



# VNiVERSIDAD D SALAMANCA

FACULTAD DE CIENCIAS

Grado en Física

Exploración numérica de la respuesta óptica  
de sistemas altamente correlacionados

**Trabajo Fin de Grado**

Daniel García González

Tutores: Carlos Hernández García  
Luis Plaja Rustein

Julio de 2024



# VNiVERSIDAD D SALAMANCA

FACULTAD DE CIENCIAS

Grado en Física

Exploración numérica de la respuesta óptica  
de sistemas altamente correlacionados

**Trabajo Fin de Grado**

Daniel García González

Tutores: Carlos Hernández García  
Luis Plaja Rustein

Julio de 2024

## Certificado de los tutores TFG Grado en Físicas

D. Carlos Hernández García, profesor/a del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca, y D. Luis Plaja Rustein, profesor/a del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca,

### HACEN CONSTAR:

Que el trabajo titulado “Exploración numérica de la respuesta óptica de sistemas altamente correlacionados”, que se presenta, ha sido realizado por D. Daniel García González, con DNI \*\*\*\*5641-K y constituye la memoria del trabajo realizado para la superación de la asignatura Trabajo de Fin de Grado en Físicas en esta Universidad.

Salamanca, a fecha de firma electrónica.

Fdo.:

Fdo.:



## Resumen

En este trabajo abordamos el estudio de sistemas aislantes donde los electrones están fuertemente localizados cerca de iones, interactuando no solo con estos sino también con los electrones de iones vecinos. Este fenómeno se modela utilizando el Hamiltoniano de Hubbard, un modelo que considera interacciones electrón-electrón próximas.

Definimos y analizamos las nociones y los conceptos básicos requeridos para poder conocer con detalle todo lo relacionado con este Hamiltoniano. Lo calculamos en un sistema de una dimensión, incorporando la interacción con un campo electromagnético que varía lentamente en el tiempo.

Proponemos una resolución numérica de este modelo, utilizando herramientas computacionales para la simulación y análisis de resultados. Encontramos los autoestados y las energías del sistema y analizamos su comportamiento en los distintos regímenes en los que muestra comportamiento como aislante o como conductor. También estudiamos la evolución temporal a través de la interacción a través de campos electromagnéticos.

### Palabras clave

Funciones de Wannier, espacio de Fock, operadores creación y destrucción, Hamiltoniano de Hubbard.

## Abstract

In this work, we address the study of insulating systems where electrons are strongly localized near ions, interacting not only with these ions but also with electrons of neighboring ions. This phenomenon is modeled using the Hubbard Hamiltonian, a model that considers nearest-neighbor electron-electron interactions.

We define and analyze the basic notions and concepts required to thoroughly understand everything related to this Hamiltonian. We compute it in a one-dimensional system, incorporating the interaction with a slowly varying electromagnetic field over time.

We propose a numerical resolution of this model, using computational tools for simulation and analysis of results. We find the eigenstates and energies of the system and analyze its behavior in the different regimes where it exhibits insulating or conducting properties. We also study the temporal evolution through interaction with electromagnetic fields.

### Keywords

Wannier functions, Fock space, creation and annihilation operators, Hubbard Hamiltonian.

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Objetivos	1
<b>2. Modelos de Hubbard</b>	<b>2</b>
2.1. Aplicaciones	2
2.2. Hamiltoniano “many-body”	3
2.2.1. Aproximación de Born-Oppenheimer	3
2.2.2. Aproximación de campo medio “mean field”	4
2.3. Primera cuantización del sistema	5
2.3.1. Base de Bloch	5
2.3.2. Base de Wannier	5
2.4. Segunda cuantización del sistema	6
2.5. Aproximación: interacción de corto alcance	6
2.6. Aproximación “tight-binding”	7
2.7. ¿Cuántos vecinos hay?	8
2.8. Campos externos	8
2.8.1. Tres dimensiones	8
2.8.2. Una dimensión	9
2.8.3. Campo eléctrico homogéneo	10
2.9. Primera cuantización: caso general	11
2.9.1. Operadores en primera cuantización	12
2.10. Segunda cuantización: caso general	13
2.10.1. El Espacio de Fock	13
2.10.2. Operadores creación y destrucción	14
2.10.3. Operador número	15
2.10.4. Operadores en la segunda cuantización	15
<b>3. Resolución del Hamiltoniano</b>	<b>17</b>
3.1. Espacios de Hilbert de 0,1 y 2 fermiones	17
3.2. Espacios de Hilbert de N fermiones	19
3.3. Espacio de Fock del sistema	19
3.4. Espacio de Fock finito	20
3.5. Restricción a un solo espacio de Hilbert	21
3.6. Restricción al Hamiltoniano	22
<b>4. Implementación en Python</b>	<b>23</b>
4.1. Método 1: considerando todos los estados	24
4.1.1. Definición de los estados	24
4.1.2. Cálculo del Hamiltoniano de hopping	24
4.1.3. Cálculo del Hamiltoniano de interacción	24
4.2. Método 2: desdoblado el espacio y acoplándolo	25
4.2.1. Definición de los estados en cada espacio	25
4.2.2. Definición de los estados del espacio producto	25
4.2.3. Acción de operadores en cada espacio	26
4.2.4. Acción de operadores en el espacio producto	26
4.2.5. Cálculo de los términos del Hamiltoniano	28
4.2.6. Reagrupamiento	28
<b>5. Resultados y análisis</b>	<b>29</b>

5.1.	Operadores de correlación de espín y número de pares doublon-hole . . . . .	30
5.2.	Caso de L=2 cajas . . . . .	31
5.2.1.	Energías y GAP . . . . .	33
5.2.2.	Correlación de espín . . . . .	34
5.2.3.	Pares doublon-hole . . . . .	35
5.3.	L=4 . . . . .	36
5.3.1.	Energías y GAP . . . . .	38
5.3.2.	Correlación de espín y pares doublon-hole . . . . .	39
5.4.	L=6 . . . . .	45
5.4.1.	Energías y GAP . . . . .	45
5.4.2.	Correlación de espín y pares doublon-hole . . . . .	46
<b>6.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>52</b>
<b>A.</b>	<b>Apéndice</b>	<b>I</b>
A.1.	Código en Python para el método 2 . . . . .	I
A.2.	Código en Python para el método 1 . . . . .	IX
	<b>Bibliografía</b>	<b>XIII</b>

# 1. Introducción

El análisis de la respuesta óptica en materiales comúnmente se realiza utilizando modelos de electrones independientes. No obstante, hay sistemas aislantes donde los electrones están fuertemente confinados en las proximidades de los iones, interactuando no solo con estos iones, sino también con los electrones de los iones vecinos. Estos sistemas presentan un comportamiento complejo que no puede ser capturado adecuadamente por modelos de electrones independientes.

Uno de los modelos más utilizados para estudiar estos sistemas es el modelo de Hubbard, que incorpora interacciones electrónicas a primer vecino y permite explorar fenómenos como la localización de electrones y las transiciones de fase entre estados metálicos y aislantes. Este modelo simplificado, aunque poderoso, proporciona una comprensión profunda de las interacciones electrónicas en sólidos y ha encontrado aplicaciones en una variedad de contextos, desde la superconductividad hasta la física de los materiales aislantes.

En este trabajo, nos proponemos resolver numéricamente el modelo de Hubbard en una dimensión, añadiendo la interacción con un campo electromagnético. Este enfoque nos permitirá estudiar cómo la inclusión de un campo externo afecta a las propiedades electrónicas y ópticas del sistema.

El modelo de Hubbard en una dimensión es particularmente interesante porque, a pesar de su simplicidad aparente, captura la esencia de las interacciones electrónicas en sistemas fuertemente correlacionados. Al añadir un campo electromagnético, podemos investigar cómo los electrones en un sistema de Hubbard responden a perturbaciones externas, proporcionando información valiosa sobre la dinámica de estos sistemas.

## 1.1. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es resolver numéricamente el modelo de Hubbard en una dimensión, considerando la interacción con un campo electromagnético. Para alcanzar este objetivo, hemos estructurado el trabajo en distintas secciones.

- Presentaremos las bases teóricas del modelo de Hubbard y cómo se modifica al incluir la interacción con un campo electromagnético. En concreto nos restringiremos al caso del modelo de Hubbard de media ocupación.
- Desarrollaremos métodos numéricos en Python para resolver el Hamiltoniano del sistema. Estos métodos incluirán la definición de los estados del sistema, el cálculo explícito de los términos del Hamiltoniano y la implementación de técnicas para manejar el espacio de Hilbert del sistema.
- Analizaremos los resultados obtenidos para sistemas periódicos de diferentes tamaños, centrándonos en los distintos regímenes en función de la interacción entre los electrones, además de la respuesta del sistema al campo electromagnético.
- Compararemos nuestros resultados con estudios previos y discutiremos la validez de nuestras aproximaciones y métodos numéricos.

Con este enfoque, esperamos contribuir al entendimiento del comportamiento de los sistemas de muchos cuerpos en presencia de campos electromagnéticos y proporcionar herramientas útiles para futuros estudios en este campo.

## 2. Modelos de Hubbard

### 2.1. Aplicaciones

El modelo de Hubbard es una herramienta fundamental en la física de la materia condensada y se utiliza para describir y entender una variedad de fenómenos relacionados con la interacción de electrones en sistemas sólidos. Algunas de sus aplicaciones más importantes incluyen:

- **Magnetismo en Sólidos:**

El modelo de Hubbard puede explicar el magnetismo en materiales, particularmente la transición entre comportamientos magnéticos y no magnéticos en función de la interacción entre los electrones.

- **Superconductividad:**

Es crucial para estudiar la superconductividad de alta temperatura en ciertos materiales cerámicos, proporcionando una base teórica para entender cómo los electrones se pueden emparejar y formar un estado superconductor.

- **Aislamiento de Mott:**

Describe la transición de un material conductor a un aislante (aislante de Mott) cuando la interacción entre los electrones es suficientemente fuerte, a pesar de que la teoría de bandas sugiera que debería ser un conductor.

- **Física de la Materia Fuertemente Correlacionada:**

Se utiliza para estudiar materiales donde las interacciones electrón-electrón son tan fuertes que no pueden ser ignoradas, incluyendo sistemas de electrones en dos dimensiones como los superconductores cupratos.

- **Estudio de Sistemas Cuánticos de Muchos Cuerpos:**

El modelo de Hubbard proporciona un marco simplificado pero potente para explorar las propiedades de los sistemas de muchos cuerpos, siendo una base para métodos numéricos como el método Monte Carlo cuántico o el método de grupos de renormalización.

- **Óptica Cuántica y Simulaciones Cuánticas:**

En sistemas de átomos ultrafríos en redes ópticas, el modelo de Hubbard puede ser implementado experimentalmente para simular fenómenos de la física del estado sólido y explorar nuevos estados de la materia.

- **Materiales Topológicos:**

Ayuda a entender y predecir propiedades en materiales con fases topológicas, donde las interacciones electrónicas juegan un papel significativo.

- **Transiciones de Fase Cuántica:**

El modelo de Hubbard es útil para estudiar las transiciones de fase cuántica, donde el cambio de fase se produce a cero absoluto debido a las fluctuaciones cuánticas, en lugar de las fluctuaciones térmicas.

## 2.2. Hamiltoniano “many-body”

Un sólido está formado por iones y electrones distribuidos en una estructura cristalina tridimensional. El Hamiltoniano  $H^{cris}$  será suma de tres Hamiltonianos: el correspondiente a los electrones  $H^{elec}$ , el de la red  $H^{latt}$ , y el debido a la interacción entre los electrones y la red  $H^{elec-latt}$ . Las coordenadas generalizadas son las posiciones de los  $N_e$  electrones de valencia, denotadas por  $\mathbf{r}_i$ ,  $i = 1, \dots, N_e$  y los  $N_n$  núcleos iónicos,  $\boldsymbol{\tau}_j$ ,  $j = 1, \dots, N_n$  de forma que

$$H^{cris} = H^{cris}((\mathbf{r}_i), (\mathbf{p}_{\mathbf{r}_i}); (\boldsymbol{\tau}_j), (\mathbf{p}_{\boldsymbol{\tau}_j}))$$

siendo  $\mathbf{p}$  los momentos asociados. Y

$$\begin{aligned} H^{elec} &= T^{elec} + V^{e^- - e^-} = H^{elec}((\mathbf{r}_i), (\mathbf{p}_{\mathbf{r}_i})), \\ H^{latt} &= T^{latt} + V^{latt-latt} = H^{latt}((\boldsymbol{\tau}_j), (\mathbf{p}_{\boldsymbol{\tau}_j})), \\ H^{elec-latt} &= V^{e^- - latt} = H^{elec}((\mathbf{r}_i), (\boldsymbol{\tau}_j)), \end{aligned}$$

donde  $V$  denota el potencial de interacción coulombiana y  $T$  la energía cinética.

### 2.2.1. Aproximación de Born-Oppenheimer

Una forma de aproximar y simplificar este Hamiltoniano es con la aproximación de Born-Oppenheimer, véase [1]. Con esta aproximación se supone que la masa de los núcleos iónicos es mucho mayor que la de los electrones y por tanto la velocidad relativa de los núcleos es mucho menor que la de los electrones. Esto es, para los electrones los núcleos son estáticos. De esta manera se puede separar el Hamiltoniano electrónico del de la red y

$$H^{cris} = H^{elec}((\mathbf{r}_i), (\mathbf{p}_{\mathbf{r}_i}); (\mathbf{R}_j)) + H^{latt}((\boldsymbol{\tau}_j), (\mathbf{p}_{\boldsymbol{\tau}_j})),$$

donde  $\mathbf{R}_j$ ,  $j = 1, \dots, N_n$  son las posiciones de equilibrio de los  $N_n$  núcleos en la red directa y donde en  $H^{elec}$  hemos englobado el término correspondiente a  $V^{e^- - latt}$ . Se puede entonces estudiar el comportamiento de los electrones de forma separada.

Por tanto el Hamiltoniano que determina el comportamiento de los electrones será

$$H = H^{elec} = T^{elec} + V^{e^- - e^-} + V^{e^- - latt}.$$

Veamos los distintos términos: - por una parte la energía cinética

$$T^{elec} = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}$$

siendo  $\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_{\mathbf{r}_i}$ .

- por otra el potencial de interacción de los electrones con el núcleo

$$V^{e^- - latt} = \sum_{i=1}^{N_e} V_I(\mathbf{r}_i)$$

con

$$V_I(\mathbf{r}_i) = - \sum_{j=1}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|}$$

el potencial de interacción de cada electrón con el núcleo, y  $\mathbf{R}_j$  recorriendo las posiciones

de los núcleos atómicos.

- y por último, el potencial de interacción entre los electrones

$$V^{e^- - e^-} = \sum_{1 \leq i < j \leq N_e} V_C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j),$$

con

$$V_C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

el potencial de interacción coulombiana entre cada par de electrones.

Finalmente se obtiene:

$$H = \sum_{i=1}^{N_e} \left( \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_I(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N_e} V_C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (2.1)$$

### 2.2.2. Aproximación de campo medio “mean field”

Pese a esta primera aproximación, el Hamiltoniano sigue siendo muy complicado para resolverlo de forma exacta debido a las dificultades que presenta cualquier Hamiltoniano “many-body”. Para simplificarlo más, habitualmente se utiliza la aproximación de campo medio, que consiste en lo siguiente. Sea  $V_A = V_A(\mathbf{r})$  un potencial auxiliar tal que

$$V(\mathbf{r}) = V_I(\mathbf{r}) + V_A(\mathbf{r}),$$

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \frac{1}{N-1} (V_A(\mathbf{r}_1) + V_A(\mathbf{r}_2)).$$

De esta forma

$$H = \sum_{i=1}^{N_e} \left( \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N_e} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (2.2)$$

En la mayoría de aproximaciones de campo medio se supone que el nuevo potencial de interacción  $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  es nulo o despreciable frente a la suma de los potenciales “one-body”

$$h_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Para ello se necesita escoger un potencial auxiliar tal que los elementos de matriz del potencial  $U(x, y)$  en la base formada por los autoestados del Hamiltoniano “one-body” sean despreciables. Aún cuando esto no es del todo posible,  $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  puede tener mucho menos alcance y magnitud en comparación con el potencial de Coulomb  $V_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ .

La idea de la introducción del potencial auxiliar  $V_A$  es partir de un número  $N_e$  muy grande de electrones en el estado fundamental  $\psi_0$  del Hamiltoniano. Al añadir un electrón al sistema, éste se verá afectado por dos potenciales: el potencial periódico de atracción con los iones y el potencial electrostático existente por la densidad del estado fundamental  $|\psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_e})|^2$ . Este potencial es periódico con la misma periodicidad que el potencial iónico. Sin embargo es del signo opuesto y por tanto apantalla la interacción atractiva con los iones (aunque esto no es del todo válido porque el electrón añadido cambia la densidad del estado fundamental). Pese a ello se supone que el efecto de este electrón es local y pequeño.

Se procede ahora a realizar una cuantización en el Hamiltoniano (2.2) siguiendo [2].

## 2.3. Primera cuantización del sistema

En el apartado (2.9) se detallan los pasos que seguiremos.

### 2.3.1. Base de Bloch

En primer lugar se calculan los autoestados del Hamiltoniano “one-body”(2.3).

Resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (2.22):

$$\begin{aligned} h_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V, \\ h_1\varphi &= \epsilon\varphi, \end{aligned}$$

la solución obtenida son las funciones de Bloch (véase [14])

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

donde  $u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  contiene la periodicidad de la red,  $\mathbf{k}$  es el cuasi-momento que recorre la primera zona de Brillouin y  $\alpha$  el índice de banda. Se puede suponer que los  $u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  están normalizados reescalando con el factor correspondiente. Se tiene entonces

$$(h_1\varphi_{\alpha\mathbf{k}})(\mathbf{r}) = \epsilon_{\alpha\mathbf{k}}\varphi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

con  $\epsilon_{\alpha\mathbf{k}}$  los autovalores de  $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}$ . Estas funciones son base de los estados de una partícula.

El Hamiltoniano (2.2) ya puede ser expresado en el formalismo de la primera cuantización.

### 2.3.2. Base de Wannier

Otra base alternativa está formada por las funciones de Wannier (ver [14], páginas 172-175)  $\phi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  donde  $\mathbf{R}_j$  son los vectores de la red de los núcleos atómicos y  $\phi_\alpha(\mathbf{r})$  puede definirse como

$$\phi_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

siendo  $L$  el número de iones. Las funciones de Wannier  $\phi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  dependen de la posición pero son independientes de los vectores  $\mathbf{k}$  de la primera zona de Brillouin. Además son ortogonales para distintos índices  $\alpha$  e  $i$ .

Con una transformada de Fourier

$$\varphi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \phi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j).$$

se obtienen nuevos estados de manera análoga a la primera cuantización del sistema.

## 2.4. Segunda cuantización del sistema

En el apartado (2,10) se detalla el procedimiento de la segunda cuantización.

Sean  $\hat{c}_{\alpha\mathbf{k},a}^\dagger$  el operador de creación de un electrón de espín  $a$  en la base total generada por los estados de Bloch  $\varphi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ .

Sean  $\hat{c}_{\alpha j,a}^\dagger$  definidos en la base total generada por los estados de Wannier de  $\phi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  como

$$\hat{c}_{\alpha j,a}^\dagger = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \hat{c}_{\alpha\mathbf{k},a}^\dagger.$$

Sea  $\psi_a^\dagger(\mathbf{r})$  el operador que crea un electrón de espín  $a$  en la posición  $\mathbf{r}$

$$\psi_a^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\mathbf{k}} \varphi_{\alpha\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \hat{c}_{\alpha\mathbf{k},a}^\dagger = \sum_{\alpha j} \phi_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \hat{c}_{\alpha j,a}^\dagger. \quad (2.5)$$

Con estos operadores, el Hamiltoniano se puede expresar en segunda cuantización (ver apartado (2,10)) como

$$\hat{H} = \sum_{a=\uparrow,\downarrow} \int d\mathbf{r} \psi_a^\dagger(\mathbf{r}) h_1 \psi_a(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{a,b=\uparrow,\downarrow} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_a^\dagger(\mathbf{r}_1) \psi_b^\dagger(\mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_2) \psi_a(\mathbf{r}_1).$$

Sean  $t_{ij}^\alpha$  los elementos de matriz de “hopping” entre bandas definidos como

$$t_{ij}^\alpha = \int d\mathbf{r} \phi_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) (h_1 \phi_\alpha)(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \epsilon_{\alpha\mathbf{k}}, \quad (2.6)$$

donde en la última igualdad se ha utilizado (2.3), (2.4) y la ortonormalidad de las funciones  $u_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ .

Se definen también los parámetros de interacción entre bandas  $U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}$  como

$$U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_\alpha^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) \phi_\beta^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_\gamma(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_k) \phi_\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_l). \quad (2.7)$$

Finalmente se puede expresar el Hamiltoniano (2.1) como

$$\hat{H} = \sum_{\alpha,i,j,a} t_{ij}^\alpha \hat{c}_{\alpha i,a}^\dagger \hat{c}_{\alpha j,a} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha,\beta,\gamma,\delta \\ i,j,k,l}} \sum_{a,b} U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{c}_{\alpha i,a}^\dagger \hat{c}_{\beta j,b}^\dagger \hat{c}_{\gamma k,b} \hat{c}_{\delta l,a}. \quad (2.8)$$

## 2.5. Aproximación: interacción de corto alcance

En la teoría de bandas se busca una buena elección de las funciones de Wannier y del potencial auxiliar para minimizar el efecto del potencial de interacción coulombiana. Cuando estos parámetros de interacción son despreciables frente a los de hopping, pueden ser estudiados con teoría de perturbaciones. .

En el modelo de Hubbard se supone que los parámetros de interacción no son despreciables pero sí de corto alcance (consúltese [4], páginas 4 y 5): la interacción coulombiana intra-

atómica es mucho mayor que la inter-atómica. Es decir,  $U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}$  son mucho mayores cuando  $i = j = k = l$  que cuando no son todos iguales. Este fenómeno es característico de los metales de tierras raras y de transición, que fueron los que motivaron a Hubbard a plantear este modelo.

Cuando la superficie de Fermi se encuentra dentro de una sola banda de conducción, se puede pasar de un Hamiltoniano multi-banda a uno efectivo de una única banda. Para ello, se supone que: - las interacciones entre bandas son débiles es decir,  $U_{iiii}^{\alpha\beta\gamma\delta}$  son mucho mayores cuando  $\alpha = \beta = \gamma = \delta$  que cuando no son todos iguales. - y que todas las bandas salvo la de conducción  $\alpha = 1$  están lejos del nivel de Fermi. Mientras se quieran estudiar las energías cercanas al nivel de Fermi, puede suponerse que las bandas de mayor energía solo influyen en el sistema cambiando los parámetros de hopping y de interacción de los electrones en la banda de conducción. Con esta aproximación se obtienen unos parámetros efectivos  $U_{iii}^{1111} = U \forall i$  y  $t_{ij}^1 = t_{ij}$  y el Hamiltoniano (2.8) adquiere la forma

$$\hat{H} = \sum_{ij,a} t_{ij} \hat{c}_{i,a}^\dagger \hat{c}_{j,a} + \frac{U}{2} \sum_{i,ab} \hat{c}_{i,a}^\dagger \hat{c}_{i,b}^\dagger \hat{c}_{i,b} \hat{c}_{i,a}. \quad (2.9)$$

Este Hamiltoniano no describe de manera exacta los metales de tierras raras o de transición debido a que en ellos la interacción entre bandas es importante. Sin embargo sí permite estudiar cualitativamente algunas propiedades electrónicas.

## 2.6. Aproximación “tight-binding”

Se puede hacer otra aproximación en el Hamiltoniano, la “tight-binding”. En ella los electrones están fuertemente ligados a los átomos y por tanto se pueden representar como funciones de onda obtenidas como combinaciones lineales de los orbitales atómicos (LCAO).

Esto se puede aplicar suponiendo que las funciones de Wannier  $\phi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  están centradas en torno a los vectores de red  $\mathbf{R}_j$ . Debido a ello solo es necesario estudiar el hopping entre los vecinos más próximos y entre los mismos iones. Si  $\hat{n}_{i,a} = \hat{c}_{i,a}^\dagger \hat{c}_{i,a}$  con  $a = \uparrow, \downarrow$  es el operador número (2.33)

$$\hat{H} = \sum_{[i,j],a} t_{ij} \hat{c}_{i,a}^\dagger \hat{c}_{j,a} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i,a} t_{ii} \hat{n}_{i,a},$$

donde  $[i, j]$  denota la suma entre los pares  $i, j$  de vecinos próximos.

Se puede considerar también que los elementos de hopping entre vecinos más próximos son iguales y  $t_{ij} = -t_0 \forall i, j, i \neq j$ . De igual forma entre los mismos iones,  $t_{ii} = -\mu \forall i$ . Se obtiene entonces

$$\hat{H} = -t_0 \sum_{[i,j],a} \hat{c}_{i,a}^\dagger \hat{c}_{j,a} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,a} \hat{n}_{i,a}. \quad (2.10)$$

El término correspondiente a  $\mu$  puede ser entendido como parte del potencial químico en una descripción macrocanónica del sistema y mide el número total de partículas. En un sistema en el que este número no presenta grandes variaciones, se puede tomar como constante y redefiniendo la escala del potencial químico, eliminarlo de la expresión del Hamiltoniano.

Finalmente

$$\hat{H} = -t \sum_{[i,j],a} \hat{c}_{i,a}^\dagger \hat{c}_{j,a} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (2.11)$$

## 2.7. ¿Cuántos vecinos hay?

La expresión del Hamiltoniano (2.11) no es tan sencilla de estudiar como parece. Todavía hay que definir cuántos “vecinos más próximos” hay. A este número se le llama número de coordinación de la red y solo hay dos casos en los que es factible poder caracterizar ciertas propiedades del sistema, cuando es dos o infinito. En [11] se estudia el caso infinito, que se puede considerar como en el que la red tiene dimensión  $D \rightarrow \infty$ . En este trabajo se analizará el otro, en el que hay dos vecinos, que es lo mismo que decir que la dimensión es  $D = 1$ .

## 2.8. Campos externos

A continuación se va a analizar cómo cambia el Hamiltoniano de Hubbard en presencia de un campo externo electro-magnético en la aproximación tight-binding, siguiendo [4], páginas 12-15.

### 2.8.1. Tres dimensiones

Se consideran electrones en una red tridimensional. Un campo electromagnético externo dependiente del tiempo, modifica el momento de los electrones de forma que ahora (2.3) adquiere la forma vista en (2.23)

$$h_1(r, p, t) = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 - e\Phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) - 2\mu_B B \cdot S + \lambda(\mathbf{r})\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (2.12)$$

siendo aquí  $q = -e$  y  $g = 2$ .

El término  $(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2$  puede ser expresado como  $(p^\alpha + eA^\alpha(\mathbf{r}, t))^2$  donde  $\alpha$  denota la componente  $\alpha$ -ésima en la base cartesiana  $\{x_1, x_2, x_3\}$  (Se sobreentiende el sumatorio sobre las tres componentes).

