

# ÍNDICE GENERAL

<b>1. Segunda Cuantización</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	1
1.2. Mecánica cuántica de un sistema de $N$ partículas. . . . .	2
1.3. Representación en el número de ocupación . . . . .	5
1.3.1. Elementos de matriz . . . . .	7
1.3.2. Operadores bosónicos . . . . .	9
1.3.3. Cambio de base . . . . .	10
1.3.4. Operadores de campo . . . . .	11
1.3.5. Cuantización de Dirac . . . . .	12
1.3.6. Expansión en ondas planas . . . . .	13
1.4. El gas de electrones. . . . .	14
1.4.1. Estados excitados del gas de Fermi . . . . .	16
1.5. Ecuación de movimiento . . . . .	23



# Segunda Cuantización

## 1.1. Introducción

La importancia de la mecánica cuántica en términos del formalismo de segunda cuantización radica en tener un número variable de partículas y a la vez los cálculos contienen automáticamente los aspectos combinatorios que surgen de la estadística particular que obedecen la estadística de las partículas, según sean estas bosones o fermiones. Podemos resumir que la segunda cuantización se ocupa o contiene:

- La estadística correcta de las partículas
- Sistema de partículas cuyo número es variable
- Cuasipartículas (métodos de aproximación)
- Utiliza los métodos de la teoría de campos
- intervienen muchos cuerpos.

Los métodos de la teoría cuántica de campos han jugado un papel muy importante en el estudio de problemas no relativistas en los cuales intervienen muchos cuerpos, tales como sistemas de estado sólido, óptica cuántica, etc. Estos métodos utilizan técnicas basadas en funciones de Green o propagadores . los cuales están basados en la formulación de la mecánica cuántica en términos de segunda cuantización.

Desde el punto de vista histórico el termino primera cuantización se refiere a las descripción cuántica del movimiento de partículas en campos electromagnéticos clásicos, lo que conocemos como mecánica cuántica y que fue desarrollada por Heisenberg, Schrödinger y Dirac. Posteriormente el campo electromagnético fue cuantizado por Dirac en 1927, y este método fue ampliado por Jordan y Klein para un sistema de bosones interactuante entre 1927-1928. En 1928 Jordan y Wigner desarrollaron el formalismos de segunda cuantización para el estudio de sistemas fermionicos, donde las partículas fueron descritas también por campos cuantizados.

Algunos años mas tarde, en 1932 Fock mostró la equivalencia de la formulación de la mecánica cuántica en términos de la segunda cuantización con la mecánica ondulatoria de un sistema de muchas partículas generalizándola a sistemas en los cuales el número de partículas puede variar. Esto lo realizó introduciendo lo que llamamos hoy en día el espacio de Fock o "graded Hilbert

space". El trabajo de Fock estuvo basado en trabajos previos de Landau, Peirls, Oppenheimer, Heisenberg y Pauli quienes consideraron problemas acerca de la interacción del campo electromagnético con la materia. Estos trabajos dan como resultando el desarrollo de la electrodinámica cuántica. Así la forma original de la mecánica cuántica se denomina primera cuantización, mientras la teoría de campos cuantizados se denomina segunda cuantización.

## 1.2. Mecánica cuántica de un sistema de $N$ partículas.

Consideremos un sistema de  $N$  electrones interactuantes moviéndose bajo la acción de un potencial  $V(\mathbf{r})$  y de un campo magnético descrito por un potencial vectorial  $A(\mathbf{r})$ . El hamiltoniano del sistema puede escribirse como

$$H_e = H_0 + H_{e-e}, \quad (1.1)$$

con  $H_0$  es el hamiltoniano de los electrones independientes

$$H_e = \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r}_i), \quad (1.2a)$$

y  $H_{e-e}$  es la energía potencial debido a la interacción entre las partículas, por ejemplo la interacción electrostática de Coulomb

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum'_{i,j=1}^N V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j),$$

donde  $h(\mathbf{r}_i)$  es el hamiltoniano asociado a una partícula dado por

$$h(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla_i - e\mathbf{A}(\mathbf{r}_i))^2 + V(\mathbf{r}_i), \quad (1.3)$$

.

La ecuación de Schrödinger del sistema es

$$H\psi = E\psi. \quad (1.4)$$

Donde  $\psi$  es una función de las coordenadas, posición y espín de todos los electrones. Los valores propios  $E$  son los niveles de energía del sistema. El estado de mínima energía se le denomina estado base y los demás estados son denominados estados excitados.

Consideremos inicialmente que no hay interacción entre los electrones, en este caso se puede resolver de una manera simple, con lo que obtenemos

$$H_0\psi = E\psi. \quad (1.5)$$

La función de onda la podemos escribir como

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \varphi_{k_1}(x_1) \varphi_{k_2}(x_2) \dots \varphi_{k_N}(x_N), \quad x \equiv \{\mathbf{r}, \sigma\}. \quad (1.6)$$

Insertando está función en la ecuación de Schrödinger obtenemos

$$h(\mathbf{r}_i)\varphi_{k_i}(x_i) = E_i\varphi_{k_i}(x_i), \quad (1.7)$$

con

$$E = \sum_{i=1}^N E_i. \quad (1.8)$$

Donde las funciones  $\varphi_{k_i}(x_i)$  forman un conjunto ortonormal y completo de funciones

$$\int \varphi_k^*(x)\varphi_{k'}(x)dx = \delta_{k,k'}, \quad \sum_k \varphi_k^*(x')\varphi_k(x) = \delta(x - x').$$

Debido que las partículas son indistinguibles el hamiltoniano  $H$  ó  $H_0$  es invariante bajo el intercambio de dos partículas o equivalentemente bajo el cambio de 2 coordenadas, por ejemplo  $i \rightarrow j, j \rightarrow i$ . Esto conlleva a que las propiedades físicas del sistema (espectro de energía, valores esperados, etc.) sean invariantes bajo estas permutaciones. La función de onda definida en (1.6) distingue entre las partículas (el electrón 1 en el estado 1, el 2 en el estado 2, etc.), una función de onda de un sistema de partículas indistinguibles debe ser tal que al intercambiar dos partículas de sus estados o posiciones las propiedades físicas del sistema no cambien, a esta función de onda la vamos a llamar  $\Phi$ .

Definamos el operador  $\hat{P}_{ij}$  tal que intercambia dos partículas, bajo la acción de este operador  $\Phi$  debe cumplir

$$\hat{P}_{i,j}\Phi(\dots x_i, x_j) = c\Phi(\dots x_j, x_i), \quad c = \text{cte}, \quad (1.9)$$

si volvemos a aplicar  $\hat{P}_{ij}$  se encuentra que

$$\hat{P}_{i,j}^2\Phi(\dots x_i, x_j) = c^2\Phi(\dots x_i, x_j).$$

Como debemos obtener la misma función de onda se debe cumplir que

$$\hat{P}_{i,j}^2\Phi(\dots x_i, x_j) = c^2\Phi(\dots x_i, x_j) = \Phi(\dots x_i, x_j).$$

Por lo tanto  $c^2 = 1$ . Cuando  $c = +1$  vamos a hablar de funciones simétricas y cuando  $c = -1$  de funciones antisimétricas. El operador  $\hat{P}_{i,j}$  es un operador unitario que cumple

$$\hat{P}_{i,j}^2 = 1, \quad \hat{P}_{i,j} = \hat{P}_{i,j}^{-1} = \hat{P}_{i,j}^+. \quad (1.10)$$

Lo anterior también conlleva a que los valores esperados no dependan del rótulo de las partículas

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle &= \langle \phi | \hat{P}_{i,j}^{-1} \hat{A} \hat{P}_{i,j} | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \hat{P}_{i,j} \hat{A} \hat{P}_{i,j} | \phi \rangle \\ &= c^2 \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle \\ &= \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Por ahora nos vamos a concentrar en los estados antisimétricos, a estos estados los podremos escribir como una proyección sobre el espacio de las funciones antisimétricas como

$$\Phi \equiv \sqrt{N!} \hat{S}_- \psi,$$

con  $\hat{S}_-$  el operador antisimetrización dado por

$$\hat{S}_- \equiv \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_p \hat{P}_p, \quad (1.12)$$

$\hat{P}$  es el operador permutación que se construye con cualquier combinación diferente entre las  $\hat{P}_{ij}$  y  $\epsilon_p$  es +1 cuando el número de permutaciones  $\hat{P}_{ij}$  es par y -1 cuando el número de permutaciones es impar. El efecto del operador  $\hat{S}_-$  es realizar todas las permutaciones posibles en las coordenadas de las partículas de tal manera que al final cada partícula la hemos "paseado" por todas las coordenadas. El factor  $1/N!$  es para normalizar y equivale a todas las permutaciones de las  $N$  partículas. El efecto final del operador  $\hat{S}_-$  es proyectar las funciones de  $\psi$  a funciones de onda antisimétricas, en donde se puede demostrar que

$$\hat{S}_-^2 = \hat{S}_-. \quad (1.13)$$

De tal manera que  $\hat{S}_-$  es efectivamente un operador proyección. De esta propiedad se puede mostrar que si  $\hat{A}$  es el operador de un sistema de partículas idénticas se cumple que

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle &= \sqrt{N!} \sum_p \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{A} \sum_p \epsilon_p \hat{P}_p | \psi \rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

Este es un resultado importante que nos permite calcular el valor esperado de  $\hat{A}$  con una función antisimetrizada y otra sin simetrizar, por ejemplo el lector puede mostrar de aquí que las funciones  $|\phi\rangle$  son ortogonales.

Para funciones de onda antisimétricas es usual escribir  $\Phi$  como un determinante de Slater

$$\Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{k_1}(x_1) & \varphi_{k_1}(x_2) & \cdots & \varphi_{k_1}(x_N) \\ \varphi_{k_2}(x_1) & \varphi_{k_2}(x_2) & \vdots & \varphi_{k_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{k_N}(x_1) & \varphi_{k_N}(x_2) & \cdots & \varphi_{k_N}(x_N) \end{vmatrix}. \quad (1.15)$$

Esta construcción se basa en tomar una partícula con coordenada  $x_i$  y llevarla a todos los estados ocupados del sistema o equivalentemente tomar el estado  $k_j$  y colocar allí cualquier partícula. Es obvio que al intercambiar dos partículas, intercambiamos dos columnas del determinante y obtenemos un cambio de signo en la función  $\Phi$ , aquí vemos que intercambiar partículas equivale a intercambiar estados,  $\Phi_{k_i, k_j}(x_i, x_j) = -\Phi_{k_j, k_i}(x_i, x_j)$ .

Una importante consecuencia de que la función de onda sea antisimétrica es que los electrones cumplen el principio de exclusión de Pauli en donde dos partículas (fermiones) no pueden ocupar el mismo estado cuántico. Para ello supongamos que tenemos dos partículas en el mismo estado, por ejemplo  $k_j = k_i$ , esto conlleva a que dos filas del determinante sean iguales, y por lo tanto

$$\Phi_{k_i, k_j=k_i}(x_i, x_j) = 0. \quad (1.16)$$

Este principio también lo podemos demostrar a partir de permutar dos partículas con los mismos números cuánticos en la ecuación (1.9) obteniendo

$$\hat{P}_{i,j} \Phi_{k_i, k_j=k_i}(x_i, x_j) = c \Phi_{k_j=k_i, k_i}(x_i, x_j), \quad (1.17)$$

pero dado que las dos partículas están en el mismo estado cuando intercambiamos las partículas el estado sigue siendo el mismo, por lo tanto

$$\begin{aligned} c \Phi_{k_j=k_i, k_i}(x_i, x_j) &= \Phi_{k_i, k_j=k_i}(x_i, x_j), \\ \Phi_{k_i, k_i}(x_i, x_j) (c - 1) &= 0. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Cuando  $c = -1$ ,  $\Phi_{k_i, k_i}(x_i, x_j) = 0$ , y cuando  $c = 1$  no tenemos prohibición en la ocupación, lo que conlleva a que los bosones tengan funciones de onda simétricas. Estas funciones se pueden construir de manera similar con un operador de simetrización  $\hat{S}_+$  y se deja al lector su construcción, en resumen tenemos

$$c = \begin{cases} +1, \text{partículas simétricas, bosones} \\ -1, \text{partículas antisimétricas, fermiones.} \end{cases}$$

Debido a que las  $\Phi$  forman un conjunto ortonormal y completo podemos escribir la función de onda del sistema interactuante como una combinación de las  $\Phi$

$$\tilde{\Psi}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{k_1, k_2, \dots, k_N} c(k_1, k_2, \dots, k_N) \Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N}(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

Hemos considerado un ordenamiento estándar  $k_1 < k_2 < \dots < k_N$ . Los estados  $k$  que aparecen en el determinante son los que están ocupados. Trabajar con funciones de onda de este tipo es bastante dispendioso y debemos buscar una representación más simple.

### 1.3. Representación en el número de ocupación

Es claro que la información contenida en el determinante se puede obtener sencillamente haciendo una lista de los estados ocupados y diciendo cuantas partículas ocupan ese estado. En el caso de fermiones este número de ocupación es 0 ó 1. Al estado  $\Phi$  lo representamos por

$$\Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow |n_{k_1}, n_{k_2}, \dots, n_{k_i}, \dots\rangle \equiv |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$$

en donde  $n_i = \{0, 1\}$ . A esta representación la denominamos número de ocupación.

Como las  $\Phi$  forman un conjunto ortonormal y completo tenemos que

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \mid n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots \delta_{n_i, n'_i} \dots, \quad (1.19)$$

$$\sum_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots| = 1, \quad (1.20)$$

es usual denotar estas relaciones como

$$\begin{aligned} \langle \{n_i\} \mid \{n'_i\} \rangle &= \delta_{\{n_i\}, \{n'_i\}}, \\ \sum_{\{n_i\}} |\{n_i\}\rangle \langle \{n_i\}| &= 1. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Analícemos, que implicaciones tiene la relación de completez de estos estado. Para ello consideremos el espacio de Hilbert de una partícula  $H^1$ , una base para este espacio es

$$|1, 0, 0, \dots\rangle; |0, 1, 0, \dots\rangle; |0, 0, 1, 0, \dots\rangle; \dots; |0, \dots, 1, 0, \dots\rangle; \dots \quad (1.22)$$

Si el espacio de Hilbert es de dos partículas  $H^2$  una base es

$$|1, 1, 0, \dots\rangle; |1, 0, 1, \dots\rangle; \dots; |1, 0, \dots, 1, \dots\rangle; \dots; |0, \dots, 1, 0, \dots, 1, 0, \dots\rangle; \dots \quad (1.23)$$

y así sucesivamente. El espacio que podemos conformar como la suma directa de todos estos espacios de Hilbert se denomina espacio de Fock y es definido como la suma directa de todos los espacios de Hilbert con número diferente de partículas

$$\mathcal{H}^F = H^0 \oplus H^1 \oplus \dots \oplus H^N \oplus H^{N+1} \oplus \dots$$

En este espacio el número de partículas puede variar al cambiar de un espacio de Hilbert a otro y nos permite trabajar tanto en sistemas cuyo número de partículas es constante como en sistemas en que no, ahora nos preguntaremos cómo es la relación de completez en este espacio y cómo podemos definir operadores que nos lleven de un espacio de Hilbert a otro con diferentes número de partículas. Para ello definimos los operadores de creación y destrucción como

$$\hat{c}_p |\dots, n_p, \dots\rangle = (-1)^{N_p} n_p |\dots, n_p - 1, \dots\rangle \quad (1.24)$$

$$\hat{c}_p^\dagger |\dots, n_p, \dots\rangle = (-1)^{N_p} (1 - n_p) |\dots, n_p + 1, \dots\rangle, \quad (1.25)$$

Donde  $N_p$  es el número de estados ocupados antes del estado  $p$ ,

$$N_p = \sum_{k < p} n_k$$

El operador  $\hat{c}_p$  se denomina de destrucción y su efecto es disminuir en 1 el número de partículas en el estado  $p$ , mientras que  $\hat{c}_p^\dagger$  aumenta en 1 el número de partículas del estado  $p$ . Es claro que se cumple lo siguiente



$$\hat{c}_p |0_p\rangle = 0, \quad \hat{c}_p^\dagger |1_p\rangle = 0$$

En el primer caso no podemos quitar partículas de un estado vacío, en el segundo caso, vmo que se cumple el principio de exclusión de Pauli, no podemos colocar más de una partícula en el mismo estado. Ahora examinemos cuál es el efecto del producto  $c_p^\dagger c_p$ , de la definiciones tenemos que

$$\begin{aligned} c_p^\dagger c_p |\dots, n_p, \dots\rangle &= (-1)^{2N_p} n_p^2 |\dots, n_p, \dots\rangle \\ &= n_p |\dots, n_p, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Por lo tanto el operador  $\hat{n}_p = \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p$  lo denominamos el operador número del estado  $p$  y el operador

$$\hat{N} = \sum_p \hat{n}_p, \quad (1.27)$$

el operador número (total), debido que al operar sobre un estado nos da el número total de estados ocupados. Las relaciones de anticonmutación también se pueden obtener directamente de como los operadores actúan sobre un estado general, ecuaciones (1.24, 1.25). Se puede demostrar que los operadores de creación y destrucción cumplen las siguientes propiedades de anticonmutación.

$$\left[ c_p^\dagger, c_q \right]_+ = c_p^\dagger c_q + c_q c_p^\dagger = \delta_{p,q} \quad (1.28)$$

$$\left[ c_p^\dagger, c_q^\dagger \right]_+ = [c_p, c_q]_+ = 0 \quad (1.29)$$

### 1.3.1. Elementos de matriz

Deseamos expresar el hamiltoniano 1.1 en la representación de número de ocupación para ello usamos las relaciones de completeness  $\sum_{\{n_i\}} |\{n_i\}\rangle \langle \{n_i\}| = 1$

$$H_e = \hat{1} H_0 \hat{1} + \hat{1} H_{ee} \hat{1}, \quad (1.30)$$

y obtenemos que (ver anexo)

$$H_0 = \sum_{i=1}^N h(\mathbf{r}_i) = \sum_{k,k'} \langle k|h|k'\rangle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'}. \quad (1.31)$$

Este resultado nos muestra que un sistema de  $N$  partículas no interactuantes puede escribirse como la suma sobre los procesos de dispersión que sufre una partícula de cualquier estado  $k$  a cualquier estado  $k'$ . Por lo tanto la suma sobre el número de partículas la hemos reemplazado por una suma sobre los estados de una partícula.

