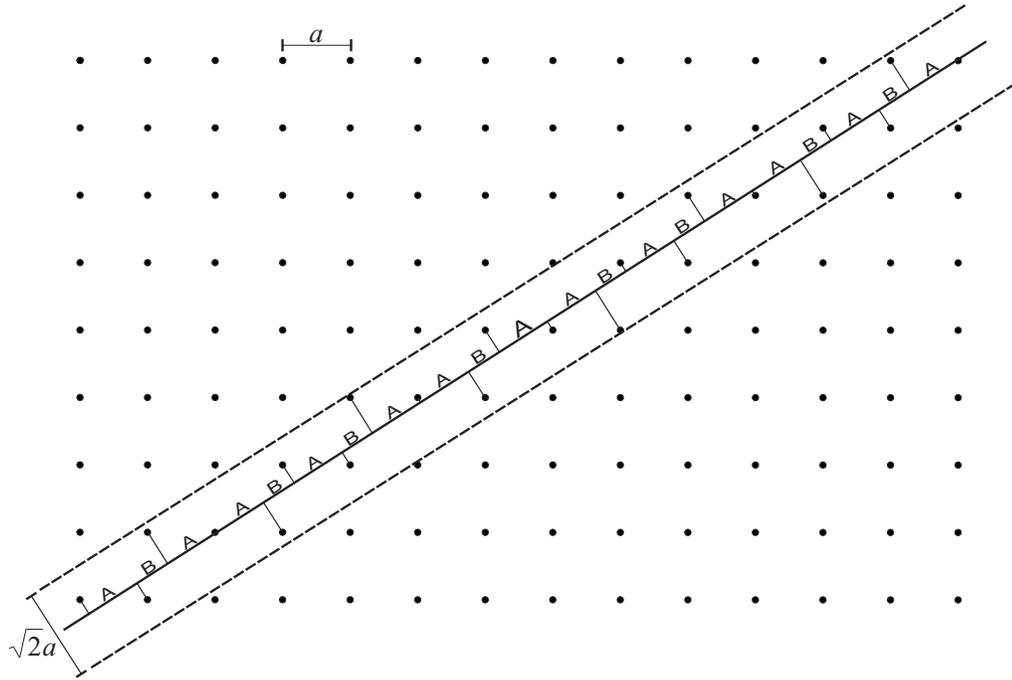


Figura 2.3: Cadena de Fibonacci de generación 7 obtenida a partir de una red bidimensional cuadrada con constante de red  $a$

## 2.2. Método del espacio de estados aplicado a la cadena de Fibonacci

Nos ocuparemos del problema de dos electrones con espines antiparalelos en una cadena lineal cuasiperiódica infinita. Para esto, analizaremos el problema de enlaces. Con el fin de dar una descripción del método del espacio de estados veamos un ejemplo sencillo de la cadena de Fibonacci. Consideremos dos electrones con espines opuestos en una red de  $N=4$  sitios.

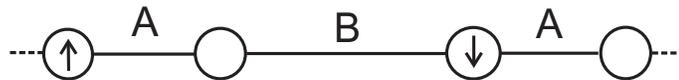


Figura 2.4: Dos electrones antiparalelos en una cadena de Fibonacci de cuatro sitios

Los posibles estados del sistema son los siguientes,

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

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 con espín hacia arriba y otro con espín hacia abajo,  $0$  representa un sitio vacío. Dentro del hamiltoniano de Hubbard extendido, la existencia de un estado con un sitio ocupado por dos electrones requiere una energía  $U$ , mientras que los estados cuyos dos electrones se encuentren en sitios vecinos más próximos, requieren una energía  $V$ . En cambio, un estado con dos electrones situados en sitios lejanos no exige ninguna energía, dentro del hamiltoniano de Hubbard extendido. La amplitud de probabilidad de transición entre los estados vecinos de la Fig. (2.5), es precisamente la  $t$ , ya que la diferencia entre estos dos estados es simplemente el salto de un electrón.

$$\begin{aligned}
 |\pm 000\rangle &\longrightarrow U \\
 |+-00\rangle &\longrightarrow V \\
 |+0-0\rangle &\longrightarrow 0 \\
 |0+0-\rangle &\longleftrightarrow |0+-0\rangle \text{ con amplitud de salto } t_A \\
 |0+-0\rangle &\longleftrightarrow |0\pm 00\rangle \text{ con amplitud de salto } t_B.
 \end{aligned}$$

El método del espacio de estados y su mapeo consiste en dar una representación geométrica de la configuración de estados, mapeando el problema original 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 si. En la Fig. (2.5) se muestra la red de estados para el sistema de dos electrones en una cadena lineal de Fibonacci con cuatro 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  $t_A$  y  $t_B$ , de esta manera la dinámica del sistema queda descrita por el siguiente hamiltoniano:

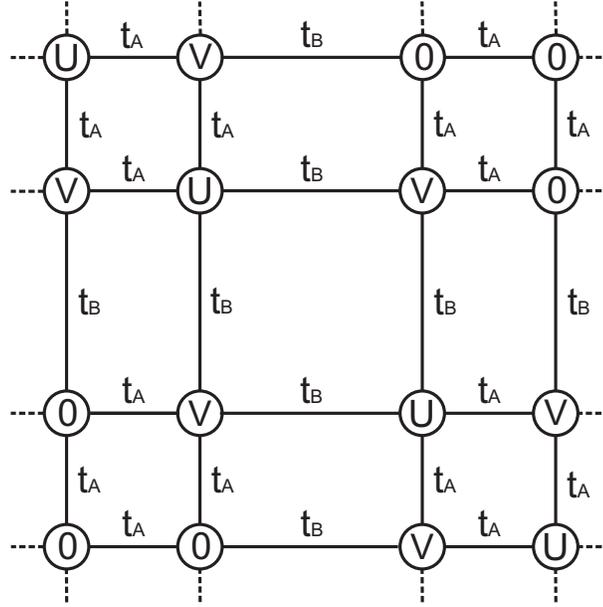


Figura 2.5: Red de estados para el sistema de dos electrones en una cadena lineal con 4 sitios

$$H_{AF} = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} b_i^\dagger b_j + \sum_i \varepsilon_i b_i^\dagger b_i, \quad (2.2)$$

donde  $t_{i,j}$  es la amplitud de salto entre el estado  $|i\rangle$  y el  $|j\rangle$ , el operador  $b_i^\dagger$  crea el estado de muchos cuerpos  $|i\rangle$  mientras  $b_i$  lo destruye, finalmente  $\varepsilon_i$  es la autoenergía del sitio  $|i\rangle$  y toma los valores U, V y 0.

El hamiltoniano de la ecuación anterior 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.

# Capítulo 3

## Análisis y discusión de resultados

¿Cuál es la estructura electrónica para el caso de los materiales cuasicristalinos?. La respuesta a esta pregunta no es trivial, ya que como consecuencia de la falta de periodicidad los métodos tradicionales para estudiar los sólidos cristalinos no son aplicables. La base de la teoría de los cristales, el teorema de Bloch, no es válida. Los cuasicristales, además de poseer un orden local tienen simetría orientacional a largo alcance, por lo que se requiere desarrollar nuevos métodos de cálculo para estos sistemas. Los cálculos realizados dentro de la aproximación de amarre fuerte, debido principalmente a la simplicidad del hamiltoniano, muestran que las funciones de onda no son extendidas ni localizadas.

### 3.1. Función de onda en la cadena de Fibonacci

Para los sistemas desordenados no existe el espacio recíproco debido a la ausencia de simetría traslacional. Consecuentemente, la relación de dispersión no está bien definida. El concepto clave aún para sistemas desordenados, es el de la densidad de estados  $N(E)$ . La  $N(E)$  multiplicada por un incremento de energía da el número de estados que puede tomar un cierto electrón en dicho intervalo de energía. Estos estados pueden estar ocupados o desocupados. En la densidad de estados de los sólidos desordenados aparecían nuevos estados llamados localizados, a diferencia de los sólidos cristalinos cuya densidad de estados está formada por estados extendidos. La descripción de las propiedades físicas de los sólidos se puede dar en términos de las funciones de Bloch (estados extendidos), y a partir de las funciones de Wannier (estados localizados). Un electrón descrito mediante la función de Bloch, tiene la misma probabilidad de estar en un punto dado que en cada uno de los demás puntos equivalentes de la red, en este sentido los estados de Bloch son estados extendidos. Los estados de Wannier son estados localizados en el sentido de que dichas funciones están centradas en puntos individuales de la red. Un estado será localizado si su función de onda asociada desaparece en el infinito, es decir, si  $\lim_{r \rightarrow \infty} |\psi(\vec{r})| = 0$ .

