

Ejercicio 5.2

Modelo de Hubbard

Hamiltoniano de un sólido

Consideremos un sólido modelado como un conjunto de iones y electrones condensados en una estructura cristalina tridimensional. Como los iones son mucho más masivos que los electrones, podemos pensar a éstos como una *lattice* estática y periódica. Bajo esta aproximación, la dinámica de los electrones está gobernada por el Hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_I(\mathbf{r}_i) \right] + \sum_{i<j} V_C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (1)$$

donde N es la cantidad de electrones del sistema, V_I el potencial periódico producido por la *lattice* y V_C el potencial de interacción (Coulomb) entre electrones.

Funciones de Wannier

Queremos escribir el Hamiltoniano (1) en el formalismo de segunda cuantización utilizando una base conveniente de funciones. Para construir esta base vamos a utilizar los autoestados del Hamiltoniano de una partícula

$$h = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_I(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Como el potencial V_I es periódico, sus autoestados se pueden escribir como funciones de Bloch

$$\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

tales que

$$h \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n,\mathbf{k}} \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (4)$$

donde u tiene la misma periodicidad que V_I , el subíndice n denota la banda n -ésima y \mathbf{k} es el cuasimomento (el momento efectivo que “ve” la función u es $\mathbf{p}_{eff} = -i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k}$) restringido a la primera zona de Brillouin.

Una base complementaria de funciones de una partícula está dada por las funciones de Wannier $\Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, donde \mathbf{R}_i es cualquier vector de la red de Bravais (hay una función por cada vector) y Φ_n está definida como

$$\Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (5)$$

con L la cantidad de celdas primitivas en el cristal y la suma es sobre todos los \mathbf{k} en la zona de Brillouin que son consistentes con las condiciones de contorno periódicas del

crystal. Es decir, hay L valores diferentes de \mathbf{k} . Como usualmente L es un número grande, se suele hacer el reemplazo

$$\sum_{\mathbf{k}} \longrightarrow \frac{N}{V} \int_{BZ} d^3k \longrightarrow \frac{N}{V} \int_{BZ} d^3k \quad (6)$$

donde BZ denota la zona de Brioullin y V su volumen. Las funciones de Wannier tienen la ventaja de ser una base ortogonal en los índices n e i . Esto es fácil de ver. Llamemos Ω al volumen de la celda unidad. Entonces,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d^3x \Phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \Phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} \int_{\Omega} d^3x \phi_{n, \mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \phi_{m, \mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\ &= \delta_{n, m} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \\ &= \delta_{n, m} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \\ &= \delta_{n, m} \delta_{i, j}, \end{aligned} \quad (7)$$

donde para demostrarlo usamos la ortonormalidad de las funciones $\phi_{n, \mathbf{k}}$. Por último, notamos que las funciones de Bloch se pueden expresar en términos de las de Wannier como

$$\phi_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (8)$$

Hamiltoniano en segunda cuantización

Consideremos los operadores $c_{n, \mathbf{k}, \sigma}^\dagger$ de creación electrones de spin σ en los estados de Bloch $\phi_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Debido a la relación entre funciones de Wannier y de Bloch dada por (5), es claro que la transformada de Fourier de los $c_{n, \mathbf{k}, \sigma}^\dagger$, definida como

$$c_{n, i, \sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{n, \mathbf{k}, \sigma}^\dagger, \quad (9)$$

corresponde a los operadores de creación en la base de Wannier. Para ver esto, consideremos al operador de campo que crea un electrón de spin σ en la posición \mathbf{r} en la base de Bloch:

$$\Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{n, \mathbf{k}} \phi_{n, \mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) c_{n, \mathbf{k}, \sigma}^\dagger. \quad (10)$$

Ahora utilizamos la transformación inversa (8) en la definición de $\Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned}
\Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_{n,\mathbf{k}} \phi_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) c_{n,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \\
&= \sum_{n,\mathbf{k}} \left[\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \Phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \right] c_{n,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \\
&= \sum_{n,i} \Phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{n,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \right] \\
&= \sum_{n,i} \Phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) c_{n,i,\sigma}^\dagger.
\end{aligned} \tag{11}$$