Ahora el operador  $H_0$  no necesariamente debe ser un hamiltoniano, por lo tanto el último resultado lo podemos generalizar a cualquier operador de partículas idénticas que actúan sobre una partícula como

$$\sum_{i=1}^N A(\mathbf{r}_i) = \sum_{k,k'} \langle k|A|k'\rangle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'}. \quad (1.32)$$

por ejemplo, en primera cuantización,

$$N = \sum_{i=1}^N 1 \quad (1.33)$$

de tal manera que el operador  $A$  es la unidad. Con la ec. (1.32) obtenemos que

$$\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k \quad (1.34)$$

que coincide con nuestro resultado anterior para el operador número. Nótese que la suma incluye todos los estados, y la información de si están ocupados o no nos los da el operador  $\hat{n}_k$ , de tal manera que si aplicamos este operador sobre un estado tenemos que

$$\hat{N}|n_1 \dots, n_p, \dots\rangle = N|n_1 \dots, n_p, \dots\rangle \quad (1.35)$$

y por lo tanto su valor propio es el número de partículas. Si tenemos un sistema de electrones independientes, cuya base diagonaliza el hamintoniano  $h$ ,

$$h|k\rangle = \varepsilon_k|k\rangle, \quad (1.36)$$

obtenemos que el hamiltoniano en segunda cuantización es

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k = \sum_k \varepsilon_k \hat{n}_k. \quad (1.37)$$

Como es de esperarse,  $H_0$  es diagonal en esta representación, y se escribe como la suma de la energía de cada estado multiplicada por el operador número en ese estado, de tal manera que al sumar sobre todos los estados obtenemos la energía del sisema, para ver esto apliquemos  $H_0$  sobre un estado cualquiera

$$H_0|n_1 \dots, n_p, \dots\rangle = E|n_1 \dots, n_p, \dots\rangle \quad (1.38)$$

con

$$E = \sum_k \varepsilon_k n_k. \quad (1.39)$$

De forma similar se puede mostrar que para operadores que actúan sobre dos partículas en segunda cuantización se obtiene que

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{2} \sum_{k,k',l,l'} \langle k, k' | V | l, l' \rangle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'}^\dagger \hat{c}_{l'} \hat{c}_l, \quad (1.40)$$

con

$$\langle k, k' | V | l, l' \rangle = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_k^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{k'}^*(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_l(\mathbf{r}_1) \varphi_{l'}(\mathbf{r}_2). \quad (1.41)$$

Nótese el ordenamiento de los operadores y del elemento matricial. Este último resultado lo podemos interpretar como sigue: *los términos de interacción que se obtienen al sumar sobre todas las partículas del sistema es equivalente a sumar los procesos de dispersión de dos partículas en los estados  $l, l'$  a los estados  $k, k'$ , lo cual se logra al destruir una partícula en el estado  $l$  y otra en el estado  $l'$  y crear una partícula en el estado  $k'$  y otra en el estado  $k$ .*

### 1.3.2. Operadores bosónicos

Consideremos el caso de un sistema de bosones no interactuantes, la diferencia con el caso fermiónico es que varias partículas pueden estar en el mismo estado de tal manera que  $n_i$  no está acotado  $n_i = [0, \infty)$ ,  $n \in N$ . La función de onda simétrica se puede construir como

$$\Phi_{\{k\}}(\{x\}) = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!...}} \sum_p P_p \varphi_{k_1}(x_1) \dots \varphi_{k_1}(x_{n_1}) \varphi_{k_2}(x_{n_1+1}) \dots \varphi_{k_N}(x_N), \quad (1.42)$$

donde la suma corre sobre todas las permutaciones de los índices  $k_1, k_2, \dots$ , y  $n_1$  factores tiene los índices  $k_1, n_2$  factores los índices  $k_2$ , etc, de tal manera que

$$\sum_i 1 = \sum_{k_i} n_{k_i} = N.$$

Como en el caso anterior la información en  $\Phi$  es representada por el número de ocupación

$$\Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N}(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow |n_{k_1}, n_{k_2}, \dots, n_{k_i}, \dots\rangle \equiv |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle, \quad (1.43)$$

donde

$$\langle \{n_i\} | \{n_i\} \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots \delta_{n_i, n'_i} \dots, \quad (1.44)$$

$$\sum_{\{n_i\}} |\{n_i\}\rangle \langle \{n_i\}| = \hat{1}, \quad (1.45)$$

Los operadores de creación y destrucción están definidos como

$$\hat{a}_p = \sum_{\{n_j\}} \sqrt{(n_i)_p} |n_1, n_2, \dots, (n_i - 1)_p, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots, (n_i)_p, \dots|, \quad (1.46)$$

$$\hat{a}_p^\dagger = \sum_{\{n_j\}} \sqrt{(n_i)_p} |n_1, n_2, \dots, (n_i)_p, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots, (n_i - 1)_p, \dots|. \quad (1.47)$$

Se ve claramente que

$$\hat{a}_p |n_1, n_2, \dots, n_p, \dots\rangle = \sqrt{n_p} |n_1, n_2, \dots, n_p - 1, \dots\rangle, \quad (1.48)$$

$$\hat{a}_p^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_p, \dots\rangle = \sqrt{n_p + 1} |n_1, n_2, \dots, n_p + 1, \dots\rangle, \quad (1.49)$$

de estas relaciones se puede mostrar fácilmente que

$$[\hat{a}_p, \hat{a}_q]_- = 0, \quad [\hat{a}_p^\dagger, \hat{a}_q^\dagger]_- = 0, \quad [\hat{a}_p, \hat{a}_q^\dagger]_- = \delta_{p,q}. \quad (1.50)$$

Se puede ver fácilmente que un estado  $|n_1, n_2, \dots, n_p, \dots\rangle$  se puede escribir como

$$|n_1, n_2, \dots, n_p, \dots\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_p^\dagger)^{n_p} \quad (1.51)$$

$$\frac{|0, 0, 0, \dots\rangle}{\sqrt{n_1! \dots n_p!}}. \quad (1.52)$$

La representación para operadores de una y dos partículas es igual a la encontrada en las ecuaciones 1.31 y 1.40 si reemplazamos los operadores  $\hat{c}$  por operadores  $\hat{a}$ .

### 1.3.3. Cambio de base

Consideremos que cambiamos la base formada por el conjunto de las  $\{k_i\}$  por la base  $\{\alpha_i\}$ , esto conlleva a que los estados se pueden representar en la nueva base como

$$|\Phi\rangle = \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \{\alpha_i\} | \{k_i\} \rangle |\{\alpha_i\}\rangle \quad (1.53)$$

Al partir de esto es posible demostrar que los operadores de creación y destrucción en la nueva base están dados por

$$\hat{c}_{\alpha_i} = \sum_{k_i} \langle \alpha_i | k_i \rangle \hat{a}_{k_i}, \quad \hat{c}_{\alpha_i}^\dagger = \sum_{k_i} \langle k_i | \alpha_i \rangle \hat{a}_{k_i}^\dagger \quad (1.54)$$

es posible demostrar que si

$$\begin{aligned} [\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}]_{\pm} &= 0, & [\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_{k'}^\dagger]_{\pm} &= 0, & [\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}^\dagger]_{\pm} &= \delta_{k,k'} \\ \Downarrow \\ [\hat{c}_a, \hat{c}_{a'}]_{\pm} &= 0, & [\hat{c}_a^\dagger, \hat{c}_{a'}^\dagger]_{\pm} &= 0, & [\hat{c}_a, \hat{c}_{a'}^\dagger]_{\pm} &= \delta_{a,a'}. \end{aligned} \quad (1.55)$$

### 1.3.4. Operadores de campo

Consideremos que la base  $\alpha$  es la base de posición  $\{\mathbf{r}\}$ , en este caso los operadores  $\hat{c}_{\mathbf{r}}$  se denominan operadores de de campo y se notan como

$$\hat{c}_{\mathbf{r}} \equiv \hat{\psi}(\mathbf{r})$$

de tal manera que las relaciones 1.54 se escriben como

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_k \varphi_k(\mathbf{r}) \hat{c}_k, \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_k \varphi_k^*(\mathbf{r}) \hat{c}_k^\dagger \quad (1.56)$$

y cumplen

$$\left[ \hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \right]_+ = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.57)$$

El operador  $\hat{\psi}(\mathbf{r})$  destruye una partícula en la posición  $\mathbf{r}$  sin importar su energía o momentum, esto se logra sumando sobre todos los estados cuánticos que caracterizan a la partícula, como puede verse en 1.56. Con los operadores de campo se puede escribir operadores que actúan sobre una partícula como

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \hat{A}(\mathbf{r}_i) &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \sum_{k,k'} \langle k | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \hat{A} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | k' \rangle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k'} \\ &= \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.58)$$

De forma similar se puede mostrar que

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (1.59)$$

El operador densidad de partículas  $\hat{\rho} = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$  se puede escribir como

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (1.60)$$

en cual cumple que

$$\int d\mathbf{r} \hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum \hat{n}_i = \hat{N}, \quad \hat{\rho}(\mathbf{r}) \left[ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') |0\rangle \right] = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \left( \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') |0\rangle \right), \quad (1.61)$$

y

$$\hat{N} \left[ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') |0\rangle \right] = 1 \left( \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') |0\rangle \right) \quad (1.62)$$

La densidad de corriente eléctrica  $\hat{\mathbf{j}} = e \sum \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$  se puede escribir en segunda cuantización como

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{e\hbar}{2im} (\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \hat{\psi}(\mathbf{r}) - \nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r})). \quad (1.63)$$

### 1.3.5. Cuantización de Dirac

Para entender el origen y el nombre segunda cuantización, haremos una deducción de este proceso que fue realizado inicialmente por Dirac, para ello consideremos que tenemos un conjunto completo y ortonormal de funciones  $\{\varphi_k(\mathbf{r})\}$ , el estado cuántico de una partícula en esta base puede ser escrito como

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k(t) \varphi_k(\mathbf{r}). \quad (1.64)$$

Donde el conjunto de números  $a_k(t)$  determinan el estado  $\psi(\mathbf{r}, t)$ . La evolución temporal viene dada por los números  $a_k(t)$ , la cual podemos encontrar a partir de ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{r}, t) = H \psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.65)$$

Sutituyendo (1.64) en (1.65) obtenemos

$$i\hbar \sum_{k'} \partial_t a_{k'}(t) \varphi_{k'}(\mathbf{r}) = \sum_k a_k(t) H \varphi_k(\mathbf{r}). \quad (1.66)$$

Multiplicando por  $\varphi_k(\mathbf{r})$  e integrando obtenemos

$$i\hbar \partial_t a_k(t) = \sum_{k'} H_{kk'} a_{k'}(t). \quad (1.67)$$

La ecuación conjugada a ésta es

$$-i\hbar \partial_t a_k^*(t) = \sum_{k'} H_{kk'} a_{k'}^*(t). \quad (1.68)$$

Ahora si introducimos una función  $\bar{H}$  que es igual al valor esperado de  $H$

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, t) H \psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \sum_{kk'} a_k^*(t) H_{kk'} a_{k'}(t), \end{aligned} \quad (1.69)$$

las ecuaciones de la dinámica para  $a_k^*(t)$  y  $a_k(t)$  las podemos ahora escribir como

$$\partial_t a_k(t) = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial (-i\hbar a_k^*)}, \quad -i\hbar \partial_t a_k^*(t) = \frac{\partial \bar{H}}{\partial a_k}. \quad (1.70)$$

De aquí podemos ver que éstas son ecuaciones de hamilton con  $\bar{H}$  el hamiltoniano y con coordenada generalizada  $-i\hbar a_k^*(t)$  y momentum canonicamente conjugado  $a_k$ . Esto permite cuantizar

nuevamente el sistema de acuerdo al principio de correspondencia promoviendo a  $a_k$  y  $a_k^*$  a operadores  $\hat{a}_k$  y  $\hat{a}_k^\dagger$ , satisfaciendo reglas de conmutación

$$\left[ -i\hbar\hat{a}_{k'}^\dagger(t), \hat{a}_k \right]_- = i\hbar\delta_{k'k} \text{ ó } \left[ \hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger(t) \right]_- = \delta_{k'k}, \quad (1.71)$$

$$\left[ \hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger(t) \right]_- = \left[ \hat{a}_k, \hat{a}_{k'}(t) \right]_- = 0. \quad (1.72)$$

Este procedimiento es llamado segunda cuantización, sin embargo la escogencia de conmutadores es solo aplicable a bosones, mientras que para fermiones se deben escoger reglas de antoconmutación. De acuerdo a este esquema obtenemos que  $\bar{H}$  es un operador y coincide con la representación del hamiltoniano que teníamos anteriormente

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \sum_{kk'} \hat{a}_k^\dagger(t) H_{kk'} \hat{a}_{k'}(t) \\ &= \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^*(\mathbf{r}, t) H \hat{\psi}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (1.73)$$

Como mencionamos, este proceso de segunda cuantización fue realizado primero por Dirac y fue Fock quien demostro luego la equivalencia de esta formulación y un sistema de muchas partículas en el espacio que ahora denominamos de Fock.

### 1.3.6. Expansión en ondas planas

Si tomamos como una base completa de ondas planas

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (1.74)$$

El operador densidad y corriente eléctrica se pueden escribir como

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \quad \text{con} \quad \hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (1.75)$$

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}} \quad \text{con} \quad \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{q}} = \frac{e\hbar}{m\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \left( \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{q} \right) \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}, \quad (1.76)$$

y el hamiltoniano de un sistema de electrones interactuantes puede ser escrito como

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \sum_{\substack{\sigma, \sigma' \\ \mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}}} V(\mathbf{q}) \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \quad (1.77)$$

con

$$V(\mathbf{q}) = V(-\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (1.78)$$

la transformada de Fourier del potencial de interacción  $V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$ . Para el potencial de interacción de Coulomb lo vamos a escribir como

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\alpha r}}{r}$$

donde hemos incluido un pequeño factor  $\alpha$ , que nos permitirá tener integrales bien definidas, donde la transformada de Fourier es

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\mathbf{r} \frac{e^{-\alpha r}}{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{q^2 + \alpha^2} \end{aligned} \quad (1.79)$$

En  $H_e$  hemos supuesto que no hay potenciales escalares, que sería el caso de un gas de electrones interactuante y que escribimos explícitamente como

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\Omega} \sum_{\substack{\sigma, \sigma' \\ \mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}}} \frac{4\pi}{q^2 + \alpha^2} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (1.80)$$

## 1.4. El gas de electrones.

En esta sección vamos a estudiar un gas de electrones libre

Denotemos como  $|F\rangle$  el estado propio de  $H_0$  a  $T = 0K$ , y el cual es dado por la esfera de Fermi

$$\begin{aligned} |F\rangle &= \prod_{\substack{k \leq k_F \\ \sigma = \uparrow, \downarrow}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger |0\rangle \\ &= c_{\mathbf{k}_{N/2}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_{N/2}\downarrow}^\dagger \dots c_{\mathbf{k}_2\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (1.81)$$

Ahora la energía del estado base sin interacción y el número de partículas son dados por

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle F | \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} | F \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k} \leq \mathbf{k}_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.82)$$

$$N = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle F | \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} | F \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k} \leq \mathbf{k}_F}. \quad (1.83)$$

Donde el 2 proviene de la suma sobre el espín. Para hacer este tipo de sumas el espaciamiento entre los estados viene dado por



$$\Delta k = \left( \frac{2\pi}{L} \right)^3. \quad (1.84)$$

De tal manera que

$$\frac{2}{\Delta \mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \Delta \mathbf{k} \rightarrow \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \int f(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (1.85)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int k^2 f(\mathbf{k}(E)) \frac{dk}{dE} dE \\ &= \int N(E) f(\mathbf{E}) dE, \end{aligned} \quad (1.86)$$

con

$$N(E) = \frac{1}{\pi^2} k^2 \frac{dk}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} E \quad (1.87)$$

la densidad de estados. Con esto obtenemos que el número de partículas y la energía del estado base son

$$N = \Omega \int_0^{E_F} N(E) dE = \Omega \frac{1}{2\pi^2} \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} E_F E_F \quad (1.88)$$

$$= \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3 \quad (1.89)$$

$$\begin{aligned} E_0 &= \Omega \int_0^{E_F} N(E) f(\mathbf{E}) dE = \Omega \frac{2}{5} \frac{1}{2\pi^2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} E_F E_F^2 \\ &= \frac{3}{5} N E_F. \end{aligned} \quad (1.90)$$

De la ecuación para el número de partículas (1.89) tenemos que  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$ , y reemplazando la energía de Fermi de (1.90) obtenemos que

$$E_0/N = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3}. \quad (1.91)$$

Este resultado nos muestra que la energía cinética por partícula aumenta con la densidad de partículas, lo que es una consecuencia del principio de exclusión de Pauli.

Ahora definimos un el radio  $r_0$  como el radio promedio ocupado por partícula,

$$\Omega = \frac{4}{3} \pi r_0^3 N \quad (1.92)$$

y el radio adimensional  $r_s$  como

$$r_s = \frac{r_0}{a_0} = \left( \frac{3}{4} \frac{1}{\pi n} \right)^{1/3} \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}, \quad (1.93)$$

con  $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$  el radio de Bohr, con esto tenemos que

$$n = \frac{3}{4\pi r_0^3} \quad (1.94)$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} = \left( \frac{9}{4} \pi \right)^{1/3} \frac{1}{r_0} \quad (1.95)$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{9}{4} \pi \right)^{2/3} \frac{1}{r_0^2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} \quad (1.96)$$

$$= \frac{3,68}{r_s^2} ry \quad (1.97)$$

$$\frac{E_0}{N} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \frac{3}{5} \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} = \frac{2,21}{r_s^2} ry \quad (1.98)$$

Donde  $ry$  es un rydberg,  $ry = e^2/(8\pi\epsilon_0 a_0) = \frac{1}{2} me^4/\hbar^2 = 13,6 \text{ eV}$ . El valor de  $r_s$  para los metales está entre 2 y 5.