El problema de la localización, así como los criterios para evaluarla siguen estando abiertos a discusión, donde, un aspecto especialmente interesante es su relación con la densidad de estados. En este sentido, Mott y Twose[39] encontraron que todas las funciones propias de una cadena lineal desordenada son localizadas. Esta propiedad fue probada para todo tipo de excitaciones en sistemas desordenados de una dimensión.

Por otra parte, el problema de la localización de los estados electrónicos en los cuasicristales es un problema que aún hoy en día permanece sin aclarar. Sin embargo, en los últimos años ha habido grandes esfuerzos para determinar la forma de la localización en estos sistemas cristalinos, mencionaremos algunos de ellos a continuación.

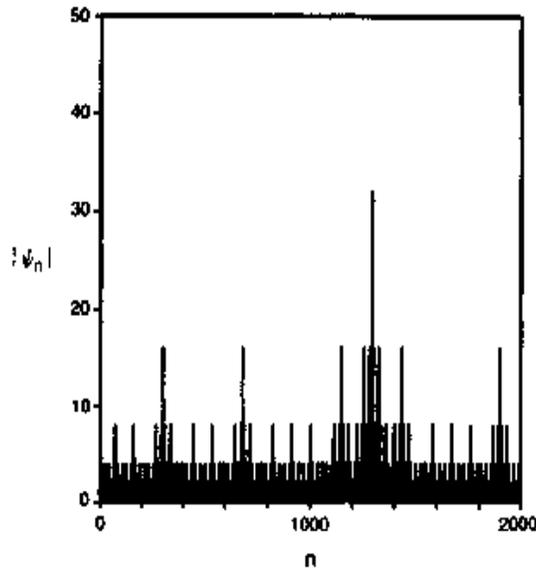


Figura 3.1: Función de onda electrónica auto-similar para  $E=0$ . En esta figura se grafica el módulo de  $\psi$  en función de del número de sitios  $n$  a lo largo de la cadena cuasiperiódica.

En 1986 Deyon y Petrietis [40] demostraron, para la cadena de Fibonacci, que todos los estados son extendidos para el caso de desorden diagonal. Asimismo, existen cálculos numéricos que afirman la existencia de los tres tipos de estados, es decir: extendidos, localizados y críticos (o exóticos) para el caso de desorden fuera de la diagonal [41]. Los estados críticos se definen como estados que no están localizados ni están completamente extendidos, sino que tienen funciones de onda auto-similares en el espacio real [42]. Kohmoto et al. calcularon explícitamente la función de onda cuando  $E = 0$  para una cadena de Fibonacci. Esta función se muestra en la Fig. (3.1), encontrándose que no es ni extendida ni localizada en el

sentido estricto.

En esta tesis estudiamos el problema de la función de onda en una cadena de Fibonacci, con la variante que dicho estudio se realiza para el problema de dos partículas con y sin interacción. El estudio se realiza en el espacio real utilizando el método del espacio de estados [16]. Los cálculos de la función de onda se obtienen numéricamente para una cadena lineal de 90 sitios y para la red de Fibonacci de generación 10 (90 sitios), lo que implica diagonalizar matrices de  $4095 \times 4095$ .

En las Figs. 3.2–3.5 se muestran los resultados para las funciones de onda cuando no incluimos interacción electrón–electrón, tanto para la cadena Lineal (a) como para la cadena de Fibonacci (b). Los parámetros que utilizamos son:  $t = -1.0$  para la cadena Lineal y  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$  para la cadena de Fibonacci.

Las funciones de onda que se muestran corresponden a los 4 eigenvalores de más baja energía, es decir:  $E_0 = -3.997616562204283$ ,  $E_1 = -3.994042825704650$ ,  $E_2 = -3.990469089204987$ ,  $E_3 = -3.988091330492548$ , para la cadena Lineal y  $E_0 = -5.666049861140060$ ,  $E_1 = -5.661148600328795$ ,  $E_2 = -5.658585411952986$ ,  $E_3 = -5.656247339517411$ , para la cadena de Fibonacci. Los resultados de la red Lineal (a), se presentan con el fin de poder comparar nuestros resultados de la red de Fibonacci (b). En las funciones de onda para la cadena de Fibonacci podemos observar cualitativamente el carácter de funciones de onda crítica, que caracteriza a las redes cuasiperiódicas en general, ya que presentan regiones tanto localizadas como extendidas.

En la Fig. 3.6 mostramos el resultado de las funciones de onda para energías muy cercanas a  $E=0$ , es decir,  $E_{2025} = -3.573736499645771E - 03$ , para la cadena Lineal y  $E_{2025} = -2.563188375763093E - 03$  para la cadena de Fibonacci. De igual forma no incluimos interacción electrónica y los parámetros del hamiltoniano son los mismos que los de la Fig. 3.2. En estos resultados para la cadena de Fibonacci se observa el carácter crítico de la función de onda en una forma más pronunciada y la comparación con los resultados de Kohmoto [42] es más directa.

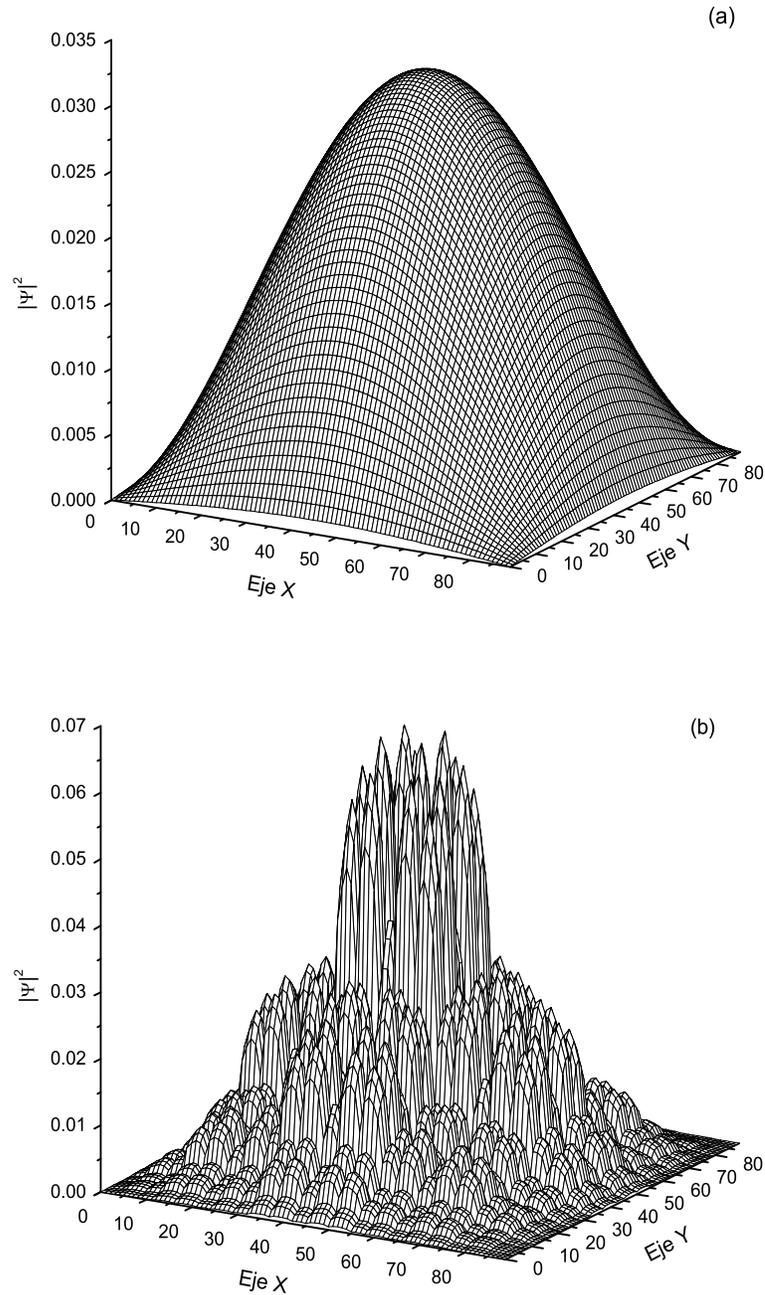


Figura 3.2: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_0 = -3.997616562204283$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_0 = -5.666049861140060$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