Como el último renglón corresponde al operador de campo en la base de Wannier, concluimos que los $c_{n,i,\sigma}^\dagger$ son los operadores creación en esa misma base. Con los operadores de creación y destrucción (sus adjuntos) ya definidos, procedemos a encontrar el Hamiltoniano del sistema (1) en el formalismo de segunda cuantización. Para ello, debemos realizar explícitamente la cuenta

$$H = \sum_\sigma \int_\Omega d^3x \Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) h \Psi_\sigma(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1,\sigma_2} \int_\Omega d^3x_1 \int_\Omega d^3x_2 \Psi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \Psi_{\sigma_2}^\dagger(\mathbf{r}_2) V_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \tag{12}$$

en la base de Wannier. Para calcular la primera de las integrales tenemos que ver cómo actúa el hamiltoniano de una partícula h sobre las funciones de Wannier:

$$\begin{aligned}
h \Phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) &= h \left[\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} [h \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})] \\
&= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \varepsilon_{n,\mathbf{k}} \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{13}$$

Por lo tanto, la primera integral es

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} d^3x \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) &= \sum_{n,m} \sum_{i,j} \int_{\Omega} d^3x [\Phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) c_{n,i,\sigma}^{\dagger}] h [\Phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) c_{m,j,\sigma}] \\
&= \sum_{n,m} \sum_{i,j} \left[\int_{\Omega} d^3x \Phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) h \Phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \right] c_{n,i,\sigma}^{\dagger} c_{m,j,\sigma} \\
&= \sum_{n,m} \sum_{i,j} \left[\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \varepsilon_{m,\mathbf{k}} \int_{\Omega} d^3x \Phi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \phi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] c_{n,i,\sigma}^{\dagger} c_{m,j,\sigma} \\
&= \sum_{n,m} \sum_{i,j} \left[\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \varepsilon_{m,\mathbf{k}} \int_{\Omega} d^3x \phi_{n,\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) \phi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] c_{n,i,\sigma}^{\dagger} c_{m,j,\sigma} \\
&= \sum_{n,m} \sum_{i,j} \left[\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \varepsilon_{m,\mathbf{k}} \delta_{n,m} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \right] c_{n,i,\sigma}^{\dagger} c_{m,j,\sigma} \\
&= \sum_n \sum_{i,j} \left[\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \varepsilon_{n,\mathbf{k}} \right] c_{n,i,\sigma}^{\dagger} c_{n,j,\sigma} \\
&= \sum_{n,i,j} t_{i,j}^n c_{n,i,\sigma}^{\dagger} c_{n,j,\sigma},
\end{aligned} \tag{14}$$

donde definimos los coeficientes

$$t_{i,j}^n = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \varepsilon_{n,\mathbf{k}}. \tag{15}$$

Por otro lado, la segunda integral simplemente la expresamos como

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega} d^3x_1 \int_{\Omega} d^3x_2 \Psi_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\sigma_2}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) V_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \\
&= \sum_{m,n,p,q} \sum_{i,j,k,l} U_{i,j,k,l}^{m,n,p,q} c_{m,i,\sigma_1}^{\dagger} c_{n,j,\sigma_2}^{\dagger} c_{p,k,\sigma_2} c_{q,l,\sigma_1}
\end{aligned} \tag{16}$$

donde los coeficientes son integrales que miden el *overlap* entre funciones:

$$U_{i,j,k,l}^{m,n,p,q} = \int_{\Omega} d^3x_1 \int_{\Omega} d^3x_2 \Phi_m^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) \Phi_n^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) V_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Phi_p(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_k) \Phi_q(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_l). \tag{17}$$