#### 1.4.1. Estados excitados del gas de Fermi

El estado base del gas de electrones está conformado por electrones con vector de onda  $\mathbf{k}$  y spin  $\sigma$ , por cada electrón en el estado  $\mathbf{k}, \sigma$  hay otro en el estado  $-\mathbf{k}, -\sigma$ , por lo tanto el estado base tiene momentum y espín cero. Un estado excitado se crea cuando es suministrada energía y momentum al sistema. El proceso más elemental en que el sistema puede cambiar es cuando un electrón del estado base en el estado  $\mathbf{k}_i \sigma$  pasa a un estado  $\mathbf{k}_f \sigma$ ,  $k_f > k_F$ , la energía y el momentum suministrados son

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_f^2 - k_i^2), \quad \Delta \mathbf{p} = \hbar (\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i). \quad (1.99)$$

En primera instancia podríamos imaginarnos que la excitación está conformada por un electrón en el estado  $\mathbf{k}_f \sigma$  fuera de la esfera de Fermi y otro en el estado  $-\mathbf{k}_i, -\sigma$  dentro de la esfera de Fermi, esto permite mantener el balance de momentum pero el de energía no, debido a que ambos electrones tienen energía positiva y no obtendríamos el valor correcto de  $\Delta E$ , además este electrón adicional aumenta el número de partículas del sistema, el cual no debe cambiar ya que el número de partículas es una constante de movimiento, por último si el estado  $-\mathbf{k}_i, -\sigma$  ya está ocupado, no podríamos crear otro electrón en este estado.

Es más conveniente trabajar en una imagen electrón-hueco, donde definimos al esfera de Fermi como el estado “vacío” y una excitación es descrita por un electrón por encima de la superficie de Fermi y por un hueco por debajo de la superficie de Fermi,  $\Delta E$  lo podemos escribir como

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}. \quad (1.100)$$

Tomando como nivel de referencia la energía de Fermi tenemos que

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} - E_F + \left( E_F - \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \right) \\ &= E_e + E_h \\ &= \varepsilon(\mathbf{k}_f) + |\varepsilon(\mathbf{k}_i)|, \end{aligned} \quad (1.101)$$

donde

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) - E_F, \quad (1.102)$$

y

$$E_e = E(\mathbf{k}) - E_F, \quad E_h = E_F - E(\mathbf{k}). \quad (1.103)$$

La energía total de excitación la podemos escribir como

$$\begin{aligned} E - E_0 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} E(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{k < k_F, \sigma} E(\mathbf{k}) \\ &= \sum_{k < k_F, \sigma} E(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{k > k_F, \sigma} E(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{k < k_F, \sigma} E(\mathbf{k}) \\ &= \sum_{k > k_F, \sigma} E(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{k < k_F, \sigma} E(\mathbf{k}) (1 - n_{\mathbf{k}\sigma}) \\ &= \sum_{k > k_F, \sigma} E(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{k < k_F, \sigma} E(\mathbf{k}) (1 - n_{\mathbf{k}\sigma}) + \sum_{k < k_F, \sigma} E_F (1 - n_{\mathbf{k}\sigma}) - \sum_{k > k_F, \sigma} E_F n_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned} \quad (1.104)$$

Al hacer esta equivalencia incluimos en el último renglón dos términos que se cancelan mutuamente, como el lector puede verificar. Nuevamente tomando el nivel de Fermi como referencia obtenemos

$$E - E_0 = \sum_{k > k_F, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{k < k_F, \sigma} |\varepsilon(\mathbf{k})| (1 - n_{\mathbf{k}, \sigma}). \quad (1.105)$$

Este resultado lo podemos interpretar como la suma de las energías electrónicas por encima del nivel de Fermi, con número de ocupación  $n_{\mathbf{k}}$ , más la energía de los huecos por debajo del nivel de Fermi con número de ocupación  $(1 - n_{\mathbf{k}})$ .

El balance de momentum es

$$\Delta P = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hbar \mathbf{k} n_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{k < k_F, \sigma} \hbar \mathbf{k} = \sum_{k > k_F, \sigma} \hbar \mathbf{k} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{k < k_F, \sigma} (-\hbar \mathbf{k}) (1 - n_{\mathbf{k}\sigma}) \equiv P. \quad (1.106)$$

donde hemos usado el hecho que el estado base no tiene momentum. De esta expresión se puede interpretar que cada electrón en el estado  $\mathbf{k}\sigma$  contribuye con un momentum  $\hbar \mathbf{k}$  y cada hueco en estado  $\mathbf{k}\sigma$  con momentum  $-\hbar \mathbf{k}$ .

Dado que útil trabajar en un escenario en que la energía de Fermi se usa como punto de referencia, para ello definimos el hamiltoniano

$$H \rightarrow H' = H - E_F \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (1.107)$$

Debido a que una excitación está asociada a la creación conjunta de un electrón y un hueco en muchos casos es conveniente definir unos nuevos operadores de “cuasipartículas” que realicen estas dos operaciones, los cuales escribimos como

$$\alpha_{\mathbf{k}\sigma} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} + v_{-\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, -\sigma}^\dagger, \quad (1.108)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + v_{-\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, -\sigma}, \quad (1.109)$$

con

$$u_{\mathbf{k}} = 1, v_{\mathbf{k}} = 0, k > k_F, u_{\mathbf{k}} = 0, v_{\mathbf{k}} = 1, k < k_F. \quad (1.110)$$

El operador  $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}$  ( $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ), destruye (crea) un electrón por encima del nivel de Fermi y un hueco por debajo del nivel de Fermi. Las constantes  $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$

$$\begin{aligned} [\alpha_{\mathbf{k}\sigma}, \alpha_{\mathbf{k}'\sigma'}]_+ &= \left[ u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} + v_{-\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, -\sigma}^\dagger, u_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'\sigma'} + v_{-\mathbf{k}'} c_{-\mathbf{k}', -\sigma'}^\dagger \right]_+ \\ &= (u_{\mathbf{k}} v_{-\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} + v_{-\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} \delta_{-\mathbf{k}, \mathbf{k}'}) \\ &= (u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + v_{-\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}}) \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}. \end{aligned} \quad (1.110)$$

Para que la transformación sea canónica, podemos tomar

$$u_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}, v_{-\mathbf{k}} = -v_{\mathbf{k}}, u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (1.111)$$

con lo que

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{k}\sigma} &= u_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma} - v_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger}, \\ \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k},-\sigma},\end{aligned}\tag{1.112}$$

$$\begin{aligned}\alpha_{-\mathbf{k}\sigma} &= u_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k}\sigma} + v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, \\ \alpha_{-\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma},\end{aligned}\tag{1.113}$$

A partir de estas relaciones podemos encontrar las transformaciones inversas

$$c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}\sigma},\tag{1.114}$$

$$c_{\mathbf{k}\sigma} = u_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k},\sigma} + v_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}.\tag{1.115}$$

De estas tenemos que

$$\begin{aligned}c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k}\sigma} &= (u_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k},-\sigma})(u_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}\sigma} + v_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger}) \\ &= u_{\mathbf{k}}^2\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}\sigma} + v_{\mathbf{k}}^2\alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}\alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\left(\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger} + \alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}\alpha_{\mathbf{k}\sigma}\right) \\ &= u_{\mathbf{k}}^2\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}\sigma} + v_{\mathbf{k}}^2(1 - \alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}) + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\left(\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger} + \alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}\alpha_{\mathbf{k}\sigma}\right).\end{aligned}\tag{1.116}$$

A partir de esta ecuación y del hamiltoniano dado por la ec. (1.107) y usando que  $u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = 0$  obtenemos

$$\begin{aligned}H' &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon(\mathbf{k})\left(u_{\mathbf{k}}^2\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}\sigma} + v_{\mathbf{k}}^2(1 - \alpha_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{k},-\sigma})\right) \\ &= \sum_{k < k_F, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) + \sum_{k < k_F, \sigma} |\varepsilon(\mathbf{k})|\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{k > k_F, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k})\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}\sigma} \\ &= E_0 + \sum_{\mathbf{k}\sigma} |\varepsilon(\mathbf{k})|\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}\sigma},\end{aligned}\tag{1.117}$$

donde hemos usado las relaciones para  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$ , ec. (1.110). Este hamiltoniano lo podemos interpretar como la energía del estado base más la energía necesaria para crear cada excitación  $\varepsilon(\mathbf{k})$  descrita por los operadores  $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}$ . Un estado excitado se obtiene de aplicar el operador de creación sobre el estado base,

$$\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}|F\rangle = \begin{cases} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}|F\rangle = c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \prod_{k' < |k_F|, \sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger}|0\rangle, & k > k_F \\ -c_{-\mathbf{k},-\sigma}|F\rangle = - \prod_{\substack{k' < |k_F|, \sigma \\ \mathbf{k}' \neq -\mathbf{k}, \sigma \neq -\sigma'}} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger}|0\rangle, & k < k_F \end{cases}\tag{1.118}$$

Similarmente el operador de destrucción sobre el estado base es cero

$$\alpha_{\mathbf{k}\sigma}|F\rangle = 0. \quad (1.119)$$

Las transformaciones (1.108) y (1.109) se conocen en su forma general como las transformaciones de Bogoliubov-Valantin y son usadas en general para diagonalizar hamiltonianos cuadráticos en los operadores, por ejemplo éstas aparecen en redes antiferromagnéticas y superconductividad, y las usaremos más adelante para describir las excitaciones del estado superconductor.

Ahora calculemos el valor esperado de energía del hamiltoniano  $H$  a temperatura finita, el cual está dado por

$$\langle H \rangle = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \quad (1.120)$$

$$= \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}} f(E_{\mathbf{k}}) \quad (1.121)$$

Donde  $f(E_{\mathbf{k}}) \equiv n_{\mathbf{k}}$  es el número promedio de partículas que en equilibrio es dada por la distribución de Fermi Dirac, ver Fig. 1.1 a)

$$f(E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{e^{(E_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T} + 1}. \quad (1.122)$$

Donde  $\mu$  es el potencial químico y a temperatura cero es igual a la energía de Fermi. A cualquier temperatura  $\mu$  se determina fijando el número total de partículas del sistema, a partir de la condición

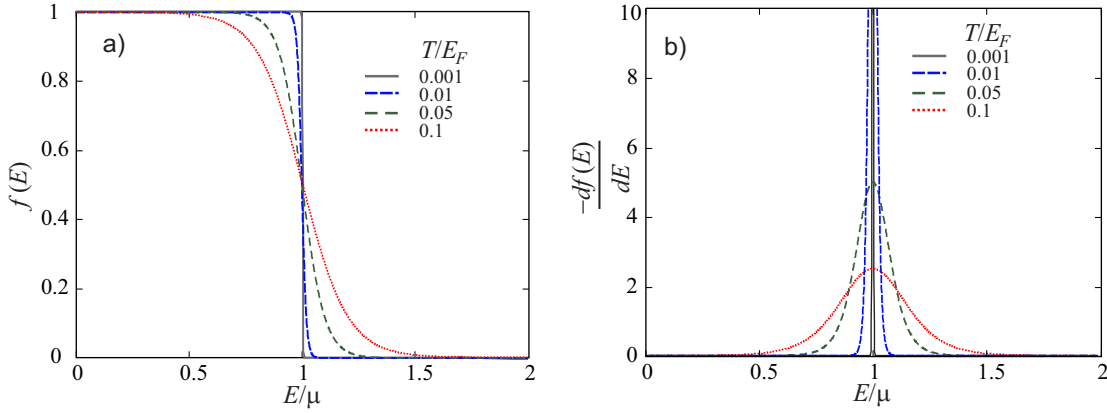


Figura 1.1. a) Función de distribución de Fermi Dirac b) y menos su derivada en función de la energía para diferentes temperaturas.

$$N = 2 \sum_{\mathbf{k}} f(E_{\mathbf{k}}), \quad (1.123)$$

La densidad de electrones en términos de la densidad de estados podemos escribir como

$$\frac{N}{V} = n = \int g(E) f(E, \mu) dE. \quad (1.124)$$

y la densidad de energía como

$$\frac{U}{V} = u = \int E g(E) f(E, \mu) dE. \quad (1.125)$$

La cantidad  $g(E)f(E)dE$  es igual al número de partículas por unidad de volumen con energías  $E$  y  $E + dE$ , el cual es proporcional al número de estados  $g(E)dE$  por la probabilidad de que estén ocupados  $f(E)$ , ver Fig. 1.2.

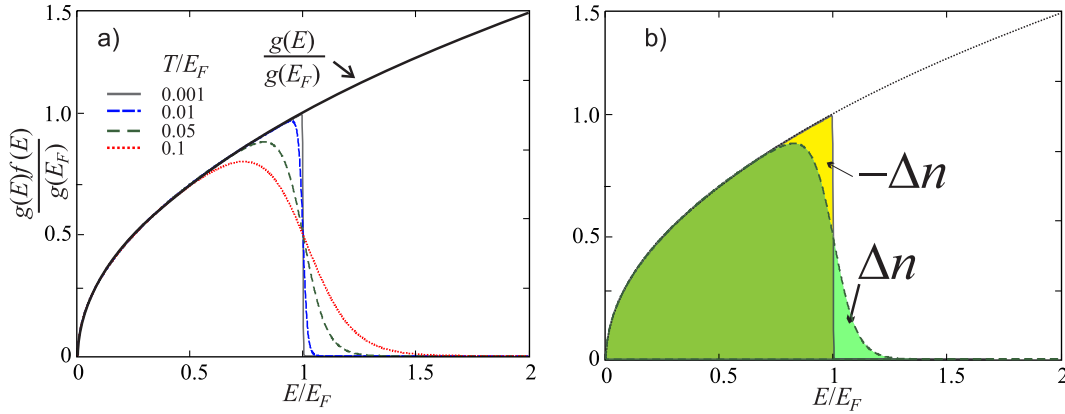


Figura 1.2. a) Densidad de estados ocupados  $dn/dE = g(E)f(E)$ , b) Las partículas que desocupan estados con  $E < E_F$  ocupan estados con  $E > E_F$ .

Dado que la densidad de partículas es una ligadura del problema, de la ecuación (1.124) podemos determinar el potencial químico. Para hacer las integrales (1.124) y (1.125) es usual hacer aproximaciones a bajas temperaturas, una de ellas es la expansión de Sommerfeld, que usa el hecho de que a temperatura cero

$$-\frac{df(E, \mu)}{dE} = \delta(E - \mu),$$

y a bajas temperaturas comparadas con la energía de Fermi esta derivada es una función secuencia Delta de Dirac con un ancho de  $2k_B T$ , ver fig. ?? b), de tal manera que podemos hacer una serie de potencial alrededor de  $E = \mu$ . En el anexo 1 se detalla esta aproximación, que conduce a las siguientes ecuaciones

$$\mu = E_F \left( 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right), \quad (1.126)$$

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} E_F + \frac{\pi^2}{6n} g(E_F) (k_B T)^2. \quad (1.127)$$

A temperatura ambiente la razón  $k_B T/E_F \sim 0,005$ <sup>1</sup> y la variación del potencial químico es del orden del 0,002% respecto a la energía de Fermi. Por otro lado la variación de la energía interna respecto a su estado base es del orden de 0,1%, lo que nos muestra que el número de electrones excitados es pequeño respecto al número total de electrones. Una vez más, esto es una consecuencia del principio de exclusión de Pauli, sólo los electrones cercanos a la superficie de Fermi en un rango de  $k_B T$  pueden ser excitados, dado que para ello estos deben ir a estados desocupados, ver Fig. 1.3. Para electrones más internos, debido a que la energía que necesitarían para ir a estados desocupados es mucho mayor de la energía térmica a temperatura ambiente, la probabilidad de ser excitados es muy baja. Lo anterior se manifiesta en la capacidad calorífica por partícula está dada por

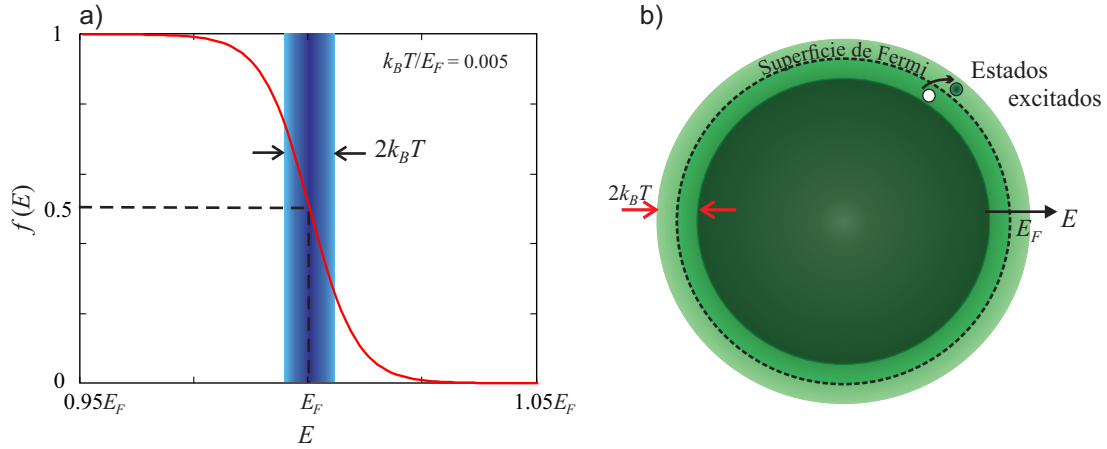


Figura 1.3. a) Función de Fermi cerca a temperatura ambiente donde su principal variación está en un ancho  $2k_B T$ , b) Esfera de Fermi ilustrando estados excitados en un cascarón esférico de ancho  $2k_B T$ .

$$c_N = \frac{\partial U}{\partial T} \frac{1}{N} = \frac{\pi^2}{3n} g(E_F) k_B^2 T = \frac{\pi^2 k_B}{2} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right). \quad (1.128)$$

Para gas clásico  $U/N = 3k_B T/2$  y  $c_N = 3k_B/2$  y todas las partículas contribuyen al calor específico al poder ser excitadas, mientras que en el gas de electrones cuántico solo un fracción del orden de  $k_B T/E_F$  contribuyen. Esto lo podemos visualizar mejor si escribimos  $c_V = n c_N$  en términos de la densidad de estados alrededor del nivel de Fermi, para ello usamos la relación

$$c_V = \frac{3}{2} k_B n \frac{\pi^2}{9} \frac{g(E_F) 2T}{n} \equiv \frac{3}{2} k_B n \frac{\Delta n}{n}. \quad (1.129)$$

Con  $\Delta n$  el número de estados excitados promedio (por unidad de volumen) que contribuyen a la capacidad calorífica

<sup>1</sup>La constante de Boltzmann es  $k_B = 8,625 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$ , para una temperatura de  $290\text{K}$ ,  $k_B T = 25\text{meV}$ . La energía de Fermi es el orden de electronvoltios, entre 1,5 a 15eV aproximadamente, para 5eV tenemos que  $k_B T/E_F = 0,005$ .



$$\Delta n = \frac{\pi^2}{9} g(E_F) 2T \simeq g(E_F) 2k_B T \quad (1.130)$$

De tal manera que  $\frac{\Delta n}{n}$  nos da la proporción de las partículas excitadas, que para nuestro ejemplo es aproximadamente igual al 1.6 %. Cuando calculemos la capacidad calorífica debida a los fonones, podremos tener una expresión completa de la capacidad calorífica del sólido y la compararemos con resultados experimentales de  $c_v$ .