Por cuestiones de simplicidad se hará la restricción a electrones que se encuentran solo en orbitales  $s$  como hizo Hubbard [7]. El momento angular orbital  $\mathbf{L}$  es por ello nulo.

El término del campo magnético solo afecta a la parte de espín de la función de onda y por tanto puede ser estudiado aparte. Consideremos que el potencial escalar es nulo,  $\Phi(\mathbf{r}, t) = 0$ .

Si  $\hat{c}_{j,a}^\dagger$  y  $\hat{c}_{j,a}$  son los operadores creación y destrucción de electrones en los estados de Wannier  $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  en la única banda considerada, ahora los elementos de hopping (2.6) son

$$\begin{aligned} t_{ij}(t) &= \int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) (h_1(t)\phi)(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \\ &= \int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[ \left( \frac{1}{2m} (p^\alpha + eA^\alpha(\mathbf{r}, t))^2 + V(\mathbf{r}) \right) \phi \right] (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \\ &= \int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) e^{-ie\lambda} \left[ \frac{1}{2m} \left( p^\alpha + e \left( A^\alpha(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial \lambda}{\partial x_\alpha} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right) e^{ie\lambda} \phi \right] (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \end{aligned}$$

La última igualdad se cumple  $\forall \lambda = \lambda(\mathbf{r}, t)$  función diferenciable con valores complejos.

Escojamos

$$\lambda(\mathbf{r}, t) := - \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' A(\mathbf{r}', t) \quad (2.13)$$

con  $\mathbf{r}_0$  un valor arbitrario fijado.

Sea  $\forall j$

$$\bar{\phi}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) := e^{-ie\lambda(\mathbf{r}, t)} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j).$$

Entonces se llega a

$$t_{ij}(t) = \int d\mathbf{r} \bar{\phi}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[ \left( \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \bar{\phi} \right] (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (2.14)$$

Los efectos del campo externo han sido absorbidos dentro de las funciones de Wannier. Evidentemente cuando este campo es nulo se obtiene el mismo resultado del principio.

Si se supone que el potencial vector varía muy lentamente a escala atómica y como las funciones de Wannier  $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  están centradas fuertemente en torno a  $\mathbf{R}_j$ , entonces es válida la siguiente aproximación

$$\bar{\phi}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = e^{-ie\lambda(\mathbf{R}_j, t)} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j).$$

Por otro lado, la aproximación tight-binding seguirá siendo válida y solo hay que considerar los elementos de hopping entre vecinos. Bajo todas estas hipótesis, se obtiene el Hamiltoniano dependiente del tiempo

$$\hat{H}(t) = -t_0 \sum_{[i,j],a} e^{+ie(\lambda(\mathbf{R}_i, t) - \lambda(\mathbf{R}_j, t))} \hat{c}_{i,a}^\dagger \hat{c}_{j,a} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (2.15)$$

A los

$$\beta_{ij}(t) := -e(\lambda(\mathbf{R}_i, t) - \lambda(\mathbf{R}_j, t)) \quad (2.16)$$

se les conoce como fases de Peierls. Se recuerda de nuevo que no se ha tenido en cuenta la parte correspondiente al campo magnético porque puede ser estudiada de manera independiente.

### 2.8.2. Una dimensión

Considerando un anillo de radio  $R$  con  $L$  puntos de red equiespaciados y siendo el centro del anillo el origen de coordenadas como el de la figura (2.1). El Hamiltoniano (2.15) ahora es

$$\hat{H}(t) = -t_0 \sum_{a,j=1}^L \left( e^{-i\beta_{j,j+1}(t)} \hat{c}_{j,a}^\dagger \hat{c}_{j+1,a} + e^{+i\beta_{j,j+1}(t)} \hat{c}_{j+1,a}^\dagger \hat{c}_{j,a} \right) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (2.17)$$

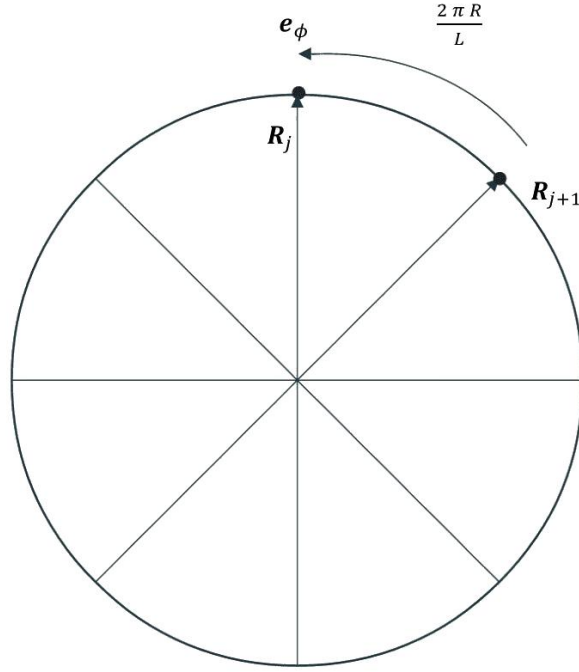


Figura 2.1: Modelo en una dimensión. Se considera una circunferencia de radio  $R$  con  $L$  puntos de red.

con  $\beta_{j,j+1}$  definidas como (2.16) y calculadas a partir de (2.13)

$$\beta_{j,j+1}(t) = -e \int_{\mathbf{R}_j}^{\mathbf{R}_{j+1}} d\mathbf{r} A(\mathbf{r}, t). \quad (2.18)$$

Se suponen condiciones periódicas de contorno en  $\lambda_{j,j+1}$ .

### 2.8.3. Campo eléctrico homogéneo

Se considera un campo eléctrico homogéneo de la forma  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E(\rho, t) \mathbf{e}_\phi$  donde  $\mathbf{e}_\phi$  es el vector unitario a lo largo del anillo y  $\rho$  es la distancia del punto  $r$  al eje perpendicular al plano del anillo que pasa por el centro de éste que se tomará como eje  $z$ . Como el potencial escalar se ha supuesto nulo entonces

$$E(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t},$$

y el potencial vector puede expresarse como

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -A(\rho, t) \mathbf{e}_\phi. \quad (2.19)$$

Sustituyendo en (2.18), todas son iguales  $\forall j$  e integrando

$$\beta(t) = ea_0 A(t)$$

con  $A(t) = A(R, t)$  y  $a_0 = \frac{2\pi R}{L}$ .

Además del campo eléctrico habría un campo magnético homogéneo  $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = B \mathbf{e}_z$  perpendicular al plano del anillo. Este campo se acopla a los espines de los electrones

añadiendo un término  $-2\mu_B B S^z$  al Hamiltoniano (2.17) donde  $S_z$  es la suma de todas las componentes en el eje de  $z$  de los espines de los electrones.

Por tanto

$$\hat{H}(t) = -t_0 \sum_{j=1,a}^L \left( e^{-i\beta(t)} \hat{c}_{j,a}^\dagger \hat{c}_{j+1,a} + e^{+i\beta(t)} \hat{c}_{j+1,a}^\dagger \hat{c}_{j,a} \right) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - 2\mu_B B S^z. \quad (2.20)$$

## 2.9. Primera cuantización: caso general

La primera cuantización se utiliza para describir la dinámica de partículas individuales. Las variables clásicas como la posición y el momento, se reemplazan por operadores que actúan sobre las funciones de onda. Se basa en la idea de que las partículas pueden describirse mediante funciones de onda  $\psi(\mathbf{r}, t)$  que contienen toda la información sobre el sistema cuántico. La evolución de estas funciones de onda está gobernada por la ecuación de Schrödinger, bien la dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.21)$$

donde  $\hat{H}$  es el Hamiltoniano del sistema, o la independiente del tiempo

$$\hat{H} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

donde  $E$  es la energía del estado correspondiente a la función de onda  $\psi(\mathbf{r})$ .

Los operadores más usuales son los siguientes:

- El operador de posición  $\hat{\mathbf{r}}$

$$\hat{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}).$$

- El operador de momento  $\hat{\mathbf{p}}$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$$

donde  $\nabla$  es el operador gradiente.

El Hamiltoniano de un sistema de  $N$  partículas libres tendrá la forma  $\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_i}$  siendo  $m_i$  la masas de cada partícula y  $\hat{\mathbf{p}}_i = -i\hbar \nabla_i$  el gradiente respecto a la posición de la partícula  $i$ .  $\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_i}$  es el Hamiltoniano de cada partícula.

En caso de estar sometido el sistema a un campo electromagnético externo dado por el potencial vector  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  y el potencial escalar  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  entonces, para cada partícula (ver [5], página 229)

$$\hat{H} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + q\Phi(\mathbf{r}, t) \right] - g\mu_B \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} + \lambda(\mathbf{r}) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (2.23)$$

donde  $g$  es el factor giromagnético,  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr,  $q$  es la carga de cada partícula,  $c$  la velocidad de la luz,  $\mathbf{L}$  es el operador de momento angular orbital y  $\mathbf{S}$  el de espín.  $\cdot$  denota el producto escalar usual en  $\mathbb{R}^3$ .  $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$  con  $\text{rot}$  el rotacional es el campo magnético.

El término que incluye a  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  con  $\lambda(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \left( \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right)$  es el debido al acoplamiento del espín con el campo magnético. El que incluye  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$  aparece por el efecto Zeeman.

El Hamiltoniano total del sistema será la suma de los individuales de cada partícula.

Para un sistema formado por  $N$  bosones o fermiones, los estados totales del sistema pueden ser expresados como combinaciones lineales de productos tensoriales de estados individuales de las  $N$  partículas. Para los bosones, de espín entero estos estados son permanentes debido a la simetría de estas funciones y para los fermiones, determinantes de Slater. Por ejemplo, si  $\psi_1(\mathbf{r}), \dots, \psi_N(\mathbf{r})$  son los estados de  $N$  partículas, el estado total es combinación lineal de términos de la forma

$$|\psi_{i_1}(\mathbf{r})\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{i_N}(\mathbf{r})\rangle,$$

con  $i_1, \dots, i_N \in \{1, \dots, N\}$  y todos distintos.  $\otimes$  denota el producto tensorial. Usualmente se omitirá el producto tensorial siempre que no haya riesgo de confusión. Como observación, un estado total de un sistema de fermiones será, salvo constantes de normalización

$$|\psi_{i_1}(\mathbf{r})\rangle \wedge \dots \wedge |\psi_{i_N}(\mathbf{r})\rangle$$

con  $\wedge$  el producto exterior.

### 2.9.1. Operadores en primera cuantización

Los operadores pueden ser expresados en la base total del sistema como se explica a continuación. Véase por ejemplo [2], páginas 4-9.

Sea  $T_j$  un operador que actúa sobre una sola partícula (por ejemplo la energía cinética),  $T_j = T(\mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j)$ .

Entonces

$$T_j = \sum_{l_2, l_1} T_{l_1 l_2} |\psi_{l_1}(\mathbf{r}_j)\rangle \langle \psi_{l_2}(\mathbf{r}_j)|, \quad (2.24)$$

donde

$$T_{l_1 l_2} = \int d\mathbf{r}_j \psi_{l_1}^*(\mathbf{r}_j) T_j \psi_{l_2}(\mathbf{r}_j). \quad (2.25)$$

$T_j$  actúa sobre  $|\psi_{i_1}(\mathbf{r}_1)\rangle \dots |\psi_{i_N}(\mathbf{r}_N)\rangle$  de la siguiente forma::

$$T_j |\psi_{i_1}(\mathbf{r})\rangle \dots |\psi_{i_N}(\mathbf{r})\rangle = \sum_{l_2, l_1} T_{l_1 l_2} \delta_{l_2, i_j} |\psi_{i_1}(\mathbf{r}_1)\rangle \dots |\psi_{l_2}(\mathbf{r}_j)\rangle \dots |\psi_{i_N}(\mathbf{r}_N)\rangle.$$

Y la energía cinética total es

$$T_{tot} = \sum_{j=1}^N T_j$$

Sea  $U_{ij}$  un operador que actúa sobre dos partículas (como el potencial de Coulomb, entendido como operador en vez de función escalar).

$$U_{ij} = \sum_{\substack{l_3, l_4 \\ l_1, l_2}} U_{l_1 l_2, l_3 l_4} |\psi_{l_1}(\mathbf{r}_i)\rangle |\psi_{l_2}(\mathbf{r}_j)\rangle \langle \psi_{l_3}(\mathbf{r}_i)| \langle \psi_{l_4}(\mathbf{r}_j)| \quad (2.26)$$

con

$$U_{l_1 l_2, l_3 l_4} = \int d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_j \psi_{l_1}^*(\mathbf{r}_i) \psi_{l_2}^*(\mathbf{r}_j) U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \psi_{l_3}(\mathbf{r}_i) \psi_{l_4}(\mathbf{r}_j). \quad (2.27)$$

La acción de  $U_{ij}$  sobre un estado  $|\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\rangle \dots |\psi_{k_N}(\mathbf{r}_N)\rangle$  es:

$$U_{ij} |\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\rangle \dots |\psi_{k_N}(\mathbf{r}_N)\rangle = \sum_{\substack{l_3, l_4 \\ l_1, l_2}} U_{l_1 l_2, k_i k_j} |\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\rangle \dots |\psi_{l_3}(\mathbf{r}_i)\rangle \dots |\psi_{l_4}(\mathbf{r}_j)\rangle \dots |\psi_{k_N}(\mathbf{r}_N)\rangle.$$

Y el potencial total que actúa sobre las partículas 2 a 2

$$U_{tot} = \sum_{i < j}^N U_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i, j=1}^N U_{ij}.$$

Se procede de manera análoga si los operadores actúan sobre más partículas. En nuestro trabajo solo serán necesarios estos dos primeros casos.

## 2.10. Segunda cuantización: caso general

La segunda cuantización es una formulación de la mecánica cuántica muy útil para la descripción de sistemas de muchas partículas, “many-body”. En esta aproximación se utilizan operadores creación y destrucción para describir estados ocupacionales en lugar de trabajar con funciones de onda de muchas partículas. Esta técnica es esencial para abordar sistemas de partículas interactuantes como electrones en sólidos. Para más detalles, consultar [9], páginas 221-230 o [2], páginas 9-16.

### 2.10.1. El Espacio de Fock

El espacio de Fock es una extensión del espacio de Hilbert en el que están definidas las funciones de onda utilizado para describir sistemas con un número variable de partículas. En él los estados se representan como superposiciones de estados con diferentes números de partículas.

El espacio de Fock  $\mathcal{F}$ , se construye como una suma directa de espacios de Hilbert de  $N$  partículas,  $\mathcal{H}_N$ :

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N, \quad (2.28)$$

donde  $\mathcal{H}_0$  es el espacio de vacío (0 partículas),  $\mathcal{H}_1$  es el espacio de una partícula,  $\mathcal{H}_2$  es el espacio de dos partículas, y así sucesivamente.

Los estados que se van a considerar para los distintos números de partículas se construyen a partir de los estados individuales de cada una de ellas de la forma (2.9). Para distinguirlos de los individuales, a éstos los llamaremos “estados totales”.

El estado vacío  $|0\rangle$  es el estado sin partículas, el único de  $\mathcal{H}_0$ . Un estado con una partícula en el estado  $i$  de  $\mathcal{H}_1$  es:

$$|1_i\rangle$$

o, si se considera un sistema con  $l$  estados,

$$|0_1, 0_2, \dots, 1_i, \dots, 0_l\rangle$$

Los estados de  $\mathcal{H}_N$  con  $N$  partículas repartidas en  $m$  estados  $i_1, i_2, \dots, i_m$  se escriben como

$$|n_{i_1}, n_{i_2}, \dots, n_{i_m}\rangle.$$

con  $n_{i_1} + \dots + n_{i_m} = N$ .

O, de nuevo si se considera un sistema de  $l$  estados

$$|0_1, \dots, 0_{i_1-1}, n_{i_1}, 0_{i_1+1}, \dots, 0_{i_m-1}, n_{i_m}, 0_{i_m+1}, \dots, 0_l\rangle.$$

Los estados totales de un sistema con  $l$  estados individuales se expresarán de forma genérica como

$$|n_1 n_2 \dots, n_l\rangle$$

con  $n_1, \dots, n_l$  tomando valores  $\geq 0$ .

Por simplicidad, si en un sistema solo se indica que en ciertos estados hay un número de partículas distinto de 0, entonces el resto de ellos lo están. No es necesario que esté indicado en todos. Por ejemplo, en un sistema con 3 estados

$$|1_1, 0_2, 0_3\rangle = |1_1\rangle = |1_1, 0_2\rangle, \quad (2.29)$$

no haría falta indicar que  $n_3 = 0$  en la última expresión.

En el caso de las partículas sean bosones puede haber un número indefinido de partículas en cada estado.

En el caso de que sean fermiones por el principio de exclusión de Pauli en cada estado solo puede haber una o ninguna partícula.

### 2.10.2. Operadores creación y destrucción

En la segunda cuantización se utilizan los operadores creación ( $\hat{c}_i^\dagger$ ) y destrucción ( $\hat{c}_i$ ) que actúan sobre el espacio de Fock y crean o destruyen una partícula en el estado  $i$  o  $j$  respectivamente. Estos operadores obedecen reglas de conmutación o anticonmutación dependiendo de si estamos tratando con bosones o fermiones.

Se utilizará que  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  es el conmutador y  $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$  es el anticonmutador.

Para bosones, que son partículas con espín entero, los operadores creación y destrucción son análogos a los del oscilador armónico cuántico. Estos cumplen:

$$\begin{aligned}\hat{c}_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_l\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_l\rangle, \\ \hat{c}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_l\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_l\rangle.\end{aligned}$$

Se cumple que

$$\begin{aligned}[\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger] &= \delta_{ij}, \\ [\hat{c}_i, \hat{c}_j] &= [\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger] = 0,\end{aligned}$$

donde  $\delta$  denota la delta de Kronecker.

Para fermiones, que son partículas con espín semi-entero, los operadores creación y destrucción se definen como

$$\begin{aligned}\hat{c}_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_l\rangle &= (-1)^{\sigma(i)} (1 - n_i) |n_1, n_2, \dots, 1 + n_i, \dots, n_l\rangle, \\ \hat{c}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_l\rangle &= (-1)^{\sigma(i)} n_i |n_1, n_2, \dots, 1 - n_i, \dots, n_l\rangle.\end{aligned}\tag{2.30}$$

donde  $\sigma(i)$  es el signo de una permutación entre los índices que dependerá de la definición de los estados en función de los operadores creación. En la sección (3) explicaremos cuál es nuestra elección y la justificaremos.

La similitud con los de los bosones está en que, como  $n_i = 0, 1$ ,  $(1 - n_i) = \delta_{n_i,0} \sqrt{n_i + 1}$  y  $n_i = \delta_{n_i,1} \sqrt{n_i}$  se podrían definir de la misma forma, pero teniendo que asegurarse de que el estado esté vacío o lleno según corresponde.

En ambos casos se verifica que

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij},\tag{2.31}$$

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0.\tag{2.32}$$

### 2.10.3. Operador número

Tanto para bosones como para fermiones el operador número se define como

$$\hat{n}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i.\tag{2.33}$$

Aplicado a cualquier estado da el número de partículas que hay en la posición  $i$ :

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_l\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_l\rangle.$$

### 2.10.4. Operadores en la segunda cuantización

Los operadores pueden ser expresados en términos de los operadores creación y destrucción definidos anteriormente. La expresión es similar a la de la primera cuantización como se verá a continuación. Sean  $\hat{c}_{l,j}^\dagger$  y  $\hat{c}_{l,j}$  los operadores creación y destrucción del estado  $\psi_l$  en la posición  $\mathbf{r}_j$ .

Si  $T_j$  es como antes (2.24) entonces

$$T_j = \sum_{l_1, l_2} T_{l_1, l_2} \hat{c}_{l_1, j}^\dagger \hat{c}_{l_2, j}, \quad (2.34)$$

con  $T_{l_1, l_2}$  igual al de (2.25).

Y si  $U_{ij}$  es como antes (2.26)

$$U_{ij} = \sum_{\substack{l_1 l_2 \\ l_3 l_4}} U_{l_1 l_2, l_3 l_4} \hat{c}_{l_1, i}^\dagger \hat{c}_{l_2, j}^\dagger \hat{c}_{l_3, i} \hat{c}_{l_4, j}, \quad (2.35)$$

con  $U_{l_1 l_2, l_3 l_4}$  igual al de (2.27).

### 3. Resolución del Hamiltoniano

Ya hemos introducido las nociones necesarias para poder conocer el problema que trataremos de solucionar. El objetivo principal es resolver el Hamiltoniano dependiente del tiempo obtenido en (2.20). Es conocida una solución exacta mediante el ansatz de Bethe, una técnica que permite calcular funciones de onda de sistemas cuánticos de varias partículas (ver por ejemplo [4], capítulo 3). No obstante, esta técnica puede resultar muy costosa para sistemas de muchas partículas. Se planteará la solución de este Hamiltoniano a través de su diagonalización en cada instante de tiempo  $t$ , obteniendo los autoestados y autovalores para posteriormente analizar sus variaciones.

Se seguirá el caso tratado en [13]. El sistema tendrá las siguientes propiedades.

- Como ya se mencionó anteriormente, los electrones estarán en el orbital  $s$ . En cada una de los puntos de la red unidimensional los electrones solo podrán tener dos estados: espín up  $\uparrow$  o down  $\downarrow$  en la dirección del eje  $z$ . En cada punto de red habrá a lo sumo 2 electrones.
- En la red unidimensional habrá un número par  $L$  de puntos de red, pudiendo haber como máximo  $2L$  electrones. En nuestro caso particular habrá  $N = L$  electrones repartidos entre los puntos de red.
- La mitad de los electrones tendrá espín up y la otra mitad espín down. De esta forma  $S_z = 0$  y el término correspondiente desaparece del Hamiltoniano.
- Se considerarán condiciones de contorno periódicas.

Se construirá el espacio de Fock de los fermiones a partir de los operadores creación y destrucción de (2.30) que ahora serán estudiados en profundidad siguiendo [8] y [4].

#### 3.1. Espacios de Hilbert de 0,1 y 2 fermiones

Para verlo desde un punto de vista más general, el subíndice  $\alpha$  será igual a  $i, a$  con  $i$  el punto de la red y  $a$  el espín. O cualquier otro conjunto de subíndices en otro caso.  $S$  es el conjunto que engloba a todos los  $\alpha$  posibles, a las posibles posiciones de las fermiones -posición como conjunto de subíndices, como por ejemplo posición en la red y espín-.

Cuando no hay fermiones el único estado posible es el trivial, el vacío:

$$\mathcal{H}_0 = \{\text{estados con 0 fermiones}\} \equiv |vac\rangle = \{|n_\alpha = 0\rangle \forall \alpha\} = |0\rangle.$$

Cuando hay un fermión:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= \{\text{estados con un único estado } n_\alpha = 1 \text{ y los demás } n = 0\} \equiv \\ &\equiv \{|n_\alpha = 1, \text{ otros } n = 0\rangle = \hat{c}_\alpha^\dagger |0\rangle\}_{\alpha \in S}. \end{aligned}$$

Es sencillo definir y ordenar una base de estados. Por ejemplo, si  $\alpha$  puede tomar  $s$  valores diferentes en  $S$ , si se ordenan estos valores desde 1 hasta  $s$ , entonces los  $s$  estados  $|i\rangle_1$  con  $i = 1, \dots, s$  son

$$\begin{aligned}
|1\rangle_1 &= |n_1 = 1\rangle = \hat{c}_1^\dagger |0\rangle = |1, 0, 0 \dots, 0\rangle, \\
|2\rangle_1 &= |n_2 = 1\rangle = \hat{c}_2^\dagger |0\rangle = |0, 1, 0 \dots, 0\rangle, \\
&\dots \\
|s\rangle_1 &= |n_s = 1\rangle = \hat{c}_s^\dagger |0\rangle = |0, 0, \dots, 0, 1\rangle.
\end{aligned}$$

En el caso en que  $\alpha = (i, a)$ , una opción es ordenarlos según las posiciones  $i$ , y a igual posición el de espín up precede al de espín down. Si hay  $L$  posiciones, los  $2L$  estados serán

$$\begin{aligned}
|1\rangle_1 &= |n_{1,\uparrow} = 1\rangle = \hat{c}_{1,\uparrow}^\dagger |0\rangle = |1, 0, \dots, 0\rangle, \\
|2\rangle_1 &= |n_{1,\downarrow} = 1\rangle = \hat{c}_{1,\downarrow}^\dagger |0\rangle = |0, 1, 0, \dots, 0\rangle, \\
|3\rangle_1 &= |n_{2,\uparrow} = 1\rangle = \hat{c}_{2,\uparrow}^\dagger |0\rangle = |0, 0, 0, 1, 0 \dots, 0\rangle, \\
&\dots \\
|2L-1\rangle_1 &= |n_{2L,\uparrow} = 1\rangle = \hat{c}_{2L,\uparrow}^\dagger |0\rangle = |0, 0, \dots, 0, 1, 0\rangle, \\
|2L\rangle_1 &= |n_{2L,\downarrow} = 1\rangle = \hat{c}_{2L,\downarrow}^\dagger |0\rangle = |0, 0, \dots, 0, 0, 1\rangle.
\end{aligned}$$

Para un sistema de dos fermiones:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_2 &= \{ \text{estados con dos estados } n_\alpha = 1, n_\beta = 1 \text{ y los demás } n = 0 \} \equiv \\
&\equiv \{ |n_\alpha = 1, n_\beta = 1, \text{ otros } n = 0\rangle = \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta^\dagger |0\rangle \}_{\alpha, \beta \in S, \alpha \neq \beta}.
\end{aligned}$$

Es importante darse cuenta de que por las propiedades de antisimetría de los operadores creación y destrucción (2.31)

$$\hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta^\dagger |0\rangle = -\hat{c}_\beta^\dagger \hat{c}_\alpha^\dagger |0\rangle.$$

Todos los estados podrán ser expresados de estas dos maneras, que son análogas. Pero para definir una base es necesario establecer un orden. Por ejemplo, si de nuevo  $\alpha$  toma  $s$  valores ordenados, entonces los elementos de la base serán  $\{\hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta^\dagger |0\rangle, \alpha > \beta\}$ . Para ordenarlos, dados dos estados, va antes el que tenga menor  $\beta$ . Y a igual  $\beta$ , el de menor  $\alpha$ .