Finalmente, el Hamiltoniano de los electrones en segunda cuantización es

$$H = \sum_{\sigma} \sum_{n,i,j} t_{i,j}^n c_{n,i,\sigma}^{\dagger} c_{n,j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1,\sigma_2} \sum_{m,n,p,q} \sum_{i,j,k,l} U_{i,j,k,l}^{m,n,p,q} c_{m,i,\sigma_1}^{\dagger} c_{n,j,\sigma_2}^{\dagger} c_{p,k,\sigma_2} c_{q,l,\sigma_1}. \tag{18}$$

Hamiltoniano de Hubbard

Las funciones de Wannier son el análogo de los orbitales moleculares localizados en un sólido cristalino: están altamente localizadas alrededor de \mathbf{R}_i y rápidamente decaen a cero

a medida que nos alejamos de él. Entonces, una primera simplificación que podemos hacer al Hamiltoniano (18) es suponer que la interacción Coulombiana dentro de una celda es mucho mayor que la interacción entre celdas. Es decir, los coeficientes U cumplen

$$|U_{i,i,i}^{m,n,p,q}| \gg |U_{i,j,k,l}^{m,n,p,q}|. \quad (19)$$

Además, estamos suponiendo que son comparables en magnitud a los t_{ij}^n , de modo que no pueden ser despreciados en su totalidad. Entonces, escribimos

$$H \simeq \sum_{\sigma} \sum_{n,i,j} t_{i,j}^n c_{n,i,\sigma}^{\dagger} c_{n,j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_{m,n,p,q} \sum_i U_{i,i,i}^{m,n,p,q} c_{m,i,\sigma_1}^{\dagger} c_{n,i,\sigma_2}^{\dagger} c_{p,i,\sigma_2} c_{q,i,\sigma_1}. \quad (20)$$

Cuando la superficie de Fermi se encuentra dentro de una sólo banda de conducción, por ejemplo, supongamos en $n = 1$, se puede argumentar que está justificado “proyectar” el Hamiltoniano multi-banda (18) en un modelo efectivo de una sola banda. Supongamos que la interacción entre bandas es débil y, a la vez, todas las bandas excepto la banda de conducción $n = 1$ están lejos de la superficie de Fermi. Si sólo estamos interesados en energías cercanas a ese nivel, entonces podemos reemplazar (18) por un modelo con parámetros efectivos

$$t_{ij}^n \longrightarrow t_{ij} \quad (21)$$

y

$$U_{i,j,k,l}^{m,n,p,q} \longrightarrow U_{i,j,k,l}. \quad (22)$$

Juntando esta aproximación con la anterior, llegamos a

$$H \simeq \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{i,j} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_i U_{i,i,i} c_{i,\sigma_1}^{\dagger} c_{i,\sigma_2}^{\dagger} c_{i,\sigma_2} c_{i,\sigma_1}. \quad (23)$$

Ya que estamos considerando un modelo efectivo, podemos realizar una simplificación extra que consiste en reemplazar los coeficientes $U_{i,i,i}$ por un sólo U con la esperanza de seguir capturando algunas de las transiciones electrónicas al menos de forma cualitativa. Entonces, tenemos

$$H \simeq \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{i,j} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_i c_{i,\sigma_1}^{\dagger} c_{i,\sigma_2}^{\dagger} c_{i,\sigma_2} c_{i,\sigma_1}. \quad (24)$$

Podemos reescribir el segundo sumando introduciendo los operadores número $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}$ de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} c_{i,\sigma_1}^{\dagger} c_{i,\sigma_2}^{\dagger} c_{i,\sigma_2} c_{i,\sigma_1} &= \sum_{\sigma_2} c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\sigma_2}^{\dagger} c_{i,\sigma_2} c_{i,\uparrow} + \sum_{\sigma_2} c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\sigma_2}^{\dagger} c_{i,\sigma_2} c_{i,\downarrow} \\ &= c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow} c_{i,\uparrow} + c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow} c_{i,\uparrow} \\ &+ c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow} c_{i,\downarrow} + c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow} c_{i,\downarrow} \\ &= c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow} - c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow} c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow} \\ &+ c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow} - c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow} c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow} \\ &+ c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow} c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow} + c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow} c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow} \\ &= n_{i,\uparrow} - n_{i,\uparrow}^2 + n_{i,\downarrow} - n_{i,\downarrow}^2 \\ &+ n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + n_{i,\downarrow} n_{i,\uparrow}. \end{aligned} \quad (25)$$