## 1.5. Ecuación de movimiento

Los operadores de campo  $\psi(\mathbf{r}, t)$  cumplen la ecuación de Fock

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = [\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), H]_- \quad (1.131)$$

Como un ejemplo escribamos esta ecuación para el caso de un sistema de electrones independientes  $H_0$ , para ello debemos calcular el conmutador de  $H_0$  con  $\psi(\mathbf{r}, t)$

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), H]_- &= \int d\mathbf{r}' \left[ \hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) h(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \right]_- \\ &= \int d\mathbf{r}' \left( \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) h(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) - \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) h(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \right) \\ &= \int d\mathbf{r}' \left( \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) h(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) + \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) h(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \right) \\ &= \int d\mathbf{r}' \left[ \hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \right]_+ h(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \\ &= h(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

Con lo cual obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = h(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t). \quad (1.132)$$

Escribiendo el operador de campo como

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_k \varphi_k(\mathbf{r}) \hat{c}_k(t), \quad (1.133)$$

Obtenemos

$$i\hbar \sum_k \varphi_k(\mathbf{r}) \frac{\partial \hat{c}_k(t)}{\partial t} = h(\mathbf{r}) \sum_k \varphi_k(\mathbf{r}) \hat{c}_k(t). \quad (1.134)$$

Podemos hacer la suposición para la dependencia temporal de los operadores de destrucción

$$\hat{c}_k(t) = \hat{c}_k(0) e^{-iE_k t/\hbar} \quad (1.135)$$

Lo cual nos conduce a

$$\sum_k E_k \varphi_k(\mathbf{r}) \hat{c}_k(0) e^{-iE_k t/\hbar} = \sum_k h(\mathbf{r}) \varphi_k(\mathbf{r}) \hat{c}_k(0) e^{-iE_k t/\hbar} \quad (1.136)$$

Multiplicando por  $\hat{c}_{k'}^\dagger$  y haciendo el anticonmutador de  $\hat{c}_{k'}^\dagger$  con  $\hat{c}_k$ , encontramos que

$$E_k \varphi_k(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}) \varphi_k(\mathbf{r}) \quad (1.137)$$

Esto muestra la equivalencia de las dos representaciones (primera y segunda cuantización) dado que ambas conducen a la ecuación de Schrödinger.

# Teoría de bandas y aproximación Tight Binding

En la sección anterior estudiamos las propiedades de un gas de electrones sin tener en cuenta este potencial periódico, ahora vamos a examinar las propiedades generales de un sistema de electrones independientes en presencia de un potencial periódico, lo que se conoce como electrones de Bloch y que conduce al concepto de bandas de energía.

La red de Bravais es un arreglo infinito de puntos discretos con una configuración y orientación que es la misma cuando nos situamos en cualquier punto del arreglo. Los vectores  $\mathbf{R}_n$  definen todos los puntos de esta red y que se pueden escribir como

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3. \quad (2.1)$$

Donde los  $n_i$  son números enteros (positivos y negativos) y los vectores son llamados vectores primitivos que generan toda la red.

En un cristal perfecto a temperatura cero los iones forman un arreglo tal que sus posiciones denotadas por  $\mathbf{R}_n$ , son periódicas, esto trae como consecuencia que el potencial que siente un electrón sea periódico en el espacio real, explícitamente tenemos que el hamiltoniano de la interacción electrón-ion, sumponiendo que hay un ión por sitio, es

$$H_{e-I} = \sum_n \sum_i V_{e-I}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n) = \sum_i V(\mathbf{r}_i). \quad (2.2)$$

con

$$V(\mathbf{r}_i) = \sum_n V_{e-I}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n), \quad V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = V(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

Por lo tanto el potencial que siente un electrón es periódico.

Asociada a la red de Bravais vamos a definir la red recíproca tal que

$$e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_n} = 1 \quad (2.4)$$

Los vectores de onda que cumplen esta ecuación nos permite trabajar con ondas planas que tienen la periodicidad de la red

$$e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)} = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.5)$$

Por lo tanto

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi n \quad (2.6)$$

La red recíproca es también una red de Bravais, cuyos vectores denotamos por  $\mathbf{b}$ , y que se pueden definir a partir de los vectores primitivos como

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (2.7)$$

El fácil verificar que

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{i,j} \quad (2.8)$$

Los vectores  $\mathbf{K}$  los podemos escribir como

$$\mathbf{K}_m = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3 \quad (2.9)$$

con  $m_i$  números enteros, con lo que se cumple

$$\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi(m_1 n_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3) = 2\pi p \quad (2.10)$$

## 2.1. Simetría de traslación, teorema de Bloch

Ahora consideremos la ecuación de Schrödinger para una partícula

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (2.11)$$

tal que  $V(\mathbf{r})$  es un potencial periódico de la red directa

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = V(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

El teorema de Bloch nos afirma que la función de onda se puede escribir como

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u(\mathbf{r}). \quad (2.13)$$

Con  $u(\mathbf{r})$  una función periódica

$$u(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = u(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Por lo tanto la función de onda preserva parte de la simetría de la red dado que se escribe como una función periódica por una onda plana, con lo cual la densidad de probabilidad es periódica. El vector de onda  $\mathbf{k}$  está definido en la red recíproca y se puede escribir como

$$\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3, \quad (2.15)$$

Otra forma de escribir el teorema de Bloch es la siguiente

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r}). \quad (2.16)$$

La cual se deriva fácilmente de (2.16). Definamos el operador traslación  $T_{\mathbf{R}_n}$ , tal que

$$T_{\mathbf{R}_n} f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n). \quad (2.17)$$

Apliquemos este operador a la ecuación de Schrödinger

$$T_{\mathbf{R}_n} H \psi(\mathbf{r}) = E T_{\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r}). \quad (2.18)$$

Como  $H$  es periódico conmuta con  $T_{\mathbf{R}_n}$ , es decir  $HT_{\mathbf{R}_n} = T_{\mathbf{R}_n}H$  obteniéndose

$$H(T_{\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r})) = E(T_{\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r})) \quad (2.19)$$

y por lo tanto  $T_{\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r})$  también es estado propio de  $H$ , este estado no debe variar en más de un factor fase respecto a  $\psi(\mathbf{r})$ ,

$$T_{\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r}) = c_n \psi(\mathbf{r}), \quad |c_n|^2 = 1. \quad (2.20)$$

Es obvio que al aplicar dos traslaciones sucesivas se tiene que

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}_l} T_{\mathbf{R}_{l'}} \psi(\mathbf{r}) &= T_{\mathbf{R}_l + \mathbf{R}_{l'}} \psi(\mathbf{r}) \equiv T_{\mathbf{R}_{l+l'}} \psi(\mathbf{r}) \\ c_{l'} c_n &= c_{n+n'} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Podemos elegir  $c_n$  como

$$c_l = e^{i\alpha_l} \quad c_l c_{l'} = e^{i(\alpha_l + \alpha_{l'})} \equiv e^{i\alpha_{l+l'}}. \quad (2.22)$$

En la dirección  $\mathbf{a}_1$  es apropiado escribir  $c_{l_1}$  como

$$c_{l_1} = e^{iq_1 l_1}. \quad (2.23)$$

Donde  $q$  es una constante de proporcionalidad común a todas las traslaciones en dirección  $\mathbf{a}_1$ , la cual podemos escribir por conveniencia como  $2\pi k_1$

$$c_{l_1} = e^{iq_1 l_1} = e^{i2\pi k_1 l_1} = e^{il_1 k_1 \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{a}_1} = e^{ik_1 \mathbf{b}_1 \cdot l_1 \mathbf{a}_1}, \quad (2.24)$$

al hacerlo en las tres dimensiones

$$c_l = e^{i(k_1 \mathbf{b}_1 \cdot l_1 \mathbf{a}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 \cdot l_2 \mathbf{a}_2 + k_3 \mathbf{b}_3 \cdot l_3 \mathbf{a}_3)} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}, \quad (2.25)$$

$$c_n = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \quad (2.26)$$

El teorema de Bloch lo escribimos finalmente como

$$\psi_{E_{n,\mathbf{k}}}(\mathbf{r}) \equiv \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.27)$$

Cuando el potencial escalar es constante  $V(\mathbf{r}) = cte$ , tenemos que  $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = cte'$  y obtenemos que  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \propto e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  en este caso el electrón es representado por una onda plana con vector de onda  $\mathbf{k}$ . Para el caso del potencial periódico podemos interpretar a  $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  como una onda plana modulada por una función periódica. Esto implica que  $\hbar\mathbf{k}$  no es en general el momentum del electrón, para ver esto más explícitamente apliquemos el operador momentum a  $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$-i\hbar\nabla\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hbar\mathbf{k}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - i\hbar e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \nabla u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.28)$$

que no es general una constante por  $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . Esto es de esperarse debido a que el potencial periódico rompió la simetría de traslación espacial que era caracterizada por un vector asociado a una onda plana. En forma similar el vector de onda  $\mathbf{k}$  caracteriza la simetría de traslación discreta y adquiere un significado de momentum cuando se examina el efecto de potenciales externos, en este caso se suele llamar a  $\hbar\mathbf{k}$  momentum cristalino. Por ahora  $\mathbf{k}$  es una tripla de números cuánticos que caracteriza el estado en presencia de un potencial periódico.

## 2.2. Propiedades del espectro de energía y primera zona de Brillouin

Vamos a demostrar que el teorema de Bloch en el espacio recíproco trae como consecuencia que la función de onda tenga la misma periodicidad de la red recíproca, lo cual permite que en este espacio solo sea necesario trabajar en el volumen de una celda primitiva y que ya hemos denominado como primera zona de Brillouin. Para esto apliquemos el operador traslación a  $\psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned}\hat{T}_l \psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) &= e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}_l} \psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r})\end{aligned}\tag{2.29}$$

lo que implica que trasladar una función de onda con vector de onda  $\mathbf{k} + \mathbf{K}$ , el vector de onda involucrado en el factor exponencial es solamente  $\mathbf{k}$ , es decir  $\mathbf{k}$  caracteriza los estados  $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  y  $\psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r})$  por lo tanto

$$\psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\tag{2.30}$$

Este resultado también lo demostraremos más adelante cuando usemos series de Fourier para expandir las funciones de onda en el espacio recíproco. Debido a que las funciones de onda son periódicas en  $\mathbf{K}_m$ , se obtiene inmediatamente que

$$E_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}_m} = E_{n,\mathbf{k}}\tag{2.31}$$

Esto nos muestra que sólo los valores de  $\mathbf{k}$  en la primera zona de Brillouin son suficientes para caracterizar el estado.

Si una función es periódica en el espacio recíproco, podemos expandir ésta en una serie de Fourier que sólo involucre los vectores de la red de Bravais, así que podemos escribir

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n} C(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\tag{2.32}$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}_n} t(\mathbf{R}_n) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\tag{2.33}$$

Donde  $C(\mathbf{r}, \mathbf{R}_n)$  y  $t(\mathbf{R}_n)$  son constantes en el espacio recíproco, que analizaremos más adelante.

## 2.3. Condiciones de frontera de Born-Von Karman

En forma similar a como se aplicaron condiciones de frontera periódicas en un caja cúbica de lado  $L$ , debemos buscar condiciones de frontera para determinar los valores posibles de  $\mathbf{k}$ . En lugar de usar esta caja es más conveniente trabajar con un volumen conmensurable a una celda primitiva de la red de Bravais. De esta manera generalizamos las condiciones de frontera como

$$\psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{r}), i = 1, 2, 3.$$

Donde los  $\mathbf{a}_i$  son los vectores primitivos y  $N_i$  son números enteros, y  $N = N_1 N_2 N_3$  es el número de celdas primitivas del cristal. Aplicando el teorema de Bloch encontramos que

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = e^{iN_i \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{a}_i} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.34)$$

Que requiere

$$e^{iN_i \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{a}_i} = 1. \quad (2.35)$$

Escribiendo el vector de onda  $\mathbf{k}$  como (2.15), tenemos que

$$e^{2\pi i N_i k_i} = 1 \Rightarrow k_i = \frac{m_i}{N_i} \quad (2.36)$$

$m_i$  entero. Por lo tanto los vectores de onda son

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \mathbf{b}_i \quad (2.37)$$

El volumen  $\Delta\mathbf{k}$  de dos valores consecutivos de  $\mathbf{k}$  es un pequeño paralelepípedo de lados  $\frac{\mathbf{b}_i}{N_i}$ ,

$$\Delta\mathbf{k} = \frac{\mathbf{b}_1}{N_1} \cdot \left( \frac{\mathbf{b}_2}{N_2} \times \frac{\mathbf{b}_3}{N_3} \right) = \frac{v_{\mathbf{k}}}{N} \quad (2.38)$$

Donde  $v_{\mathbf{k}}$  es el volumen de una celda primitiva en el espacio recíproco. Primero podemos concluir que el número de vectores de onda en una celda primitiva de la red recíproca es igual al número de sitios en el cristal,  $v_{\mathbf{k}} = N\Delta\mathbf{k}$ . Usando la relación  $v_{\mathbf{k}} = \frac{(2\pi)^3}{v}$  entre el volumen  $v_{\mathbf{k}}$  con el volumen  $v = \frac{V}{N}$  de una celda primitiva en el espacio real, encontramos que

$$\Delta\mathbf{k} = \frac{(2\pi)^3}{V}, \quad (2.39)$$

donde  $V$  es el volumen del cristal,  $V = Nv$ . Esta es la generalización de la ecuación que encontramos para el caso de electrones libres y nos permite escribir en el límite de  $V \rightarrow \infty$

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \dots \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int \dots d\mathbf{k} \quad (2.40)$$

## 2.4. Identidades útiles

Una identidad útil es

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} = N \sum_{\mathbf{K}_m} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{K}_m}, \quad (2.41)$$

donde  $\mathbf{R}_n$  corre sobre los  $N$  sitios de la red de Bravais y  $\mathbf{k}$  es un vector de la red recíproca. Para demostrar esta identidad la podemos desplazar cada  $\mathbf{R}_n$  por una cantidad  $\mathbf{R}_0$  y obtenemos

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_0} \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \quad (2.42)$$

con lo cual

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} (1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_0}) = 0, \quad (2.43)$$

la suma se hace cero, excepto cuando  $\mathbf{k} = \mathbf{K}_m$ , en este caso la suma da el número de vectores de la Red de Bravais que es  $N$ , de tal manera que

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} = N \sum_{\mathbf{K}_m} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{K}_m}$$

Si restringimos el valor de  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$  a la primera zona de Brillouin, podemos escribir

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_n} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$$

La relación complementaria es

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} = N \delta_{\mathbf{R}_l, 0} \quad (2.44)$$

La suma sobre  $\mathbf{k}$  corre en la primera Zona de Brillouin, para demostrar esta relación podemos trasladar el vector  $\mathbf{k}$  por  $\mathbf{k} + \mathbf{k}_0$ , donde  $\mathbf{k}_0$  es un vector que cumple las condiciones de Born-von Karman (2.37) y proceder de forma similar a como se hizo en la identidad anterior. Esta última identidad al pasar al continuo es

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{V_k} d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} \\ \int_{v_k} d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l} &= \frac{N}{V} (2\pi)^3 \delta_{\mathbf{R}_l, 0} \\ &= \frac{(2\pi)^3}{v} \delta_{\mathbf{R}_l, 0} \\ &= v_k \delta_{\mathbf{R}_l, 0} \end{aligned} \quad (2.45)$$

Otra identidad importante es

$$\frac{1}{v} \int_C d\mathbf{r} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{K}_m, 0} \quad (2.46)$$

La integral se realiza en una celda primitiva. Dado que el resultado no depende del origen de la celda primitiva que escojamos podemos trasladar la celda primitiva una cantidad  $d$ , y proceder como en las identidades anteriores para demostrar que la suma es cero excepto cuando  $\mathbf{K}_m = 0$ . Una identidad equivalente pero para los vectores de onda  $\mathbf{k}$  en el volumen  $V$  es

$$\frac{1}{V} \int_V d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (2.47)$$