Ahora habrá  $\binom{s}{2} = q$  estados en la base.

$$\begin{aligned}
|1\rangle_2 &= |n_1 = 1, n_2 = 1\rangle = \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_1^\dagger |0\rangle = |1, 1, \dots, 0\rangle, \\
|2\rangle_2 &= |n_1 = 1, n_3 = 1\rangle = \hat{c}_3^\dagger \hat{c}_1^\dagger |0\rangle = |1, 0, 1, 0 \dots, 0\rangle, \\
|3\rangle_2 &= |n_2 = 1, n_3 = 1\rangle = \hat{c}_3^\dagger \hat{c}_2^\dagger |0\rangle = |0, 1, 1, 0 \dots, 0\rangle, \\
&\dots \\
|q-1\rangle_2 &= |n_{s-2} = 1, n_s = 1\rangle = \hat{c}_s^\dagger \hat{c}_{s-2}^\dagger |0\rangle = |0, 0 \dots, 0, 1, 0, 1\rangle, \\
|q\rangle_2 &= |n_{s-1} = 1, n_s = 1\rangle = \hat{c}_s^\dagger \hat{c}_{s-1}^\dagger |0\rangle = |0, 0 \dots, 0, 1, 1\rangle.
\end{aligned}$$

En el caso en que  $\alpha = (i, a)$  como antes, se puede combinar esta ordenación con la descrita para  $\mathcal{H}_1$ . Los elementos de la base serán  $\{\hat{c}_{i,a}^\dagger \hat{c}_{i',a'}^\dagger |0\rangle, i > i' \text{ ó } i = i' \text{ y } a > a'\}$ .  $a > a'$  quiere decir que  $a = \downarrow$  y  $a' = \uparrow$ .

Para dos estados diferentes  $\hat{c}_{i,a}^\dagger \hat{c}_{i',a'}^\dagger |0\rangle$  va primero el de mayor  $i$ . A igual  $i$ , el de mayor  $a$ . Si también es igual, se compara  $(i', a')$ .

### 3.2. Espacios de Hilbert de $N$ fermiones

Habiendo analizado los espacios de Hilbert de 0, 1 y 2 partículas, podemos extender los resultados a un espacio de Hilbert con un número arbitrario de fermiones  $N$ .

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_N &= \{ \text{estados con } N \text{ estados } n_{\alpha_1} = 1, \dots, n_{\alpha_N} = 1 \text{ y los demás } n = 0 \} \equiv \\ &\equiv \{ |n_{\alpha_1} = 1, \dots, n_{\alpha_N} = 1, \text{ otros } n = 0 \rangle \}. \end{aligned}$$

Los estados de la base serán

$$\{ \hat{c}_{\alpha_N}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle, \alpha_1, \dots, \alpha_N \in S, \alpha_N > \alpha_{N-1} > \dots > \alpha_1 \} = |\alpha\rangle$$

donde  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ . El espacio -y la base- es de dimensión  $\binom{s}{N}$ .

El orden de los estados  $\alpha$  vendrá dado por el que tenga menor  $\alpha_N$ . En caso de igualdad el de menor  $\alpha_{N-1}$ , y así sucesivamente.

Cuando hay  $N$  fermiones con dos espines posibles,  $\alpha = (\mathbf{i}, \mathbf{a})$  siendo  $\mathbf{i} = (i_1, \dots, i_N)$  el conjunto de las posiciones de los  $N$  fermiones en la red y  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_N)$  el conjunto de los espines de los  $N$  fermiones. Si hay  $L$  posiciones en la red, hay  $2L$  combinaciones posibles  $(i, a)$ . La dimensión del espacio es  $\binom{2L}{N}$ . Para dos estados  $(\mathbf{i}, \mathbf{a})$  va primero el de menor  $i_N$ . Si es igual, el de menor  $a_N$ ; si la igualdad persiste, el de menor  $i_{N-1}$  y así hasta el final. Los estados así descritos  $|(\mathbf{i}, \mathbf{a})\rangle$  son también los estados de Wannier totales.

### 3.3. Espacio de Fock del sistema

Para que los operadores creación y destrucción estén definidos para cualquier estado hay que considerar el espacio de Fock (2.28), que es la suma directa de todos los espacios de Hilbert:

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N.$$

Con los operadores creación se pueden transformar estados de  $\mathcal{H}_N$  a estados  $\mathcal{H}_{N+1}$ , y con los destrucción al revés. Los operadores destrucción de un electrón actuando sobre estados con dicha posición y espín vacíos es nula, esto es, da un 0, no el estado vacío. Ocurre lo mismo con los construcción sobre los estados con esa posición y espín ocupados.

La ordenación de los estados en el espacio de Fock se hace en orden ascendente de los espacios de Hilbert. Y dentro de cada espacio de Hilbert, según se ha indicado en el apartado (3.2).

Estudiemos la expresión de los operadores creación y destrucción en el espacio de Fock. Sea  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$  un estado en un espacio con  $N$  fermiones con  $s$  posiciones posibles para los fermiones -de nuevo como conjunto de subíndices-. Entonces

$$|\alpha\rangle \equiv |n_1 \dots n_s\rangle,$$

con  $n_i = n_{\alpha_i} = 1 \forall i = 1, \dots, N$  y  $n$  para el resto.

Luego

$$\begin{aligned}\hat{c}_i |\alpha\rangle &= \hat{c}_i |n_1 \dots n_i \dots n_s\rangle = \hat{c}_i \hat{c}_{\alpha_N}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_{l+1}}^\dagger \hat{c}_{\alpha_l}^\dagger \hat{c}_{\alpha_{l-1}}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle = \\ &= \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha_l \neq i \ \forall l = 1, \dots, N \equiv n_i = 0, \\ (-1)^{N-(l+1)} \hat{c}_{\alpha_N}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_{l+1}}^\dagger \hat{c}_{\alpha_{l-1}}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle & \text{si } \exists l \text{ con } \alpha_l = i \equiv n_i = 1. \end{cases}\end{aligned}$$

En el segundo caso se ha utilizado que

$$\begin{aligned}\hat{c}_i \hat{c}_{\alpha_N}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_{l+1}}^\dagger \hat{c}_{\alpha_l}^\dagger \hat{c}_{\alpha_{l-1}}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle &= (-1)^{N-(l+1)} \hat{c}_{\alpha_N}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_{l+1}}^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_{\alpha_l}^\dagger \hat{c}_{\alpha_{l-1}}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle = \\ &= (-1)^{N-(l+1)} \hat{c}_{\alpha_N}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_{l+1}}^\dagger (1 - \hat{c}_{\alpha_l}^\dagger \hat{c}_i) \hat{c}_{\alpha_{l-1}}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle = \\ &= (-1)^{N-(l+1)} \hat{c}_{\alpha_N}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_{l+1}}^\dagger \hat{c}_{\alpha_{l-1}}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle.\end{aligned}$$

La última igualdad se cumple porque  $\hat{c}_i \hat{c}_{\alpha_{l-1}}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle = 0$  ya que  $i \neq \alpha_1, \dots, \alpha_{l-1}$ .

Para simplificar esta expresión, notemos que

$$(-1)^{N-(l+1)} = \{ \text{suma de los unos que hay después de } n_i \text{ y hasta } n_s \} = (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r}.$$

Por otra parte

$$\begin{aligned}\hat{c}_{\alpha_N}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_{l+1}}^\dagger \hat{c}_{\alpha_{l-1}}^\dagger \dots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle &= |n_1 \dots n_{i-1}, 0, n_{i+1} \dots n_s\rangle = |n_1 \dots n_{i-1}, 0, n_{i+1} \dots n_s\rangle = \\ &= n_i |n_1 \dots n_{i-1} (1 - n_i) n_{i+1} \dots n_s\rangle \text{ si } n_i = 1.\end{aligned}$$

Por tanto

$$\hat{c}_i |n_1 \dots n_i \dots n_s\rangle = (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} n_i |n_1 \dots n_{i-1} (1 - n_i) n_{i+1} \dots n_s\rangle, \quad (3.1)$$

expresión válida evidentemente para  $n_i = 1$  como se acaba de ver y también para  $n_i = 0$  pues  $n_i$  aparece multiplicando.

Razonando similarmente para el operador construcción

$$\hat{c}_i^\dagger |n_1 \dots n_i \dots n_s\rangle = (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} (1 - n_i) |n_1 \dots n_{i-1} (1 + n_i) n_{i+1} \dots n_s\rangle. \quad (3.2)$$

Hemos llegado evidentemente a las expresiones (2.30). Con esta elección de la definición y ordenación de los estados  $\sigma(i) = (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r}$ .

### 3.4. Espacio de Fock finito

Trabajar en este espacio no parece viable. Por este motivo se define el espacio de Fock de dimensión  $M$

$$\mathcal{H}^M = \bigoplus_{N=0}^M \mathcal{H}_N. \quad (3.3)$$

En él, los operadores destrucción están definidos para todos los estados. Sin embargo, los operadores creación ahora no lo están para  $\mathcal{H}_M$ . Se puede entender su acción sobre ellos como nula.

La dimensión del espacio de Fock de dimensión  $M$   $\mathcal{H}^M$  es

$$\sum_{N=0}^M \binom{M}{N} = 2^M$$

### 3.5. Restricción a un solo espacio de Hilbert

Restringirse a un solo espacio de Hilbert, a un sistema con un número fijo de fermiones, reduciría aún más la dificultad del problema. Pero en él carece de sentido describir la acción de los operadores creación y destrucción sobre los estados de la base por separado. Sin embargo sí es posible describir el comportamiento de cualquier composición de operadores creación y destrucción, siempre y cuando haya el mismo número de ambos.

Por las propiedades de antisimetría (2.31) cualquier composición de un mismo número de operadores creación y destrucción puede expresarse como composición de parejas

$$\hat{h}_{\alpha\beta} := \hat{c}_{\beta}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha}.$$

Si  $\alpha \neq \beta$  a estos operadores se les llama operadores de hopping de  $\alpha$  a  $\beta$ , pues “quitan” un electrón de  $\alpha$  y lo “ponen” en  $\beta$ . Si son iguales, son los operadores número (2.33). Para estudiar las propiedades de un sistema como éste solo es necesario calcular la acción de los operadores de hopping y número sobre cualquier estado.

Sea de nuevo  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$  un estado en un espacio con  $N$  fermiones con  $s$  posiciones posibles para los fermiones. Entonces

$$|\alpha\rangle \equiv |n_1 \dots n_s\rangle$$

con  $n_i = n_{\alpha_i} = 1 \forall i = 1, \dots, N$  y  $n$  para el resto.

Luego a partir de (3.1) y (2.9), los operadores de hopping sobre un estado cualquiera  $\alpha$  están dados por:

- Si  $i < j$  :

$$\begin{aligned} \hat{h}_{ij} |\alpha\rangle &= \hat{h}_{ij} |n_1 \dots n_i \dots n_j \dots n_s\rangle = \hat{c}_j^{\dagger} \hat{c}_i |n_1 \dots n_i \dots n_j \dots n_s\rangle = \\ &= \hat{c}_j^{\dagger} (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} n_i |n_1 \dots (1 - n_i) \dots n_j \dots n_s\rangle = \\ &= (-1)^{\sum_{r=j+1}^s n_r} (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} n_i (1 - n_j) |n_1 \dots (1 - n_i) \dots (1 + n_j) \dots n_s\rangle = \\ &= (-1)^{\sum_{r=i+1}^j n_r} n_i (1 - n_j) |n_1 \dots (1 - n_i) \dots (1 + n_j) \dots n_s\rangle. \end{aligned}$$

En la última igualdad se ha usado que

$$(-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} = (-1)^{\sum_{r=i+1}^j n_r + \sum_{r=j+1}^s n_r} \implies (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} (-1)^{\sum_{r=j+1}^s n_r} = (-1)^{\sum_{r=i+1}^j n_r}$$

- Si  $i > j$  :

$$\begin{aligned} \hat{h}_{ij} |\alpha\rangle &= \hat{h}_{ij} |n_1 \dots n_j \dots n_i \dots n_s\rangle = \hat{c}_j^{\dagger} \hat{c}_i |n_1 \dots n_j \dots n_i \dots n_s\rangle = \\ &= \hat{c}_j^{\dagger} (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} n_i |n_1 \dots n_j \dots (1 - n_i) \dots n_s\rangle = \\ &= (-1)^{\sum_{r=j+1}^s n_r - n_i + (1 - n_i)} (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} n_i (1 - n_j) |n_1 \dots (1 + n_j) \dots (1 - n_i) \dots n_s\rangle = \\ &= (-1)^{\sum_{r=j+1}^i n_r + 1} n_i (1 - n_j) |n_1 \dots (1 + n_j) \dots (1 - n_i) \dots n_s\rangle. \end{aligned}$$

En la última igualdad se ha razonado igual que cuando  $i < j$  y se ha utilizado que  $(-1)^{-2n_i} = 1$ .

Los operadores número

$$\begin{aligned}\hat{n}_i |\alpha\rangle &= \hat{n}_i |n_1 \cdots n_i \cdots n_s\rangle = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i |n_1 \cdots n_i \cdots n_s\rangle \\ &= \hat{c}_i^\dagger (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} n_i |n_1 \cdots (1 - n_i) \cdots n_s\rangle = \\ &= (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} (-1)^{\sum_{r=i+1}^s n_r} n_i (1 - (1 - n_i)) |n_1 \cdots (1 - (1 - n_i)) \cdots n_s\rangle = \\ &= n_i |n_1 \cdots n_i \cdots n_s\rangle,\end{aligned}$$

pues  $n_i^2 = n_i$  si  $n_i = 0, 1$ . Como era de esperar se recupera (2.33).

Finalmente se tienen los operadores de hopping, para  $i < j$  y  $i > j$  respectivamente:

$$\begin{aligned}\hat{h}_{ij} |n_1 \cdots n_i \cdots n_j \cdots n_s\rangle &= (-1)^{a_{ij}} n_i (1 - n_j) |n_1 \cdots (1 - n_i) \cdots (1 + n_j) \cdots n_s\rangle, \\ \hat{h}_{ij} |n_1 \cdots n_j \cdots n_i \cdots n_s\rangle &= (-1)^{a_{ij}+1} n_i (1 - n_j) |n_1 \cdots (1 + n_j) \cdots (1 - n_i) \cdots n_s\rangle\end{aligned}\quad (3.4)$$

$$\text{con } a_{ij} = \sum_{r=j+1}^i n_r.$$

Y el operador número

$$\hat{n}_i |n_1 \cdots n_i \cdots n_s\rangle = n_i |n_1 \cdots n_i \cdots n_s\rangle. \quad (3.5)$$

### 3.6. Restricción al Hamiltoniano

Ya tenemos todas las expresiones requeridas para estudiar el Hamiltoniano (2.20) con las condiciones impuestas en la sección (3):  $L$  puntos de red a los que llamaremos cajas, dos estados posibles de los electrones en cada caja, espín up o down en la dirección del eje  $z$  y  $N = L$  electrones repartidos en las  $L$  cajas, con  $\frac{N}{2}$  electrones de cada espín. Su expresión es

$$\hat{H}(t) = -t_0 \sum_{j=1, a=\uparrow, \downarrow}^{j=L} \left( e^{-i\beta(t)} \hat{h}_{(j+1, a), (j, a)} + e^{+i\beta(t)} \hat{h}_{(j, a), (j+1, a)} \right) + U \sum_{j=1}^{j=L} \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow}. \quad (3.6)$$

Para calcular la dimensión del espacio, observemos que tenemos que considerar las combinaciones posibles de poner  $\frac{N}{2}$  electrones de cada espín en las  $L$  cajas. Esto es, habrá  $\left(\frac{L}{2}\right)^2$ . Como  $N = L$ , entonces la dimensión es  $\left(\frac{L!}{\left(\frac{L}{2}\right)!^2}\right)^2$ .

Como observación, gracias al desarrollo explícito realizado de todos los operadores sería posible extender el Hamiltoniano para un sistema con un distinto número de electrones de cada espín como el de (2.20), o al de un sistema en el que el número de electrones no sea necesariamente contante (2.10).

## 4. Implementación en Python

Diagonalizaremos el Hamiltoniano (3.6) para sistemas con distintos números de cajas. Para ello vamos a Utilizar dos procedimientos.

- Método 1. Se consideran todos los estados ordenados según el apartado (3,2).

El sistema de  $L$  cajas con  $N$  electrones y dos posibles espines en cada caja es equivalente a un sistema de  $2L$  cajas ocupadas por  $N$  electrones, sin distinción de espín. la primera caja se corresponde con el electrón  $(1, \uparrow)$ , la segunda con el  $(1, \downarrow)$  y así sucesivamente. Identificando  $a = \uparrow = 0$  y  $a = \downarrow = 1$ , se puede establecer una relación biunívoca asignando a cada par  $(j, a)$  la caja  $2(j - 1) + a$ . La dimensión es de  $\left(\frac{L}{2}\right)^2 =: d^2$ . El Hamiltoniano ahora es

$$\hat{H}(t) = -t_0 \sum_{s=1}^{s=2L} \left( e^{-i\beta(t)} \hat{h}_{s+2,s} + e^{+i\beta(t)} \hat{h}_{s,s+2} \right) + U \sum_{s=1}^{s=L} \hat{n}_{2s-1} \hat{n}_{2s}. \quad (4.1)$$

- Método 2. Se consideran dos espacios distintos, el de los formados por electrones con espín up y down,  $E^+$  y  $E^-$ . Cada uno de ellos ordenados según (3,2). Los estados totales se pueden expresar como un producto tensorial de los de estos espacios que más adelante se definirá.

Cada espacio es un sistema de  $L$  cajas ocupadas por  $\frac{N}{2}$  electrones de dimensión  $\left(\frac{L}{2}\right) =: d$ . En cada uno de ellos se puede calcular de manera independiente, la acción de la contribución de hopping del Hamiltoniano, que denotaremos por  $\hat{H}_{hopping} = \hat{H}_{hop}$ ,

$$\hat{H}_{hop}(t) = \sum_{j=1}^L \left( e^{-i\beta(t)} \hat{h}_{j+1,j} + e^{+i\beta(t)} \hat{h}_{j,j+1} \right), \quad (4.2)$$

donde se ha omitido el espín. Una vez conocidos los elementos de matriz de estos Hamiltonianos, que serán iguales, se puede calcular fácilmente la parte de hopping del Hamiltoniano total  $\hat{H}_{hopping}$ .

La parte de interacción coulombiana será la composición de dos operadores,  $n_{j\uparrow}$  y  $n_{j\downarrow}$  que actúan sobre espacios distintos. Estudiando la acción de cada uno de ellos en el espacio correspondiente, esto es, calculando las matrices de  $\hat{H}_{interacción} = \hat{H}_{int}$

$$\hat{H}_{int} = \sum_{j=1}^L \bar{n}_j, \quad (4.3)$$

se obtendrá la matriz del término de interacción del Hamiltoniano total.

Como observación general para los dos métodos, notemos que

$$\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i = \left( \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \right)^\dagger \implies \hat{h}_{ij} = \left( \hat{h}_{ji} \right)^\dagger. \quad (4.4)$$

Luego

$$e^{i\beta(t)} \hat{h}_{ji} = \left( e^{i\beta(t)} \hat{h}_{ij} \right)^\dagger,$$

y el Hamiltoniano de hopping es hermítico como era esperable.

Por tanto solamente habrá que calcular la suma  $\sum_{s=1}^{2L} \hat{h}_{s,s+2}$  o  $\sum_{j=1}^L \hat{h}_{j,j+1}$  respectivamente.

Luego multiplicar por  $e^{i\beta(t)}$  y finalmente tomar el complejo-conjugado. O trasponer, y multiplicar a la primera suma por  $e^{i\beta(t)}$  y a la traspuesta por  $e^{-i\beta(t)}$  y después sumarlas.

## 4.1. Método 1: considerando todos los estados

Este método es más simple a nivel computacional. No obstante, está peor optimizado.

### 4.1.1. Definición de los estados

En primer lugar se crean y ordenan los  $d^2 = \left(\frac{L}{2}\right)^2$  que hay en el sistema de  $L$  cajas con dos espines posibles en cada una, con  $N = L$  electrones con cada espín. Los electrones tienen  $2L$  posiciones posibles. Para ello, se consideran los  $2^{2L}$  primeros números y se convierten a binario de forma que cada uno determina una combinación única de 0s y 1s, es decir, un estado. Para cada uno de ellos se hace la suma de los valores de las posiciones pares e impares. Si estas sumas coinciden y son iguales a  $N$ , dicho estado cumple las condiciones deseadas. La combinación de 0s y 1s se invierte para ser consistentes con nuestra notación y se añade a la lista de estados de nuestro espacio de Hilbert.

### 4.1.2. Cálculo del Hamiltoniano de hopping

Como ya se explicó previamente, basta con calcular la suma  $\sum_{s=1}^{2L} \hat{h}_{s,s+2}$ . Hay que tener en cuenta las condiciones de periodicidad, que dicen que  $c_{2L+1}^\dagger = c_1^\dagger$  y que  $c_{2L+2}^\dagger = c_2^\dagger$ .

Se calcula la acción de cada uno de los operadores de hopping  $\hat{h}_{s,s+2}$  con la expresión (3.4). Para ello se van recorriendo todos los estados  $k$  y se comprueba que la posición  $s$  esté ocupada y la  $s+2$  vacía. En dicho caso, se comprueba qué posición  $q$  en la base de ordenada ocupa el estado resultante. El elemento  $[q, k]$  de la matriz asociada al operador de hopping será  $\pm$  según si el sumatorio correspondiente es par o impar. En concreto, si  $s \neq 2L-1, 2L$  el sumatorio será igual a  $n_{s+1} + n_{s+2} = n_{s+1}$  pues  $n_{s+2}$  es 0 en el estado  $q$ . Si  $s = 2L-1$ , será igual a  $N - n_L + 1$  entonces el elemento de matriz será  $(-1)^{N-n_L+1} = -(-1)^{n_L}$  pues  $N$  es par. Y si  $s = 2L$ , quedaría un  $(-1)^{n_1}$ .

Se realiza la suma de las matrices asociadas a todos los  $\hat{h}_{s,s+2}$  ( $=: \hat{H}_1$ ) y se traspone ( $:= \hat{H}_2$ ), se multiplican por  $e^{i\beta(t)}$  y  $e^{-i\beta(t)}$  respectivamente y se suman. Se obtiene finalmente la matriz del Hamiltoniano de hopping como

$$\hat{H}_{hop}(t) = -t_0 \left( e^{i\beta(t)} \hat{H}_1 + e^{-i\beta(t)} \hat{H}_2 \right). \quad (4.5)$$

### 4.1.3. Cálculo del Hamiltoniano de interacción

Esta parte es relativamente sencilla. Para cada par  $\hat{n}_{2s-1}\hat{n}_{2s}$  se recorren todos los estados  $k$ . Si este estado tiene dos 1s en las posiciones  $2s$  y  $2s+1$ , entonces el elemento  $[k, k]$  de la matriz asociada a  $\hat{n}_{2s}\hat{n}_{2s+1}$  será 1. Haciendo la suma de todos los pares y multiplicando por  $U$  se obtiene el Hamiltoniano de interacción.

## 4.2. Método 2: desdoblado el espacio y acoplándolo

Este método es más complejo y extenso a nivel computacional. Sin embargo, permite enfocar el problema desde otro punto de vista y presenta ciertas ventajas en cuanto a la optimización en los cálculos y al tiempo de ejecución. Esto se debe a que es menos costoso definir matrices de dimensión  $d \cdot d$  y después acoplarlas, que definir directamente matrices de dimensión  $d^2 \cdot d^2$ .

### 4.2.1. Definición de los estados en cada espacio

De una manera similar se crean y ordenan los  $d = \left(\frac{L}{2}\right)$  estados en los espacios  $E^+$  y  $E^-$  que llamaremos subestados. Se procede igual cambiando ahora  $2L$  por  $L$  pues solo hay un espín posible en cada espacio. Los subestados considerados ahora son los que tienen un total de  $\frac{N}{2}$  electrones, es decir, la suma de todas las posiciones debe ser  $\frac{N}{2}$ .

### 4.2.2. Definición de los estados del espacio producto

Se define el espacio producto como

$$E := E^- \otimes E^+. \quad (4.6)$$

Dados un subestado  $|\alpha_i^-\rangle \in E^-$  y  $|\alpha_j^+\rangle \in E^+$  se define el estado del espacio total

$$|\alpha_{i,j}\rangle := |\alpha_i^-\rangle \otimes |\alpha_j^+\rangle. \quad (4.7)$$

En total habrá  $\left(\frac{L}{2}\right)^2$  estados evidentemente. Para ordenarlos, se puede asignar a cada par  $(i, j)$  la posición  $(i - 1) \cdot d + j$ . Esta correspondencia es biunívoca. De esta forma, los estados  $\alpha_{i,j}$  están ordenados en orden ascendente de  $i$  y a igual a  $i$ , en orden ascendente de  $j$ .

Los subestados están representados por una combinación de  $L$  números, 0s y 1s, que representan si hay un electrón o no con dicho espín en cada caja. Para representar los estados del espacio producto, hemos elegido que estos sean también una combinación de  $L$  números que pueden tomar los valores 0, 1, 2 y 3 de tal manera que:

- 0 significa que no hay ningún electrón en la caja.
- 1 significa que hay un electrón con espín up.
- 2 significa que hay un electrón con espín down.
- 3 significa que hay dos electrones, uno de cada espín.

Luego

$$\begin{aligned} |\alpha_i^-\rangle &= |n_{i,1}^- \dots n_{i,k}^- \dots n_{i,L}^-\rangle, & |\alpha_j^+\rangle &= |n_{j,1}^+ \dots n_{j,k}^+ \dots n_{j,L}^+\rangle \quad \text{y} \\ |\alpha_{ij}\rangle &= |2n_{i,1}^- + n_{j,1}^+, \dots, 2n_{i,k}^- + n_{j,k}^+, \dots, 2n_{i,L}^- + n_{j,L}^+\rangle. \end{aligned}$$

Esta definición de los estados producto es análoga a la utilizada anteriormente dada en la sección (3) de los estados totales. Pero el criterio seguido para la ordenación no es la misma. Además puede ocurrir que un estado producto sea equivalente a – un estado total. Esto se debe a que al escoger una ordenación se supone un orden que los operadores construcción deben seguir en la representación de los estados a través de ellos. Si se hace una permutación de estos operadores, se obtiene  $\pm$  el mismo estado. En la base producto se define este orden dentro de cada espacio  $E^-$  y  $E^+$  y después se acopla. Para un estado

producto, solo se pueden permutar operadores construcción en cada espacio por separado. La forma de permutar es evidentemente distinta a la de la base total. Por tanto puede suceder que los estados no sean exactamente iguales.

No obstante, notemos que los estados se pueden relacionar mediante un cambio de base dado por una matriz  $A$  unitaria cuyos elementos son todos 0 salvo un único 1 ó  $-1$  en cada fila y columna. Por ende se obtendrán resultados completamente idénticos salvo algún signo.

### 4.2.3. Acción de operadores en cada espacio

En cada espacio los operadores se pueden representar como matrices de dimensión  $d \times d$ .

Se tiene el operador de hopping  $\hat{h}_{j,j+1}$  siguiendo (3.4) teniendo en cuenta las condiciones de periodicidad,  $c_{L+1}^\dagger = c_1^\dagger$ . Se procede igual que en el primer método, recorriendo los subestados  $k$  y viendo qué subestado  $q$  se obtiene. El elemento  $[q, k]$  de la matriz asociada al operador  $\hat{h}_{j,j+1}$  será  $\pm$  si el sumatorio es par o impar. Para  $j \neq L$ , el sumatorio será igual a  $n_{j+1} = 0$  por tanto, siempre aparecerá un  $+1$  en la matriz. Para  $j = L$ , el sumatorio será  $\frac{N}{2} - n_1 + 1 = \frac{N}{2} + 1$  pues  $n_1 = 0$  y aparecerá un  $(-1)^{\frac{N}{2}+1}$ .