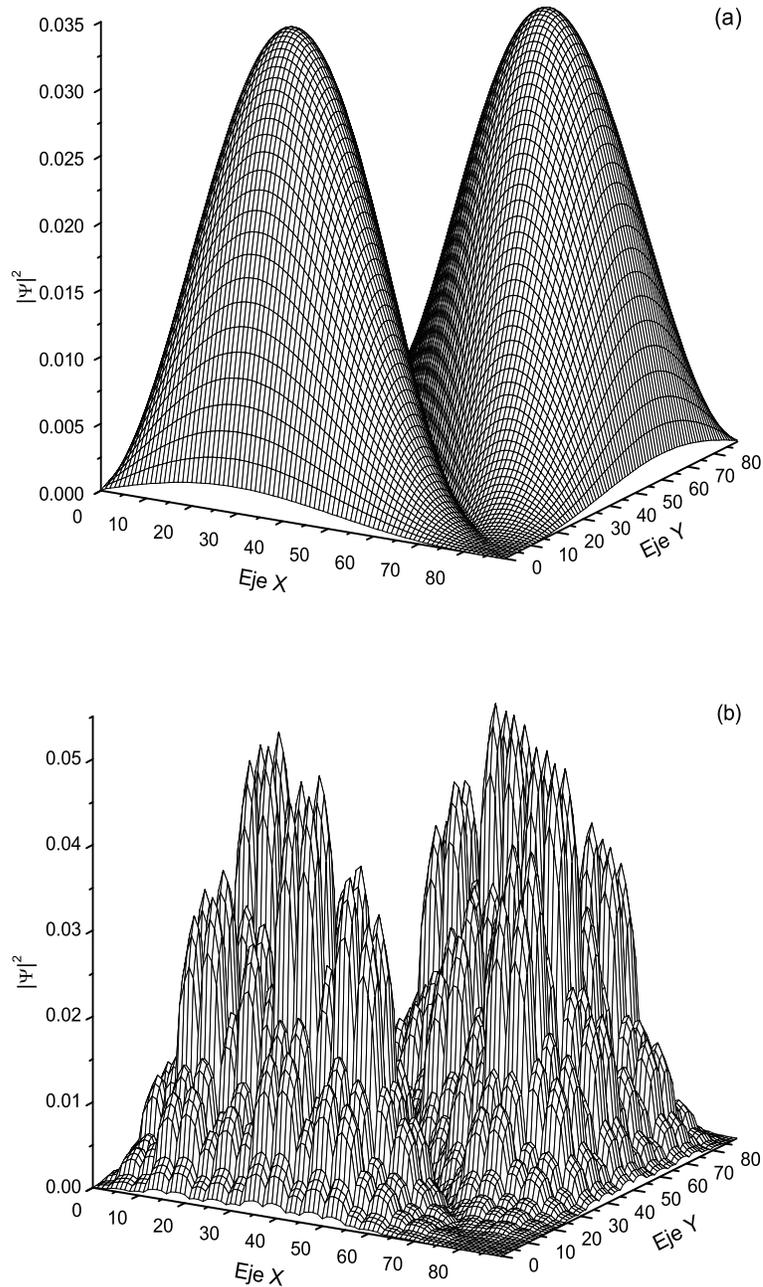


Figura 3.3: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_1 = -3.994042825704650$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_1 = -5.661148600328795$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

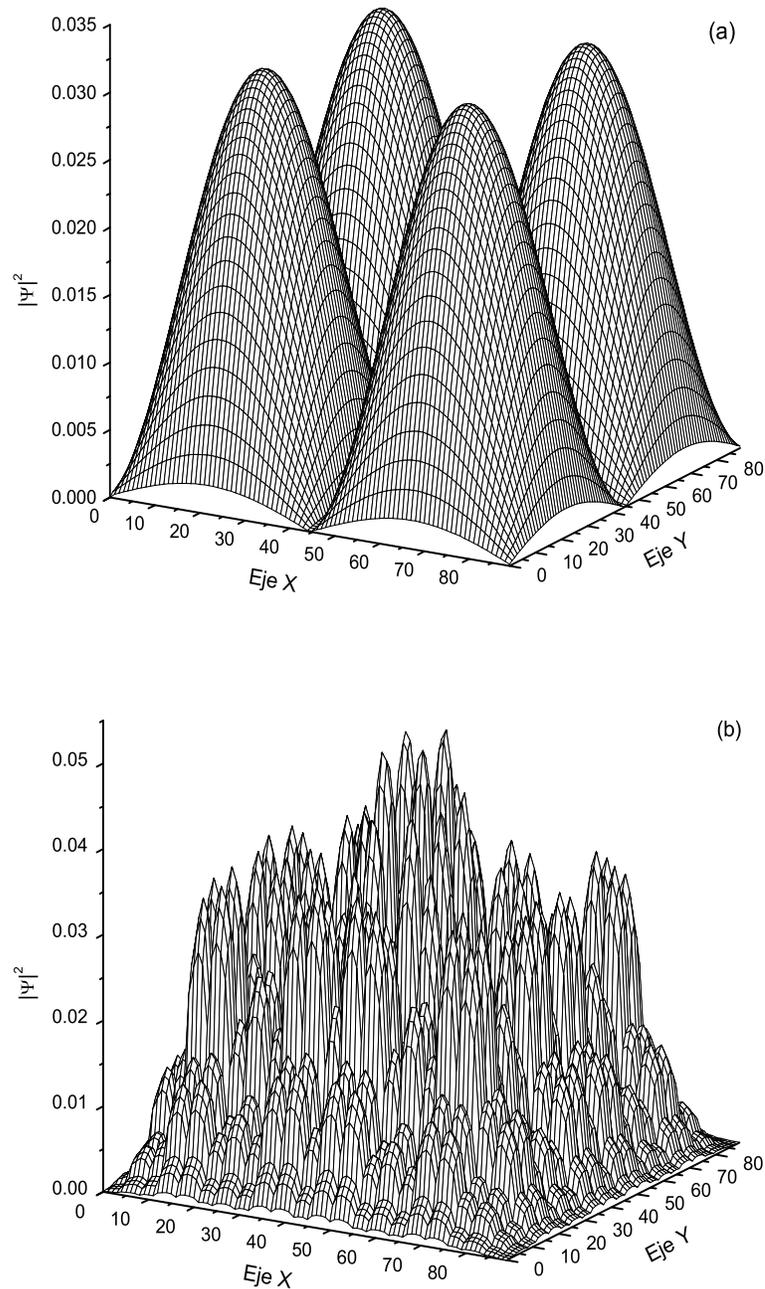


Figura 3.4: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_2 = -3.990469089204987$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_2 = -5.658585411952986$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