En resumen podemos escribir

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_l} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_l} &= \sum_{\mathbf{K}_m} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' + \mathbf{K}_m} \\
 \frac{1}{v_{\mathbf{k}}} \int_{v_{\mathbf{k}}} d\mathbf{k} e^{i(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_n) \cdot \mathbf{k}} &= \delta_{\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_n} \\
 \frac{1}{v} \int_v d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{K}_m - \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}} &= \delta_{\mathbf{K}_m, \mathbf{K}_n} \\
 \frac{1}{v} \int_V d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

### 2.4.1. Teorema sobre funciones periódicas

Consideremos una función  $f(\mathbf{r})$  periódica en el espacio directo, es decir

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = f(\mathbf{r}). \tag{2.49}$$

Si expandimos está función en una base de ondas planas tenemos que

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}}. \tag{2.50}$$

Donde la suma corre sobre todos los vectores de onda  $\mathbf{k}$  de la forma discreta a como teníamos en el gas de electrones,  $\Delta\mathbf{k} = (2\pi/L)^d$ , con  $d$  la dimensión del sistema y  $L^d = V$ , el volumen del sistema. Multiplicando por  $d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}'}$  e integrando en  $V$  obtenemos

$$\sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \int_V d\mathbf{r} e^{i\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')} = \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} f(\mathbf{r}). \tag{2.51}$$

Usando

$$\int_V d\mathbf{r} e^{i\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')} = V \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \tag{2.52}$$

obtenemos

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} f(\mathbf{r}). \tag{2.53}$$

De la periodicidad de  $f(\mathbf{r})$ , la integral no puede depender del origen de coordenadas, por lo tanto

$$\begin{aligned}
f_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)} f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \\
&= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \\
&= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} f_{\mathbf{k}},
\end{aligned} \tag{2.54}$$

con que obtenemos

$$f_{\mathbf{k}} (1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}) = 0. \tag{2.55}$$

Si deseamos tener una solución no trivial para todo  $f_{\mathbf{k}}$ , se debe cumplir que  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} = 1$ , a estos valores de  $\mathbf{k}$  que son discretos los denotaremos con la letra  $\mathbf{K}_m$  y cumplen

$$e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{R}_n} = 1 \tag{2.56}$$

Los vectores  $\mathbf{K}_m$  definen la red en el espacio recíproco y que definimos anteriormente. Los vectores de onda que cumplen esta ecuación nos permite trabajar con ondas planas que tienen la periodicidad de la red

$$e^{i\mathbf{K}_m \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)} = e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}}, \tag{2.57}$$

con esto tenemos que  $f_{\mathbf{k}} = 0$  para  $\mathbf{k} \neq \mathbf{K}_m$ , es decir que en la expansión solo aparecen los vectores de onda iguales a  $\mathbf{K}_m$  por lo tanto

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}_m} f_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}}, \tag{2.58}$$

con

$$\begin{aligned}
f_{\mathbf{K}_m} &= \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \\
&= \frac{1}{v} \int_v d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} f(\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{2.59}$$

donde  $v$  es el volumen de la celda unidad.

De forma similar si una función es periódica en el espacio recíproco

$$f(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m) = f(\mathbf{k})$$

esta solo acepta una expansión con vectores de la red directa de Bravais

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}_n} f_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{R}_n \cdot \mathbf{k}}. \tag{2.60}$$

## 2.5. Funciones de Wannier y aproximación de amarre fuerte

La descripción de los estados de un sistema electrónico en términos de las funciones de Wannier y el uso del método de enlace fuerte o de banda delgada “TB-Tight-Binding” se aplica en general a los casos en que los electrones están ligados fuertemente a los átomos y su movimiento a través del cristal es el resultado del acoplamiento débil entre átomos vecinos. Este método nos permite buscar una estrategia complementaria a la del método de electrones cuasi-libres y que se suele usar más para el cálculo de bandas de energía en los sólidos.

De acuerdo al teorema de Bloch, las funciones de Bloch son periódicas en el espacio recíproco y por lo tanto podemos usar (2.60) para escribir estas funciones de la forma

$$\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \phi_n(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (2.61)$$

Donde se ve fácilmente que estas funciones son periódicas en el espacio- $\mathbf{k}$ ,  $\psi_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}, \mathbf{r}) = \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ . El índice  $n$  se refiere a la banda de energía  $E_n$ , el índice  $i$  denota los sitios de la red en tres dimensiones y  $\mathbf{k}$  corre en la primera zona de Brillouin. Las funciones  $\phi_n(\mathbf{R}_i, \mathbf{r})$  se denominan funciones de Wannier, multiplicando por  $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}$  y sumando sobre  $\mathbf{k}$  y usando la ecuación

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)} = N \delta_{\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_m} \quad (2.62)$$

obtenemos

$$\phi_n(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.63)$$

Usando el teorema de Bloch encontramos que

$$\phi_n(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.64)$$

Debido a la periodicidad de las funciones  $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_i) = u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  es claro que

$$\phi_n(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \equiv \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (2.65)$$

Es decir que depende de la diferencia  $\mathbf{r} - \mathbf{R}_i$  y por lo tanto cada función de Wannier está centrada en el punto medio de la celda primitiva de Wigner-Seitz.

Las funciones de Wannier para diferentes bandas ( $n$ ) y diferentes sitios  $\mathbf{R}_i$  son ortogonales



Figura 2.1. Ilustración de las funciones de Wannier, las cuales se pueden ver como funciones centradas en cada punto de la red, y cumplen  $\phi_i(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$

$$\begin{aligned}
 \int_V d\mathbf{r} \phi_{n'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) &= \int_V d\mathbf{r} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} \psi_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_i} \int_V d\mathbf{r} \psi_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \delta_{n, n'} \\
 &= \delta_{n, n'} \delta_{i, j}.
 \end{aligned} \tag{2.66}$$

De forma similar podemos demostrar que forman un conjunto de funciones completo

$$\sum_{n, i} \phi_n^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) \phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \tag{2.67}$$

Usando la siguiente notación

$$\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \equiv \phi_{ni}(\mathbf{r}) \tag{2.68}$$

La propiedad la podemos escribir como

$$\phi_{n, i}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \equiv \phi_{n, i+j}(\mathbf{r}) \tag{2.69}$$

por ejemplo para  $i = 0$

$$\phi_{n, 0}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \phi_{n, j}(\mathbf{r}) \tag{2.70}$$

De tal manera que todas las funciones de Wannier las podemos encontrar a partir de hacer traslaciones de la función de la celda “ $i = 0$ ”, ver Fig. 2.1. En esta notación las propiedades de ortogonalización y completéz son

$$\sum_{n, i} \phi_{n, i}(\mathbf{r}) \phi_{n, i}^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \int d\mathbf{r} \phi_{m, j}^*(\mathbf{r}) \phi_{n, i}(\mathbf{r}) = \delta_{i, j} \delta_{n, m} \tag{2.71}$$

Una de las propiedades de las funciones de Wannier es que están localizadas alrededor de los sitios de la red, para ello usemos la ecuación, 2.64 y despreciemos la dependencia en  $\mathbf{k}$  de la función  $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \simeq u_{0n}(\mathbf{r})$

$$\phi_n(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}) \simeq \frac{1}{\sqrt{N}} u_{0n}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \quad (2.72)$$

consideremos esta suma en una dimensión,

$$\sum_{k_n} e^{ik_n \cdot (x - x_i)} = \sum_{n=0}^{N-1} e^{i \frac{2n\pi}{Na} (x - x_i)} \quad (2.73)$$

y usando

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{inw} = e^{i \frac{(N-1)w}{2}} \frac{\sin\left(\frac{Nw}{2}\right)}{\sin\left(\frac{w}{2}\right)} \quad (2.74)$$

obtenemos

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{in \frac{2\pi}{Na} (x - x_i)} = e^{i \frac{(N-1)}{N} \frac{\pi}{a} (x - x_i)} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a} (x - x_i)\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{Na} (x - x_i)\right)} \quad (2.75)$$

Para  $N \gg 1$

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{in \frac{2\pi}{Na} (x - x_i)} \simeq N e^{i \frac{\pi}{a} (x - x_i)} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a} (x - x_i)\right)}{\frac{\pi}{a} (x - x_i)} \quad (2.76)$$

y por lo tanto

$$\phi_n(x_i, x) \simeq \sqrt{N} u_{0n}(\mathbf{r}) \frac{\sin\left(\frac{\pi}{a} (x - x_i)\right)}{\frac{\pi}{a} (x - x_i)} \quad (2.77)$$

De tal manera que la función  $\phi_n(x_i, x)$  es máxima alrededor de  $x = x_i$ , en tres dimensiones  $\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  sería proporcional a productos similares de tal manera que  $\phi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  es máxima en  $\mathbf{r} = \mathbf{R}_i$ .

En la base de Wannier podemos definir operadores de creación y destrucción como

$$c_{n,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{n,\mathbf{k}}, \quad c_{n,i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{n,\mathbf{k}}^\dagger$$

Los operadores  $c_{n,i}, c_{n,i}^\dagger$  los podemos interpretar como un operador que destruye (crea) un electrón alrededor del sitio  $i$ . Ahora consideremos el hamiltoniano con estos operadores

$$H = \sum_{nmij} c_{mj}^\dagger h_{mj,ni} c_{ni}$$

$$\begin{aligned}
\langle mj | H | ni \rangle &= \int d\mathbf{r} \phi_{m,j}^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \phi_{n,i}(\mathbf{r}) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \psi_m^*(\mathbf{k}', \mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \psi_m^*(\mathbf{k}', \mathbf{r}) E_n(\mathbf{k}) \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} E_n(\mathbf{k}) \delta_{nm} \\
&= t_{ji} \delta_{nm},
\end{aligned} \tag{2.78}$$

así que nos podemos restringir a un valor de  $n$ , el cual no notaremos explícitamente. Con esto, tenemos que se puede escribir  $H$  como

$$H = \sum_{ij} c_j^\dagger t_{ji} c_i \tag{2.79}$$

con  $t_{ji}$  los elementos de Matriz

$$\begin{aligned}
t_{ji} &= \int d\mathbf{r} \phi_j^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} E(\mathbf{k}) = t_{ij}^*
\end{aligned} \tag{2.80}$$

Tomando  $i = 0$  e invirtiendo esta relación obtenemos

$$\sum_j e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} t_{j0} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_j e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_j} E(\mathbf{k}) \tag{2.81}$$

$$E(\mathbf{k}) = \sum_j e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} t_{j0} \tag{2.82}$$

Donde hemos usado la propiedad de ortogonalidad

$$\frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_i} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \tag{2.83}$$

Esta ecuación nos relaciona el espectro de energía con los parámetros de acople o "hopping"  $t_{j0}$ , También vemos que la energía es periódica,

$$E(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = E(\mathbf{k}), \tag{2.84}$$

concordando con lo que habíamos encontrado en 2.33.

### 2.5.1. Cadena lineal de átomos

Para interpretar el resultado 2.82 escribamos el Hamiltoniano para una red lineal de átomos que interactúan a primeros vecinos, ver Fig 2.2,

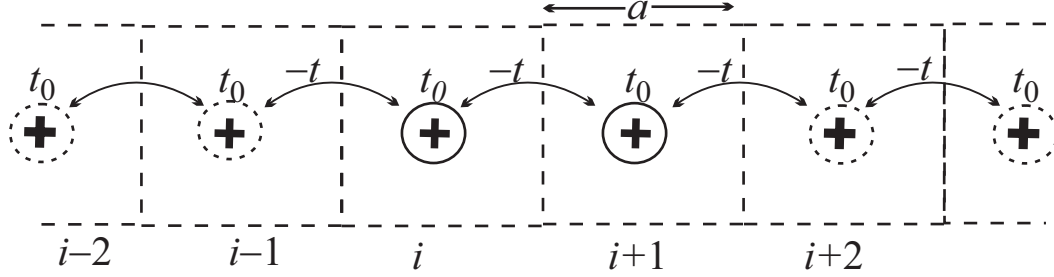


Figura 2.2. Cadena lineal de átomos acoplados a los primeros vecinos con parámetros de acople  $-t$  y energía en cada sitio  $t_0$ .

$$H = \sum_i \left\{ t_0 c_i^\dagger c_i - t \left( c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1} \right) \right\} \quad (2.85)$$

Donde el primer término da cuenta de la energía del electrón en la celda  $i$ , mientras el segundo es la energía  $-t$  de interacción de un electrón que va del átomo en la celda  $i$  al átomo adyacente en la celda  $i+1$  y viceversa. El Hamiltoniano 2.85 lo podemos diagonalizar si hacemos la transformación

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} c_k \quad (2.86)$$

$$c_{i+1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ika} e^{-ikR_i} c_k, \quad (2.87)$$

con lo que obtenemos

$$H = \frac{1}{N} \sum_{i,k,k'} \left\{ t_0 e^{i(k'-k)R_i} c_k^\dagger c_k - t e^{i(k'-k)R_i} \left( e^{ika} c_k^\dagger c_k + e^{-ika} c_k^\dagger c_k \right) \right\} \quad (2.88)$$

Haciendo la suma sobre  $i$  y usando la propiedad de ortogonalidad 2.83

$$H = \sum_k E_k c_k^\dagger c_k,$$

con

$$E_k = t_0 - 2t \cos ka. \quad (2.89)$$

De tal manera que la energía mínima es  $t_0 - 2t$  y la energía máxima es  $t_0 + 2t$ , lo que nos da un ancho de la banda de energía  $\Delta E = 4t$ , ver Fig. 2.3. Si los átomos están separados,

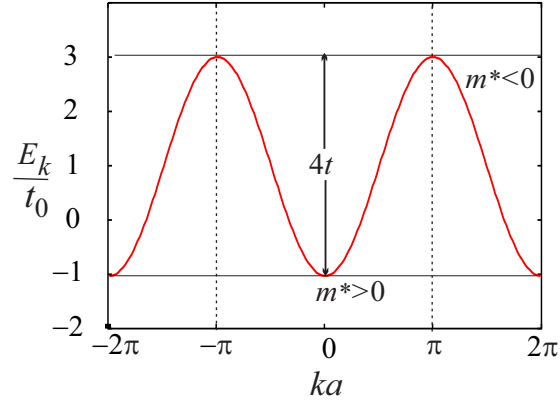


Figura 2.3. Espectro de energía de una cadena lineal de átomos acoplados a los primeros vecinos, se ha tomado  $t = 2t_0$ . Alrededor del punto  $k = 0$ , la masa efectiva de las partículas es positiva, mientras que alrededor de los puntos  $k = \pm\pi/a$  es negativa.

esperamos un valor pequeño de  $t$ , mientras que si están cerca el parámetro de acople debe aumentar, conduciendo a una banda de energía más ancha. Este espectro lo podemos analizar en dos puntos de la primera zona de Brillouin, para  $|k|a \ll 1$  obtenemos

$$\begin{aligned} E_k &\simeq t_0 - 2t + ta^2k^2 \\ &= E_b + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \end{aligned}$$

donde  $E_b = t_0 - 2t$  es la energía mínima y  $m^*$  es la masa efectiva y que hemos definido en analogía al sistema de electrones libres

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}. \quad (2.90)$$

La energía es máxima cuando  $ka = \pm\pi$ , expandiendo alrededor de estos puntos y definiendo

$$k = \frac{\pi}{a} + \delta k, \quad (2.91)$$

tenemos

$$\begin{aligned} E_k &= t_0 - 2t \cos(\pi + \delta ka) \\ &\simeq E_t + \frac{\hbar^2 (\delta k)^2}{2m^*} \\ &= E_t - \frac{\hbar^2 (\delta k)^2}{2|m^*|} \end{aligned}$$



con  $E_t = t_0 + 2t$  la energía máxima y  $m^*$  la masa efectiva la cual resulta ser negativa

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2ta^2} \quad (2.92)$$

El concepto de masa efectiva lo analizaremos más adelante.