Calcular la acción de los operadores número  $\hat{n}_j$  en cada espacio es simple. Hay que recorrer todos los subestados  $q$  y el elemento  $[q, q]$  de  $j$  será el valor de  $n_j$  de  $q$ . Como los únicos términos no nulos posibles están en la diagonal, se puede guardar estas matrices como diagonales formadas por 0s y 1s.

Por último se tiene la aplicación identidad  $\hat{I}$ , cuyos elementos de matriz son 1s en toda la diagonal y 0 el resto.

### 4.2.4. Acción de operadores en el espacio producto

Para verlo de manera general, consideremos dos endomorfismos  $f, g$  sobre dos espacios cualesquiera  $E_1, E_2$ :

$$\begin{aligned} f &: E_1 \longrightarrow E_1, \\ g &: E_2 \longrightarrow E_2 \end{aligned}$$

y sea

$$(f, g) : E_1 \otimes E_2 \longrightarrow E_1 \otimes E_2$$

con  $(f, g)(e \otimes e') = f(e) \otimes g(e')$  para  $e \in E_1, e' \in E_2$ .

Si  $\dim(E_1) = m_1$  y  $\dim(E_2) = m_2$ , sean  $\{e_i\}_{i=1}^{m_1}$  base de  $E_1$  y  $\{e'_j\}_{j=1}^{m_2}$  de  $E_2$ .

$\{e_i \otimes e'_j\}_{i=1, j=1}^{i=m_1, j=m_2}$  es base de  $E_1 \otimes E_2$ . Sea ahora un vector  $e \in E_1$  de coordenadas  $a_i$  y un vector  $e' \in E_2$  de coordenadas  $b_j$ . Entonces, utilizando el convenio de suma de Einstein:

$$\begin{aligned} f(e) &= f_{li} a_i e_l \\ g(e') &= g_{kj} b_j e'_k \\ (f, g)(e \otimes e') &= f_{li} g_{kj} a_i b_j e_l \otimes e'_k. \end{aligned}$$

Luego para un vector de la base  $e_i \otimes e'_j$ ,

$$(f, g)(e_i \otimes e'_j) = f_{li} g_{kj} e_l \otimes e'_k = (f, g)_{(l,k),(i,j)} e_l \otimes e'_k, \quad (4.8)$$

con  $(f, g)_{(l,k),(i,j)} = f_{li} g_{kj}$  el elemento de matriz correspondiente del operador  $(f, g)$ , pues

aplicado al vector de la base  $e_i \otimes e'_j \equiv (i, j)$  se obtiene el  $e_l \otimes e'_k \equiv (l, k)$ .

Matemáticamente hablando, si  $E_i^*$  es el espacio dual para  $i = 1, 2$ , como  $f, g$  son endomorfismos sobre espacios de dimensión finita,  $f \in \text{End}(E_1) = E_1 \otimes E_1^*$  y  $g \in \text{End}(E_2) = E_2 \otimes E_2^*$ . Ambos endomorfismos son también tensores de tipo  $(1, 1)$ . Por tanto  $(f, g)$  es otro tensor

$$(f, g) \in \text{End}(E_1 \otimes E_2) = E_1 \otimes E_2 \otimes E_1^* \otimes E_2^*.$$

Queda claro entonces, que si la expresión de  $f$  en coordenadas es  $f_{li}$  y la de  $g$  es  $g_{kj}$ , la de  $(f, g)$  es  $(f, g)_{lkij} = f_{li}g_{kj}$ .

Apliquemos esto a los operadores de nuestro espacio producto  $E = E^- \otimes E^+$  que se le denotará de la misma manera pero con un  $+$  o un  $-$  según en qué espacio actúen.

Sea un estado  $|\alpha_{ij}\rangle = |\alpha_i^-\rangle \otimes |\alpha_j^+\rangle \in E$ .

Estudiemos en primer lugar cómo actúan los operadores de hopping. Estos están definidos de manera independiente en cada espacio. Extendiéndolo al espacio producto,

$$\begin{aligned} \hat{h}_{k,l}^+ |\alpha_{ij}\rangle &= \hat{h}_{k,l}^+ (|\alpha_i^-\rangle \otimes |\alpha_j^+\rangle) = |\alpha_i^-\rangle \otimes \hat{h}_{k,l} |\alpha_j^+\rangle = \\ &= (\hat{I}, \hat{h}_{k,l}) (|\alpha_i^-\rangle \otimes |\alpha_j^+\rangle) = (\hat{I}, \hat{h}_{k,l}) |\alpha_{ij}\rangle, \\ \hat{h}_{k,l}^- |\alpha_{ij}\rangle &= (\hat{h}_{k,l}, \hat{I}) (|\alpha_i^-\rangle \otimes |\alpha_j^+\rangle) = (\hat{h}_{k,l}, \hat{I}) |\alpha_{ij}\rangle. \end{aligned}$$

los operadores número de cada espacio serán

$$\begin{aligned} \hat{n}_k^+ |\alpha_{ij}\rangle &= (\hat{I}, \hat{n}_k) (|\alpha_i^-\rangle \otimes |\alpha_j^+\rangle) = (\hat{I}, \hat{n}_k) |\alpha_{ij}\rangle, \\ \hat{n}_k^- |\alpha_{ij}\rangle &= (\hat{n}_k, \hat{I}) (|\alpha_i^-\rangle \otimes |\alpha_j^+\rangle) = (\hat{n}_k, \hat{I}) |\alpha_{ij}\rangle. \end{aligned}$$

Por último faltaría calcular la acción de  $\hat{n}_k^+ \hat{n}_k^-$ :

$$\hat{n}_k^+ \hat{n}_k^- |\alpha_{ij}\rangle = (\hat{n}_k, \hat{n}_k) |\alpha_{ij}\rangle. \quad (4.9)$$

Como hemos visto, calculando los elementos de matriz de los operadores de hopping y número en cada espacio, se pueden calcular los de los operadores del espacio producto.

Los elementos de matriz de la aplicación identidad  $\hat{I}$  están dados por  $(\hat{I}_{ab})_{a,b=1}^d$ . Los de un operador de hopping cualquiera  $\hat{h}$  por  $(\hat{h}_{ab})_{a,b=1}^d$ . Y los de un operador número  $\hat{n}$  por  $(\hat{n}_{ab})_{a,b=1}^d$ .

Entonces

$$\begin{aligned} \hat{h}_{abcd}^+ &= \hat{I}_{ac} \hat{h}_{bd}, \\ \hat{h}_{abcd}^- &= \hat{h}_{ac} \hat{I}_{bd}, \\ (\hat{n}^+ \hat{n}^-)_{abcd} &= \hat{n}_{ac} \hat{n}_{bd}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

La función “einsum” del paquete NumPy ha sido clave para poder hallar con sencillez estos elementos de matriz. Esta significa convención de la suma de Einstein. Es una herramienta que permite realizar operaciones tensoriales. Dándole como parámetros varios tensores e indicando con índices sus expresiones en coordenadas, es posible agruparlos para

definir otros tensores. Por ejemplo en nuestro caso, pasándole las matrices asociadas a un operador de hopping  $\hat{h} \equiv hij$  y la identidad  $\hat{I} \equiv Ident$  con

$$einsum('ij,kl- > ikjl', hij, Ident)$$

se obtiene la expresión en coordenadas de  $\hat{h}^+$ .

#### 4.2.5. Cálculo de los términos del Hamiltoniano

Para hallar el término de interacción solo hay que hallar la matriz diagonal correspondiente a cada operador  $\hat{n}$ , con ello calcular  $\hat{n}^+\hat{n}^-$  y después sumarlas todas. De esta forma se obtiene  $\hat{H}_{diag} = \hat{H}_d$ .

Para la parte de hopping, solamente hay que calcular las matrices de los operadores  $\hat{h}_{j,j+1}^+$ . Esto es porque para cualquier  $\hat{h}_{i,j}^+$ , si sus elementos de matriz son  $\hat{h}_{(i,j),abcd}^+$  entonces:

$$\begin{aligned} \hat{h}_{(i,j),abcd}^- &= \hat{h}_{(i,j),ac} \hat{I}_{bd} = \hat{h}_{(i,j),badc}^+, \\ \hat{h}_{(j,i),abcd}^+ &= \hat{I}_{ac} \hat{h}_{(j,i),bd} = \hat{I}_{ac} \hat{h}_{(i,j),db} = \hat{h}_{(i,j),adcb}^+, \\ \hat{h}_{(j,i),abcd}^- &= \hat{h}_{(j,i),ac} \hat{I}_{bd} = \hat{h}_{(i,j),ca} \hat{I}_{bd} = \hat{h}_{(i,j),cbad}^- = \hat{h}_{(i,j),bcd a}^+. \end{aligned} \quad (4.11)$$

donde se ha utilizado (4.10) y (4.4). Por todo ello, el resto de operadores de hopping se pueden obtener mediante la trasposición de los  $\hat{h}_{j,j+1}^+$ . Primero se sumarán para calcular  $\hat{H}_1^+$ . Se traspondrán los dos primeros índices y los dos últimos para hallar la suma de los  $\hat{h}_{j,j+1}^-$ ,  $\hat{H}_1^-$ . Luego se trasponen el segundo y cuarto índice para obtener la suma de los  $\hat{h}_{j+1,j}^+$ ,  $\hat{H}_2^+$ . Por último, permutando los índices un puesto hacia la derecha se tiene la suma de  $\hat{h}_{j+1,j}^-$ ,  $\hat{H}_2^-$ . Finalmente

$$\hat{H}_{hop} = \left[ e^{i\beta(t)} \left( \hat{H}_1^+ + \hat{H}_1^- \right) + e^{-i\beta(t)} \left( \hat{H}_2^+ + \hat{H}_2^- \right) \right] \quad (4.12)$$

#### 4.2.6. Reagrupamiento

Tenemos una expresión del Hamiltoniano en forma de una matriz de dimensión  $d \times d \times d \times d$ . Pero para poder diagonalizarla necesitaríamos reagruparla en una matriz de dimensión  $d^2 \times d^2$ . Esto se puede hacer manualmente asociando a cada elemento  $\hat{H}_{ikjl} = \hat{H}_{ik,jl}$  el elemento  $\hat{H}_{(i-1) \cdot d+k, (j-1) \cdot d+l}$  por lo que vimos en el apartado (4,2,2).  $\bar{H}$  es el Hamiltoniano tras haber reagrupado los términos.

Esto se puede hacer directamente con la función “reshape”. Funciona de manera similar a la que hemos mencionado nosotros. En particular para una matriz de 4 dimensiones  $d_1 \times d_2 \times d_3 \times d_4$ , asigna a cada  $(i, k, j, l)$  un índice  $ind = d_2 d_3 d_4 (i - 1) + d_3 d_4 (k - 1) + d_4 (j - 1) + l$ . Para transformarla en otra matriz de 2 dimensiones  $d_1 \cdot d_2 \times d_3 \cdot d_4$ , cada índice se corresponde con un par  $(a, b)$  con  $a = \left\lfloor \frac{ind}{d_3 d_4} \right\rfloor$  y  $b = ind \pmod{d_3 d_4}$ . En nuestro caso  $d_1 = d_2 = d_3 = d_4$ , y la matriz sería la misma que la explicada arriba.

También se podría hacer el “reshape” inverso para poder recuperar el Hamiltoniano en 4 dimensiones.

De nuevo como observación, con ligeras modificaciones en el programa se podrían calcular las matrices asociadas a Hamiltonianos más genéricos como (2.20) ó (2.10).

## 5. Resultados y análisis

Ya podemos calcular el Hamiltoniano dependiente del tiempo (3.6):

$$\hat{H}(t) = -t_0 \sum_{j=1, a=\uparrow, \downarrow}^{j=L} \left( e^{-i\beta(t)} \hat{h}_{(j,a),(j+1,a)} + e^{+i\beta(t)} \hat{h}_{(j+1,a),(j,a)} \right) + U \sum_{j=1}^{j=L} \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow}, \quad (5.1)$$

con  $\beta(t) = ea_0A(t)$  y  $a_0$  la constante de red.

Como observación, debido a las unidades utilizadas y para que la fase sea adimensional, es necesario introducir una  $\hbar$  de manera que  $\beta(t) = \frac{ea_0}{\hbar}A(t)$ . Los estados están ordenados según 3.2.

Se utilizarán los valores de las constantes de [13] del  $Sr_2CuO_3$  para tratar de obtener resultados similares.

La constante de red es  $a_0 = 4\text{\AA}$  (ver [12]).

El parámetro de interacción de hopping  $t_0 = 0,52eV$ . El pulso electromagnético se aplica desde  $t = 0$ ,

$$A(t) = A_0 f(t) \sin(w_L t), \quad (5.2)$$

y tiene una duración de 10 ciclos ópticos con

- $w_L = 32,9THz \equiv$  longitud de onda de  $9,11\mu m$  (ver [6]).
- $f(t) = \sin^2\left(\frac{w_L}{20}t\right)$  es una envolvente que modula la amplitud.
- La amplitud máxima viene dada por  $F_0 = \omega A_0 = 10MV/cm$ .

Más adelante en los resultados comentaremos algunos leves cambios realizados sobre el pulso para poder estudiarlo con nuestros programas.

Solamente se necesitan 4 parámetros:

- El número de cajas  $L$ .
- El parámetro de interacción coulombiana  $U$ .
- El tiempo  $t$ .

En cuanto al número de cajas  $L$  consideradas, idealmente lo mejor sería utilizar el mayor número posible, sin embargo, hay ciertas limitaciones computacionales. Para  $L = 2, 4, 6, 8, 10, 12$  hay  $2^2 = 4, 6^2 = 36, 20^2 = 400, 70^2 = 4900, 252^2 = 63504, 924^2 = 853776$  estados en la base respectivamente aumentando rápidamente la complejidad del problema. Por este motivo, solo se estudiará el problema con 2, 4 y 6 cajas mediante los dos métodos descritos.

El objetivo es analizar el efecto del parámetro de interacción coulombiana  $U$ . Para ello se variará el valor de  $U$  en función del de  $t_0$ , se estudiará también la evolución adiabática del sistema a lo largo del tiempo debida a los cambios de fase y nos restringiremos al estado fundamental del sistema al que denotaremos por  $\psi_{gs}$ .

El parámetro de  $U$  cuantifica la repulsión coulombiana existente entre electrones que se encuentran en una misma caja. Cuando es nulo o muy bajo, entonces los electrones pueden moverse libremente por las cajas. Los electrones tenderán a estar en cajas tales que los electrones de cajas adyacentes tengan espines opuestos. De esta forma se minimiza la energía debido al término de hopping.

A medida que incrementa  $U$ , debido al aumento de la repulsión entre electrones de una misma caja debería haber menos cajas llenas -y en consecuencia menos vacías- para minimizar la energía. Y los electrones solos adyacentes tenderán a tener espines antiparalelos. En el caso límite en que  $U \gg t_0$ , el Hamiltoniano solo tendrá parte diagonal y los elementos de esta serán  $0, U, 2U, \dots, NU$  (si hay  $N$  electrones). Entonces el GAP tenderá a  $U$  y el material tenderá a ser aislante. Esto es, a medida que aumenta  $U$  debería abrirse un GAP proporcional a  $U$ . Esto es lo que se conoce como aislantes de Mott, que por el modelo de bandas convencional deberían ser conductores, pero debido a la fuerte repulsión coulombiana no lo son.

Con la intención de cuantificar la relación entre los espines de cajas adyacentes y el número de cajas llenas, introducimos las dos siguientes definiciones análogas a las de [13].  $\langle, \rangle$  denota  $\langle \psi_{gs} |, | \psi_{gs} \rangle$  -aunque podría ser un estado cualquiera-.

- Función de correlación de espín de vecinos próximos  $\eta$ :

$$\eta = \frac{1}{L} \left\langle \sum_{j=1}^L \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} \right\rangle. \quad (5.3)$$

- Número medio de cajas llenas  $D_h$  -o número de pares doublon-hole por su nombre en inglés-:

$$D_h = \frac{1}{L} \left\langle \sum_{j=1}^L \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} \right\rangle. \quad (5.4)$$

$\vec{S}_j$  es el operador de espín de la caja  $j$ . Para nuestro sistema como los electrones solo tienen espín en la dirección  $z$  -la del campo magnético- entonces

$$\vec{S}_j = S_j^z = \hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow} \quad (5.5)$$

omitiendo constantes.

Tanto la correlación de espín como el número de pares doublon-hole están “normalizados”, en el sentido de que pueden tomar valores entre 0 y 1 (en valor absoluto).

## 5.1. Operadores de correlación de espín y número de pares doublon-hole

Definamos el operador de correlación de espín de vecinos próximos que llamaremos simplemente correlación de espín. Hay que empezar por el operador de espín  $S_j^z$  sobre los estados de la base.

$$\begin{aligned} S_z^j |n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \dots n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \dots n_{L\uparrow} n_{L\downarrow}\rangle &= (\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow}) |n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \dots n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \dots n_{L\uparrow} n_{L\downarrow}\rangle = \\ &= (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) |n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \dots n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \dots n_{L\uparrow} n_{L\downarrow}\rangle. \end{aligned} \quad (5.6)$$

En el método 1 para cada caja  $j$  basta con restar las posiciones  $2j - 1$  y  $2j$  para obtener el espín de cada caja. En el método 2 hay que comprobar si en la caja  $j$  hay un 0, 1, 2, 3 (espín 0, 1, -1, 0 respectivamente).

A continuación hay que hacer la suma para  $j = 1, \dots, L$  considerando las condiciones de contorno.

Por último, calculemos la correlación de espín de un estado cualquiera expresado como combinación lineal de los estados de la base. Si esta es de dimensión  $d$ , sea  $|\alpha\rangle = \sum_{k=1}^d a_k |\alpha_k\rangle$  con  $\{\alpha_1, \dots, \alpha_d\}$  base,  $a_1, \dots, a_d$  coeficientes complejos. Entonces, si  $|\alpha_k\rangle = |n_{k,1\uparrow} n_{k,1\downarrow} \dots n_{k,j\uparrow} n_{k,j\downarrow} \dots n_{k,L\uparrow} n_{k,L\downarrow}\rangle$ :

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \sum_{i,k=1}^d a_i^* a_k \langle \alpha_i | S_j^z S_{j+1}^z | \alpha_k \rangle = \\ &= \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \sum_{i,k=1}^d a_i^* a_k (n_{k,j\uparrow} - n_{k,j\downarrow}) (n_{k,j+1\uparrow} - n_{k,j+1\downarrow}) \langle \alpha_i | \alpha_k \rangle = \\ &= \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \sum_{k=1}^d |a_k|^2 (n_{k,j\uparrow} - n_{k,j\downarrow}) (n_{k,j+1\uparrow} - n_{k,j+1\downarrow}), \end{aligned} \quad (5.7)$$

utilizando que, por construcción, los estados de la base son ortonormales.

Luego para  $|\alpha\rangle$ , basta con ir recorriendo sus coeficientes y para cada uno aplicar los operadores de espín al estado al que representa. Haciendo el sumatorio se halla la correlación de espín.

Análogamente se calcula el número de pares doublon-hole como

$$D_h = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \sum_{k=1}^d |a_k|^2 n_{k,j\uparrow} n_{k,j\downarrow}. \quad (5.8)$$

## 5.2. Caso de $L=2$ cajas

Este es el caso más sencillo. Gracias a su baja dimensión, podremos dar la expresión analítica del Hamiltoniano para conocer cómo actúa sobre los estados de la base.

Observemos que aquí puede pensarse que la periodicidad en el Hamiltoniano carece de sentido. Como solo hay dos cajas, la parte de hopping será

$$\begin{aligned} \hat{H}_{hop} &= \sum_{j=1, a=\uparrow, \downarrow}^2 \left( e^{-i\beta(t)} \hat{c}_{j,a}^\dagger \hat{c}_{j+1,a} + e^{i\beta(t)} \hat{c}_{j+1,a}^\dagger \hat{c}_{j,a} \right) = \\ &= \sum_{a=\uparrow, \downarrow} (e^{-i\beta(t)} + e^{i\beta(t)}) \left( \hat{c}_{1,a}^\dagger \hat{c}_{2,a} + \hat{c}_{2,a}^\dagger \hat{c}_{1,a} \right) = \sum_{a=\uparrow, \downarrow} 2 \cos(\beta(t)) \left( \hat{c}_{j,1}^\dagger \hat{c}_{2,a} + \hat{c}_{2,a}^\dagger \hat{c}_{1,a} \right). \end{aligned}$$

Es como si se tuviera en cuenta dos veces el hopping entre las dos cajas. Por este motivo analizaremos el sistema de forma periódica y no periódica.

Con el método 1, la base es:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1100\rangle = \hat{c}_{1\downarrow}^\dagger \hat{c}_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle, \\ |2\rangle &= |0110\rangle = \hat{c}_{2\uparrow}^\dagger \hat{c}_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle, \\ |3\rangle &= |1001\rangle = \hat{c}_{2\downarrow}^\dagger \hat{c}_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle, \\ |4\rangle &= |0011\rangle = \hat{c}_{2\downarrow}^\dagger \hat{c}_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned}$$

Con el método 2, la base de cada espacio de espín es

$$\begin{aligned} |1\rangle_{\pm} &= |10\rangle_{\pm} = \hat{c}_{1\pm}^{\dagger} |0\rangle, \\ |2\rangle_{\pm} &= |01\rangle_{\pm} = \hat{c}_{2\pm}^{\dagger} |0\rangle. \end{aligned}$$

Y la del espacio producto

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1\rangle_{-} \otimes |1\rangle_{+} = \hat{c}_{1\downarrow}^{\dagger} |0\rangle \otimes \hat{c}_{1\uparrow}^{\dagger} |0\rangle = |30\rangle, \\ |2\rangle &= |1\rangle_{-} \otimes |2\rangle_{+} = \hat{c}_{1\downarrow}^{\dagger} |0\rangle \otimes \hat{c}_{2\uparrow}^{\dagger} |0\rangle = |21\rangle, \\ |3\rangle &= |2\rangle_{-} \otimes |1\rangle_{+} = \hat{c}_{2\downarrow}^{\dagger} |0\rangle \otimes \hat{c}_{1\uparrow}^{\dagger} |0\rangle = |12\rangle, \\ |4\rangle &= |2\rangle_{-} \otimes |2\rangle_{+} = \hat{c}_{2\downarrow}^{\dagger} |0\rangle \otimes \hat{c}_{2\uparrow}^{\dagger} |0\rangle = |03\rangle. \end{aligned}$$

Como se puede ver, el orden de los estados de las bases de ambos métodos es el mismo. Cada uno de ellos se corresponde con el mismo número de electrones de cada espín en cada caja. Esto no tiene por qué ser siempre así, es una coincidencia por la elección de la ordenación de las bases.

Los Hamiltonianos obtenidos con el método 1 son los siguientes: - Considerando periodicidad:

$$\begin{pmatrix} U & 2t_0 \cos[\beta(t)] & -2t_0 \cos[\beta(t)] & 0 \\ 2t_0 \cos[\beta(t)] & 0 & 0 & 2t_0 \cos[\beta(t)] \\ -2t_0 \cos[\beta(t)] & 0 & 0 & -2t_0 \cos[\beta(t)] \\ 0 & 2t_0 \cos[\beta(t)] & -2t_0 \cos[\beta(t)] & U \end{pmatrix}$$

- Sin considerarla:

$$\begin{pmatrix} U & t_0 e^{+i\beta(t)} & -t_0 e^{+i\beta(t)} & 0 \\ t_0 e^{-i\beta(t)} & 0 & 0 & t_0 e^{+i\beta(t)} \\ -t_0 e^{-i\beta(t)} & 0 & 0 & -t_0 e^{+i\beta(t)} \\ 0 & t_0 e^{-i\beta(t)} & -t_0 e^{-i\beta(t)} & U \end{pmatrix}$$

Con el método 2, con periodicidad:

$$\begin{pmatrix} U & -2t_0 \cos[\beta(t)] & -2t_0 \cos[\beta(t)] & 0 \\ -2t_0 \cos[\beta(t)] & 0 & 0 & -2t_0 \cos[\beta(t)] \\ -2t_0 \cos[\beta(t)] & 0 & 0 & -2t_0 \cos[\beta(t)] \\ 0 & -2t_0 \cos[\beta(t)] & -2t_0 \cos[\beta(t)] & U \end{pmatrix}$$

Sin periodicidad:

$$\begin{pmatrix} U & -t_0 e^{+i\beta(t)} & -t_0 e^{+i\beta(t)} & 0 \\ -t_0 e^{-i\beta(t)} & 0 & 0 & -t_0 e^{+i\beta(t)} \\ -t_0 e^{-i\beta(t)} & 0 & 0 & -t_0 e^{+i\beta(t)} \\ 0 & -t_0 e^{-i\beta(t)} & -t_0 e^{-i\beta(t)} & U \end{pmatrix}$$

Debido a que las bases están ordenadas igual, es lógico que los Hamiltonianos obtenidos mediante los dos métodos sean idénticos salvo un factor  $-1$  en la segunda fila y segunda columna. El motivo es que el estado  $|2\rangle$  del método 1 se corresponde con el  $-|2\rangle$  del método 2, como ya se mencionó anteriormente en el apartado (4,2,1) que podría ocurrir. Es decir, ambos Hamiltonianos vienen a ser el mismo expresado en otra base, por lo que los resultados no variarán si se utiliza uno u otro. Explicaremos los resultados obtenidos

con el método 2.

Analicemos la expresión del Hamiltoniano. Los únicos términos diagonales aparecen evidentemente en los estados que tienen una caja llena, por la repulsión coulombiana entre ellos. Los no diagonales son por los términos de hopping que producen saltos entre los estados. De los estados  $|1\rangle$  y  $|4\rangle$ , con dos electrones en la primera caja y segunda caja respectivamente, pueden producirse saltos de uno de los electrones a la otra caja, transformándose en el estado  $|2\rangle$  ó  $|3\rangle$ . Los estados  $|2\rangle$  y  $|3\rangle$  puede convertirse en el estado  $|1\rangle$  ó el  $|4\rangle$  en función de a dónde salte su electrón con espín  $\uparrow$  ó  $\downarrow$ .