Como estamos trabajando con fermiones, el operador número sobre un autoestado sólo puede devolver como autovalor el 0 o el 1. Por lo tanto, los términos $n_{i,\uparrow} - n_{i,\uparrow}^2$ y $n_{i,\downarrow} - n_{i,\downarrow}^2$ se anulan. Además, $[n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow}] = 0$. Entonces,

$$\sum_{\sigma_1, \sigma_2} c_{i,\sigma_1}^\dagger c_{i,\sigma_2}^\dagger c_{i,\sigma_2} c_{i,\sigma_1} = 2 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (26)$$

Luego,

$$H \simeq \sum_{\sigma} \sum_{i,j} t_{i,j} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (27)$$

La última aproximación que vamos a hacer para llegar al Hamiltoniano de Hubbard es la de *tight banding*. El primer sumando del Hamiltoniano representa los saltos que hacen los electrones entre las distintas celdas unidad: desaparece un electrón en la celda j y aparece uno en la celda i con probabilidad (proporcional a) $t_{i,j}$. Vamos a asumir que lo más probable es que los electrones salten entre celdas vecinas y, además, que la probabilidad es igual para todos ellos. Entonces, reemplazamos los coeficientes $t_{i,j} \rightarrow -t$ y sumamos sólo sobre los pares ordenados de primeros vecinos para llegar al Hamiltoniano final

$$\boxed{H_{hub} = -t \sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}}. \quad (28)$$

Caso $U = 0$

Consideremos el caso de electrones no interactuantes. Es decir, fijamos $U = 0$. El Hamiltoniano se reduce a

$$H_{hub} = -t \sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}. \quad (29)$$

Para diagonalizarlo vamos a utilizar los operadores de creación y destrucción en la base de Bloch (9). Reemplazando en (29), obtenemos

$$H_{hub} = -t \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\frac{1}{L} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j} \right] c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma}. \quad (30)$$

Analicemos el término

$$\frac{1}{L} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j}. \quad (31)$$

Consideremos los vectores primitivos $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ que generan la *lattice* de iones. Entonces, para pasar de la celda unidad i a la celda unidad j (que está en correspondencia uno a uno con los iones), sólo basta movernos una cantidad entera de veces en las direcciones \mathbf{a}_k . Es decir,

$$\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j = l \mathbf{a}_1 + m \mathbf{a}_2 + n \mathbf{a}_3 \quad l, m, n \in \mathbb{Z}. \quad (32)$$

En particular, si estoy considerando sólo primeros vecinos, entonces $l, m, n \in \{-1, 0, 1\}$. Por ejemplo, si fijamos i y sumamos j sólo sobre sus primeros vecinos, entonces, suponiendo condiciones de contorno periódicas,

$$\begin{aligned} \sum_{\langle j \rangle} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} &= e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_i} \left(e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_1} \right) + e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_i} \left(e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_2} \right) + e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_i} \left(e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_3} + e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_3} \right) \\ &= 2 e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_i} [\cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_3)] \end{aligned} \quad (33)$$

Volviendo a la suma que nos interesaba, tenemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \sum_{\langle i, j \rangle} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} &= \frac{1}{L} \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \sum_{\langle j \rangle} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} \\ &= 2 [\cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_3)] \left[\frac{1}{L} \sum_i e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} \right] \\ &= 2 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_3)]. \end{aligned} \quad (34)$$

Insertando este resultado en (30), llegamos al Hamiltoniano diagonalizado

$$\boxed{H_{hub} = -2t \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3)] n_{\mathbf{k}, \sigma}}. \quad (35)$$

donde $n_{\mathbf{k}, \sigma} = c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma}$ es el operador número.