### 2.5.2. Modelo de dos bandas

Consideremos una red lineal con dos átomos por celda primitiva, que denotamos con  $A$  y  $B$ . Vamos a suponer que la interacción es sólo a primeros vecinos, ver Fig. 2.4. El Hamiltoniano correspondientes es

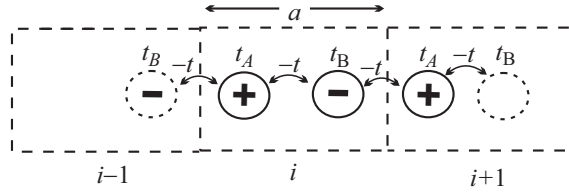


Figura 2.4. Cadena lineal de dos átomos por celda acoplados a los primeros vécinos con parámetros de acople  $-t$  y energía en cada sio  $t_A$  y  $t_B$ .

$$H = \sum_i \left\{ t_A c_{Ai}^\dagger c_{Ai} + t_B c_{Bi}^\dagger c_{Bi} - t \left( c_{B,i}^\dagger c_{A,i} + c_{A,i}^\dagger c_{B,i} \right) - t \left( c_{B,i+1}^\dagger c_{A,i} + c_{A,i}^\dagger c_{B,i+1} \right) \right\}$$

Los dos primeros términos del Hamiltoniano corresponden a la energía del electrón en los átomos  $A$  y  $B$ , el tercer y cuarto término dan la energía de interacción de un electrón que va de  $A$  a  $B$  en la misma celda y viceversa, y los dos últimos son similares pero el átomo  $A$  y  $B$  están en celdas adyacentes. Este Hamiltoniano se puede diagonalizar haciendo la transformación

$$c_{\alpha,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} c_{\alpha,k} \quad (2.93)$$

$$c_{\alpha,i+1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ika} e^{-ikR_i} c_{\alpha,k} \quad (2.94)$$

donde hemos escrito  $R_i = ina$  y el subíndice  $\alpha$  denota los átomos  $A$  ó  $B$ , los ket  $|k\rangle_\alpha$  son estados en el espacio recíproco asociados a la transformación de fourier del átomo  $\alpha$  y están relacionados con los estados de Bloch. Con esta transformación obtenemos

$$H = \frac{1}{N} \sum_{i,k,k'} \left\{ t_A e^{i(k'-k)R_i} c_{A,k}^\dagger c_{A,k'} + t_B e^{i(k'-k)R_i} c_{B,k}^\dagger c_{B,k'} - t e^{i(k'-k)R_i} \left( c_{B,k}^\dagger c_{A,k'} + c_{A,k}^\dagger c_{B,k'} \right) - t e^{i(k'-k)R_i} \left( e^{ika} c_{B,k}^\dagger c_{A,k'} + e^{-ika} c_{A,k}^\dagger c_{B,k'} \right) \right\} \quad (2.95)$$

Haciendo la suma sobre  $i$  y reagrupando tenemos

$$H = \sum_k \left\{ t_A c_{A,k}^\dagger c_{A,k} + t_B c_{B,k}^\dagger c_{B,k} - t \left( 1 + e^{ika} \right) c_{B,k}^\dagger c_{A,k} - t \left( 1 + e^{-ika} \right) c_{A,k}^\dagger c_{B,k} \right\}. \quad (2.96)$$

Si escribimos  $H$  en forma matricial en la base  $c_{A,k}, c_{B,k}$  el hamiltoniano para un valor de  $k$  es

$$\hat{H}_k = \begin{pmatrix} t_A & -t(1 + e^{-ika}) \\ -t(1 + e^{ika}) & t_B \end{pmatrix}, \quad (2.97)$$

el cual podemos diagonalizar como

$$\hat{H}_k |E_k\rangle = E_k |E_k\rangle. \quad (2.98)$$

Los valores propios de la energía son

$$E_{k,\pm} = t_1 \pm \sqrt{t_2^2 + 2t^2(1 + \cos ak)}, \quad (2.99)$$

con

$$t_{1(2)} = \frac{(t_A \pm t_B)}{2}. \quad (2.100)$$

Este espectro se ilustra en la Fig. 2.5. A diferencia de cuando teníamos un sólo átomo por celda, aparecen dos bandas, que hemos denotado como  $E_{k,\pm}$  y aparece un gap de energía que depende de los parámetros del modelo, ver Problema 1. Así mismo se puede calcular la masa efectiva cerca a la brecha de energía, donde para la banda  $E_-$  es negativa y para la  $E_+$  es positiva, ver Problema 2.

### 2.5.3. Bandas en más dimensiones

Retomando el caso general en tres dimensiones a vecinos cercanos el hamiltoniano  $H$  se suele escribir como

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ji} c_j^\dagger c_i. \quad (2.101)$$

Donde el símbolo  $\langle i, j \rangle$  denota que la suma sobre  $j$  se restringe a valores cercanos a  $i$ , como antes el hamiltoniano pudo ser diagonalizado invirtiendo la transformación de estados de Wannier a estados de Bloch, para ello usamos la transformación

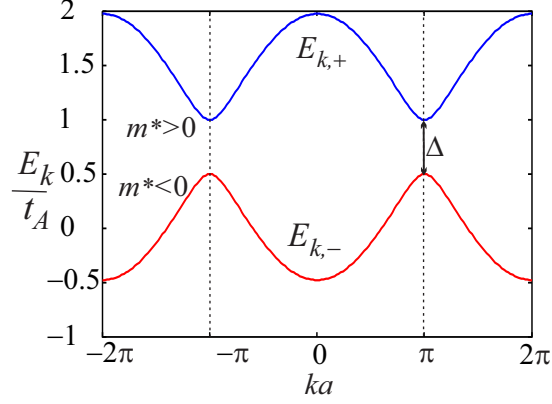


Figura 2.5. Espectros de energía  $E_{\pm}$  de una cadena lineal con dos átomos por celda acoplados a los primeros vecinos. Se ha tomado  $t_B = 0,5t_A$  y  $t = 0,6t_A$ . En los puntos  $k = \pm\pi/a$  la masa efectiva es negativa para la banda  $E_-$  y positiva para la banda  $E_+$ . La brecha de energía para este caso es dada por  $\Delta = E_+(\pi/a) - E_-(\pi/a)$ .

$$\begin{aligned}
 c_j &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}} \\
 H &= \frac{1}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ji} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'}^\dagger \\
 &= \sum_{\mathbf{k}, \delta \mathbf{R}_j} t_{\delta \mathbf{R}_j, 0} e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}
 \end{aligned} \tag{2.102}$$

con

$$E(\mathbf{k}) = \sum_{\delta \mathbf{R}_j} t_{\delta \mathbf{R}_j, 0} e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta \mathbf{R}_j}$$

Que coincide con la ecuación y nos da el espectro de energía en 1, 2 y 3 dimensiones si tenemos un átomo por sitio.

Por ejemplo para una red cuadrada con  $t_{ii} = t_1, t_{ij} = -t$  para el primer vecino cercano y cero para el resto obtenemos

$$\begin{aligned}
 E(\mathbf{k}) &= \sum_{\langle i, 0 \rangle} t_{i0} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \\
 &= t_0 - t e^{-ik_x a} - t e^{ik_x a} - t e^{ik_y b} - t e^{-ik_y b} \\
 &= t_0 - 2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]
 \end{aligned} \tag{2.103}$$

Este espectro de energía se ilustra en un diagrama extendido en la Fig. 2.6a) y el mapa de niveles de energía constante en la Fig. 2.6b). En este caso el ancho de la Banda es  $8t$ . Si tenemos un sistema en 3D el ancho sería  $12t$ , de tal manera que en este modelo el ancho de la banda para el sistema cúbico simple es

$$\Delta E = 2\beta, \quad (2.104)$$

con  $\beta$  el número de primeros vecinos.

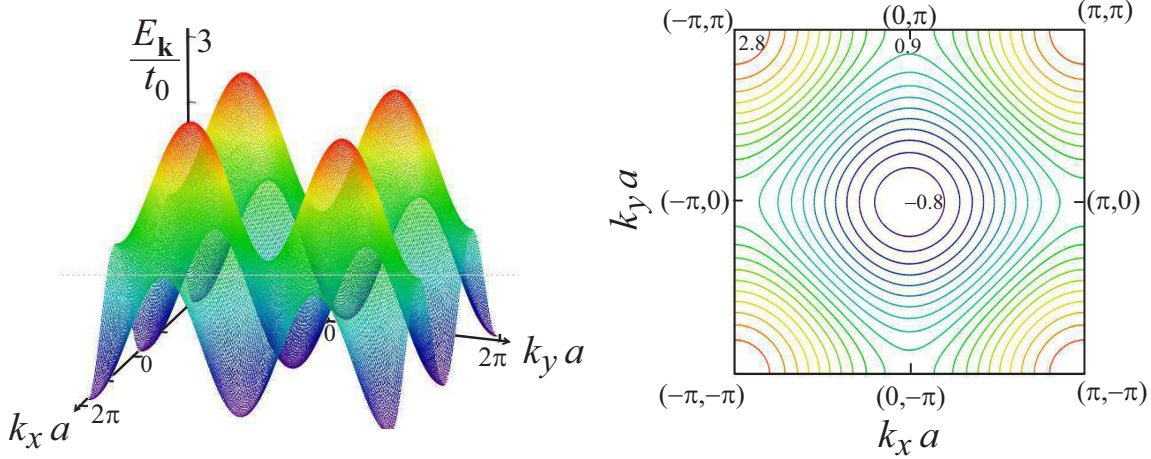


Figura 2.6. Espectro de energía  $E_{\mathbf{k}}$  de una red cuadrada con un átomo por celda en un diagrama extendido, se ha tomado  $t = 0,5t_0$ . b) Mapa de niveles de energía constante en la primera zona de Brillouin.

## 2.6. Propiedades del espectro de energía $E_n(\mathbf{k})$

En esta sección vamos a usar la aproximación  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  para analizar las propiedades del espectro de energía alrededor de un punto, adicionalmente vamos a ver qué otras propiedades presenta cuando hay simetría de inversión temporal y de paridad.

### 2.6.1. Aproximación $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Analicemos el efecto del operador momentum sobre una función de onda  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , del teorema de Bloch se tiene que

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= -i\hbar\nabla \left( u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) \\ &= \left( -i\hbar e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\nabla u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \hbar\mathbf{k}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.105)$$

De forma similar

$$\hat{\mathbf{p}} \cdot (\hat{\mathbf{p}}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k})^2 u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.106)$$

con lo cual obtenemos que el operador “hamiltoniano” que define la ecuación de valores propios para las funciones  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  es

$$H_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k})^2 + V(\mathbf{r}), \quad (2.107)$$

tal que

$$H_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.108)$$

Ésta es una ecuación tipo Schrödinger donde el término de momentum depende del vector de onda,  $\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k}$  similar a cuando se tiene un campo electromagnético con el momentum cinético,  $\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}$ . Si agrupamos el término cuadrado en  $E_n(\mathbf{k})$  definiendo  $E'_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}) - \hbar^2 k^2 / 2m$ ,  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  cumple la ecuación efectiva

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + V(\mathbf{r}) \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E'_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.109)$$

Debido al producto  $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$  a esta aproximación se le conoce como  $kp$  y es útil cuando desemos analizar el espectro de energía alrededor de un valor de  $\mathbf{k}$  así como para tener hamiltonianos efectivos alrededor de un punto de la primera zona de Brillouin. Para ello expandamos el espectro de energía  $E(\mathbf{k} + \mathbf{q})$  en una serie de potencias alrededor de  $\mathbf{k}$

$$E_n(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = E_n(\mathbf{k}) + \nabla_{\mathbf{k}} E_n \cdot \mathbf{q} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j + O(q^3), \quad (2.110)$$

Haciendo la misma expansión en el Hamiltoniano efectivo,  $H_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$  (2.111) Con

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{m} \mathbf{q} \cdot (-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k}) \quad (2.112)$$

Expandiendo a primer orden en  $\mathbf{q}$

$$H_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \simeq H_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{q}} \quad (2.113)$$

Podemos calcular la corrección a la energía debido al potencial  $V_{\mathbf{q}}$ , para ello usamos teoría perturbaciones a primer orden con lo cual la corrección a la energía es

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) V_{\mathbf{q}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \int u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{m} \mathbf{q} \cdot (-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar}{m} \int \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) (-i\hbar\nabla) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{q} \\ &= \frac{\hbar}{m} \langle n\mathbf{k} | \mathbf{p} | n\mathbf{k} \rangle \cdot \mathbf{q}, \end{aligned} \quad (2.114)$$

donde hemos usado la Ec. 2.105. Comparando con la serie de potencias 2.110 para  $E_n(\mathbf{k})$  encontramos que

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{\langle \mathbf{p}_n \rangle}{m} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}). \quad (2.115)$$

De tal manera que la velocidad de grupo en la banda  $n$  es dada por el gradiente del espectro de energía, por ejemplo para el caso de electrones libres tenemos (el lo que sigue no notaremos el índice  $n$ )

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}. \quad (2.116)$$

Como vimos en la sección anterior, cerca de los mínimos o máximos de las bandas podemos escribir en una dimensión

$$E(\delta k) = \frac{\hbar^2 \delta k^2}{2m^*}, \quad (2.117)$$

de tal manera que la velocidad de grupo es

$$v_g(k) = \frac{\hbar \delta k}{m^*} \quad (2.118)$$

Haciéndose cero cuando  $\delta k \rightarrow 0$ . Si hacemos la segunda derivada vemos que

$$\frac{\partial v_k}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E(\delta k)}{\partial^2 k} = \frac{\hbar}{m^*} \quad (2.119)$$

donde la masa efectiva es definida como

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial v_k}{\partial k} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\delta k)}{\partial^2 k} \quad (2.120)$$

Para entender este concepto de masa efectiva vamos a dar un argumento semiclásico y a mirar el efecto de un campo eléctrico y magnético sobre el vector de onda y la velocidad de grupo. Si aplicamos un campo eléctrico los electrones pueden ser acelerados y haciendo la derivada respecto al tiempo de  $\mathbf{v}_g(\mathbf{k})$  obteniendo,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}(\mathbf{k}(t))}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \sum_i \frac{\partial E_n(\mathbf{k}(t))}{\partial k_i} \hat{i} \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_j \partial k_i} \frac{dk_j}{dt} \hat{i} \end{aligned} \quad (2.121)$$

Considerando que los electrones que sienten el efecto del campo eléctrico están cerca al nivel de Fermi y se comportan similar a los electrones libres, tenemos que

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = q\mathbf{E} \quad (2.122)$$

lo que conduce a

$$\frac{d\mathbf{v}_\mathbf{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_j \partial k_i} qE_j \hat{i}. \quad (2.123)$$

Este resultado lo podemos escribir como

$$\frac{dv_{\mathbf{k},i}}{dt} = \sum_j \left( \frac{1}{m^*} \right)_{i,j} qE_j \quad (2.124)$$

Donde el tensor de la masa efectiva se define como

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{i,j} \equiv m_{ij}^{*-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial k_j \partial k_i} \quad (2.125)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial v_{\mathbf{k},i}}{\partial k_j}. \quad (2.126)$$

En forma vectorial tenemos

$$\frac{d\mathbf{v}_{\mathbf{k}}}{dt} = \frac{1}{m^*} q \mathbf{E}, \quad (2.127)$$

$(m^*)^{-1}$  es una matriz  $3 \times 3$ . En general se puede demostrar que un estado de Bloch  $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  con vector de onda  $\mathbf{k}$ , bajo el efecto de un campo eléctrico y magnético homogéneos y estáticos tiene la misma solución con un vector de onda dependiente del tiempo que cumple (ver más adelante)

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{B}) \quad (2.128)$$

Esta ecuación es análoga a la fuerza de Lorentz y el efecto del potencial de la red está en la forma de las superficies de energía y en la relación de dispersión, que a la vez nos determinan la velocidad de grupo y la masa efectiva. La ecuación (2.128) es válida para bajos campos y puede ser demostrada a partir de la Ecuación de Schrödinger y nos permite escribir como solución  $\psi_n(\mathbf{k}(t))$ , donde  $\psi_n(\mathbf{k})$  es la solución sin campos externos y con ello la velocidad de grupo como

$$\frac{d\mathbf{v}_{\mathbf{k}}}{dt} = \frac{\hbar \dot{\mathbf{k}}}{m^*} = \frac{1}{m^*} q(\mathbf{E} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \times \mathbf{B}). \quad (2.129)$$

Para encontrar la relación explícita de la masa efectiva, volvamos a nuestra aproximación  $kp$ , y escribamos explícitamente a segundo orden la corrección de la energía, para ello tenemos en cuenta el resultado a orden 1, ec. 2.114

$$E_n^{(2)} - \frac{\hbar^2}{2m} q^2 = \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^2 \sum_{n \neq n'} \frac{\langle n\mathbf{k} | \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{p}} | n'\mathbf{k} \rangle \langle n'\mathbf{k} | \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{p}} | n\mathbf{k} \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \quad (2.130)$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^2 \sum_{i,j} \sum_{n \neq n'} \frac{\langle n\mathbf{k} | \hat{p}_i | n'\mathbf{k} \rangle \langle n'\mathbf{k} | \hat{p}_j | n\mathbf{k} \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} q_i q_j \quad (2.131)$$

$$= \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^2 \sum_{n \neq n'} \sum_{i,j} \frac{p_{i,nn'} p_{jn'n}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} q_i q_j \quad (2.132)$$

Con

$$p_{i,nn'} = \int \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) (-i\hbar \nabla_i) \psi_{n'\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.133)$$

Nuevamente comparando con la serie de potencias

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\delta_{i,j}}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{n \neq n'} \frac{p_{i,nn'} p_{jn'n}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \equiv \left(\frac{1}{m^*}\right)_{i,j} \quad (2.134)$$

$$\left(\frac{m}{m^*}\right)_{i,j} = \delta_{i,j} + \frac{2}{m} \sum_{n \neq n'} \frac{p_{i,nn'} p_{jn'n}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}}$$

Con esto podemos escribir a segundo orden en  $q$  la corrección del espectro de energía

$$E_n(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = E_0 + \frac{\hbar}{m} \mathbf{p}_{nn} \cdot \mathbf{q} + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{q} \cdot \widehat{\left(\frac{m}{m^*}\right)} \cdot \mathbf{q}. \quad (2.135)$$

Como veremos a en la próxima sección, esta es la base de la teoría de perturbaciones en el método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ .

Para analizar la dinámica en general de los electrones de Bloch en campos eléctricos y magnéticos consideremos el hamiltoniano de un electrón en un campo electromagnético homogéneo

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}. \quad (2.136)$$

Si  $\psi_n(\mathbf{k}_0, \mathbf{r})$  es la función en  $t = 0$ , en un pequeño intervalo de tiempo  $dt$  la función de onda es

$$\begin{aligned} \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) &= e^{-iHdt/\hbar} \psi_n(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}) \\ &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} H dt\right) \psi_n(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.137)$$

Una pregunta natural es si ésta es una función de Bloch, para ello apliquemos el operador de traslación temporal  $T_{\mathbf{R}}$ ,

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) &= T_{\mathbf{R}} \left(1 - \frac{i}{\hbar} H dt\right) \psi_n(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}) \\ &= \left(T_{\mathbf{R}} - \frac{i}{\hbar} T_{\mathbf{R}} H dt\right) \psi_n(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}) \\ &= \left(T_{\mathbf{R}} - \frac{i}{\hbar} (HT_{\mathbf{R}} dt - [H, T_{\mathbf{R}}]_- dt)\right) \psi_n(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}) \\ &= \left(T_{\mathbf{R}} - \frac{i}{\hbar} (HT_{\mathbf{R}} + [T_{\mathbf{R}}, H]_-) dt\right) \psi_n(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.138)$$

Debemos calcular el conmutador de

$$[T_{\mathbf{R}}, H]_- = \left[ T_{\mathbf{R}}, \frac{1}{2m} (\mathbf{p}^2 + e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + e^2 \mathbf{A}^2) + V(\mathbf{r}) + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} \right]_-. \quad (2.139)$$

Por facilidad vamos a tomar el gauge

$$\mathbf{A} = (0, Bx, 0). \quad (2.140)$$

Para calcular el conmutador de  $[T_{\mathbf{R}}, H]_-$  actuando sobre una función de onda vamos a hacer unas demostraciones preliminares



$$\begin{aligned}
 [T_{\mathbf{R}}, x]_- f(x) &= T_{\mathbf{R}} x f(x) - x T_{\mathbf{R}} f(x) \\
 &= (x + R_x) f(x + R_x) - x f(x + R_x) \\
 &= R_x T_{\mathbf{R}} f(x).
 \end{aligned} \tag{2.141}$$

con  $R_x$  la traslación de Bravais  $\mathbf{R}$  en dirección  $x$ . Con esto podemos demostrar

$$\begin{aligned}
 [T_{\mathbf{R}}, \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}]_- f(\mathbf{r}) &= 2B p_y R_x T_{\mathbf{R}} f(\mathbf{r}) \\
 [T_{\mathbf{R}}, A^2]_- f(\mathbf{r}) &= B^2 [T_{\mathbf{R}}, x^2]_- f(\mathbf{r}) \\
 &= (B^2 R_x^2 T_{\mathbf{R}} + 2B^2 R_x x T_{\mathbf{R}}) f(\mathbf{r}).
 \end{aligned} \tag{2.142}$$

Con lo anterior tenemos que

$$\begin{aligned}
 [T_{\mathbf{R}}, H]_- &= \left( \frac{eB}{m} p_y R_x + \frac{e^2}{2m} B^2 R_x^2 + \frac{e^2}{m} B^2 R_x x + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{R} \right) T_{\mathbf{R}} \\
 &= \left( \frac{e}{m} p_y B_z R_x - \frac{e}{m} p_x B_z R_y + \frac{e}{m} p_x B_z R_y + \frac{e^2}{m} A_y B_z R_x + \frac{e^2}{2m} B^2 R_x^2 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{R} \right) T_{\mathbf{R}} \\
 &= \left( \frac{e}{m} (\mathbf{p} \times \mathbf{B})_x R_x + \frac{e}{m} (\mathbf{p} \times \mathbf{B})_y R_y + \frac{e}{m} \dot{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{R} + \frac{e^2}{m} (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{R} + \frac{e^2}{2m} B^2 R_x^2 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{R} \right) T_{\mathbf{R}} \\
 &= \left( \frac{e}{m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{R} + e\dot{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{R} + \frac{e^2}{2m} B^2 R_x^2 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{R} \right) T_{\mathbf{R}}.
 \end{aligned} \tag{2.143}$$

podemos oidentificar la fuerza de Lorentz como

$$\begin{aligned}
 \xi &= \frac{e}{m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \times \mathbf{B} + e\dot{\mathbf{A}} + e\mathbf{E} \\
 &= e\mathbf{v} \times \mathbf{B} + e\dot{\mathbf{A}} + e\mathbf{E},
 \end{aligned} \tag{2.144}$$

con lo cual a bajos campos magnéticos podemos escribir

$$[T_{\mathbf{R}}, H]_- \simeq (\xi \cdot \mathbf{R}) T_{\mathbf{R}}. \tag{2.145}$$

Insertando esto en la ecuación (2.138) obtenemos

$$\begin{aligned}
 T_{\mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) &= \left( 1 - \frac{i}{\hbar} (H + \xi \cdot \mathbf{R}) dt \right) T_{\mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}) \\
 &= e^{-\frac{i}{\hbar} \xi \cdot \mathbf{R} dt} e^{-\frac{i}{\hbar} H dt} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}) \\
 &= e^{i(\mathbf{k}_0 - \frac{\xi}{\hbar} dt) \cdot \mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) \\
 &= e^{i\mathbf{k}(t) \cdot \mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{k}(t), \mathbf{r}),
 \end{aligned} \tag{2.146}$$

con

$$\begin{aligned}\hbar \mathbf{k}(t) &= \hbar \mathbf{k}_0 - \xi dt \\ \hbar \dot{\mathbf{k}}(t) &= -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \dot{\mathbf{A}} + \mathbf{E}) \\ \frac{d}{dt}(\hbar \mathbf{k}(t) + e\mathbf{A}) &= -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \mathbf{E}).\end{aligned}\quad (2.147)$$

que podemos interpretar como una fuerza de Lorentz, donde  $\hbar(\mathbf{k}(t) + e\mathbf{A}) \equiv \mathbf{P}$ , con  $\mathbf{P}$  el momentum cinético. Siendo consistentes con la aproximación a campo bajo que hemos hecho no hay diferencia entre el momentum cinético y el momentum canónico, así que  $\mathbf{P} \simeq \hbar \mathbf{k}(t)$ , de tal manera que

$$\hbar \dot{\mathbf{k}}(t) = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \mathbf{E}) \quad (2.148)$$

Que es la “fuerza de Lorentz” para el estado  $\dot{\mathbf{k}}(t)$ , es decir la variación de un estado de Bloch descrito por el vector de onda  $\mathbf{k}$  es gobernada por la fuerza de Lorentz asociada a los campos electroamgnéticos externos, en los que no aparece el potencial de la red y lo cual podemos describir como estados  $\psi_n(\mathbf{k}(t), \mathbf{r})$ .

$$\psi_n(\mathbf{k}(t), \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}(t) \cdot \mathbf{r}} u_n(\mathbf{k}(t), \mathbf{r}) \quad (2.149)$$

Por lo tanto en esta aproximación los electrones son descritos por funciones de Bloch y el efecto de un campo eléctrico y magnético es cambiar el estado  $\mathbf{k}$  de la función de Bloch.

### 2.6.2. Interacción espín-orbita

El hamiltoniano incluyendo la interacción espín orbita es

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{p}. \quad (2.150)$$

Con  $\sigma$  las matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.151)$$

Si tomamos el espín en direccipon  $z$  como los estados propios de espín, tenemos

$$\sigma_z |\sigma\rangle = \sigma |\sigma\rangle, \sigma = \pm 1 \quad (2.152)$$

Este hamiltoniano es periódico si  $V(\mathbf{r})$  es periódico, sin embargo las funciones de Bloch no son iguales para espines diferentes, la función de onda la podemos escribir como

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} \chi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) \\ \zeta_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}\end{aligned} \quad (2.153)$$

Donde  $u_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r})$  es un espinor de dos componentes, si la interacción espín-orbita es cero, denemos que

$$\chi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = \delta_{1,\sigma} u_{\mathbf{k}0}(\mathbf{r}), \quad \zeta_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = \delta_{-1,\sigma} u_{\mathbf{k}0}(\mathbf{r}) \quad (2.154)$$

Donde  $u_{\mathbf{k}0}(\mathbf{r})$  es una función escalar y que es la usada cuando no hay interacción espín-orbita  $u_{\mathbf{k}0}(\mathbf{r}) \equiv u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ . Con interacción SO,  $u_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$  (igual que  $\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$ ) combina ambos estados de espín  $|u_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})\rangle = \chi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})|+\rangle + \zeta_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})|-\rangle$  y por lo tanto no tiene la componente de espín bien definida, sin embargo el subíndice  $\uparrow$  se refiere que su proyección de espín en  $z$  positiva, es decir  $\langle u_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) | \sigma_z | u_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle > 0$ . La ecuación que satisface  $u_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r})$  es

$$\left( \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{k})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{k}) \right) u_{n\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = E_{n\sigma}(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.155)$$

la cual podemos escribir como

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot (\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}) \right) u_{n\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = E'_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}). \quad (2.156)$$

Donde el término perturbativo para  $\mathbf{k} \neq 0$  es

$$\begin{aligned} H' &= \frac{\hbar}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k} + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot \hbar \mathbf{k} \\ &= \frac{\pi \cdot \mathbf{k}}{m}, \end{aligned} \quad (2.157)$$

con

$$\pi = \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{4mc^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}). \quad (2.158)$$

### 2.6.3. Simetría de inversión temporal y teorema de Kramers

Consideremos primero como ejemplo un sistema “sin” espín, en donde la ecuación de Schrödinger es

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Si suponemos que  $H$  es real (no hay campos magnéticos), podemos hacer el complejo conjugado

$$H\psi^* = i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial (-t)}.$$

De tal manera que cambiar  $t$  por  $-t$  equivale a hacer  $\psi \rightarrow \psi^*$ , y deja la densidad de probabilidad invariante pero la densidad de corriente de probabilidad no dado que  $\mathbf{J} \propto \text{Im}(\psi^* \nabla \psi)$ ,  $\mathbf{J} \rightarrow -\mathbf{J}$ . Por

otro lado esto implica que  $H\psi = E\psi$ ,  $H\psi^* = E\psi^*$  y el estado estará degenerado dependiendo de si  $\psi^*$  es linealmente independiente de  $\psi$ . Si llamamos a  $K$  el operador de inversión temporal,

$$\begin{aligned} KH\psi &= K\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\right), \\ H(K\psi) &= K\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\right). \end{aligned} \quad (2.159)$$

Para que  $K\psi$  sea un estado de  $H$ , reemplazando  $t$  por  $-t$ , se debe cumplir que  $Ki = -iK$ , de tal manera que

$$H(K\psi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial(-t)}(K\psi). \quad (2.160)$$

Esto nos define que el operador es antilineal,

$$K(\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2) = \alpha^*K\varphi_1 + \beta^*K\varphi_2, \quad (2.161)$$

Al incluir el espín, el operador  $K$  lo podemos proponer como

$$K = UK_0. \quad (2.162)$$

donde  $U$  es un operador unitario y  $K_0$  el operador complejo conjugado.

$$K_0\varphi = \varphi^* \quad (2.163)$$

y cumple  $K_0^2 = 1$ . En este caso se dice que es un operador antilineal, y conserva la magnitud del producto escalar

$$|\langle K\psi | K\varphi \rangle| = |\langle \psi | \varphi \rangle| \quad (2.164)$$

La simetría de inversión temporal tiene la siguiente propiedad sobre los operadores de posición, momentum y espín.

$$\begin{aligned} K\mathbf{r} &= \mathbf{r}K \\ K\mathbf{p} &= -\mathbf{p}K \\ K\sigma &= -\sigma K \end{aligned} \quad (2.165)$$

Sin tener en cuenta el espín  $K = K_0$ , cumple estas propiedades en la representación de posición,  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ , así que  $K_0\mathbf{p} = -\mathbf{p}$  y podemos hacer  $U = 1$ . Al tener en cuenta el espín, necesitamos una matriz  $U$  tal que

$$\begin{aligned} U\sigma_x &= -\sigma_x U \\ U\sigma_y &= \sigma_y U \\ U\sigma_z &= -\sigma_z U \end{aligned} \quad (2.166)$$

donde hemos usado que  $\sigma_y^* = -\sigma_y$ , es claro que  $U$  lo podemos escoger como  $U \propto \sigma_y$  dado que  $\sigma_j^\dagger \sigma_i \sigma_j = -\sigma_i$  para  $i \neq j$  y  $\sigma_i^\dagger \sigma_i \sigma_i = \sigma_i$ . Con lo anterior tenemos que la representación del operador  $K$  es

$$K = -i\sigma_y K_0 \quad (2.167)$$

Nota La forma general es  $K = \exp(-i\pi S_y/2) K_0$  y toma la forma anterior cuando el espín es  $1/2$ . El papel de  $\exp(-i\pi S_y/2)$  es rotar el espín alrededor del eje  $y$ , cambiando  $S_x \rightarrow -S_x$ ,  $S_y \rightarrow S_y$  y  $S_z \rightarrow -S_z$ . Una propiedad importante que cumple el operador  $K$  es

$$\begin{aligned} K^2 \psi &= -i\sigma_y K_0 (-i\sigma_y K_0) \psi \\ &= -\sigma_y^2 \psi \\ &= -\psi \end{aligned} \quad (2.168)$$

Donde hemos usado  $\sigma_y^2 = 1$ , El operador  $K_0$  tiene la siguiente propiedad

$$\begin{aligned} \langle K_0 \psi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{r}) | K_0 \psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) \rangle &= \int d\mathbf{r} K_0 \psi_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}) K_0 \psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger*}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} (\psi_{\mathbf{k}'\sigma',1}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}\sigma,1}^*(\mathbf{r}) + \psi_{\mathbf{k}'\sigma',2}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}\sigma,2}^*(\mathbf{r})) \\ &= \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{r}) \\ &= \langle \psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) | \psi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{r}) \rangle \end{aligned} \quad (2.169)$$

$$\begin{aligned} \langle K \psi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{r}) | K \psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) \rangle &= \int d\mathbf{r} (K_0 \psi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{r}))^\dagger i\sigma_y^\dagger \cdot -i\sigma_y K_0 \psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} (K_0 \psi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{r}))^\dagger \cdot \sigma_y^2 K_0 \psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) \\ &= \langle \psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) | \psi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{r}) \rangle \end{aligned} \quad (2.170)$$

Donde hemos usado  $i\sigma_y^\dagger = i\sigma_y$ . Las propiedades anteriores son más generales dado que

$$\langle K_0 \psi | K_0 \varphi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | \psi \rangle \quad (2.171)$$

$$\langle K \psi | K \varphi \rangle = \langle U K_0 \psi | U K_0 \varphi \rangle = \langle K_0 \psi | K_0 \varphi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle \quad (2.172)$$

#### 2.6.4. Teorema de Kramers

Analicemos el efecto de aplicar el operador de inversión a un estado de Bloch,

$$\begin{aligned} K \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) &= -i\sigma_y K_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \\ &= e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{u}_{\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.173)$$

donde  $\tilde{u}_{\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) \equiv -i\sigma_y K_0 u_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$  es una función periódica, así que podemos escribir

$$K\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) = \psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) \quad (2.174)$$

Para convencernos de esto, apliquemos el operador de traslación a  $\psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r})$ , así que  $T_l K\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} K\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r})$

Vamos a mostrar que  $\psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r})$  es función propia de  $H$  y es un estado ortogonal a  $\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$ , para ello apliquemos  $H$  a este estado,

$$H\psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) = E_{-\mathbf{k}\downarrow}\psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) \quad (2.175)$$

Dado que el Hamiltoniano tiene inversión temporal,  $[H, K]_- = 0$ , así

$$\begin{aligned} H\psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) &= HK\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \\ &= KH\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.176)$$

$$\begin{aligned} &= KE_{\mathbf{k}\uparrow}\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \\ &= E_{\mathbf{k}\uparrow}\psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.177)$$

De tal manera que podemos concluir que

$$E_{-\mathbf{k}\downarrow} = E_{\mathbf{k}\uparrow} \quad (2.178)$$

es claro que también se cumple

$$E_{-\mathbf{k}\uparrow} = E_{\mathbf{k}\downarrow} \quad (2.179)$$

Este es el denominado teorema de Kramers. En el caso que el hamiltoniano sea real sin interacción espín orbita tenemos que

$$T_l\psi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{r}) \quad (2.180)$$

$$T_l\psi_{-\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi_{-\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) \quad (2.181)$$

de tal manera que  $\psi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{r})$  y  $\psi_{-\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r})$  describen el mismo estado y como  $H$  es real  $\psi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{r})$  también es estado propio de  $H$

$$H\psi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}\sigma}\psi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{r}) \quad (2.182)$$

$$H\psi_{-\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = E_{-\mathbf{k}\sigma}\psi_{-\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.183)$$

en este caso  $E_{\mathbf{k}\sigma} = E_{-\mathbf{k}\sigma}$ , que es una condición especial del teorema de Kramers cuando hay degeneración de espín. En general con interacción espín-orbita se rompe este degeneramiento, y solo podemos afirmar que  $E_{\mathbf{k},\sigma} = E_{-\mathbf{k},-\sigma}$

Ahora demostremos que  $\psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r})$  es un estado ortogonal a  $\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) | \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle &= \langle K \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) | \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle \\
 &= - \langle K \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) | K^2 \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle \\
 &= - \langle K \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) | \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle \\
 &= - \langle \psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) | \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{2.184}$$

es decir  $\psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r})$  es un estado linealmente independiente de  $\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$ , y la energía  $E_{\mathbf{k}\uparrow}$  está degenerada.

### 2.6.5. Inversión espacial

El operador de inversión espacial  $I$  cambia  $\mathbf{r}$  por  $-\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{p}$  por  $-\mathbf{p}$  y  $\sigma$  por  $\sigma$ , La razón de que el espín no cambie de signo es que éste es un momentum angular y se transforma como un vector axial, mientras que  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{p}$  son vectores polares. El término de interacción espín orbita es invariante bajo inversiones, dado que incluye una derivada espacial y un vector momentum. Ahora si el potencial de la red es invariante bajo inversiones espaciales  $H$  conmutará con  $I$ , tenemos que

$$\begin{aligned}
 I \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) &= I e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \\
 &= e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}\uparrow}(-\mathbf{r})
 \end{aligned} \tag{2.185}$$

Dado que

$$T_l(I \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} (I \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})) \tag{2.186}$$

el estado  $I \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$  está asociado al vector de onda  $-\mathbf{k}$ , así que podemos llamar  $u_{\mathbf{k}\uparrow}(-\mathbf{r}) = u_{-\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$ , y con esto

$$\begin{aligned}
 I \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) &= e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{-\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \\
 &= \psi_{-\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}).
 \end{aligned} \tag{2.187}$$

Dado que  $I$  conmuta con  $H$  tenemos

$$\begin{aligned}
 H(I \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})) &= I H \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \\
 &= E_{\mathbf{k}\uparrow} (I \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})),
 \end{aligned} \tag{2.188}$$

pero usando  $I \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) = \psi_{-\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned}
 H(I \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})) &= H \psi_{-\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) \\
 &= E_{-\mathbf{k}\uparrow} \psi_{-\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}).
 \end{aligned} \tag{2.189}$$

Por lo tanto

$$E_{\mathbf{k}\uparrow} = E_{-\mathbf{k}\uparrow}, \quad (2.190)$$

y generalizando este resultado tenemos

$$E_{\mathbf{k}\sigma} = E_{-\mathbf{k}\sigma}. \quad (2.191)$$

Cuando tenemos inversión espacial, nos referimos a estados de paridad, por ejemplo paridad par o impar. Una simetría adicional es la de conjugación, que definimos como  $C = KI$ , al combinar  $K$  e  $I$ , el efecto neto es cambiar el espín, así  $C\psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r})$ .