Para  $t_0 \neq 0$ , los autovalores y autovectores no normalizados para el sistema periódico son los siguientes. Si  $A := \sqrt{U^2 + 64t_0^2 \cos[\beta(t)]^2} \geq U$

- Autovalor y autovector:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{1}{2}(U - A), & \mathbf{v}_1 &= \left(1, \frac{(U-A)\sec[\beta(t)]}{8t_0}, \frac{(U-A)\sec[\beta(t)]}{8t_0}, 1\right) \\ \lambda_2 &= 0, & \mathbf{v}_2 &= (0, -1, 1, 0) \\ \lambda_3 &= U, & \mathbf{v}_3 &= (-1, 0, 0, 1) \\ \lambda_4 &= \frac{1}{2}(U + A), & \mathbf{v}_4 &= \left(1, \frac{(U+A)\sec[\beta(t)]}{8t_0}, \frac{(U+A)\sec[\beta(t)]}{8t_0}, 1\right)\end{aligned}$$

Y los del sistema no periódico, si  $B := \sqrt{U^2 + 16t_0^2} \geq U$

- Autovalores y autovectores:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{1}{2}(U - B), & \mathbf{v}_1 &= \left(e^{-2i\beta(t)}, \frac{(U-B)e^{-i\beta(t)}}{4t_0}, \frac{(U-B)e^{-i\beta(t)}}{4t_0}, 1\right) \\ \lambda_2 &= 0, & \mathbf{v}_2 &= (0, -1, 1, 0) \\ \lambda_3 &= U, & \mathbf{v}_3 &= (-e^{-2i\beta(t)}, 0, 0, 1) \\ \lambda_4 &= \frac{1}{2}(U + B), & \mathbf{v}_4 &= \left(e^{-2i\beta(t)}, \frac{(U+B)e^{-i\beta(t)}}{4t_0}, \frac{(U+B)e^{-i\beta(t)}}{4t_0}, 1\right)\end{aligned}$$

La principal diferencia está en que los autovalores del sistema no periódico son independientes del tiempo. Salvo ese detalle, las expresiones resultantes son similares. Debido a las particularidades de este sistema, lo estudiaremos sin la presencia del campo externo que es el que afecta a los términos no diagonales. Es decir, para  $t = 0$ .

Sin embargo, sí mencionaremos que para el caso no periódico nada depende del tiempo: ni las energías, ni las correlación de espín ni el número de pares doublon-hole -estos últimos debido a que los estados y en particular el estado fundamental, son un número real multiplicado por una fase imaginaria-. Analizaremos la dependencia del GAP, la correlación de espín y los pares doublon-hole con el parámetro de repulsión coulombiana  $U$ .

### 5.2.1. Energías y GAP

Para valores grandes de  $U$  -equivalente a tomar  $t_0 \approx 0$ - los dos primeros autoestados estarán degenerados con una energía igual a 0. Ahora estarán generados por combinaciones lineales independientes de los estados con un electrón en cada caja. Los dos segundos también lo estarán, con una energía igual a  $U$  como ya se comentó anteriormente. Y ahora estarán generados por combinaciones lineales de los estados con un par doublon-

hole. El GAP óptico se interpreta como la cantidad de energía necesaria para formar un par. Si el GAP es bajo, los electrones podrán saltar a la otra caja formando pares y mejorando la conducción eléctrica. Si es alto, estarán fijados cada uno en su caja y no podrán desplazarse, disminuyendo la conducción y mostrando el carácter aislante del material.

Se entiende entonces el GAP como la energía necesaria para formar un par doublon-hole cuando  $U \gg t_0 \equiv t_0 = 0$ . Como se puede comprobar con nuestros programas para el caso general  $L$ , los  $d$  primeros autoestados se corresponden con los  $d$  posibles estados sin pares doublon-hole y tienen energía nula. Los  $d + L$  siguientes tendrán energía  $U$  y se corresponden con los  $L$  estados con un par doublon-hole. Los  $d + \binom{L}{2}$  energía  $2U$  y tienen dos pares doublon-hole. Y así sucesivamente.

Para valores grandes de  $U$  tales que no pueda considerarse  $t_0$  despreciable, el GAP se calculará por tanto como la diferencia de energía entre el estado  $d$  y el  $d + 1$ -ésimo. Además, los  $d$  primeros autoestados tendrán energías que se aproximan entre ellas y a 0 a medida que aumenta  $U$ .

En la gráfica (5,1) se aprecia el comportamiento descrito. El sistema no periódico es muy similar.

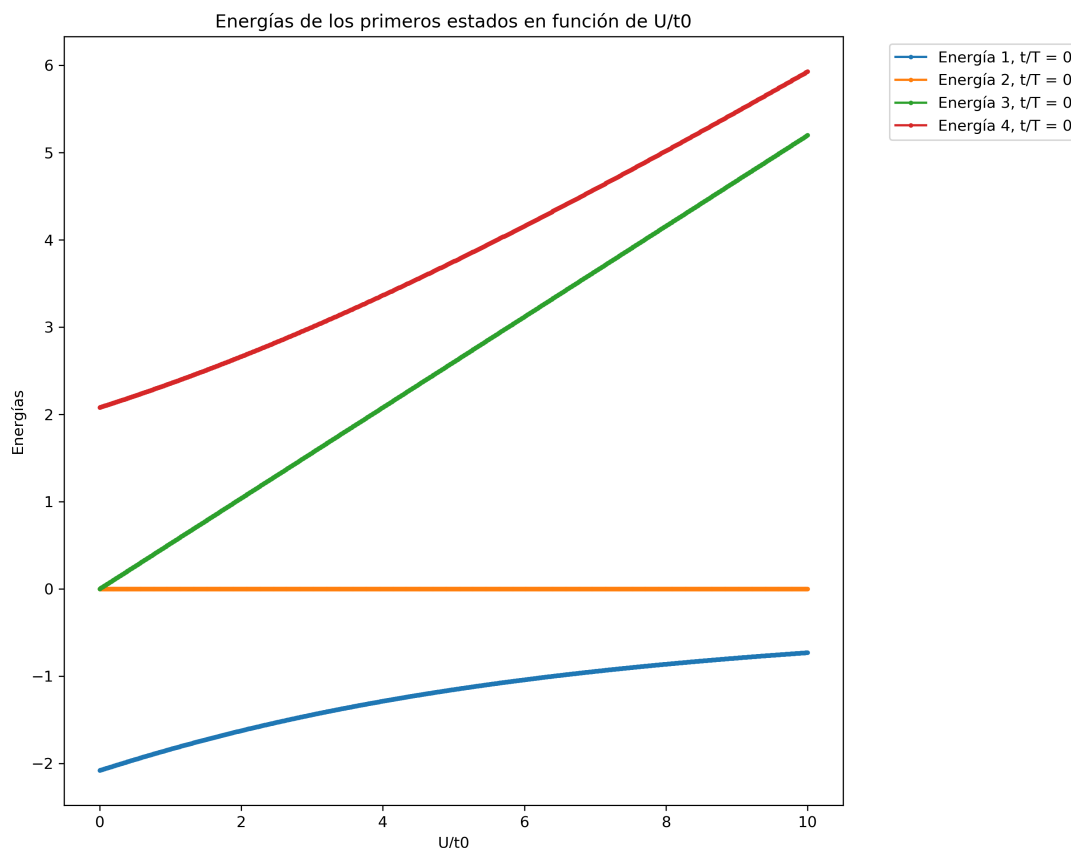


Figura 5.1: Energías de los 4 autoestados del sistema con  $L = 2$  cajas periódico.

### 5.2.2. Correlación de espín

A medida que  $U$  aumenta la correlación de espín aumenta en valor absoluto, como es de esperar ya que los electrones tienden a estar localizados en cajas distintas. Matemáticamente tiene una explicación muy lógica. Los únicos estados con correlación de espín no nula son los que tienen un electrón en cada caja. A mayor  $U$ , menor será  $U - A$  y

por tanto mayor serán los coeficientes de esos estados del estado fundamental. Luego la correlación de espín será más negativa, como se ve en la gráfica (5,2).

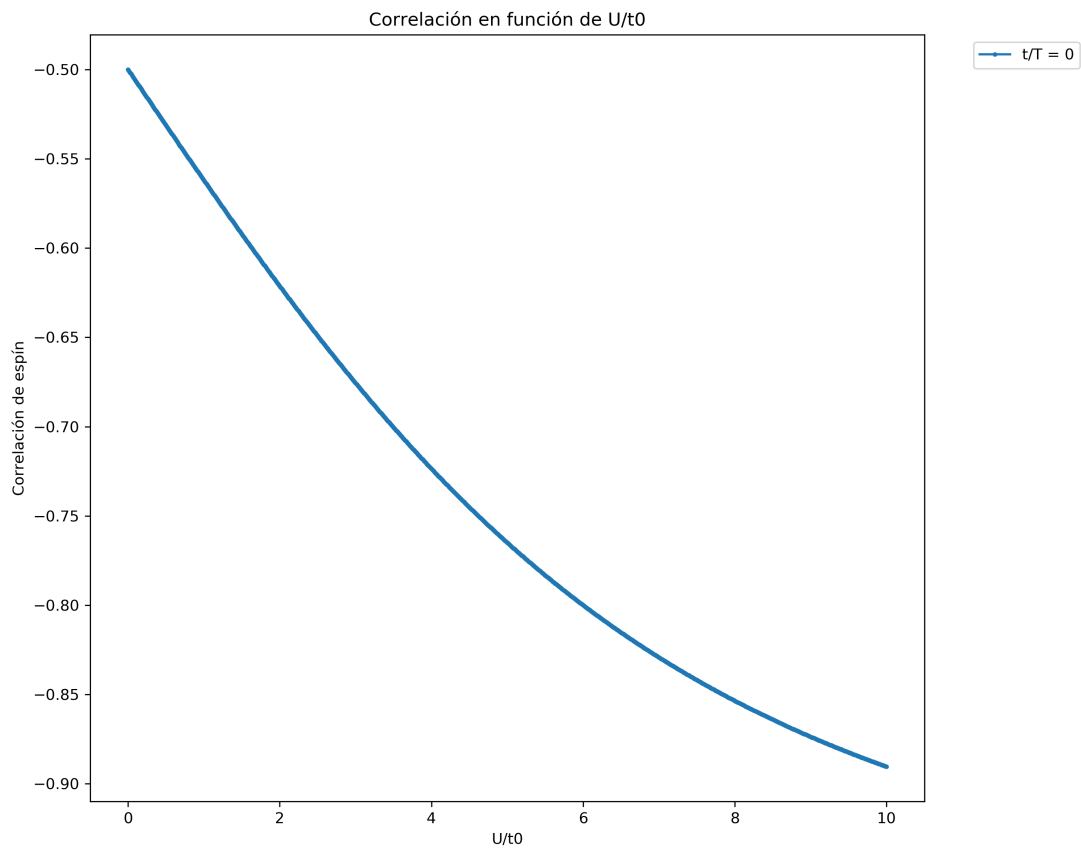


Figura 5.2: Correlación de espín del estado fundamental del sistema con  $L = 2$  cajas periódico.

### 5.2.3. Pares doublon-hole

El comportamiento es idéntico al de la correlación de espín. Una vez normalizado el estado fundamental, a mayor  $U$ , menor será el peso de los coeficientes de esos estados, como se ve en la gráfica (5,3).

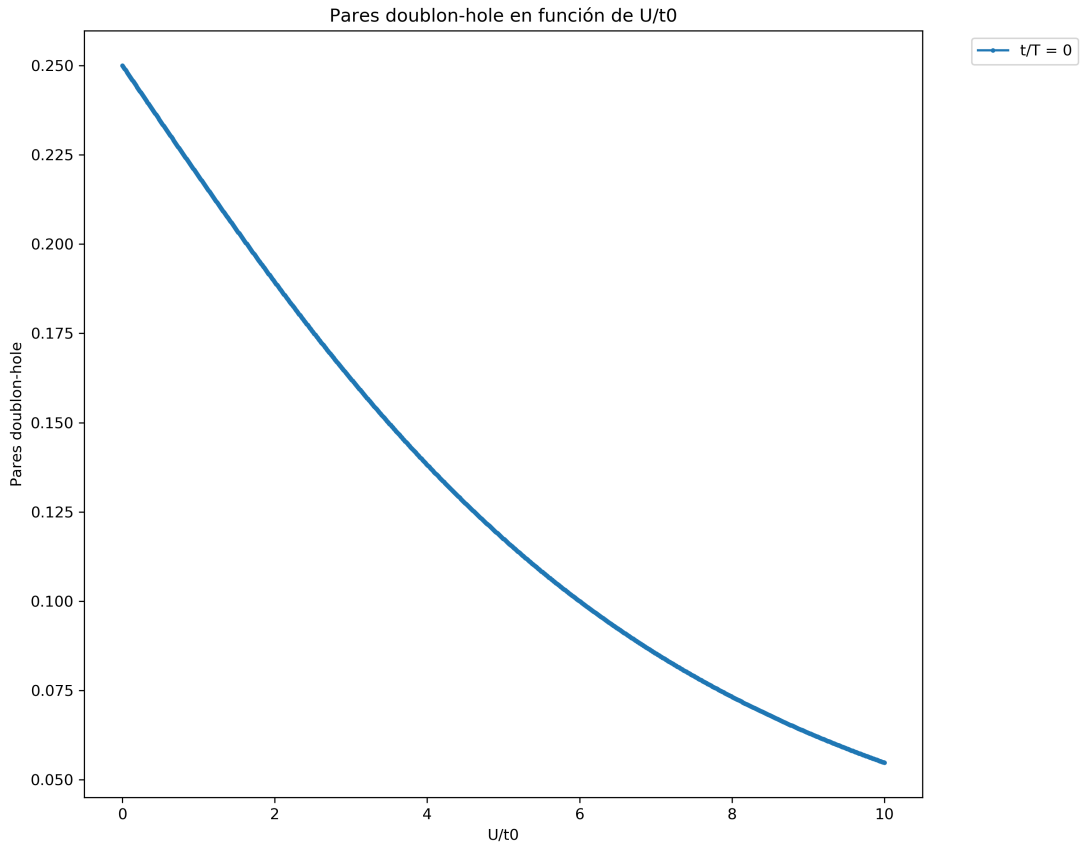


Figura 5.3: Pares doublon-hole del estado fundamental del sistema con  $L = 2$  cajas periódicas.

### 5.3. $L=4$

La dimensión del sistema es sustancialmente mayor, por lo que nos limitaremos a mostrar los resultados numéricos y gráficos hallados con el método 2. Ahora sí consideraremos el pulso electromagnético. No obstante, para obtener resultados concordantes con los de [13] impondremos algunas limitaciones.

En este artículo el pulso tiene duración de 10 ciclos ópticos, con una envolvente de  $\sin^2$ , como en (5,4).

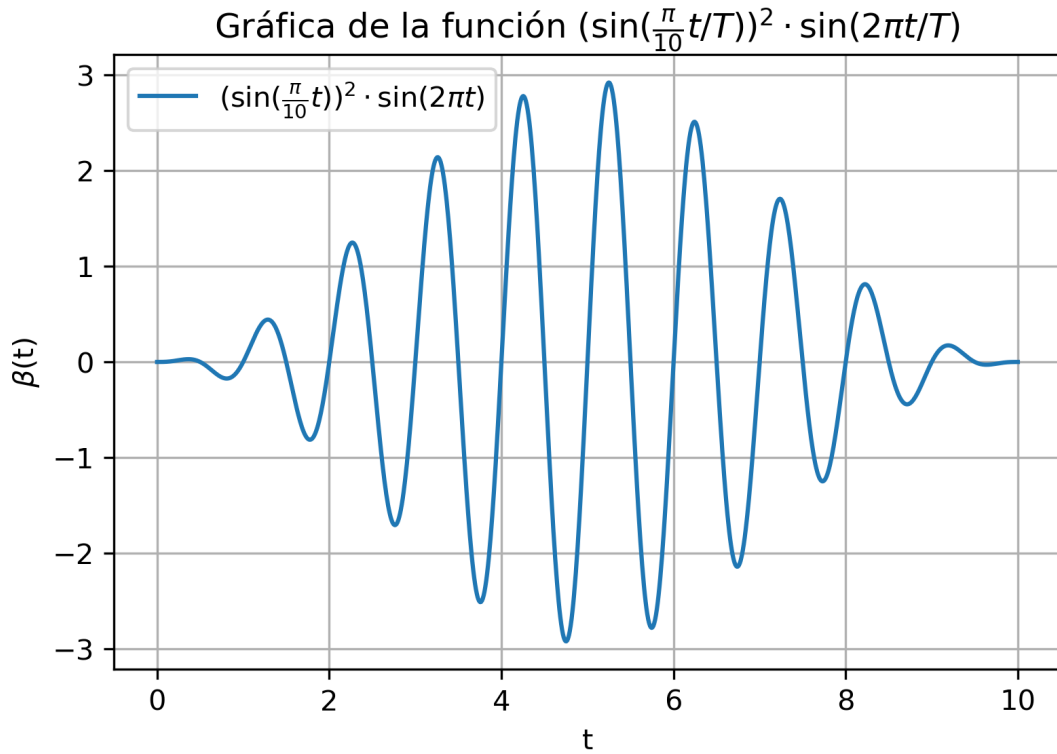


Figura 5.4: Pulso con una duración de 10 ciclos ópticas y una envolvente  $\sin^2$ .

En él se estudia la evolución temporal del estado fundamental. Pero en nuestro trabajo solo nos centraremos en la resolución del Hamiltoniano para cada valor del tiempo y su evolución adiabática. En la duración total del pulso, el sistema será entonces el mismo siempre y cuando las fases de Peierls coincidan. Por ejemplo, cuando el cociente  $t/T$  sea  $n\frac{\pi}{2}$  con  $n$  un número entero, la fase será nula y el sistema será el mismo. Si resolviéramos el problema para  $t = 0$  y después se estudiara su evolución temporal aunque se repitiera el valor de la fase, el sistema sería distinto y se obtendrían resultados similares a los de [13].

Nos restringiremos entonces a pequeños intervalos del pulso, de forma que no se repitan valores de la fase. En estos intervalos, nuestros resultados deberían ser similares a los de [13]. En el mapa de calor (5,5) se ve la evolución de la correlación de espín en el tiempo que justifica por qué hemos decidido acortar la duración del pulso.

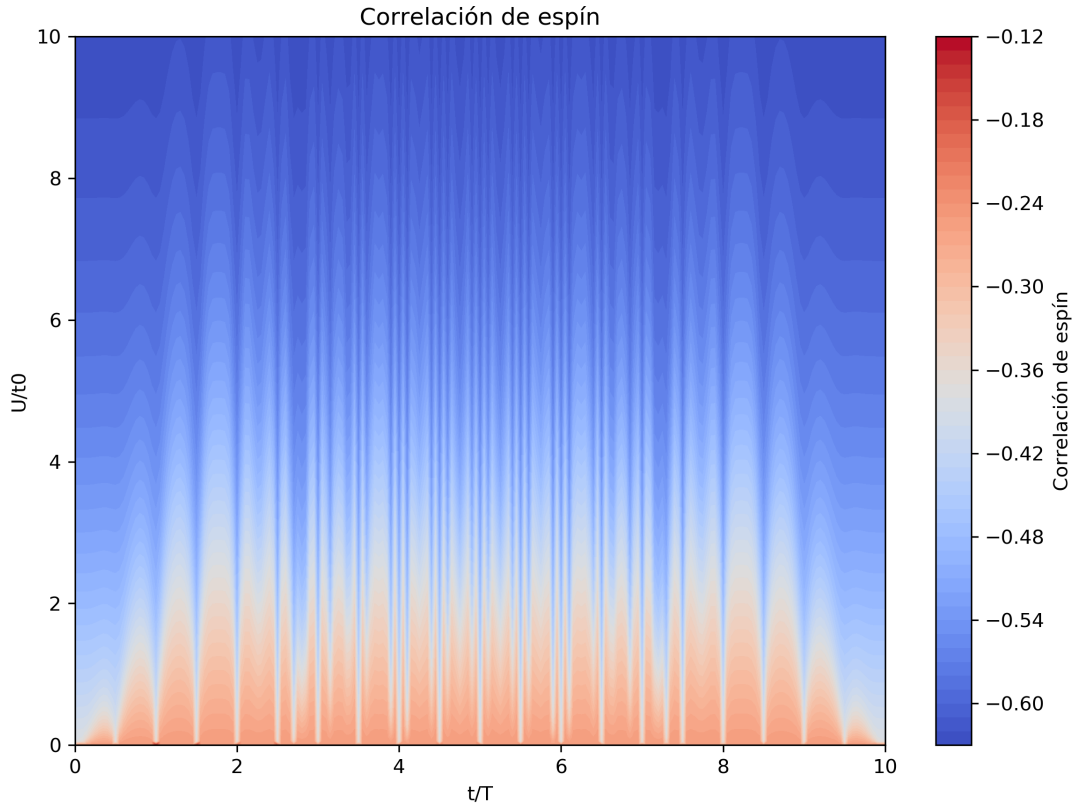


Figura 5.5: Correlación de espín del estado fundamental del sistema con  $L = 4$  considerando el pulso completo.

El intervalo escogido es  $0 \leq \frac{t}{T} \leq 0,35$  hasta cerca del primer máximo del pulso. Además, para poder apreciar mejor el efecto de la envolvente, se va a cambiar esta por una de una duración de 2 ciclos. Esto es,  $\sin\left(\frac{\omega_L}{2}t\right)^2$ .

### 5.3.1. Energías y GAP

Veamos el efecto que tiene  $U$  en el GAP. Basta con conocerlo para  $t = 0$ , es decir, sin campo, como en la gráfica (5,6). Como nuestro intervalo temporal es corto, no habrá diferencias a nivel cualitativo.

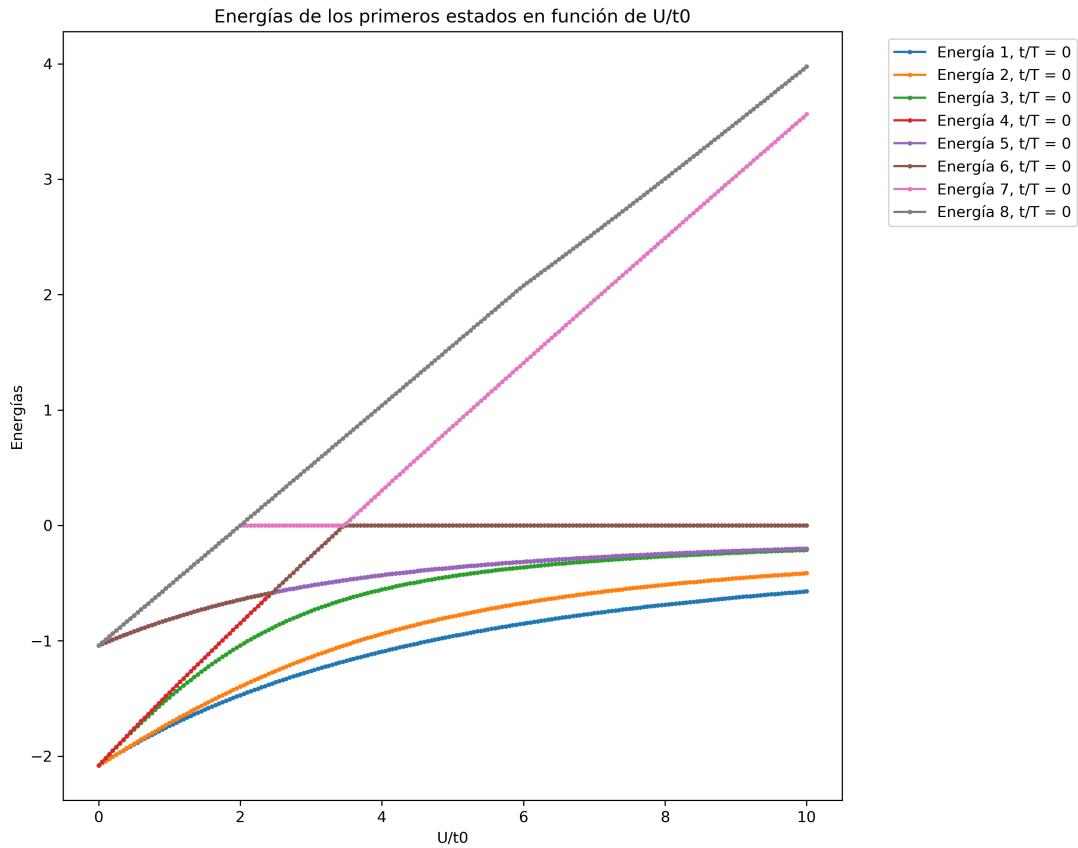


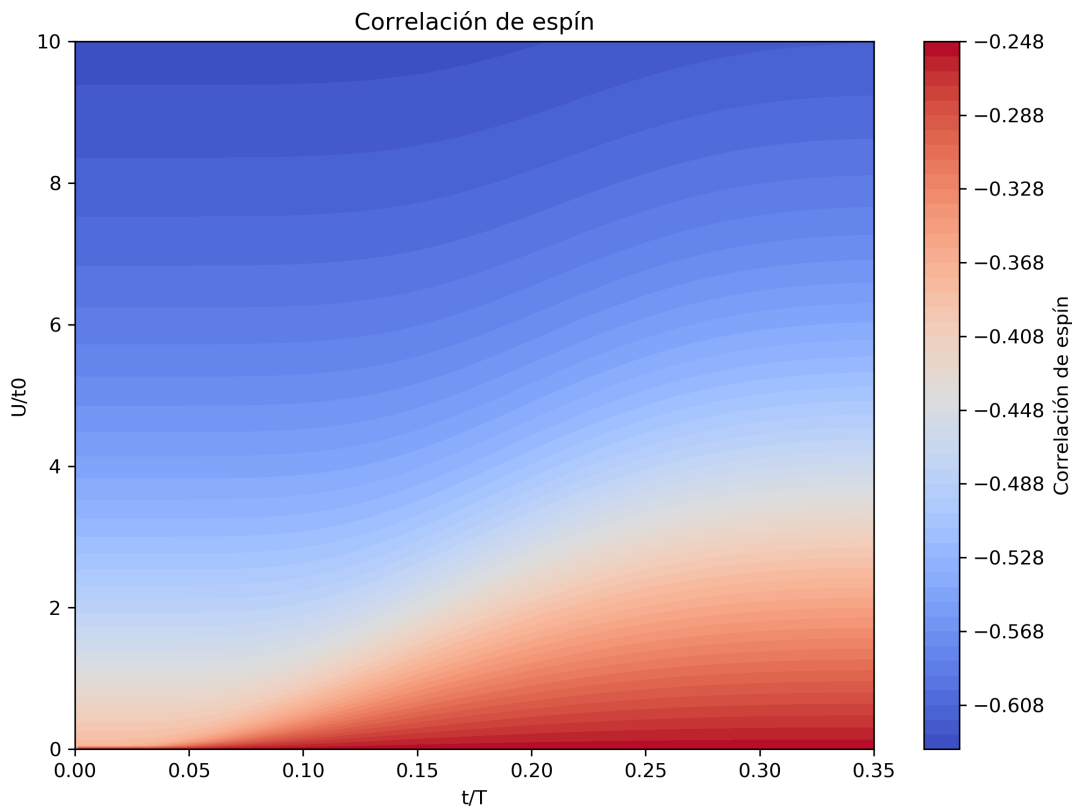
Figura 5.6: Energías de los primeros 6 + 2 autoestados del sistema con  $L = 4$  cajas.

A mayor  $U$  aumenta la energía del séptimo autoestado, el que marca el GAP para valores altos de  $U$ . Esto era esperable por lo razonado anteriormente.