Como el Hamiltoniano diagonalizado (35) es una combinación lineal de operadores número $n_{\mathbf{k}, \sigma}$, los autovalores y autovectores son sencillos de encontrar. Un autovector arbitrario $|\psi\rangle$ queda especificado dando los números de ocupación ($n_{\mathbf{k}, \sigma} = 0$ o $n_{\mathbf{k}, \sigma} = 1$) para cada uno de los estados (de Bloch) de una partícula $\phi_{\mathbf{k}, \sigma}$. A su vez, el autovalor asociado está dado por

$$E_{\psi} = -2t \sum_{\mathbf{k}, \sigma \in \psi} [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3)] \quad (36)$$

donde las sumas ahora son sobre los índices en los que $n_{\mathbf{k}, \sigma} = 1$ en $|\psi\rangle$. Supongamos que tenemos un número fijo de electrones N_e . En ese caso, los números de ocupación $n_{\mathbf{k}, \sigma}$ de un estado $|\psi\rangle$ satisfacen

$$\sum_{\sigma \in \psi} \sum_{\mathbf{k} \in \psi} n_{\mathbf{k}, \sigma} = N_e. \quad (37)$$

El estado fundamental de este sistema se obtiene llenando los N_e estados $\phi_{\mathbf{k}, \sigma}$ de menor energía. Cada estado con \mathbf{k} fijo puede ser ocupado por dos electrones: uno con $\sigma = \uparrow$ y el otro con $\sigma = \downarrow$. Como la energía (36) tiene un mínimo en $\mathbf{k} = 0$ y crece monótonicamente a medida que $|\mathbf{k}|$ se mueve lejos del cero en la primera zona de Brioullin, los estados que se van a ocupar son los primeros $N_e/2$ estados más cercanos a $\mathbf{k} = 0$. Entonces, si $\mu = \mu(N_e)$ es el potencial químico y $E(\mathbf{k}) = \mu$ es la ecuación que define la superficie de Fermi (pues estamos en el caso no interactuante), consideremos el conjunto Λ tal que $\partial\Lambda = \{\mathbf{k} | E(\mathbf{k}) = \mu\}$, que son los \mathbf{k} 's encerrados por la superficie (los más cercanos a $\mathbf{k} = 0$). En ese caso, el estado fundamental es

$$|\psi_0\rangle = \prod_{\mathbf{k} \in \Lambda} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} |0\rangle \quad (38)$$

con energía

$$E_0 = -4t \sum_{\mathbf{k} \in \Lambda} [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3)], \quad (39)$$

en donde se ha añadido un factor 2 proveniente de la suma sobre el espín.

Para una red cúbica los vectores primitivos están dados por,

$$\mathbf{a}_1 = a \hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{a}_2 = a \hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{a}_3 = a \hat{\mathbf{z}}, \quad (40)$$

y la energía del estado fundamental resulta ser,

$$E_0 = -4t \sum_{\mathbf{k} \in \Lambda} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]. \quad (41)$$

con,

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{aL^{\frac{1}{3}}}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{aL^{\frac{1}{3}}}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{aL^{\frac{1}{3}}}, \quad (42)$$

pues estamos considerando condiciones de contorno periódicas en una red cúbica con L sitios.

En el límite continuo tomamos $a \rightarrow 0$, preservando el volumen macroscópico del cristal $V = (aL^{\frac{1}{3}})^3$. Es decir, hacemos tender a cero el volumen de cada celda unidad ($a \rightarrow 0$), al mismo tiempo que hacemos tender a infinito la cantidad de celdas del cristal ($L \rightarrow \infty$) que consideramos. En términos coloquiales, es como si estuviéramos mirando muy cerca el cristal con un zoom enorme de modo que podemos ver en detalle cada celda, y de repente disminuimos el aumento de nuestra lente, nos alejamos del cristal, y entonces el tamaño de la celdas se hace muy pequeño, y el número de celdas que observamos es muy grande de manera que ya no distinguimos unas de otras. Pero el tamaño del cristal sigue siendo el mismo. Estamos en el límite continuo.