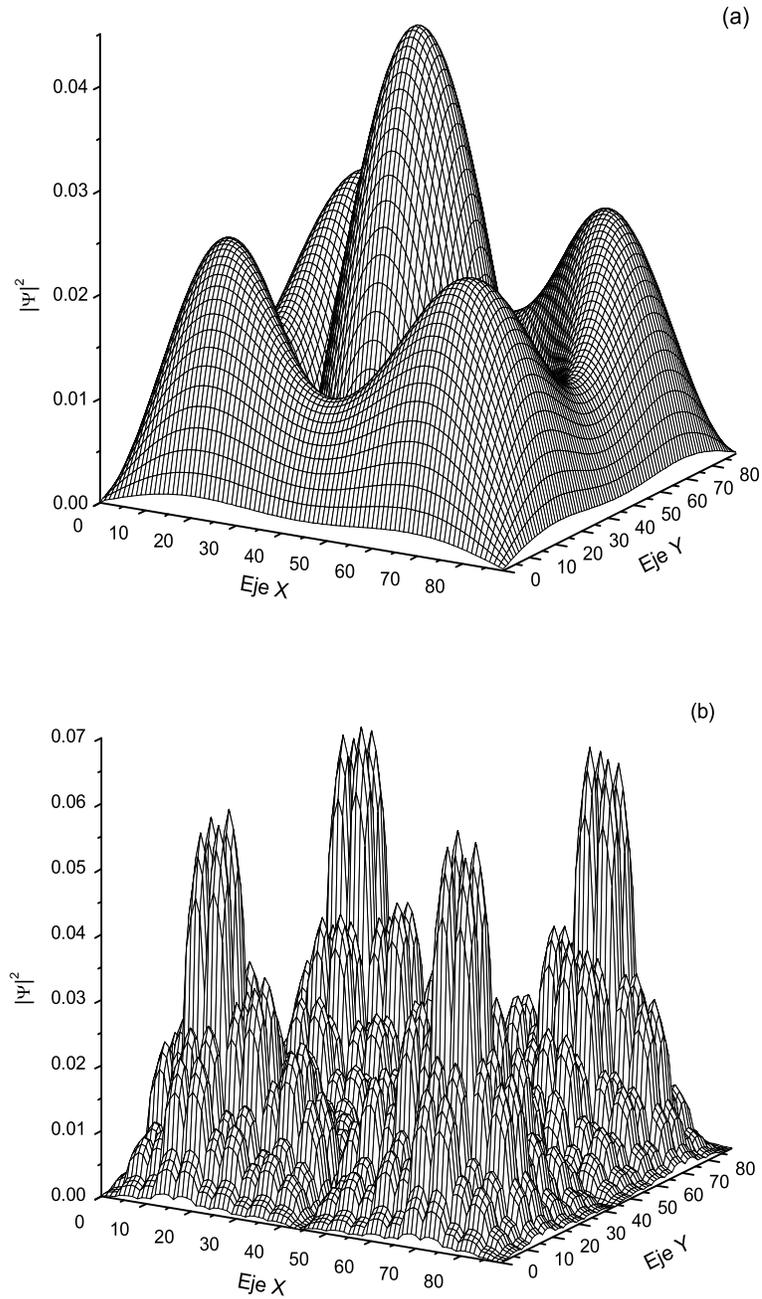


Figura 3.5: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_3 = -3.988091330492548$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_3 = -5.656247339517411$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

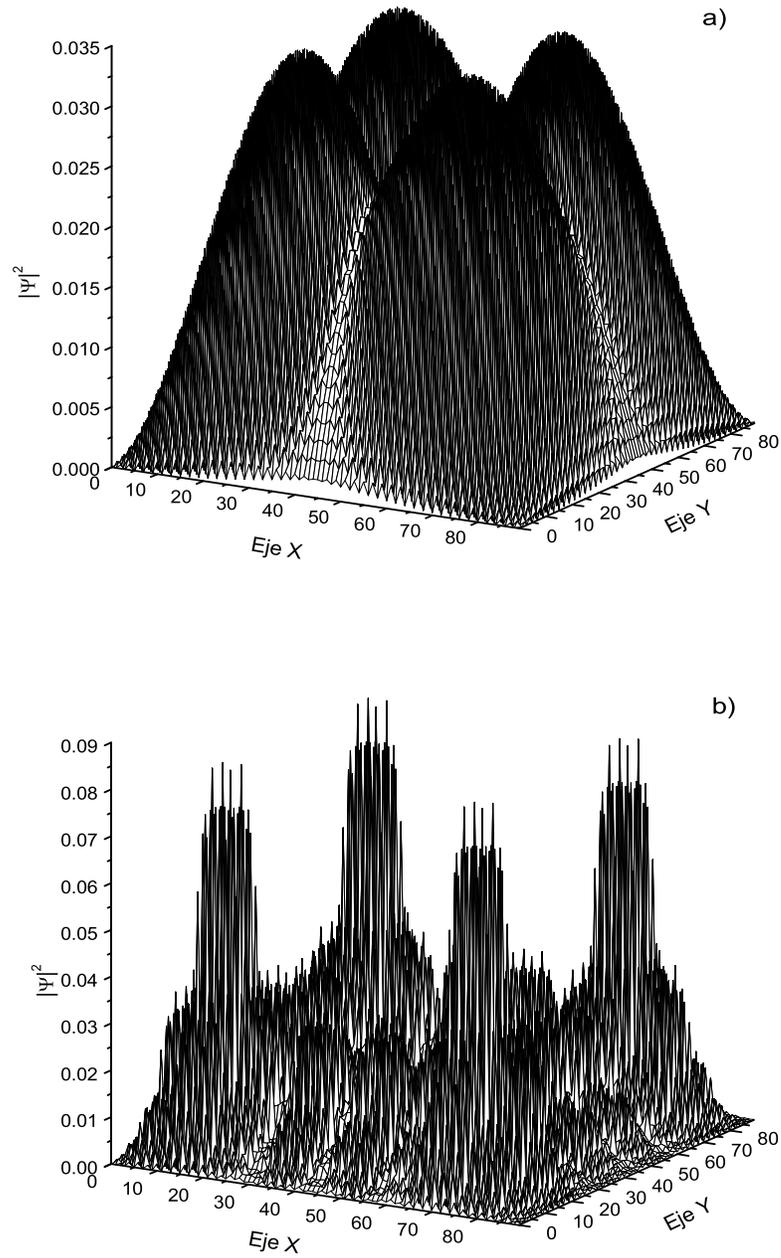


Figura 3.6: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_{2025} = -3.573736499645771E - 03$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_{2025} = -2.563188375763093E - 03$ , donde no hay interacción  $e - e$ . Los parámetros utilizados son:  $t_A = -1.0, t_B = -2.0$

En las Figs. 3.7–3.10 presentamos las funciones de onda incluyendo la interacción electrónica, en este caso la interacción es atractiva para electrones en el mismo sitio, muy similar a la formación de pares de Cooper en superconductividad de alta temperatura crítica [43]. Las eigenfunciones que mostramos son para los 4 eigenvalores de más baja energía, es decir:  $E_0 = -3.994528104688936$ ,  $E_1 = -3.989053414361333$ ,  $E_2 = -3.985751949803757$ ,  $E_3 = -3.981385842278388$ , para la cadena Lineal y  $E_0 = -5.661648478876018$ ,  $E_1 = -5.658956183291668$ ,  $E_2 = -5.654059391101760$ ,  $E_3 = -5.650814772489555$ , para la cadena de Fibonacci. En las Figs. 3.7–3.10 observamos que para una interacción atractiva pequeña  $U = -1.0$ , las funciones se localizan a lo largo de la diagonal principal de la red de estados en dos dimensiones, que es justamente donde se localiza el parámetro responsable de la interacción (en nuestra red de estados bidimensional, simula una autoenergía de impurezas).