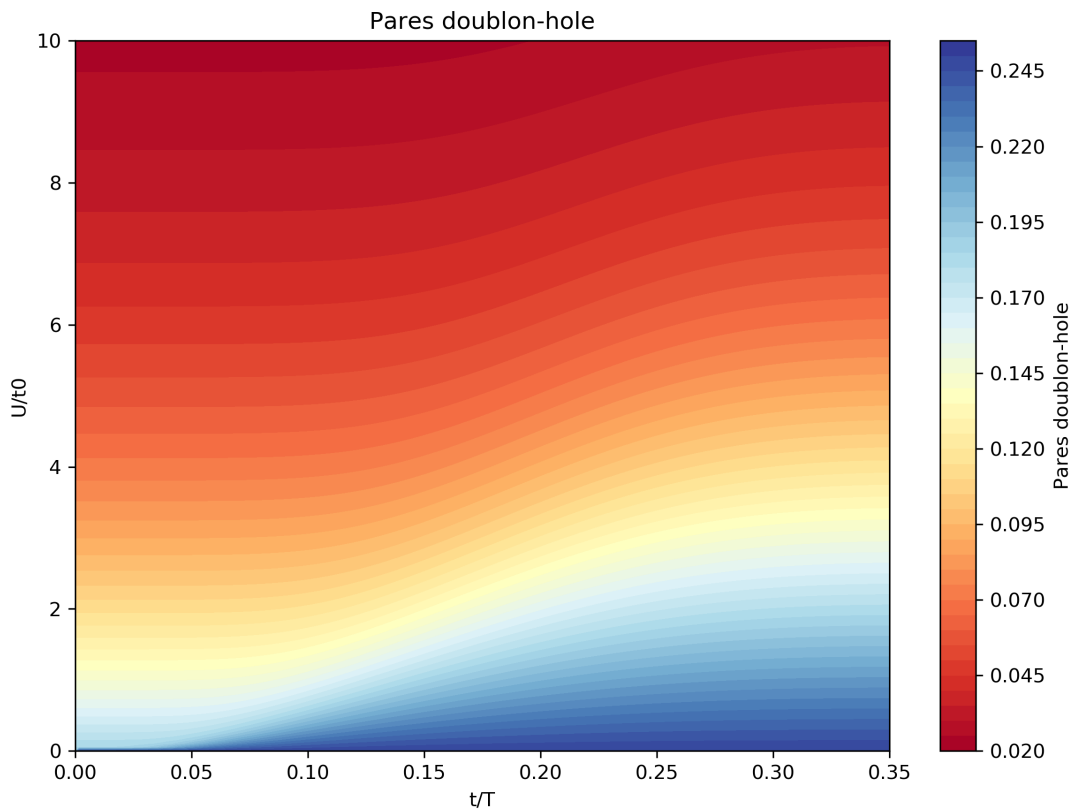
Aparentemente las bandas de energía no son continuas. No obstante, lo que sucede es que estamos representando para cada pareja  $(U, T)$  las energías más bajas de los primeros autoestados. Hay solapamientos entre ellos, motivo por el cual hay algunos puntos en los que se producen discontinuidades en la gráfica.

### 5.3.2. Correlación de espín y pares doublon-hole

Veamos ahora la correlación de espín y los pares doublon-hole en función de  $U/t_0$  y  $t$  del estado fundamental, en los mapas de calor (5,7a) y (5,7b).



(a) Correlación de espín del estado fundamental del sistema con  $L = 4$  cajas.



(b) Pares doublon-hole del estado fundamental del sistema con  $L = 4$  cajas.

Figura 5.7: Análisis de correlación de espín y pares doublon-hole para  $L = 4$  cajas.

Antes de comentar las dependencias con la repulsión coulombiana y el tiempo, notemos

que la relación entre la correlación de espín y el número de pares es evidente. Esto puede comprobarse en la gráfica (5,8).

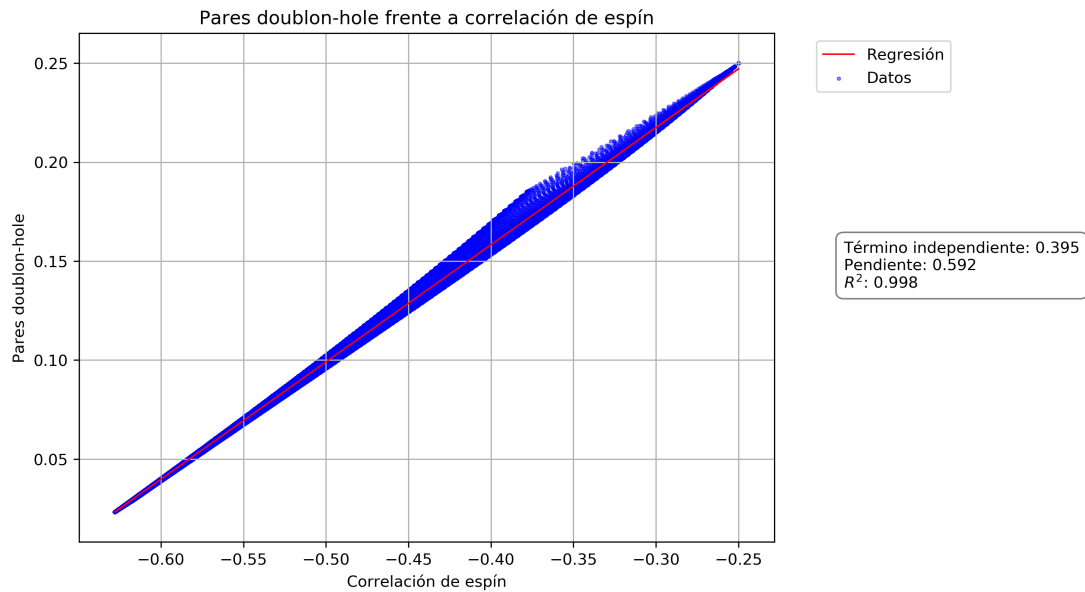
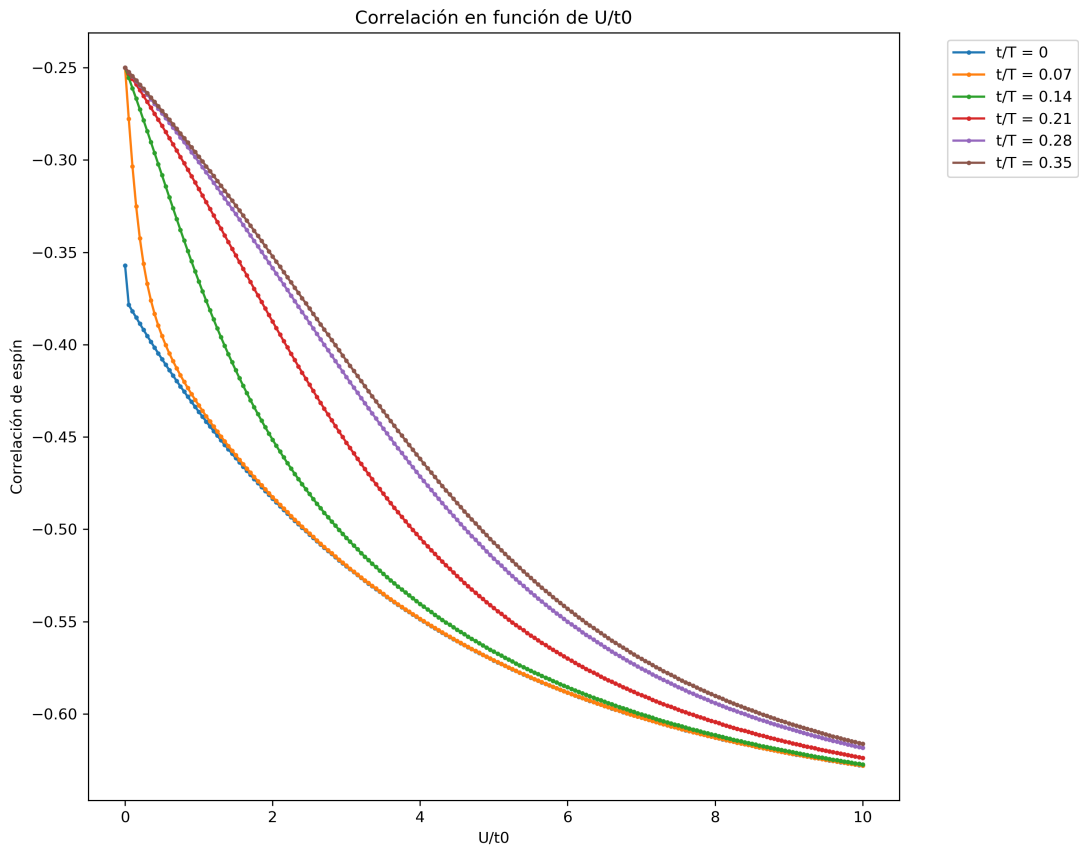
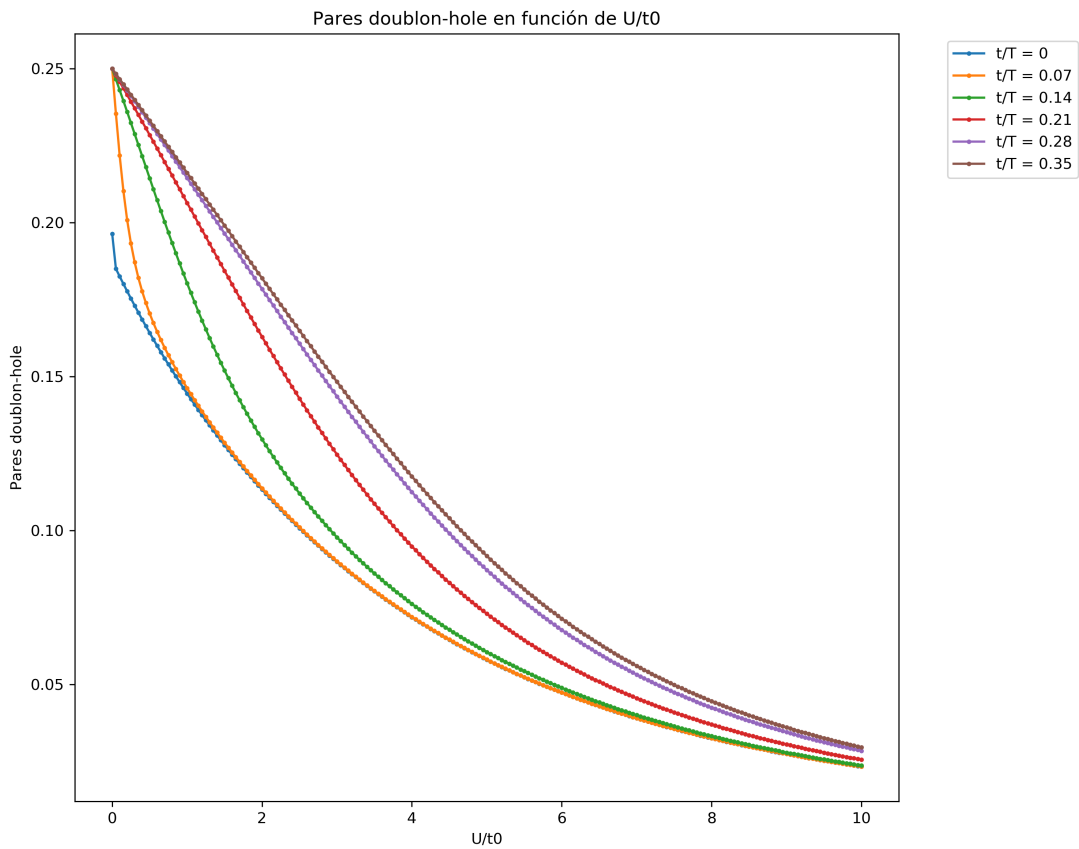


Figura 5.8: Regresión lineal del número de pares doublon-hole frente a la correlación de espín del sistema con  $L = 4$  cajas.

Como se puede apreciar, a mayor  $U$  aumenta en valor absoluto la correlación de espín y disminuye el número de pares doublon-hole. La repulsión coulombiana localiza a los electrones de forma que estos tienen dificultad para moverse. A medida que avanza el pulso en el tiempo, se produce el efecto contrario aunque a un ritmo muy lento. En las siguientes gráficas (5,9a), (5,9b), (5,10a) y (5,10b) se ve con más claridad.

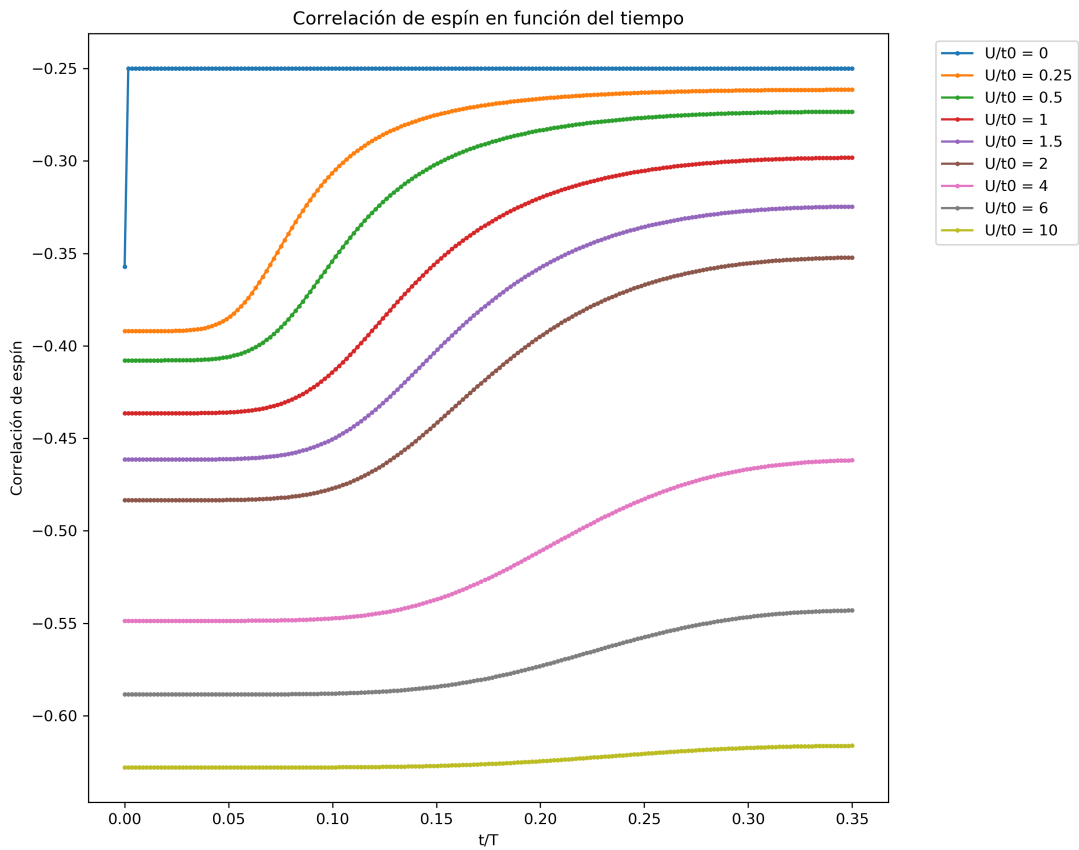


(a) Correlación de espín del estado fundamental en función de  $U/t_0$  para ciertos valores de  $t/T$  del sistema con  $L = 4$  cajas.

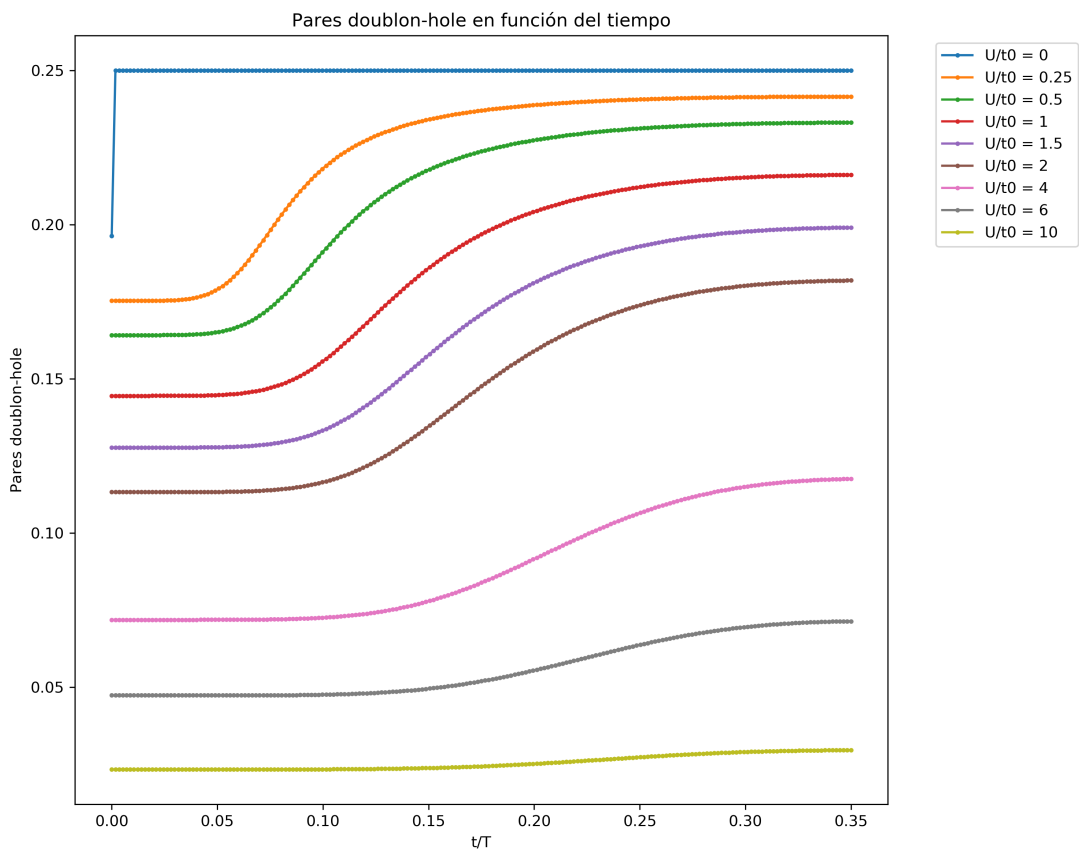


(b) Pares doublon-hole del estado fundamental en función de  $U/t_0$  para ciertos valores de  $t/T$  del sistema con  $L = 4$  cajas.

Figura 5.9: Correlación de espín y pares doublon-hole en función de  $U/t_0$  para  $L = 4$  cajas.



(a) Correlación de espín del estado fundamental en función de  $t/T$  para ciertos valores de  $U/t_0$  del sistema con  $L = 4$  cajas.



(b) Pares doublon-hole del estado fundamental en función de  $t/T$  para ciertos valores de  $U/t_0$  del sistema con  $L = 4$  cajas.

Figura 5.10: Correlación de espín y pares doublon-hole en función de  $t/T$  para  $L = 4$  cajas.

El campo electromagnético excita a los pares doublon-hole, que se comportan como los portadores de carga. Para algunos valores suficientemente grandes de  $U$ , el material se comporta como un aislante. Pero si la amplitud del campo dependiente del tiempo dada por  $E_0$  y la envolvente supera un valor límite, la evolución del pulso en el tiempo producirá una transición de aislante a conductor acorde a [13]. Este efecto no es apreciable debido a las limitaciones de nuestro programa. Un estudio más exhaustivo de la evolución temporal del estado fundamental quizá permitiría observarlo.

Por último y como observación, veamos el gráfico (5,11) correspondiente a la correlación de espín sin considerar condiciones periódicas en el pulso completo.

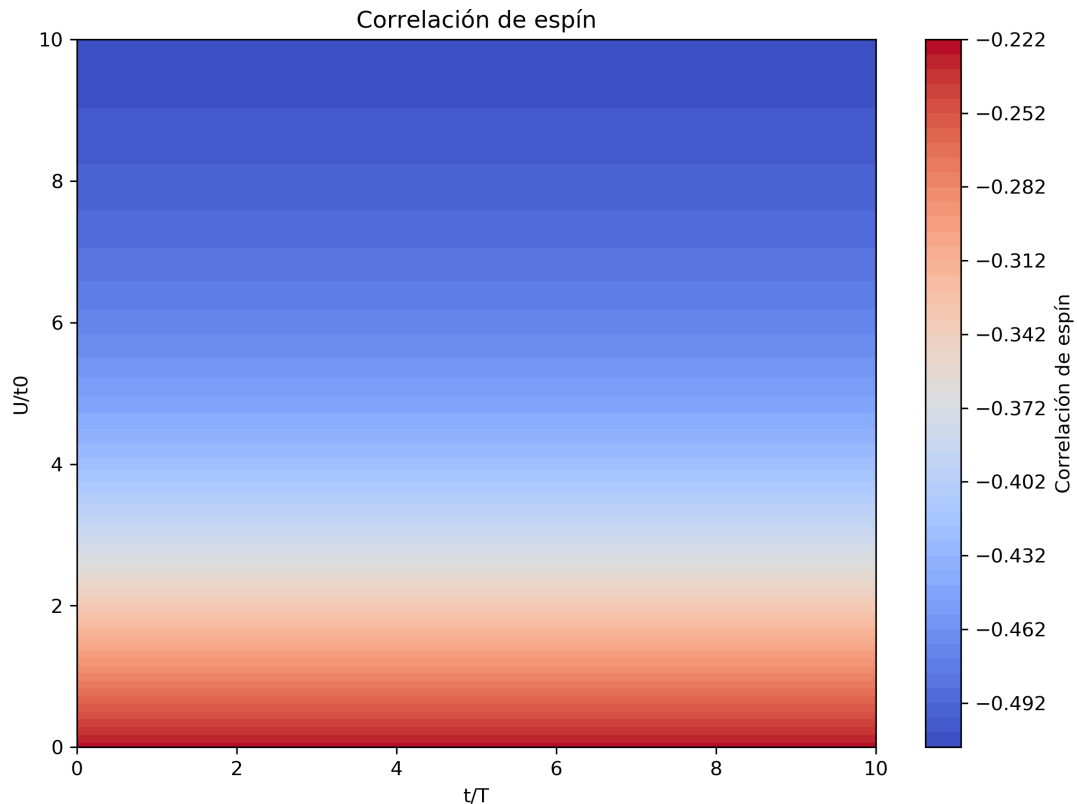


Figura 5.11: Correlación de espín del estado fundamental del sistema con  $L = 4$  cajas no periódico considerando el pulso completo.

Si bien la dependencia con  $U$  es la misma, vemos que no varía en el tiempo con el pulso. Podría pensarse que esta anomalía sucede porque, al no considerar condiciones de contorno periódicas, habría que redefinir la correlación de espín para que las cajas del inicio y el final tengan el mismo peso que las intermedias. Sin embargo, lo que en realidad sucede es que no varían las energías y los coeficientes de los autoestados en la base solo varían una fase. En el gráfico (5,12) esta invariancia de las energías.

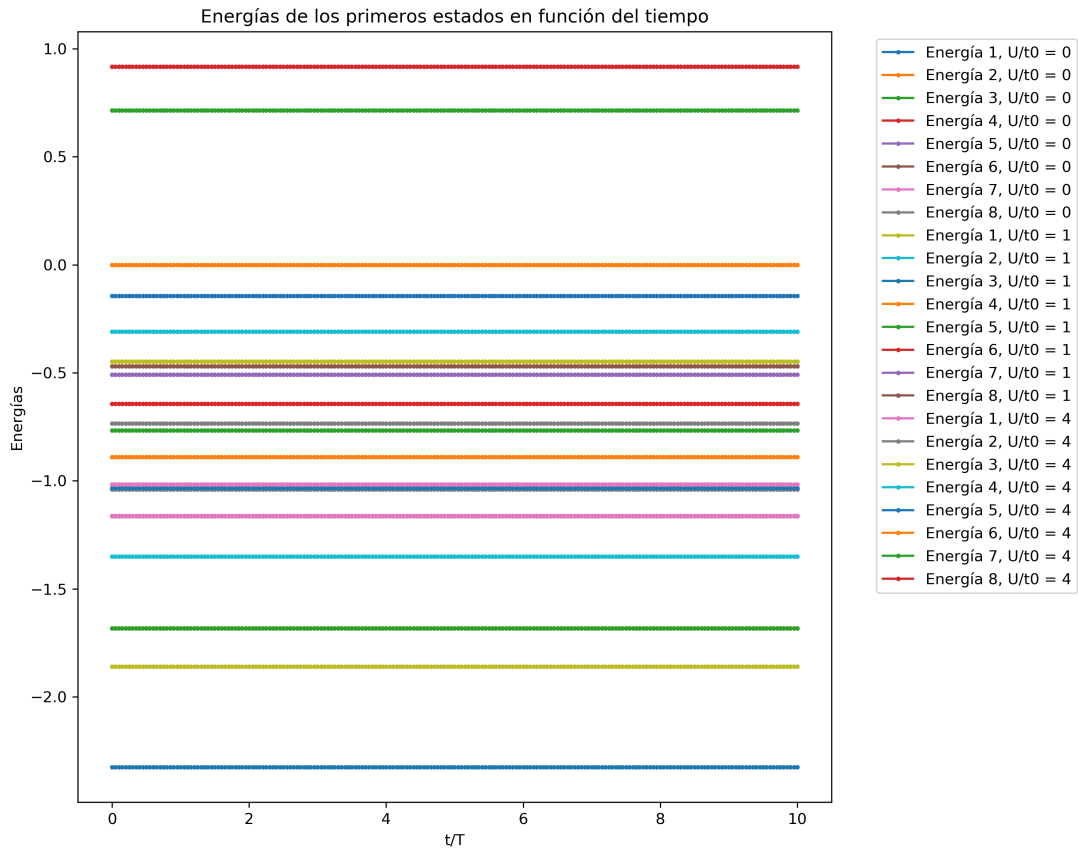


Figura 5.12: Energías de los primeros 6 + 2 autoestados del sistema con  $L = 4$  cajas no periódico.

De esta manera la correlación de espín y el número de pares doublon-hole se mantienen constantes a lo largo del tiempo. Lo mismo ocurría para el caso  $L = 2$ . Esto demuestra la importancia de considerar dichas condiciones de contorno.

## 5.4. $L=6$

Procederemos de la misma forma que en el caso  $L = 4$ . Ahora escogeremos el intervalo  $0 \leq \frac{t}{T} \leq 0,27$ .

### 5.4.1. Energías y GAP

Veamos el efecto que tiene la repulsión  $U$  en el GAP.