Como en este límite las longitudes macroscópicas se conservan, también se conserva el número de vectores de onda permitidos por unidad de volumen. Por lo tanto, al considerar el límite continuo en un sistema de dimensión d reemplazaremos,

$$\frac{1}{a^d L} \sum_{\mathbf{k} \in \Lambda} \rightarrow \int_{\Lambda} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}. \quad (43)$$

De esta manera, para el caso bidimensional la energía por unidad de superficie del estado fundamental resulta ser,

$$\varepsilon_0 = \frac{E_0}{a^2 L} = -\frac{t}{\pi^2} \int_{\Lambda} dk_x dk_y [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)], \quad (44)$$

y para el caso unidimensional, la energía por unidad de longitud es,

$$\varepsilon_0 = \frac{E_0}{aL} = -\frac{2t}{\pi} \int_{\Lambda} dk_x \cos(k_x a) = -\frac{2t}{\pi a} \sin(k_x a) \Big|_{-k_F}^{k_F} = -\frac{4t}{\pi a} \sin(k_F a), \quad (45)$$

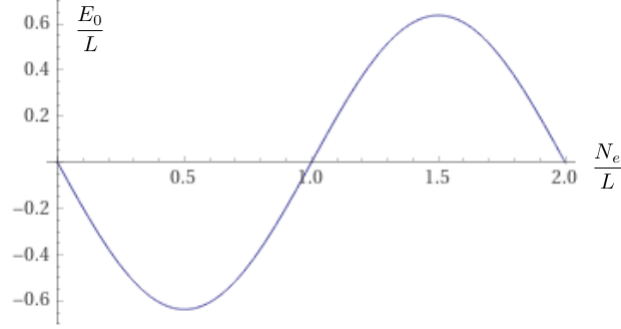
con

$$k_F = \frac{2\pi N_e}{aL} = N_e \frac{\pi}{aL}. \quad (46)$$

Esto es, para el caso unidimensional la energía del estado fundamental por cada sitio de la red está dada por,

$$\boxed{\frac{E_0}{L} = -\frac{4t}{\pi} \sin\left(\frac{N_e}{L}\pi\right)}. \quad (47)$$

Si tomamos $t = 0.5$, obtenemos el siguiente gráfico,



Término de interacción en la base de Bloch

Escribamos ahora el término de interacción del modelo de Hubbard

$$U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (48)$$

en la base de Bloch.

Tenemos,

$$\begin{aligned} n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} &= \left[\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \right] \left[\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma} \right] = \\ &= \left[\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \right] c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma}, \end{aligned}$$

de modo que,

$$\begin{aligned} \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} &= \sum_i \left[\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \right] c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} \left[\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'''} e^{i(\mathbf{k}''-\mathbf{k}''')\cdot\mathbf{R}_i} \right] c_{\mathbf{k}''\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'''\downarrow} = \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} \left[\frac{1}{L^2} \sum_i e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{k}''-\mathbf{k}-\mathbf{k}''')\cdot\mathbf{R}_i} \right] c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} c_{\mathbf{k}''\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'''\downarrow} = \\ &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} \delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}''', \mathbf{k}+\mathbf{k}''} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} c_{\mathbf{k}''\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'''\downarrow} = \end{aligned}$$

Hago un cambio de variables,

$$\begin{cases} \mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, & \mathbf{k}'' = \mathbf{k}_2 - \mathbf{q} \\ \mathbf{k}' = \mathbf{k}_1, & \mathbf{k}''' = \mathbf{k}_2 \end{cases},$$

entonces,

$$\begin{aligned} \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\uparrow} c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\downarrow} = \\ &= -\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\uparrow} c_{\mathbf{k}_2\downarrow} = \end{aligned}$$

Esto es,

$$\boxed{U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} = -\frac{U}{L} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\uparrow} c_{\mathbf{k}_2\downarrow}}, \quad (49)$$

que al igual que cuando estudiamos el modelo de Jellium expresa la conservación del momento, en este caso, el momento cristalino, entre dos electrones que interactúan via Coulomb.