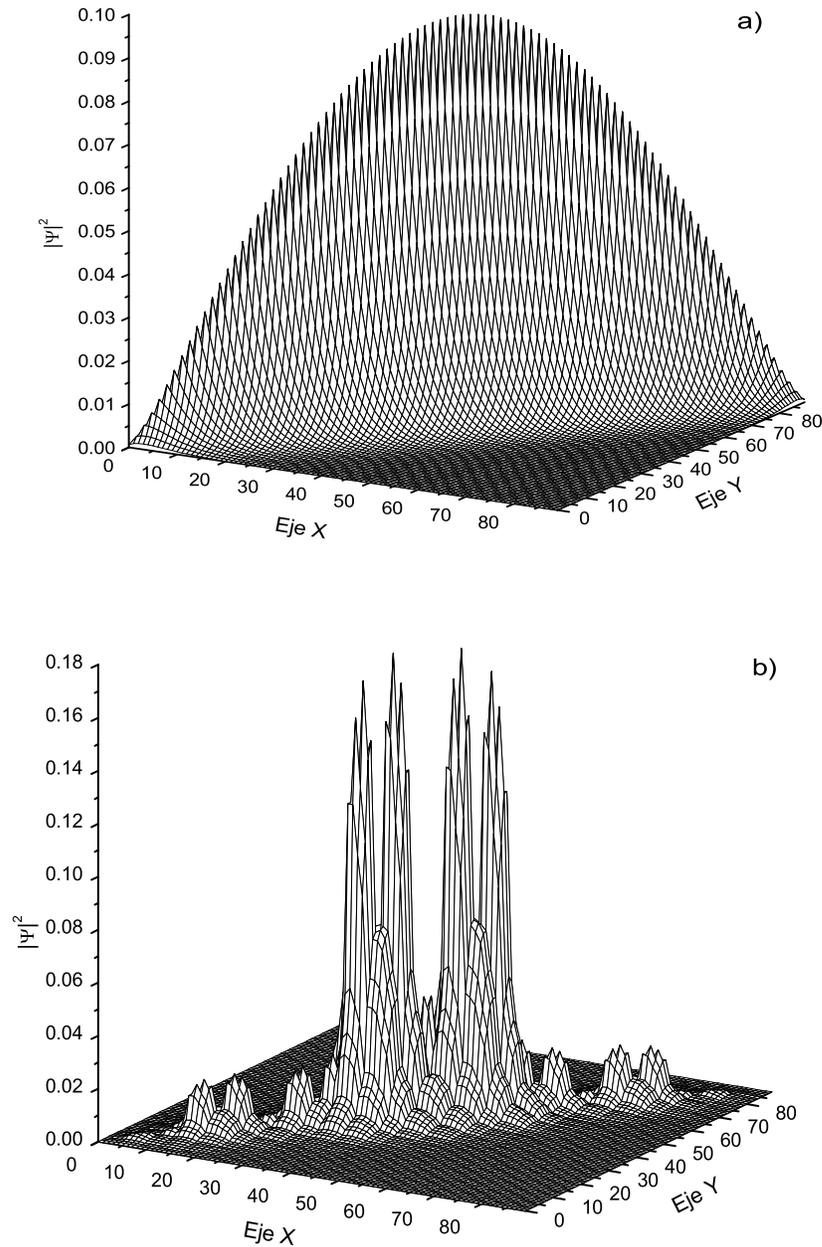


Figura 3.7: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_0 = -3.994528104688936$ . Los parámetros utilizados son:  $U = -1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_0 = -5.661648478876018$ . Los parámetros utilizados son:  $U = -1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

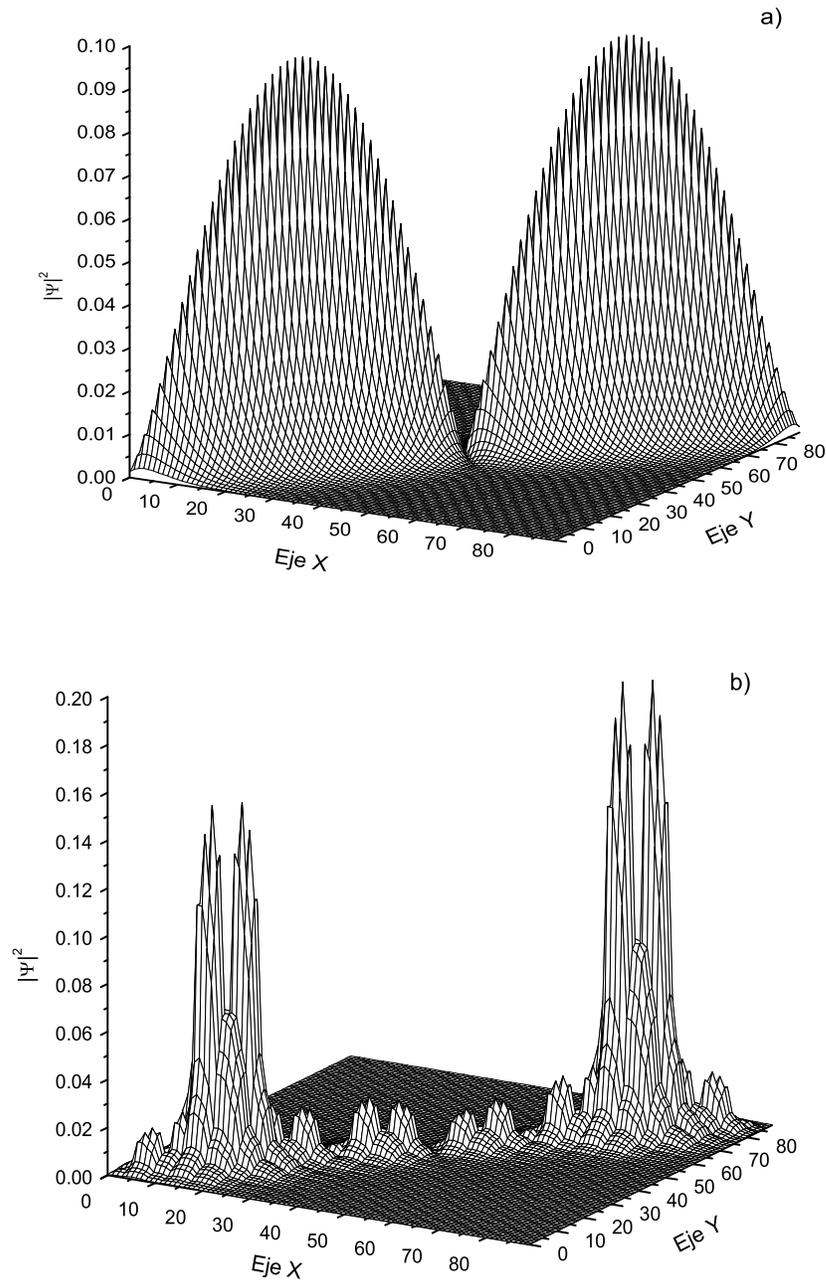


Figura 3.8: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_1 = -3.989053414361333$ . Los parámetros utilizados son:  $U = -1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_1 = -5.658956183291668$ . Los parámetros utilizados son:  $U = -1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