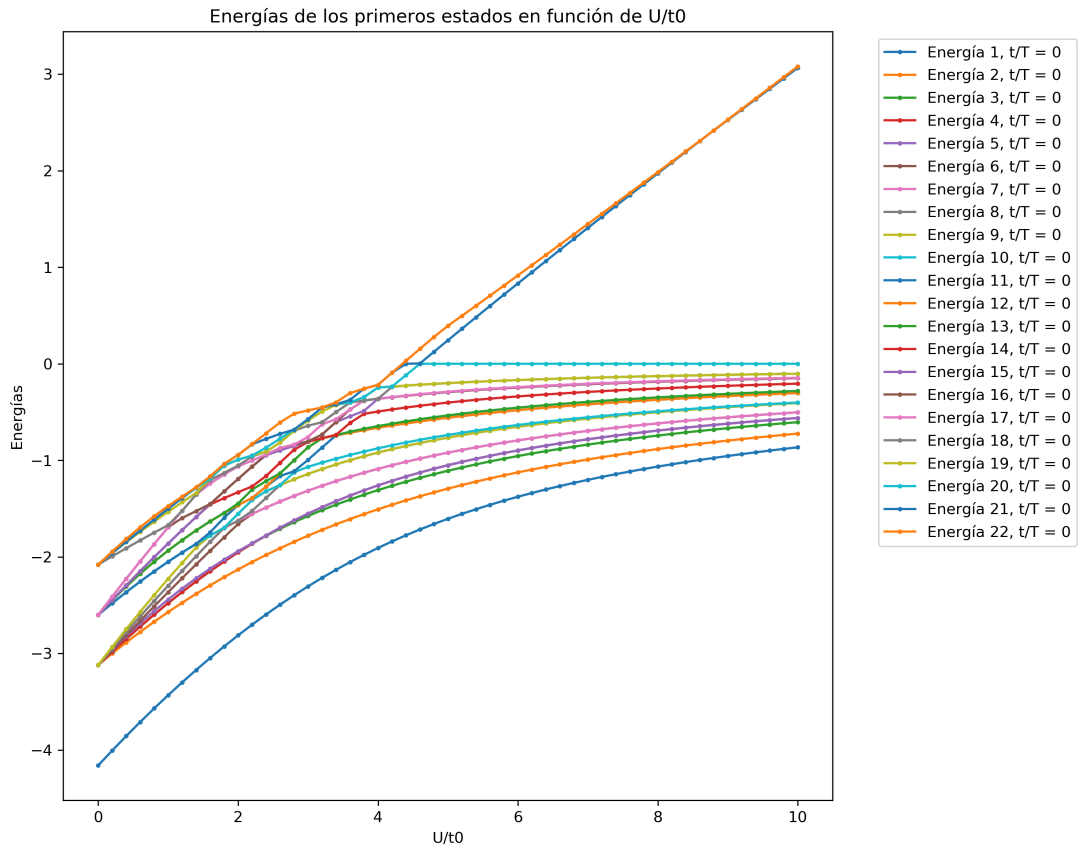
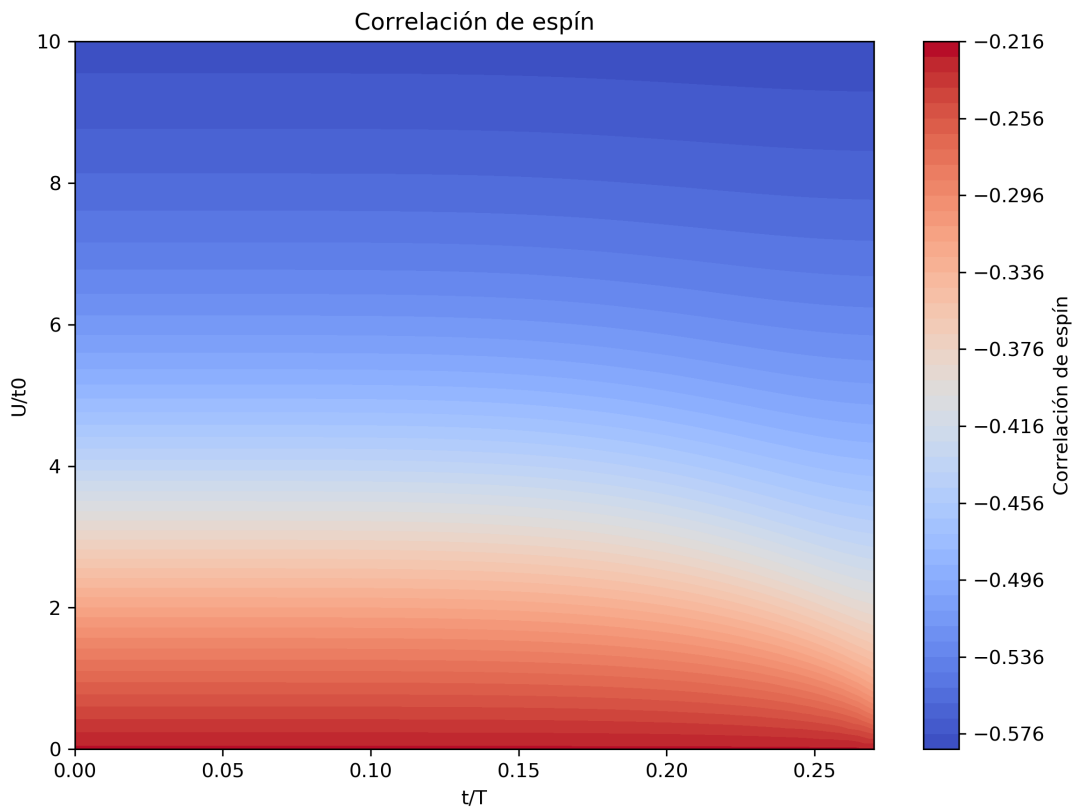


Figura 5.13: Energías de los primeros  $20 + 2$  autoestados del sistema con  $L = 6$  cajas.

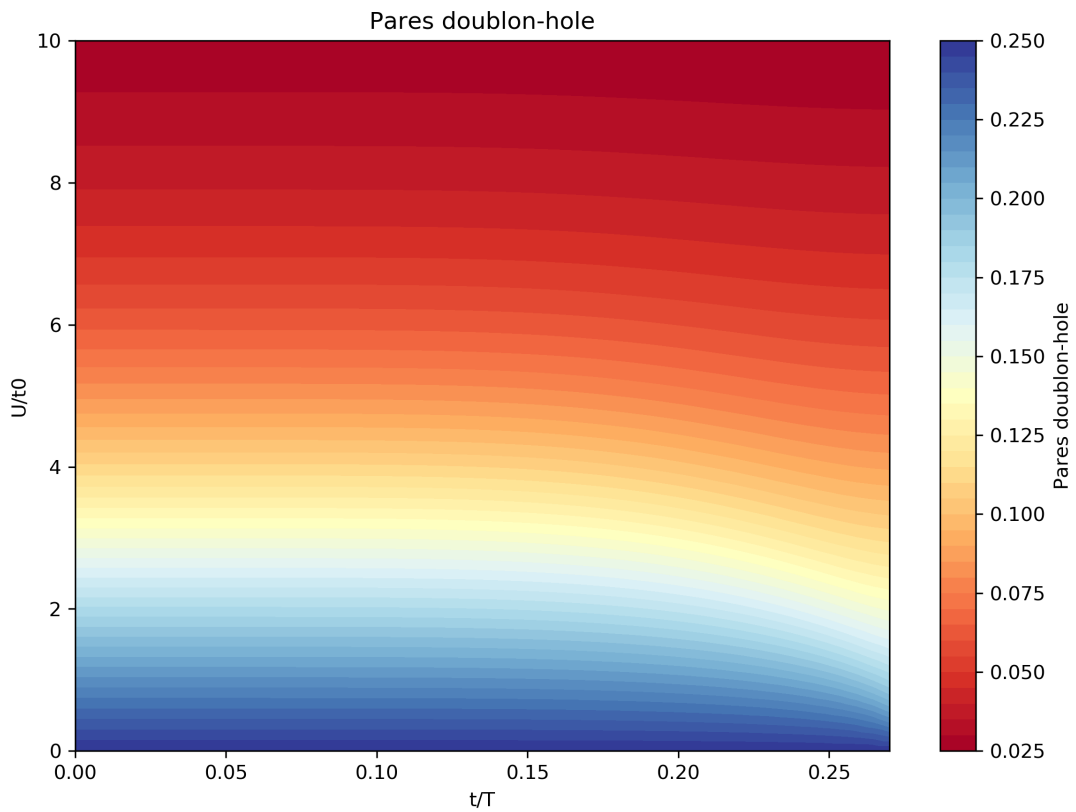
El comportamiento es el esperado, como el de los casos anteriores.

#### 5.4.2. Correlación de espín y pares doublon-hole

Veamos ahora la correlación de espín y los pares doublon-hole en función de  $U/t_0$  y  $t$  del estado fundamental, en los mapas de calor (5,14a) y (5,14b).



(a) Correlación de espín del estado fundamental del sistema con  $L = 6$  cajas.



(b) Pares doublon-hole del estado fundamental del sistema con  $L = 6$  cajas.

Figura 5.14: Análisis de correlación de espín y pares doublon-hole para  $L = 6$  cajas.

La relación entre la correlación de espín y el número de pares doublon-hole es de nuevo

muy fuerte, como se ve en (5,15).

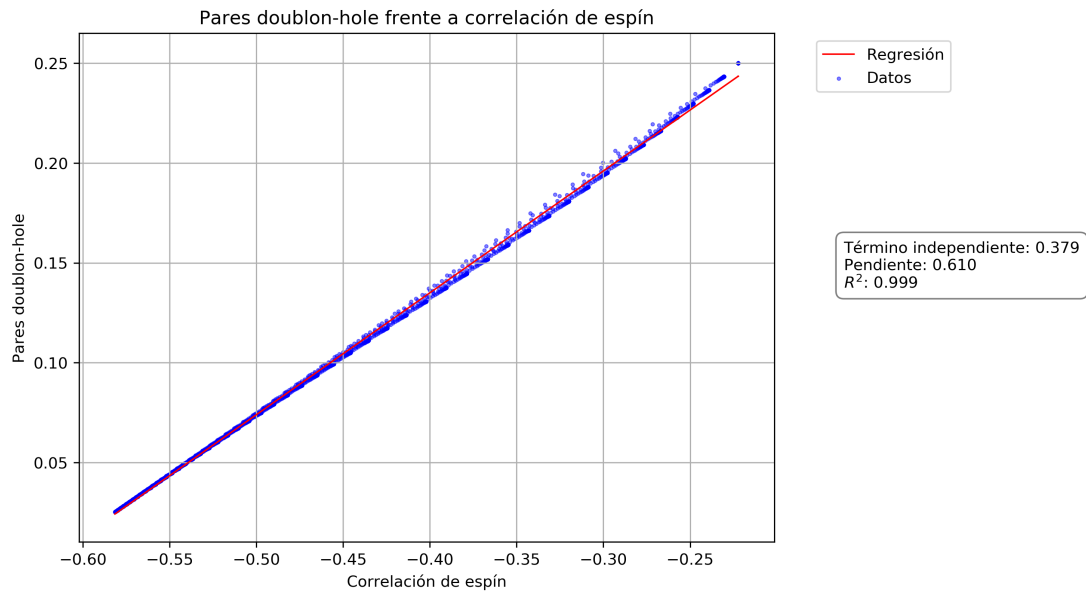
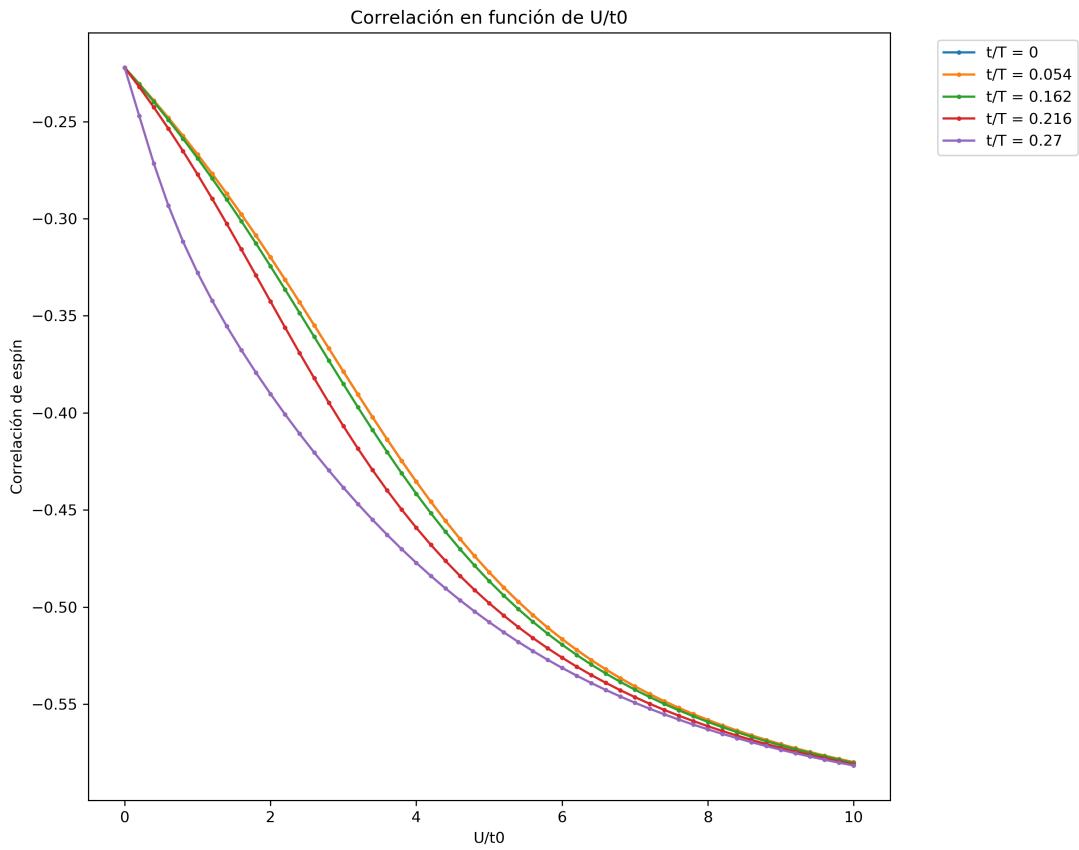
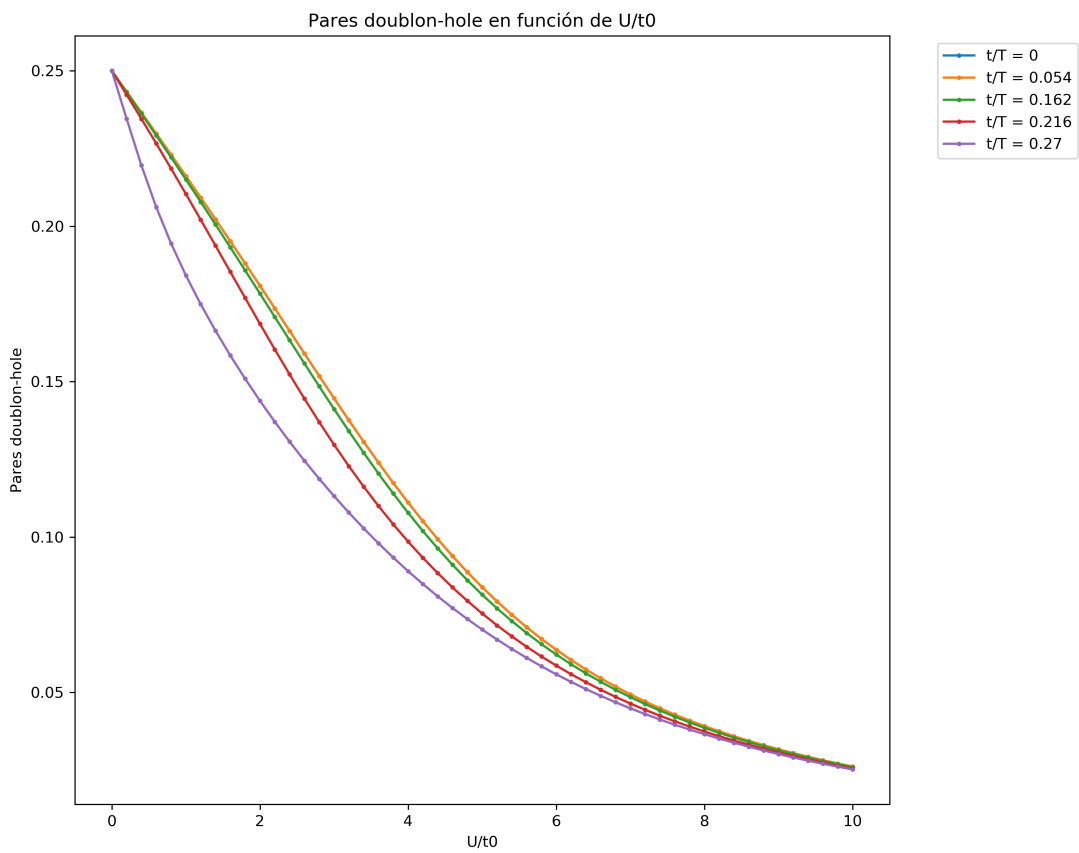


Figura 5.15: Regresión lineal del número de pares doublon-hole frente a la correlación de espín del sistema con  $L = 6$  cajas.

En (5,16a), (5,16b), se ve cómo la dependencia con  $U/t_0$  es la misma que en  $L = 4$ . No ocurre lo mismo con la dependencia temporal que parece ser inversa a la de antes -ver (5,17a), (5,17b)-.

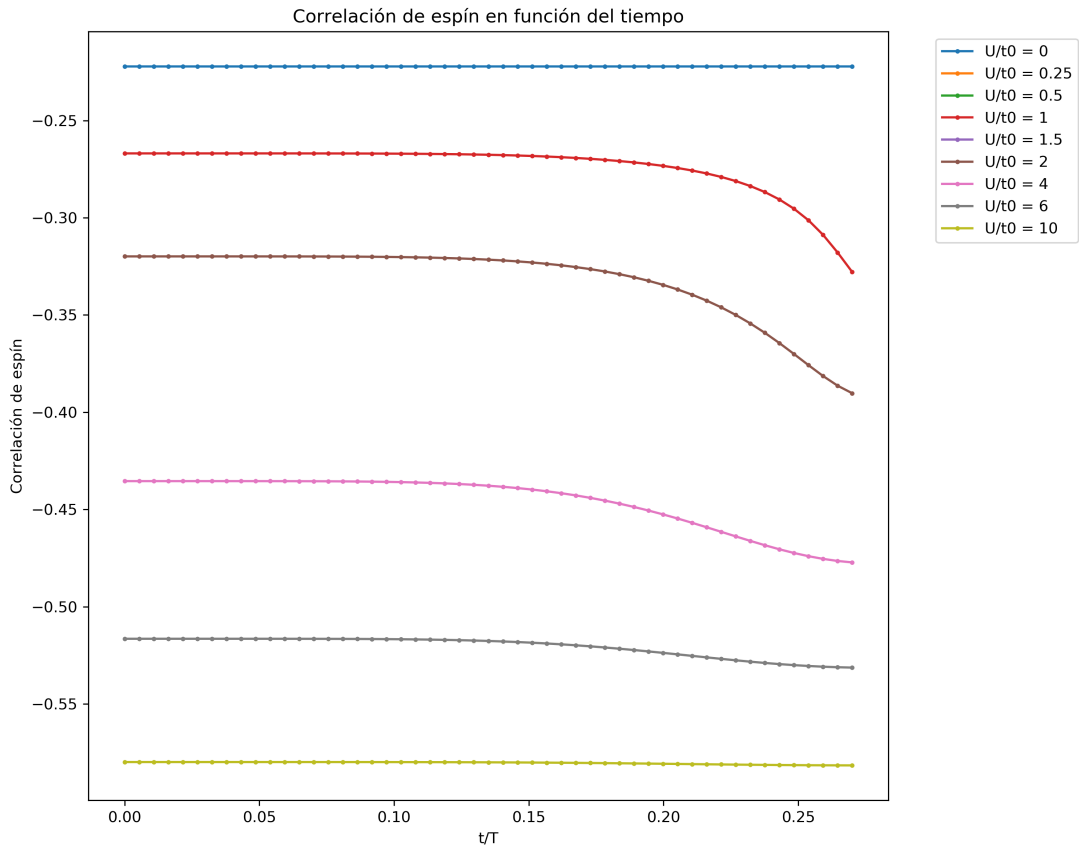


(a) Correlación de espín del estado fundamental en función de  $U/t_0$  para ciertos valores de  $t/T$  del sistema con  $L = 6$  cajas.

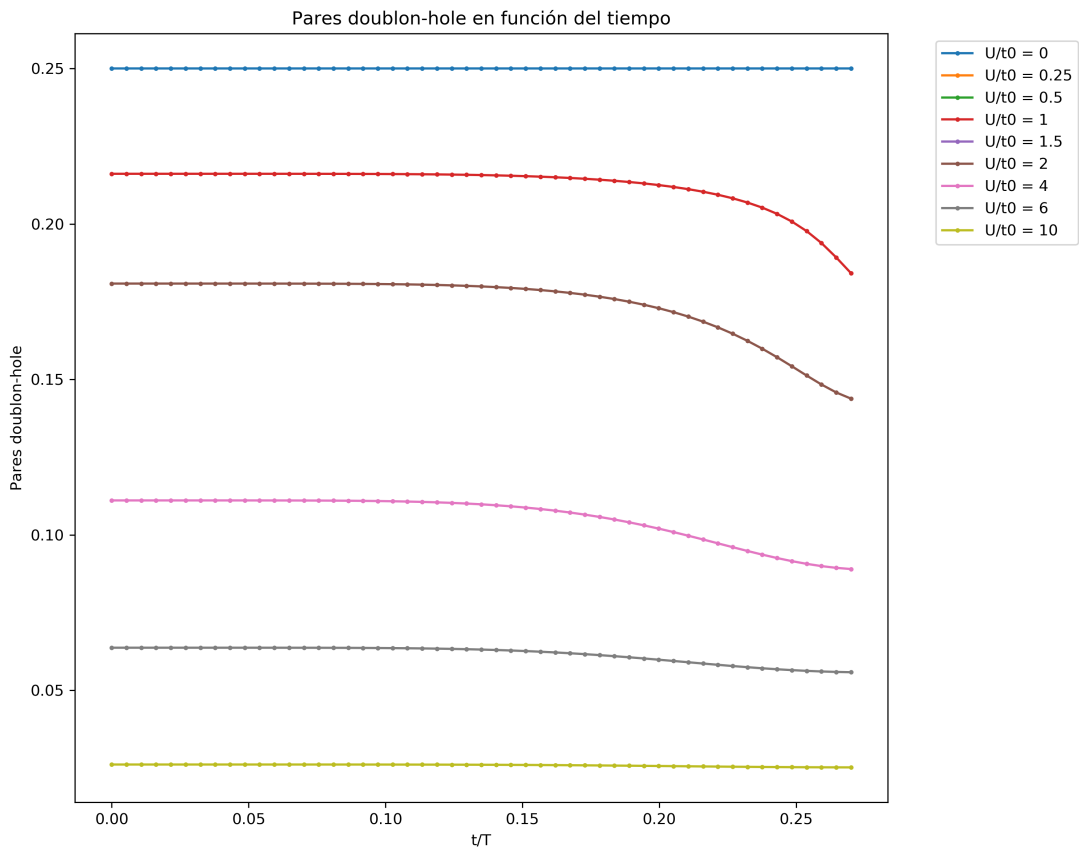


(b) Pares doublon-hole del estado fundamental en función de  $U/t_0$  para ciertos valores de  $t/T$  del sistema con  $L = 6$  cajas.

Figura 5.16: Correlación de espín y pares doublon-hole en función de  $U/t_0$  para  $L = 6$  cajas.



(a) Correlación de espín del estado fundamental en función de  $t/T$  para ciertos valores de  $U/t_0$  del sistema con  $L = 6$  cajas.



(b) Pares doublon-hole del estado fundamental en función de  $t/T$  para ciertos valores de  $U/t_0$  del sistema con  $L = 6$  cajas.

Figura 5.17: Correlación de espín y pares doublon-hole en función de  $t/T$  para  $L = 6$  cajas.

Aparentemente no hay una explicación de por qué ocurre este fenómeno. El número de cajas consideradas no debería influir en las propiedades de los parámetros estudiados en función de la repulsión coulombiana y el pulso. Sin embargo, hemos notado un detalle que parece que pueda tener relación. Las condiciones de contorno periódicas son necesarias por los resultados obtenidos con  $L = 2$  y  $L = 4$  cajas que también se repiten para  $L = 6$  -y creemos que para cualquier valor-.

Pero quizá sea necesario una mejor implementación de estas. En el apartado (4,2,3), se vio que los términos de hopping debidos a las condiciones periódicas son  $(-1)^{\frac{N}{2}+1}$ . Para  $N = L$ , si  $L$  es par y múltiplo de 4 este coeficiente es negativo. En vistas a nuestros resultados con  $L = 4$  y los de [13], donde se utiliza  $L = 12$ , los resultados son consistentes. Sin embargo, si  $L$  no es múltiplo de 4 el coeficiente cambia de signo. Esto ocurre para  $L = 2$  y  $L = 6$ , donde la dependencia con el tiempo de la correlación de espín y el número de pares doublon-hole se invierte. De hecho, cambiando el signo de estos términos se recupera la dependencia de [13], como se ve en (5,18).

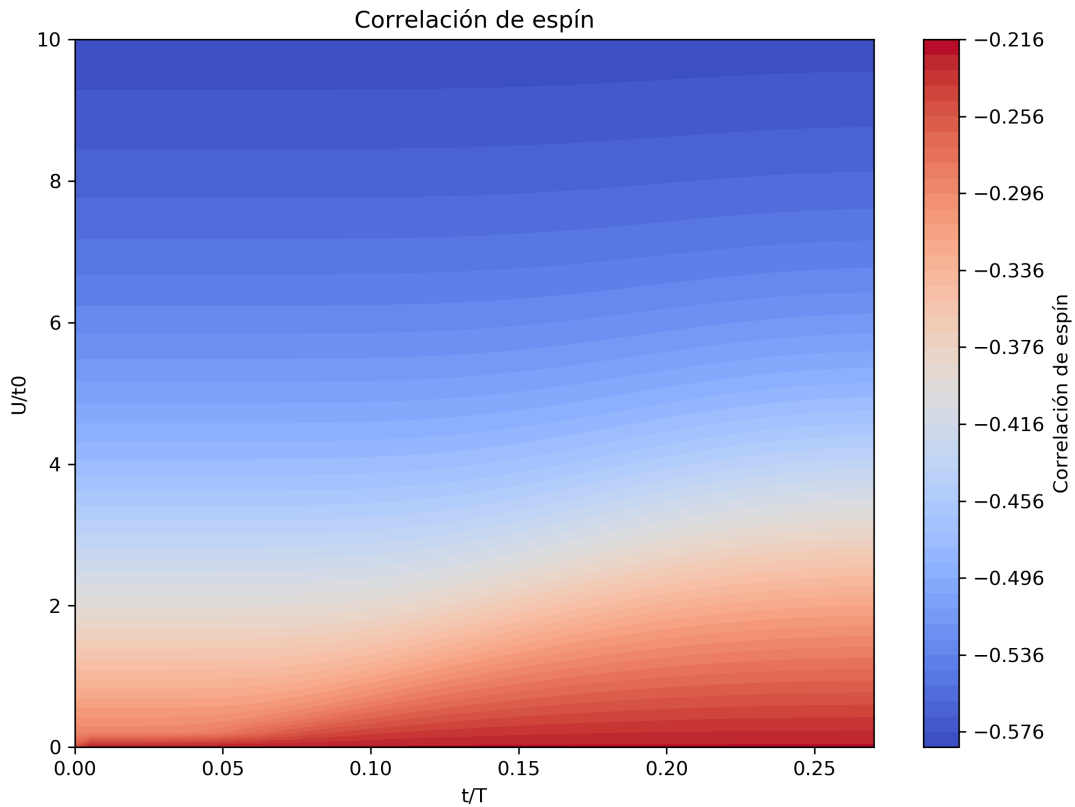


Figura 5.18: Correlación de espín del estado fundamental del sistema con  $L = 6$  cambiando las condiciones periódicas.