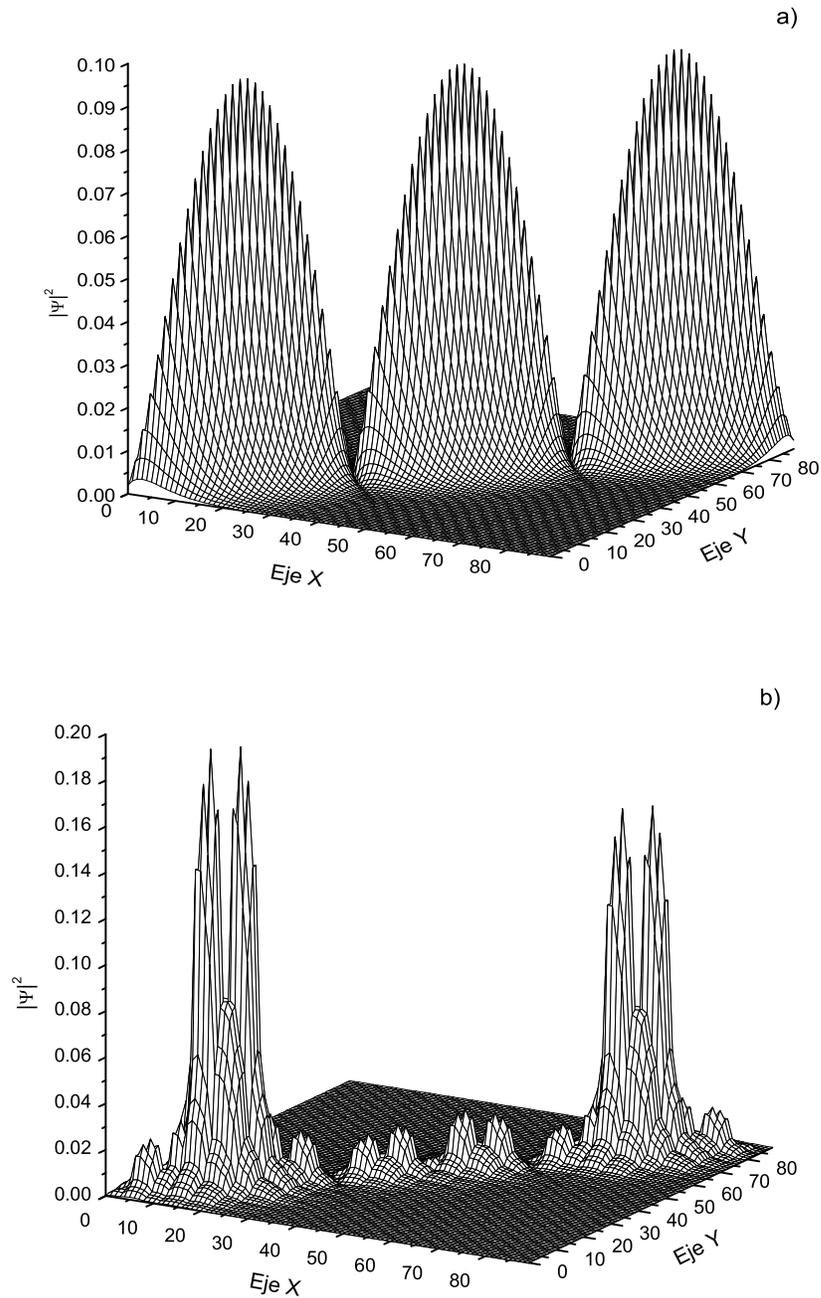


Figura 3.9: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_2 = -3.985751949803757$ . Los parámetros utilizados son:  $U = -1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_2 = -5.654059391101760$ . Los parámetros utilizados son:  $U = -1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

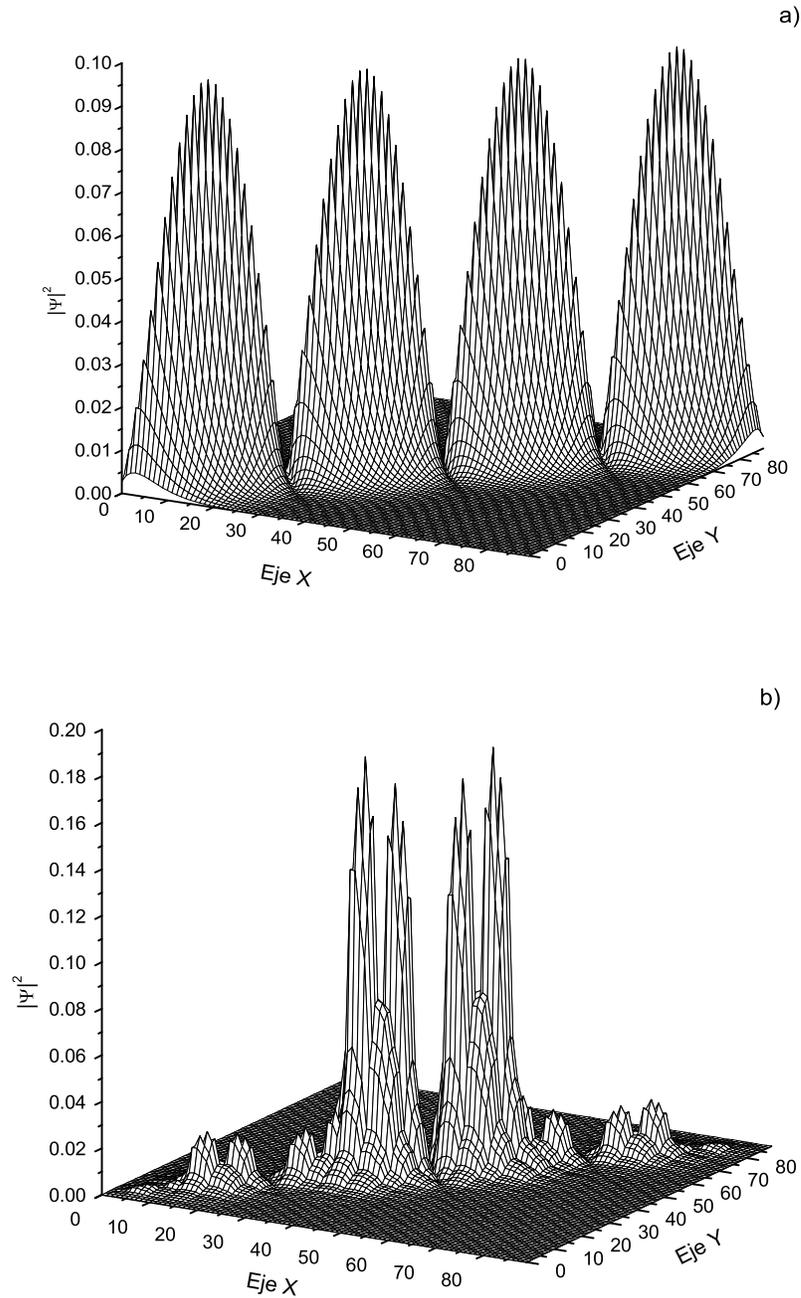


Figura 3.10: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_3 = -3.981385842278388$ . Los parámetros utilizados son:  $U = -1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_3 = -5.650814772489555$ . Los parámetros utilizados son:  $U = -1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

Los resultados de las funciones de onda con una interacción repulsiva entre electrones con espines opuestos en el mismo sitio, se muestran en las Figs. 3.11–3.14. Observamos que incluso cuando la interacción repulsiva es pequeña  $U = 1.0$ , las funciones nos dan una probabilidad muy baja de que los electrones se encuentren sobre la diagonal principal de la red de estados en dos dimensiones, que es donde se encuentra el potencial responsable de la interacción.

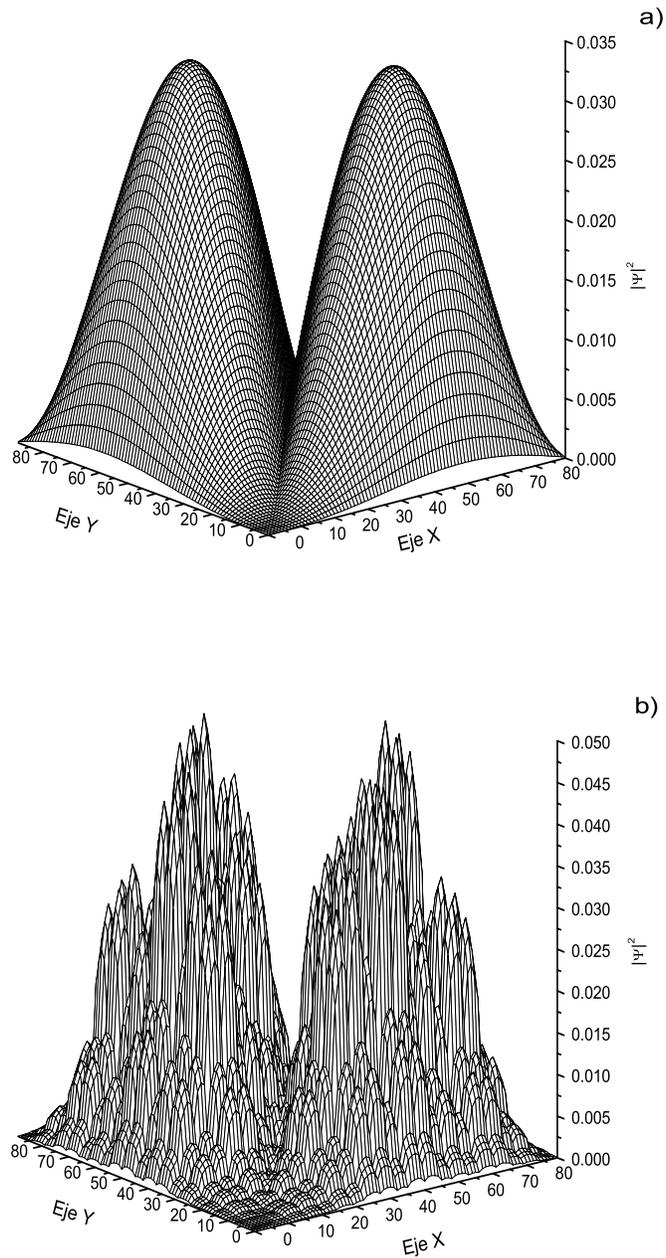


Figura 3.11: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_0 = -4.122471456841995$ . Los parámetros utilizados son:  $U = 1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_0 = -5.810903888521960$ . Los parámetros utilizados son:  $U = 1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