## 6. Conclusiones

En el presente trabajo se ha investigado cómo la interacción entre electrones afecta las propiedades de un sistema descrito por el modelo de Hubbard en una dimensión, especialmente cuando se incorpora un campo electromagnético.

- Se ha comprobado que la repulsión/interacción entre electrones modifica significativamente el comportamiento del sistema en comparación con el modelo de electrones independientes. En particular, se encontró que la inclusión de la interacción entre electrones puede conducir a una transición de un estado conductor a un estado aislante. Este fenómeno destaca la importancia de considerar las interacciones electrónicas para entender correctamente las propiedades de los materiales.
- Se ha abordado la evolución temporal del sistema bajo la aproximación adiabática, resolviendo el sistema para cada valor del tiempo. Sin embargo, para caracterizar completamente la evolución temporal, es necesario emplear otros métodos que puedan captar la dinámica del sistema de manera más precisa. A pesar de estas limitaciones, los resultados obtenidos en un pequeño intervalo de tiempo han mostrado cómo la interacción con un campo electromagnético puede alterar el comportamiento del material, proporcionando información valiosa sobre la respuesta del sistema a perturbaciones externas.
- Por último, se ha resaltado la importancia de las condiciones periódicas en el sistema. Se observó que la imposición de estas condiciones es crucial, ya que, de no haberlas aplicado, ciertas propiedades del sistema no cambiarían con el tiempo. No obstante, también se detectaron anomalías relacionadas con las condiciones periódicas, particularmente diferencias en el comportamiento según el número de cajas y la dimensión del sistema periódico considerado. Estas discrepancias sugieren que es necesario un replanteamiento de las condiciones de contorno para asegurar una representación más precisa del sistema.

## Conclusions

In this study, we have investigated how the interaction between electrons affects the properties of a system described by the Hubbard model in one dimension, especially when incorporating an electromagnetic field.

- It has been confirmed that the repulsion/interaction between electrons significantly modifies the system's behavior compared to the independent electron model. In particular, it was found that including electron-electron interaction can lead to a transition from a conducting state to an insulating state. This phenomenon highlights the importance of considering electronic interactions to properly understand the properties of materials.
- We have addressed the temporal evolution of the system under the adiabatic approximation, solving the system for each time step. However, to fully characterize the temporal evolution, it is necessary to employ other methods that can capture the system's dynamics more accurately. Despite these limitations, the results obtained over a small time interval have shown how interaction with an electromagnetic field can alter the material's behavior, providing valuable insights into the system's response to external perturbations.
- Lastly, the importance of periodic boundary conditions in the system has been emphasized. It was observed that imposing these conditions is crucial, as certain properties of the system would not change over time without them. However, anomalies related to periodic conditions were also detected, particularly differences in behavior depending on the number of boxes and the dimension of the periodic system considered. These discrepancies suggest a need for reconsidering boundary conditions to ensure a more accurate representation of the system.

## A. Apéndice

Adjuntamos los códigos empleados para el cálculo del Hamiltoniano y los operadores necesarios mediante los dos métodos.

### A.1. Código en Python para el método 2

```
1
2 import numpy as np
3 import math
4 import cmath
5
6 pi = math.pi
7
8 # Notas: 1. Si no se quieren condiciones periódicas, mirar línea
9         288 y 364 de esta celda.
10 #         2. Para cambios en la fase, línea 279.
11 #1. Funciones para poder conocer posición en la base, vector en ,a
12     base, y expresión en 0s y 1s.
13 # Función que, dado un vector en la base, devuelve su posición
14 def index_v(vect):
15     return [np.array_equal(vect, iv) for iv in v].index(True)
16
17 # Función que, dada una combinación de 0s y 1s, devuelve su
18     posición
19 def index_ocup(ocup):
20     return [np.array_equal(ocup, state) for state in
21             states].index(True)
22
23 # Función que, dado un vector, devuelve la combinación de 0s y 1s
24     correspondientes
25 def ocup_v(vect):
26     return states[index_v(vect)]
27
28 #Función que, dada una combinación de 0s y 1s, devuelve el vector
29     en la base
30 def v_ocup(ocup):
31     return v[index_ocup(ocup)]
32
33 #Función que, dado un vector cualquiera, devuelve su expresión
34     como combinación lineal de combinaciones de 0123
35 def ocup_v_cualquiera(vect):
36     vect_str = ""
37     for i in range(len(vect)):
38         if abs(vect[i].real) > 10**(-6):
39             if abs(1j * vect[i].imag) > 10**(-6):
40                 # Caso: parte real e imaginaria presentes
41                 vect_str += f"({vect[i].real:.2f} +
42                               {vect[i].imag:.2f}j) {states[i]} + "
43             else:
44                 # Caso: solo parte real presente
```

```

39         vect_str += f"{vect[i].real:.2f} {states[i]} + "
40     else:
41         if abs(1j * vect[i].imag) > 10**(-6):
42             # Caso: solo parte imaginaria presente
43             vect_str += f"{vect[i].imag:.2f}j {states[i]} + "
44     vect_str = vect_str[:-3]
45     return vect_str
46
47 #Función que, dada una combinación cualquiera, devuelve su
48 expresión como vector
49 #Aquí Ocup será una cadena!!!
50 def v_ocup_cualquiera(expression):
51     terms = expression.split('+')
52
53     result_vector = np.zeros(len(states))
54
55     for term in terms:
56         coef, vector_str = term.split('[')
57         coef = int(coef.strip())
58
59         vector_str = vector_str.rstrip('] ').strip()
60
61         vector = list(map(int, vector_str.split(',')))
62         result_vector[index_ocup(vector)] = coef
63
64     return result_vector
65
66 #2. CÁLCULO ESTADOS DE CADA ESPACIO. L CAJAS, n ELECTRONES DE CADA
67 TIPO
68 def calculate_states(L, n):
69     def generate_states(L, n):
70         states = []
71         for i in range(2**L):
72             state = bin(i)[2:].zfill(L)
73             state = [int(x) for x in state]
74             count = sum(state)
75             if count == n:
76                 state = state[::-1]
77                 states.append(state)
78         return states
79
80     states = generate_states(L, n)
81
82 #2.1. GUARDAR POSICIONES DE LOS ELEMENTOS DE LA BASE
83 d = len(states)
84 v=[]
85 for m in range(d):
86     iv=np.zeros(d)
87     iv[m]=1
88     v.append(iv)
89
90 """

```

```

90     #2.2. GUARDAR ESTADOS EN UN ARCHIVO (OPCIONAL)
91     def save_states(filename):
92         with open(filename, 'w') as file:
93             for m in range(0, d):
94                 #index_mn= {index_mn(Index[m])}
95                 texto = f'v[{m}] = |{m+1}> Index={m} ocup=
96                     {states[m]}\n '#{v[m]} ponerlo al final de esta
97                     línea si se quiere
98                     file.write(texto + '\n')
99     estados = "estados_L={}.txt".format(L)
100    save_states(estados)
101    """;
102    return states, v
103
104
105 #3. FUNCIONES ANÁLOGAS EN EL ESPACIO PRODUCTO
106
107 # Función que, dado un vector en la base, devuelve su posición
108 def index_V(Vect):
109     return [np.array_equal(Vect, iV) for iV in V].index(True)
110
111 # Función que, dado un vector en la base, devuelve su par (i, j)
112 def mn_V(Vect):
113     return Index[index_V(Vect)]
114
115 # Función que, dado un vector en la base, devuelve su combinación
116     de 0s, 1s, 2s y 3s
117 def Ocup_V(Vect):
118     return states_product[index_V(Vect)]
119
120 # Función que, dado un par (i,j), devuelve su posición en la base
121 def index_mn(i, j):
122     return [np.array_equal(mn, [i,j]) for mn in Index].index(True)
123
124 # Función que, dado un par (i,j), devuelve su vector en la base
125 def V_mn(i, j):
126     return V[index_mn(i, j)]
127
128 # Función que, dado un par (i,j), devuelve su combinación de 0s,
129     1s, 2s y 3s
130 def Ocup_mn(i, j):
131     return states_product[index_mn(i, j)]
132
133 # Función que, dada una combinación de 0s, 1s, 2s y 3s, devuelve
134     su posición
135 def index_Ocup(Ocup):
136     return [np.array_equal(Ocup, state_p) for state_p in
137         states_product].index(True)

```

```

136 # Función que, dada una combinación de 0s, 1s, 2s y 3s, devuelve
      su par (i,j)
137 def mn_Ocup(Ocup):
138     return Index[index_Ocup(Ocup)]
139
140 # Función que, dado un par (i,j), devuelve su vector en la base
141 def V_Ocup(Ocup):
142     return V[index_Ocup(Ocup)]
143
144
145 #Función que, dado un vector cualquiera, devuelve su expresión
      como combinación lineal de combinaciones de 0123
146 def Ocup_V_cualquiera(vect):
147     vect_str = ""
148     for i in range(len(vect)):
149         if abs(vect[i].real) > 10**(-6):
150             if abs(vect[i].imag) > 10**(-6):
151                 # Caso: parte real e imaginaria presentes
152                 vect_str += f"({vect[i].real:.5f} +
                          {vect[i].imag:.5f}j) {states_product[i]} + "
153             else:
154                 # Caso: solo parte real presente
155                 vect_str += f"{vect[i].real:.5f}
                          {states_product[i]} + "
156         else:
157             if abs(vect[i].imag) > 10**(-6):
158                 # Caso: solo parte imaginaria presente
159                 vect_str += f"{vect[i].imag:.5f}j
                          {states_product[i]} + "
160     vect_str = vect_str[:-3]
161
162     return vect_str
163
164 #Función que, dada una combinación cualquiera, devuelve su
      expresión como vector
165 #Aquí Ocup será una cadena!!!
166 def V_Ocup_cualquiera(expression):
167     terms = expression.split('+')
168
169     result_vector = np.zeros(len(states_product))
170
171     for term in terms:
172         coef, vector_str = term.split('[')
173         coef = int(coef.strip())
174
175         vector_str = vector_str.rstrip('] ').strip()
176
177         vector = list(map(int, vector_str.split(',')))
178         result_vector[index_Ocup(vector)] = coef
179
180     return result_vector
181
182

```

```

183 #4. ESTADOS ESPACIO PRODUCTO
184
185 def calculate_states_product(L, n):
186     states, v = calculate_states(L, n)
187     d = len(states)
188
189     #4.1 ORDENACIÓN A PARTIR DE LAS BASES DOWN Y UP
190     # formamos la base del espacio producto
191     V=[]
192     Index=[]
193     states_product=[]
194
195     for m in range(0, d): # spin down son las filas
196         for n in range(0, d): # spin up son las columnas
197             Vij=np.einsum('i,j->ij', v[m], v[n])
198             V.append(Vij)
199             Index.append((m,n))
200             # Representamos spin d como 2, spin up como 1 y ambos
201             # spines en la misma celda como 3
202             # Hacemos down \tens up
203             ocup_t=[(2 * iocup_d+iocup_u) for iocup_d, iocup_u in
204                 zip(states[m],states[n])]
205             states_product.append(ocup_t)
206
207     """
208     #4.2 GUARDAR ESTADOS ESPACIO PRODUCTO (OPCIONAL)
209     def save_states_product(filename):
210         with open(filename, 'w') as file:
211             for m in range(0, (d)**2):
212                 texto = f'V[{m}]= V[{Index[m]}] Index={m} Ocup=
213                     {states_product[m]}\n {V[m]}'
214                 file.write(texto + '\n')
215
216     estados = "estados_producto_L={}.txt".format(L)
217     save_states_product(estados)
218     """;
219     return states, states_product, d
220
221 #5. OPERADORES EN EL ESPACIO PRODUCTO
222
223 #5.1. HOPPING EN CADA ESPACIO
224 def calculate_hij(i, j):
225     #Condiciones de contorno
226     i = i % L
227     j = j % L
228     hij = np.zeros((d, d))
229     #Recorremos todos los estados
230     for k in range(0, d):
231         for q in range(0, d):
232             if states[k][j] == 1 or states[k][i] == 0:
233                 #Queremos i->j, si i es 0 o j es 1, esa columna
234                 #entera es nula

```

```

232         pass #o hij[q,k]=0
233     elif states[k][j] == 0 and states[k][i] == 1:
234         new_state = states[k].copy()
235         new_state[j] = 1
236         new_state[i] = 0
237         #Cambiamos el estado, y comprobamos con cuál se
           corresponde de la lista q. Aplicamos la
           expresión de arriba.
238         if new_state == states[q]:
239             if i<j:
240                 count = sum(states[k][i+1: j+1])
241             if i>j:
242                 count = sum(states[k][j+1: i+1])+1
243             hij[q, k] = (-1)**(count)
244     return hij
245
246 #5.2. HOPPING EN EL PRODUCTO
247 def hij_du(i, j):
248     hij = calculate_hij(i, j)
249     hij_u = np.einsum('ij,kl->ikjl', np.eye(d), hij)
250     return hij_u
251
252
253 #5.3. NÚMERO EN CADA ESPACIO
254 def nj(j):
255     diag = np.zeros(d)
256     for i in range(0, d):
257         if states[i][j] == 1:
258             diag [i] = 1
259     return np.diag(diag)
260
261 #5.4. NÚMERO EN EL PRODUCTO
262 def n_du(j):
263     n_du = np.einsum('ij,kl->ikjl', nj(j), nj(j))
264     return n_du
265
266
267 #6. DEFINICIÓN HAMILTONIANO EN ESPACIO PRODUCTO
268
269 #6.1. FASE
270
271 w = 32.9 * 10**12 # Hz = 32.9 THz
272 hbar = 4.135667696 * 10**(-15) #eV s
273 e = 1
274 E0 = 10**9 #V/m = #10 MV/cm
275 A0 = E0/w #V/m * s
276 a = 4 * 10**(-10) #= 10 Armstrong #2 * pi * R/L
277 amplitud = e * a * A0 / hbar #hbar para cuadrar unidades
278
279 def fase_campo(t): #t va desde 0 hasta 10T. t se expresa en
           unidades t/T.
280     fase = amplitud * np.sin(2 * pi * t) * (np.sin(pi/10 * t))**2
           #

```

```

281     return fase
282
283 #6.2. HAMILTONIANO DE HOPPING EN ESPACIO SEPARADOS Y PRODUCTO.
284 def Hi_du():
285
286     H1_u = np.zeros((d, d, d, d))
287
288     #L si se quiere con condiciones periódicas, L-1 si no
289     for j in range(L):
290         hij_u = hij_du(j, j+1)
291         H1_u += hij_u
292     H1_d = H1_u.transpose((1,0,3,2))
293     H2_u = H1_u.transpose((0,3,2,1))
294     H2_d = H1_u.transpose((3,0,1,2))
295
296     return H1_u, H1_d, H2_u, H2_d
297
298
299 #6.3. HAMILTONIANO DE INTERACCIÓN (NÚMERO)
300
301 def Hdd():
302     Hd = np.zeros((d, d, d, d))
303     for j in range(L):
304         Hd += n_du(j)
305     return Hd
306
307
308 #6.4. HAMILTONIANO TOTAL
309 def H_tot(U, t0, t):
310
311     fase = fase_campo(t)
312
313     H1_u, H1_d, H2_u, H2_d = Hi_du()
314     Hd = Hdd()
315
316     H = -t0 * ((H1_u + H1_d) * cmath.exp(1j * fase) + (H2_u +
317         H2_d) * cmath.exp(- 1j * fase)) + U * Hd
318
319     H_reshaped = H.reshape((d**2, d**2))
320     return H_reshaped
321
322 #7. OPERADORES PARA ESTUDIAR EL SISTEMA
323
324 #7.1. OPERADOR DUOBLON (PARES DE ELECTRONES EN UNA MISMA CAJA)
325
326 def doublon_estado(state):
327     doublon_pairs = 0
328     for i in range(len(state)):
329         if state[i] == 3:
330             doublon_pairs += 1
331
332     return doublon_pairs

```

```

333 def doublon_vector(vect):
334     doublon_pairs = 0
335     for i in range(len(vect)):
336         doublon_pairs += abs(vect[i])**2 *
337             doublon_estado(states_product[i])
338     return doublon_pairs/L
339
340 #7.2. OPERADOR ESPÍN
341 #Espín de cada caja
342 def espin_caja(state, box_index):
343     # Obtenemos el estado de la caja específica
344     box_state = state[box_index]
345
346     # Determinamos el operador de espín según el estado de la caja
347     if box_state == 0:
348         # Si la caja está vacía (0 electrones), el operador de
349             espín es 0
350         spin_value = 0
351     elif box_state == 1:
352         # Si hay un electrón con espín up (1), el operador de
353             espín es +1
354         spin_value = 1
355     elif box_state == 2:
356         # Si hay un electrón con espín down (2), el operador de
357             espín es -1
358         spin_value = -1
359     elif box_state == 3:
360         # Si hay dos electrones con espines opuestos (3), el
361             operador de espín es 0
362         spin_value = 0
363     return spin_value
364
365 #Suma de todos los  $S_j S_{j+1}$  aplicados sobre un estado
366 def espin_correlacion(state):
367     espin_corr = 0
368     for i in range(len(state)): #len(state)-1 si no se quieren
369         condiciones periódicas
370         espin_corr += espin_caja(state, i) * espin_caja(state,
371             (i+1)%L)
372     return espin_corr
373
374 #Aplicar el operador a la expresión en coordenadas de un estado en
375 términos de los de la base
376 def espin_operador(vect):
377     espin = 0
378     for i in range(len(vect)):
379         espin += abs(vect[i])**2 *
380             espin_correlacion(states_product[i])
381     return espin/L #Se normaliza ya que -L es el valor máximo que
382         puede tomar. Se supone que vect está normalizado.

```

Código 1: Método 2, desdoblamiento y acoplación de estados.

## A.2. Código en Python para el método 1

```
1 import numpy as np
2 import math
3 import cmath
4 import sys
5 from scipy.sparse import csr_matrix
6
7 pi = math.pi
8
9
10 #Dado un L se generan todos los estados posibles (combinaciones de
11   0s y 1s de longitud 2L debido al espín)
12 #Con bin(i) se pasa a binario, el número queda 0b(...). [2:] quita
13   el 0b. zfill completa los 0s.
14 #state[::-1] invierte el orden de los números por mi elección
15 def generate_states(L, N):
16     states = []
17     for i in range(2**(2*L)):
18         state = bin(i)[2:].zfill(2*L)
19         state = [int(x) for x in state]
20         up_count = sum(state[::2])
21         down_count = sum(state[1::2])
22         if up_count == down_count == N:
23             state = state[::-1]
24             states.append(state)
25     return states
26
27 def save_states(filename, states):
28     with open(filename, 'w') as file:
29         i = 0
30         #print('Los estados son:')
31         for state in states:
32             i += 1
33             state_str = '|{}>='.format(i) + ''.join(map(str,
34                 state)) + '>\n'
35             file.write(state_str)
36
37 #Operador de hopping de i a j. Sigma es el espín, 0 es up, 1 es
38   down.
39
40 #Recuerdo que  $c^{\dagger}_k |n_1 \dots n_k \dots n_N\rangle = (-1)^{\sum_{l=k+1, N} n_l} (1-n_k) |n_1 \dots (1+n_k) \dots n_N\rangle$ 
41 #  $c_k$  igual cambiando  $1-n_k$  por  $n_k$  y  $1+n_k$  por  $1-n_k$ 
42 #  $i < j$ ,  $h_{ij} |n_1 \dots n_i \dots n_j \dots n_N\rangle = (-1)^{\sum_{l=i+1, j} n_l} (1-n_j) |n_1 \dots (1-n_i) \dots (1+n_j) \dots n_N\rangle$ 
43 #  $i > j$ , al revés
44
45 def calculate_h_ij(states, i, j, L, sigma):
46     #print('hola')
47     n = len(states)
48     #Condiciones de contorno, se pueden obviar en un principio
49     i = (2*i+sigma) % (2*L)
```

```

47     j = (2*j+sigma) % (2*L)
48     h_ij = np.zeros((n, n))
49     #Recorremos todos los estados
50     for k in range(n):
51         for q in range(n):
52             if states[k][j] == 1 or states[k][i] == 0:
53                 #Queremos i->j, si i es 0 o j es 1, esa columna
                    entera es nula
54                 pass #o h_ij[q,k]=0
55             elif states[k][j] == 0 and states[k][i] == 1:
56                 new_state = states[k].copy()
57                 new_state[j] = 1
58                 new_state[i] = 0
59                 #Cambiamos el estado, y comprobamos con cuál se
                    corresponde de la lista q. Aplicamos la
                    expresión de arriba.
60                 if new_state == states[q]:
61                     if i<j:
62                         count = sum(states[k][i+1:j+1])
63                     if i>j:
64                         count = sum(states[k][j+1:i+1])+1
65                     h_ij[q, k] = (-1)**(count)
66     h_ij = csr_matrix(h_ij)
67     return h_ij
68
69 #operador número
70 def calculate_w_j(states, j, L):
71     n = len(states)
72     w_j = np.zeros((n, n))
73     j = (2*j) % (2*L)
74     #Para cada caja comprobamos si está llena o no
75     for k in range(n):
76         if states[k][j] == 1 and states[k][j+1] == 1:
77             w_j[k,k] = 1
78
79     w_j = csr_matrix(w_j)
80     return w_j
81
82 #Nos quedamos solo desde j hasta j+1
83 def calculate_H1(states, L):
84     n = len(states)
85     H1 = np.zeros((n, n))
86     #L si se quiere con condiciones periódicas, L-1 si no
87     for j in range(L):
88         for sigma in range(2):
89             h_ij = calculate_h_ij(states, j, j+1, L, sigma)
90             H1 += h_ij
91     H1 = csr_matrix(H1)
92     return H1
93
94
95 def calculate_H2(H1):
96     H2 = H1.transpose()

```

```

97     return H2
98
99 #Calculamos la parte diagonal
100 def calculate_Hd(states, L):
101     n = len(states)
102     Hd = np.zeros((n, n))
103     for j in range(L):
104         w_j = calculate_w_j(states, j, L)
105         Hd += w_j
106     Hd = csr_matrix(Hd)
107     return Hd
108
109 #Amplitud del campo
110
111 w = 32.9 * 10**12# Hz = 32.9 THz
112 #T = 2 * pi/w #ps
113 hbar = 4.135667696 * 10**(-15) #eV s
114 e = 1 #eV = 1.602 * 10**(-19) C
115 F0 = 10**9 #V/m = #10 MV/cm
116 A0 = F0/w #MV/(cm*s)
117 a = 4 * 10**(-10) #= 4 Armstrong
118 amplitud = e * a * A0 / hbar
119
120 def fase_campo(t): #t va desde 0 hasta 10T en el pulso completo. t
    se expresa en unidades t/T.
121     fase = amplitud * np.sin(2 * pi * t) * (np.sin(pi/10 * t))**2 #
122     return fase
123
124
125 def H_tot(U, t0, t):
126
127     H1 = calculate_H1(states, L)
128     H2 = calculate_H2(H1)
129
130     Hd = calculate_Hd(states, L)
131
132     fase = fase_campo(t)
133
134     H = -t0 * (cmath.exp(1j * fase) * H1 + cmath.exp(-1j * fase) *
        H2) + U * Hd
135
136     return H.toarray()
137
138
139 #Operadores doublon-hole
140
141 def doublon_estado(state):
142     doublon_pairs = 0
143     for i in range(L):
144         if state[2 * i] == 1 and state[2 * i + 1] == 1:
145             doublon_pairs += 1
146
147     return doublon_pairs

```

```

148
149 def doublon_vector(vect):
150     doublon_pairs = 0
151     for i in range(len(vect)):
152         doublon_pairs += vect[i].conjugate() *
153             doublon_estado(states[i]) * vect[i]
154     return (doublon_pairs.real/L).real
155
156 #Operadores de correlación de espín
157 def espin_caja(state, box_index):
158     # Obtenemos el estado de la caja específica
159     return state[2 * box_index] - state[2 * box_index + 1]
160
161 def espin_correlacion(state):
162     espin_corr = 0
163     for i in range(L):
164         espin_corr += espin_caja(state, i) * espin_caja(state,
165             (i+1)%L)
166     return espin_corr
167
168 #Convertir la expresión en coordenadas de un vector, a la misma
169     expresión pero cada coordenada multiplicada por el espín que
170     tiene
171 def espin_operador(vect):
172     espin = 0
173     for i in range(len(vect)): #len(vect)-1 si no se quieren
174         condiciones periódicas
175         #Si vect = a_i state_i, queda a_i^*
176             espin_correlacion(states_i) * a_i
177         espin += vect[i].conjugate() *
178             espin_correlacion(states[i]) * vect[i]
179     return (espin.real/L).real #Se normaliza ya que -L es el valor
180         máximo que puede tomar

```

Código 2: Método 1, considerando todos los estados directamente.

## Bibliografía

- [1] M. Born y K. Huang. *Dynamical theory of crystal lattices*. Oxford university press, 1954.
- [2] H. Bruus y K. Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. OUP Oxford, 2004.
- [3] R. M. Dreizler y E. K. U. Gross. *Density functional theory: an approach to the quantum many-body problem*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [4] F. H. L. Essler et al. *The one-dimensional Hubbard model*. Cambridge University Press, 2005.
- [5] D. J. Griffiths y D. F. Schroeter. *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge university press, 2018.
- [6] M. Hohenleutner et al. “Real-time observation of interfering crystal electrons in high-harmonic generation”. En: *Nature* 523.7562 (2015), págs. 572-575.
- [7] J. Hubbard. “Electron correlations in narrow energy bands”. En: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 276.1365 (1963), págs. 238-257.
- [8] V. Kaplunovsky. *Fermionic Algebra and Fock Space*. Lecture Notes. 2016.
- [9] L. D. Landau y E. M. Lifshitz. *Quantum mechanics: non-relativistic theory*. Vol. 3. Elsevier, 2013.
- [10] A. Lubatsch y J. Kroha. “Optically driven Mott-Hubbard systems out of thermodynamic equilibrium”. En: *Annalen der Physik* 521.12 (2009), págs. 863-867.
- [11] W. Metzner y D. Vollhardt. “Correlated lattice fermions in d= dimensions”. En: *Physical review letters* 62.3 (1989), pág. 324.
- [12] T. Oka. “Nonlinear doublon production in a Mott insulator: Landau-Dykhne method applied to an integrable model”. En: *Physical Review B* 86.7 (2012), pág. 075148.
- [13] R. E. F. Silva et al. “High-harmonic spectroscopy of ultrafast many-body dynamics in strongly correlated systems”. En: *Nature Photonics* 12.5 (2018), págs. 266-270.
- [14] J. M. Ziman. *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge university press, 1972.