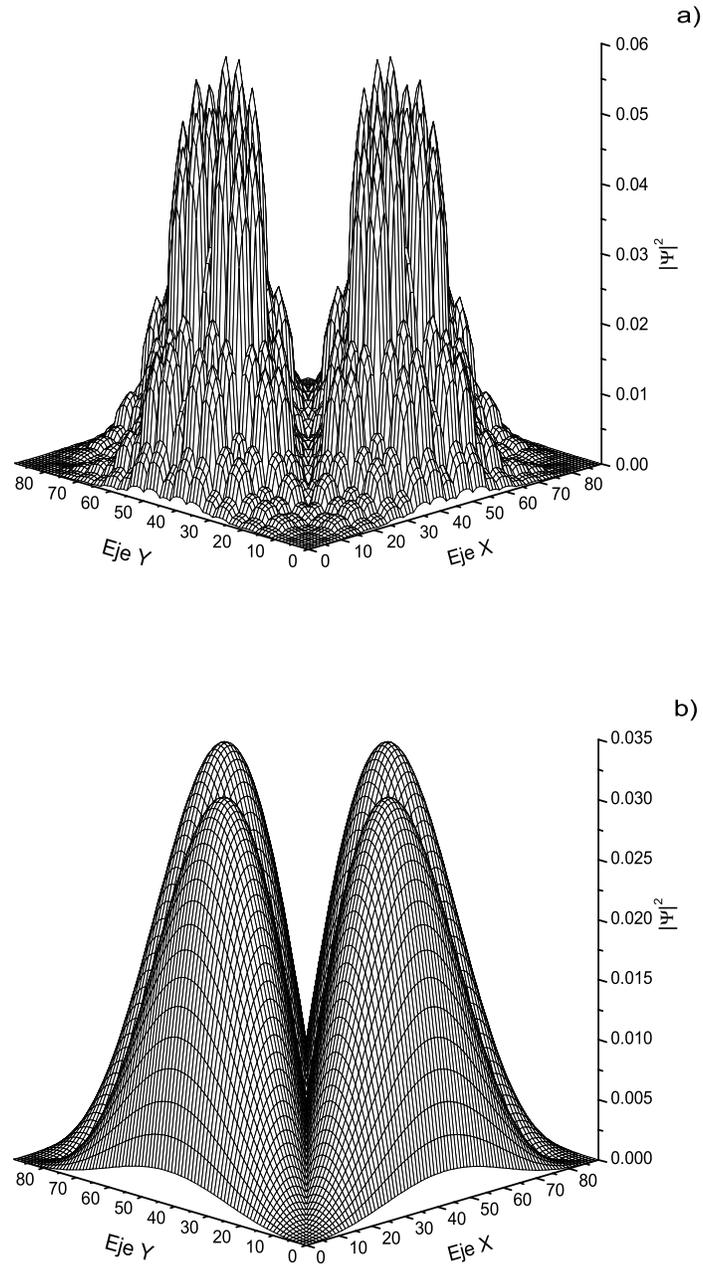


Figura 3.12: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_1 = -4.120570539947830$ . Los parámetros utilizados son:  $U = 1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_1 = -5.809400865100256$ . Los parámetros utilizados son:  $U = 1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

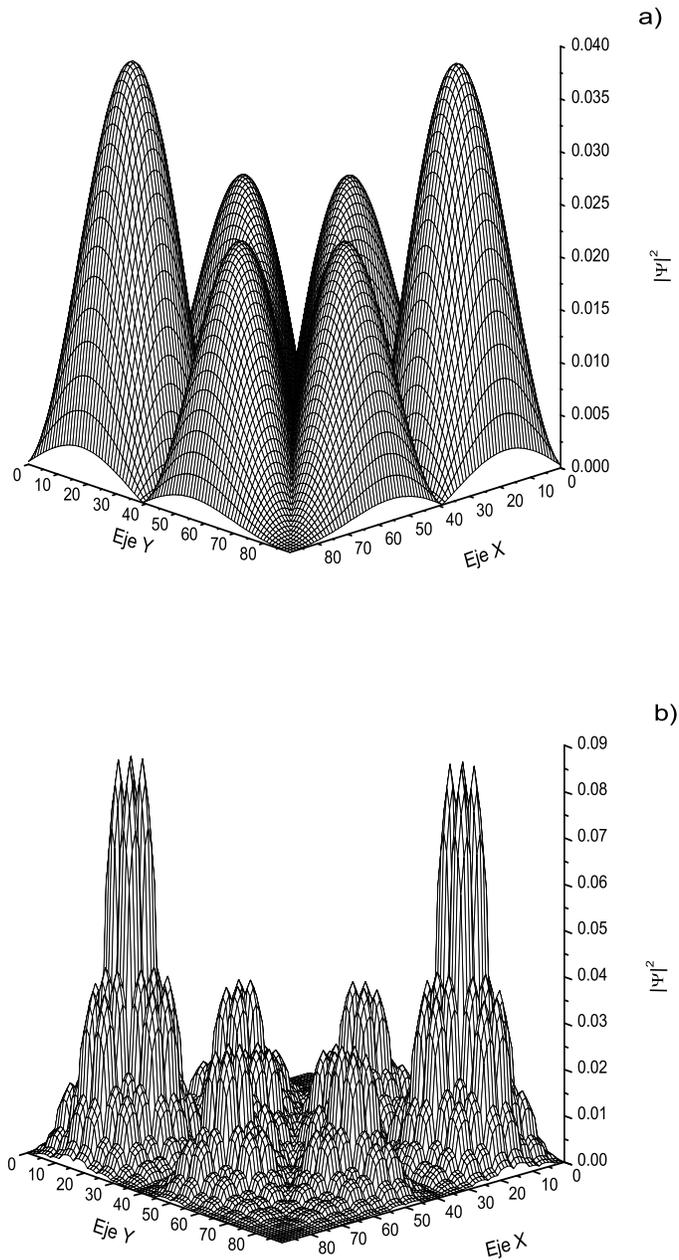


Figura 3.13: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_2 = -4.117407497518421$ . Los parámetros utilizados son:  $U = 1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_2 = -5.809345221675802$ . Los parámetros utilizados son:  $U = 1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

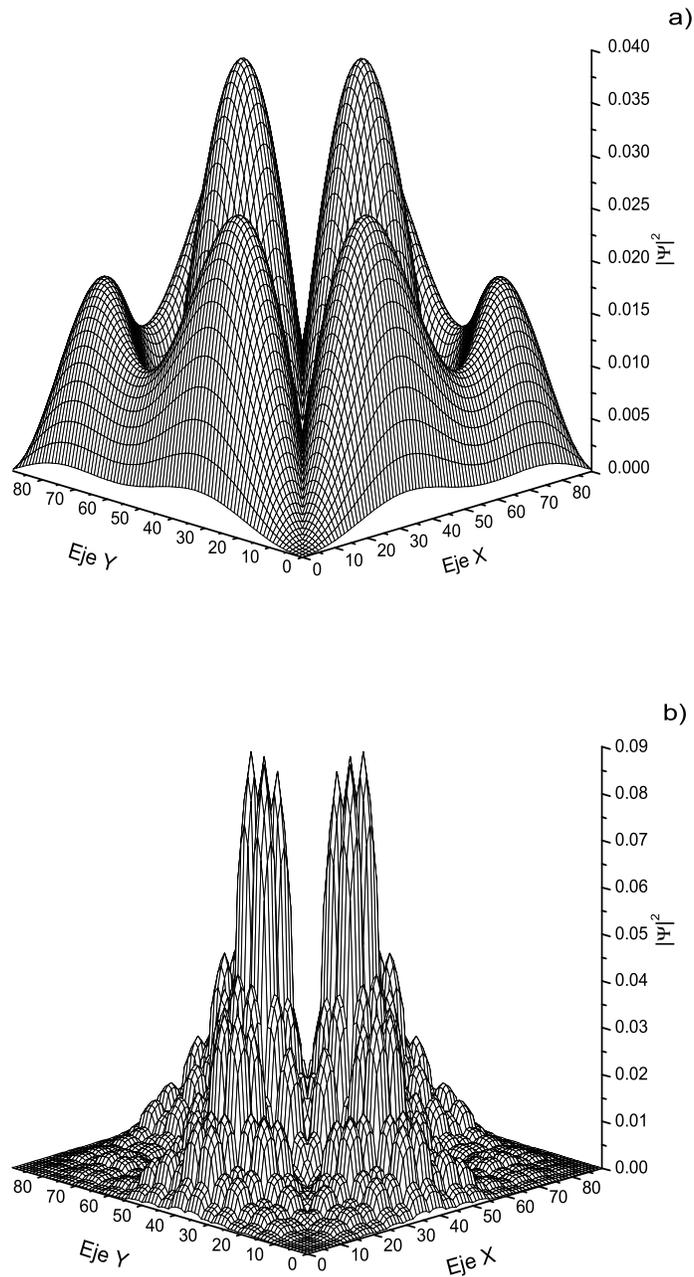


Figura 3.14: a) Función de onda de la cadena lineal (con 90 sitios) asociada al eigenvalor  $E_3 = -4.112989581664515$ . Los parámetros utilizados son:  $U = 1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = t_B = -1.0$ , b) Función de onda de la cadena de Fibonacci (con 90 sitios, generación 10) asociada al eigenvalor  $E_3 = -5.807529373981843$ . Los parámetros utilizados son:  $U = 1.0$ ,  $V = 0.0$ ,  $t_A = -1.0$ ,  $t_B = -2.0$

# Conclusiones

En esta tesis se determinó la función de onda en la cadena lineal y en la cadena de Fibonacci para el caso de dos partículas con y sin interacción electrónica. Hemos utilizado para este estudio, el modelo de Hubbard y el método del espacio de estados.

Los cálculos numéricos para obtener las funciones de onda se realizaron para cadenas de 90 sitios, la cadena de Fibonacci que nos da este número de sitios es la generación 10. Observamos en forma general el carácter crítico de la función de onda en la cadena de Fibonacci. Cuando incluimos una interacción electrónica atractiva, encontramos que la función de onda se localiza en la diagonal principal de la red de estados, manteniendo su carácter crítico para la red de Fibonacci y extendido para la cadena Lineal. El efecto es contrario cuando el potencial es repulsivo, es decir, la función de onda se localiza fuera de la diagonal principal.

Es importante mencionar que este estudio de la función de onda con interacción electrónica, es de los pocos estudios que existen hoy en día debido a lo complicado del cálculo, es decir, estamos abordando a la vez el problema de la correlación electrónica y la cuasiperiodicidad.

Como perspectivas del trabajo podemos mencionar las siguientes: estudiar el problema para un número mayor de sitios (átomos) y para un número mayor de electrones, así como extender nuestro estudio para redes de mayor dimensión. Analizar con detalle los efectos de la auto-similaridad de la función de onda en la red de Fibonacci.

# Bibliografía

- [1] Fundamentals of Crystallography, *International Union of Crystallography*, University of Oxford (1992).
- [2] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 5th Ed., John Wiley & Sons (1976).
- [3] Jhon P. Mckelvey, *Física del Estado Sólido y de semiconductores*, Ed. Limusa (1980).
- [4] O. Madelung, *Introduction to Solid State Theory*, Springer-verlag Berlin Heidelberg (1979).
- [5] William Jones and Norman H. March, *Theoretical solid state physics*, volume 1, Dover (1985).
- [6] Gregory H. Wannier, *Physical review*, **52**, 191 (1939).
- [7] W. Kohn, *Phys. Review*, **4**, 115 (1959).
- [8] F. B. Pedersen, G. T. Einevoll and P. C. Hemmer, *Physical Review B*, **44**, 5470 (1991).
- [9] Richard D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, Second Edition , Dover (1992).
- [10] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solids State Physics*, Holt Saunders International Editions (1975).
- [11] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd Ed., John Wiley & Sons (1998).
- [12] O. Navarro, *Introducción a la superconductividad*, Colección Aula Magna UAS, Núm. 11 (1997).
- [13] C. Kittel. *Quantum Theory of Solids*, 2nd Ed., John Wiley & Sons (1987).
- [14] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **A276**, 238 (1963).

- [15] A. P. Balachandran, E. Ercolessi, G. Morandi and A. M. Srivastava, *Int. Journal of Modern physics B*, **4**,2075 (1990).
- [16] O. Navarro & C. Wang, *Rev. Méx. Fís.*, **38**, 553 (1992).
- [17] O. Navarro & C. Wang, *Solid State Commun.*, **83**, 473 (1992).
- [18] J. R. Suárez, *Tesis de maestría en ciencias físicas*, UNAM (2005).
- [19] L. A. Pérez, O. Navarro and C. Wang, *Phys. Rev. B*, **53**, 15389 (1996).
- [20] D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias and J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 1951 (1984).
- [21] D. Levine and P. J. Steinhardt, *Phys. Rev. B*, **34**, 596 (1986).
- [22] J. E. S. Socolar and P. J. Steinhardt, *Phys. Rev. B*, **34**, 617 (1986).
- [23] A.P.Tsai, A. Niikura,A.Inoue, T. Masumoto, Y. Nishida, K. Tsuda and M.Tanaca, *Philos. Mag. Lett.*, **70**, 169 (1994).
- [24] L. X. He, Y. K. Wu and K. H. Kuo, *J. Mater. Sci. Lett.*, **7**,1284 (1988).
- [25] N. Wang, H. Chen and K. H. Kuo, *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 1010 (1987).
- [26] W. Cao, H. Q. Ye and K. H. Kuo, *Phys. Status Solid A*, **107**, 511 (1988).
- [27] T. Ishimasa, H. U. Nissen and Y. Fukano, *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 511 (1985).
- [28] K. Yoshida and Y.Taniguchi, *Philos. Mag. Lett.*, **63**, 127 (1991).
- [29] M. D. Ball and D. J. LLoyd, *Scr. Metall.*, **19**, 1065 (1985).
- [30] W. Ohashi and F. Spaepen, *Nature*, **330**, 555 (1987).
- [31] N. Koshikawa, S. Sakamoto, K. Edagawa and S. Takeuchi, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **31**, 1966 (1992).
- [32] Z. Luo, S. Zhang, Y. Tang and D. Zhao, *Scr. Metall.*, **28**, 1513 (1993).
- [33] A. Niikura, A. P. Tsai, A. Inoue and T. Masumoto, *Philos. Mag. Lett.*, **69**, 351 (1994).
- [34] T. J. Sato, E. Abe and A. P. Tsai, *Jpn. j. Appl. Phys.*, **36**, L1038 (1997).
- [35] T. J. Sato, E. Abe and A. P. Tsai, *Philos. Mag. Lett.*, **77**, 213 (1998).
- [36] R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, 108 (1955).
- [37] C. Janot, *Phys. Rev. B*, **53**, 181 (1996).

- [38] S. Martin, *Phys. Rev. Lett*, **67**, 719 (1991).
- [39] H. Matsuda and K. Ishii, *Prog. Theor. Phys. Supp.*, **45**, 56 (1970).
- [40] F. Delyon and D. Preitits, *Commun. Math. Phys.*, **103**, 441 (1986).
- [41] Y. Liu and Riklund, *Phys. Rev. B*, **35**, 6034 (1987).
- [42] M. Kohmoto and B. Sutherland, *Phys. Rev. B*, **35**, 1020 (1987).
- [43] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 763 (1994).