## 2.7. Cálculo de bandas en la aproximación $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ .

Anteriormente vimos como el método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  nos sirve para analizar las propiedades del espectro de energía alrededor de un punto  $\mathbf{k}$  del espacio recíproco, es así como las primeras derivadas del espectro estaban relacionadas con la velocidad de grupo y con la definición de masa efectiva. En esta sección vamos a introducir cómo calcular de manera aproximada la estructura de bandas alrededor de un punto particular  $\mathbf{k}_0$  usando esta aproximación, en primera instancia vamos a suponer que el espectro no está degenerado, y luego vamos a ver cómo usar el método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  cuando el espectro está degenerado.

Retomando la ecuación para  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  y considerando  $\mathbf{k} = 0$ , obtenemos la ecuación

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) u_{n0}(\mathbf{r}) = E_{n0} u_{n0}(\mathbf{r}). \quad (2.192)$$

Las funciones  $u_{1,0}(\mathbf{r}), u_{2,0}(\mathbf{r}), \dots$  con energías  $E_{1,0}, E_{2,0}, \dots$  que corresponde a diferentes bandas, en este caso  $\psi_{n0}(\mathbf{r}) = u_{n0}(\mathbf{r})$  forman una base completa para cualquier función que tenga las simetrías del cristal y por lo tanto para cualquier  $u_{n,\mathbf{k}}$ . Por lo tanto podemos usar como base para la teoría de perturbaciones las funciones  $u_{n0}(\mathbf{r})$ . Para estados con  $\mathbf{k} \neq 0$  el hamiltoniano a primer orden sin incluir espín orbita es

$$H_1 = \frac{\hbar}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k} \quad (2.193)$$

A primer orden en teoría de perturbaciones la corrección de la energía en la banda  $n$  es

$$E_{n\mathbf{k}}^{(1)} = \frac{\hbar}{m} \langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n0} \rangle \cdot \mathbf{k} \quad (2.194)$$

Si el sistema tiene simetría de inversión, las funciones  $u_{n,\mathbf{k}=0}$  tienen paridad bien definida, de tal manera que la integral  $\langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n0} \rangle$  es impar y su contribución a la energía es cero. Por otro lado si estamos en un máximo o mínimo de la banda de energía esta contribución también es cero. Sin embargo en teoría de perturbaciones degenerada esto puede cambiar. Ahora si tenemos un punto  $\mathbf{k}_0 \neq 0$  en donde encontramos las funciones  $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$  estas forman una base, y  $H_1$  es proporcional



a  $\mathbf{p} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{k}$ , haciendo el cambio de  $\delta \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}$  obtenemos un  $H_1 \propto \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}$  como en el caso anterior. Suponiendo que la corrección a primer orden es cero, a segundo orden la energía es

$$E_{\mathbf{k}} = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k} \cdot \left( \frac{m}{m^*} \right) \cdot \mathbf{k} \quad (2.195)$$

Podemos usar esta expresión para  $E_{\mathbf{k}}$  para definir un hamiltoniano efectivo  $H(\hbar \mathbf{k})$

$$H(\hbar \mathbf{k} \rightarrow -i\hbar \nabla) = \left( E_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \left( \frac{m}{m^*} \right)_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}). \quad (2.196)$$

La solución de esta ecuación nos da el valor correcto de  $\mathbf{k}$  en la vecindad de  $\mathbf{k}_0$  y  $\varphi(\mathbf{r})$  sera una función de onda válida en esta vecindad. Si adicionamos un potencial  $V(\mathbf{r})$  que varíe suavemente a distancias atómicas, similar a como hicimos en la aproximación semiclásica para incluir el efecto de un campo electromagnético, podemos resolver la ecuación

$$\left( E_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \left( \frac{m}{m^*} \right)_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} + V(\mathbf{r}) \right) \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}). \quad (2.197)$$

Esto permite aplicar el método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  a sistemas que no son periódicos, tales como heteroestructuras, junturas y sistemas finitos.

## 2.8. Aproximación $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ con estados degenerados

En el caso que los estados en las bandas esten degenerados debemos usar teoría de perturbaciones degenerada, en este caso para las correcciones a primer y segundo orden. Si tenemos una banda  $n$  con  $\nu_n$  estados degenerado,  $i = 1, 2, \dots, \nu_n$ . Las correcciones a la energía en esta banda son calculadas a partir de diagonalizar la matriz  $H_n = H_n^{(1)} + H_n^{(2)}$  donde  $H_n^{(1)}$  y  $H_n^{(2)}$  son las correcciones a orden (1) y (2) cuyos elementos en los estados degenerados en la banda  $n$  son dados por

$$H_{n,ij}^{(1)} = \langle ni | H' | nj \rangle, \quad (2.198)$$

$$H_{n,ij}^{(2)} = \sum_{n' \neq n} \sum_{h=1}^{\nu_{n'}} \frac{\langle ni | H' | n'h \rangle \langle n'h | H' | nj \rangle}{E_n - E_{n'}}.$$

Donde hemos denotado que cada banda  $n'$  tiene estados degenerados  $h = 1, \dots, \nu_{n'}$ , en ocasiones la suma sobre  $h$  se coloca implícita en  $n'$ . Es importante resaltar que los estados  $|nj\rangle$ , etc son los no perturbados a  $k = 0$ , es decir  $|nj\rangle \equiv |n0j\rangle$  Como vimos el término perturbativo es

$$H' = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}. \quad (2.199)$$

Para ilustrar el método anterior consideremos que tenemos dos bandas, una de valencia  $n = v$  con dos estados degenerados con simetría tipo  $p_x$  y  $p_y$ ,  $|v, p_{x(y)}\rangle \equiv |x(y)\rangle$  y una banda de conducción con  $n = c$ , cuyo estado tiene simetría tipo  $s$ ,  $|cs\rangle \equiv |s\rangle$ . En  $k = 0$  la brecha de energía es  $E_g$  y el sistema tiene simetría axial a lo largo del eje  $z$ , si existe un orbital  $p_z$  vamos a suponer por ahora que su energía es mucho más alta que la de las bandas involucradas. El término a primer orden para la banda de conducción es

$$H_{c,ss}^{(1)} = \frac{\hbar}{m} \langle s | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | s \rangle \quad (2.200)$$

por paridad del estado  $s$  esta integral es impar, si cambiamos  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  los estados no cambian pero el gradiente cambia de signo por lo tanto  $H_{1,ss}^{(1)} = 0$ . Los términos a primer orden para la banda de valencia son

$$H_{v,xx}^{(1)} = \frac{\hbar}{m} \langle x | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | x \rangle = 0 \quad (2.201)$$

$$H_{v,xy}^{(1)} = \frac{\hbar}{m} \langle y | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | y \rangle = 0 \quad (2.202)$$

etc. Aquí también se anulan por paridad dado que al hacer  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ , tenemos que  $|p_{x(y)}\rangle \rightarrow -|p_{x(y)}\rangle$  y la integral vuelve a ser impar.

A segundo orden para la banda de conducción tenemos

$$\begin{aligned} H_{c,ss}^{(2)} &= \left( \frac{\hbar}{m} \right)^2 \sum_{h=p_x, p_y} \frac{\langle s | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | h \rangle \langle h | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | s \rangle}{E_c - E_v} \\ &= \left( \frac{\hbar}{m} \right)^2 \frac{1}{E_g} (\langle s | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | x \rangle \langle x | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | s \rangle + \langle s | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | y \rangle \langle y | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | s \rangle) \\ &= \left( \frac{\hbar}{m} \right)^2 \frac{1}{E_g} (k_x^2 |\langle s | p_x | x \rangle|^2 + k_y^2 |\langle s | p_y | y \rangle|^2) \\ &= A \hbar^2 (k_x^2 + k_y^2), \end{aligned} \quad (2.203)$$

con

$$A = \frac{1}{E_g m^2} |\langle s | p_x | x \rangle|^2 = \frac{1}{E_g m^2} |\langle s | p_y | y \rangle|^2 \equiv \frac{|P|^2}{E_g m^2}. \quad (2.204)$$

De tal manera que el espectro de energía lo podemos escribir como

$$\begin{aligned} E_s &= E_v + E_g + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) + \hbar^2 A (k_x^2 + k_y^2) \\ &= E_v + E_g + \frac{\hbar^2}{2m^{c*}} (k_x^2 + k_y^2), \end{aligned} \quad (2.205)$$

con

$$\frac{m}{m_{\mu\nu}^{c*}} = \left( 1 + \frac{2}{E_g m} |P|^2 \right) \delta_{\mu\nu}. \quad (2.206)$$

Para la banda de valencia debemos usar la teoría degenerada, con lo cual debemos calcular términos de la forma

$$\begin{aligned}
H_{v,xx}^{(2)} &= \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \sum_{n'h} \frac{\langle x | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | n'h \rangle \langle n'h | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | x \rangle}{E_v - E_{n'}} \\
&= \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \frac{\langle x | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | s \rangle \langle s | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | x \rangle}{E_v - E_c} \\
&= -\frac{1}{E_g} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 |P|^2 k_x^2 = -Ak_x^2
\end{aligned} \tag{2.207}$$

$$\begin{aligned}
H_{v,xy}^{(2)} &= -\frac{1}{E_g} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \frac{\langle x | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | s \rangle \langle s | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | y \rangle}{E_v - E_{n'}} \\
&= \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \frac{\langle x | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | s \rangle \langle s | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | y \rangle}{E_v - E_c} \\
&= -\frac{1}{E_g} \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 |P|^2 k_x k_y = -Ak_x k_y.
\end{aligned} \tag{2.208}$$

Con lo anterior tenemos que

$$H_{\mathbf{k}}^v = \left( E_v + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) \right) I - A \begin{pmatrix} k_x^2 & k_x k_y \\ k_x k_y & k_y^2 \end{pmatrix}. \tag{2.209}$$

El cual escribimos explícitamente como

$$H_{\mathbf{k}}^v = \begin{pmatrix} E_v + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) - Ak_x^2 & -Ak_x k_y \\ -Ak_x k_y & E_v + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) - Ak_y^2 \end{pmatrix},$$

y la energía la obtenemos de

$$\begin{vmatrix} E_v + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) - Ak_x^2 - E & -Ak_x k_y \\ -Ak_x k_y & E_v + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) - Ak_y^2 - E \end{vmatrix} = 0, \tag{2.210}$$

cuyos estados son

$$\begin{aligned}
E_- &= E_v + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) - A (k_x^2 + k_y^2) \\
&= E_v - \frac{\hbar^2}{2|m^{v*}|} (k_x^2 + k_y^2),
\end{aligned} \tag{2.211}$$

$$E_+ = E_v + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2), \tag{2.212}$$

con

$$\frac{m}{m_{\mu\nu}^*} = \left(1 - \frac{2}{E_g m} |P|^2\right) \delta_{\mu\nu} < 0,$$

lo conduce a un rompimiento del degeneramiento de los estados de la banda de valencia para  $k \neq 0$ .

Consideremos ahora el efecto la interacción espín orbita, para ello debemos tener en cuenta el término adicional

$$H'_{SO} = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{k}.$$

El primer término es la interacción SO para  $\mathbf{k} = 0$ , mientras el segundo es el término perturbativo en la aproximación  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  y que vamos a despreciar cerca de  $k = 0$ . Reescribiendo  $H_{SO}$  para una campo de fuerzas central.

$$\begin{aligned} H'_{SO} &\simeq H_{SO} = \frac{\hbar^2 e}{4m^2 c^2} \frac{E_r}{r} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \\ &= -i \frac{e \hbar^3}{4m^2 c^2} \frac{E_r}{r} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla) \\ &= -i \frac{\Lambda}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla), \end{aligned} \tag{2.213}$$

con

$$\Lambda = \frac{e \hbar^3}{4m^2 c^2} \frac{E_r}{r}.$$

Para calcular el efecto de la interacción SO a primer orden en la banda de valencia podemos demostrar que

$$\langle y | H_{SO} | x \rangle = -\langle x | H_{SO} | y \rangle = i\lambda \sigma_z \tag{2.214}$$

con  $\lambda > 0$ . Si tenemos la influencia de los orbitales  $p_z$  los cuales ahora suponemos degenerados con  $p_x$  y  $p_y$ , se puede mostrar

$$\langle z | H_{SO} | y \rangle = -\langle y | H_{SO} | z \rangle = i\lambda \sigma_x \tag{2.215}$$

$$\langle x | H_{SO} | z \rangle = -\langle x | H_{SO} | z \rangle = i\lambda \sigma_y \tag{2.216}$$

Con lo cual la base de espín y orbitales ( $\boldsymbol{\sigma} \otimes p$ ) el hamiltoniano SO es dado por

$$H_{SO} = i\lambda \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_z & \sigma_y \\ \sigma_z & 0 & -\sigma_x \\ -\sigma_y & \sigma_x & 0 \end{pmatrix} \tag{2.217}$$

y hamiltoniano total es

$$H = \sigma_0 H_{0\mathbf{k}} + H_{SO}, \quad (2.218)$$

con

$$H_{0\mathbf{k}} = E_0 \sigma_0 I - A \sigma_0 \begin{pmatrix} k_x^2 & k_x k_y & k_x k_z \\ k_x k_y & k_y^2 & k_y k_z \\ k_x k_z & k_y k_z & k_z^2 \end{pmatrix}, \quad (2.219)$$

donde  $\sigma_0$  es la matriz unidad en el espacio de espín e  $I$  en el espacio de los orbitales.  $E_0 = E_v + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ .

Si consideramos el estado  $k = 0$ , se puede mostrar que se obtiene

$$E = E_0 + 2\lambda \text{ degeneración } 2, \quad (2.220)$$

$$E = E_0 - \lambda, \text{ degeneración } 4. \quad (2.221)$$

Por lo tanto las bandas de valencia que tenían degeneración 6, de desdoblan separándose una energía  $3\lambda$  en  $k = 0$  debido a la interacción espín órbita. En este caso el gap disminuye y su nuevo valor es

$$\Delta = E_g - \lambda \quad (2.222)$$

Otro caso sencillo es un sistema bidiimensional, como en el primer ejemplo de esta sección, no tenemos contribución de  $p_z$ , así que hacemos  $k_z = 0$ , en este caso la matriz es también de dimensión 6, pero el único término espín órbita que contribuye es el debido a  $\sigma_z$ . Para  $k = 0$  se obtiene que las dos bandas de valencia se separan  $2\lambda$ , si consideramos la diagonal en la que  $k_x = k_y \equiv k$ , se puede mostrar que

$$E_{\pm} = E_v + \frac{\hbar^2}{2m} (2k^2) - Ak^2 \pm \lambda \quad (2.223)$$

Un caso más interesante es cuando volvemos al sistema tridimensional y hacemos  $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$  podemos obtener bandas pesadas o livianas de huecos, ver por ejemplo: The  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  method and its application to graphene, carbon nanotubes, and graphene nanoribbons: the Dirac equation, P. Marconcini, M. Macucci, RIVISTA DEL NUOVO CIMENTO Vol. 34, N. 8-9, 2011., o Fundamentals of semiconductors. P. Y. Yu, M. Cardona. 2<sup>nd</sup> ed. Springer, 1999.

## Funciones de Green

### 3.1. Definiciones generales

En este capítulo vamos a definir las funciones de green para sistemas fermiónicos y bosónicos de forma general, la función de Green retardada ( $r$ ), avanzada ( $a$ ) y causal( $c$ ) las definimos como

$$G_{AB}^r(t, t') = \left\langle \left\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \right\rangle \right\rangle^r = -i\theta(t - t') \left\langle \left[ \hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_{-\epsilon} \right\rangle. \quad (3.1)$$

$$G_{AB}^a(t, t') = \left\langle \left\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \right\rangle \right\rangle^a = i\theta(t' - t) \left\langle \left[ \hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_{-\epsilon} \right\rangle. \quad (3.2)$$

$$G_{AB}^c(t, t') = \left\langle \left\langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \right\rangle \right\rangle^c = -i \left\langle \hat{T}_\epsilon \left( \hat{A}(t) \hat{B}(t') \right) \right\rangle, \quad (3.3)$$

donde los operadores están escritos en la imagen de Heisenberg y el valor esperado es en un ensamble gran canónico. El conmutador o anticomutador se define como

$$\left[ \hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_{-\epsilon} = \hat{A}(t) \hat{B}(t') - \epsilon \hat{B}(t') \hat{A}(t), \quad (3.4)$$

donde

$$\epsilon = \begin{cases} + & \text{conmutador: funciones simétricas} \Rightarrow \text{bosones,} \\ - & \text{anticomutador: funciones antisimétricas} \Rightarrow \text{fermiones,} \end{cases}$$

y  $\hat{T}_\epsilon$  es el operador de ordenación en el tiempo de Wick definido como

$$\hat{T}_\epsilon \left( \hat{A}(t) \hat{B}(t') \right) = \theta(t - t') \hat{A}(t) \hat{B}(t') + \epsilon \theta(t' - t) \hat{B}(t') \hat{A}(t). \quad (3.5)$$

De las definiciones (3.1) a (3.3) las funciones de Green pueden depender explícitamente de la temperatura. Como veremos más adelante es posible relacionar estrechamente el tiempo con la temperatura y trabajar en un espacio complejo de tiempo. Definimos la densidad espectral como

$$S_{AB}(t, t') = \frac{1}{2\pi} \left\langle \left[ \hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_{-\epsilon} \right\rangle \quad (3.6)$$

y las funciones de correlación como el valor esperado de productos de operadores

$$\left\langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \right\rangle \quad \text{y} \quad \left\langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \right\rangle \quad (3.7)$$

del **ejercicio ??** se plantea que si el hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo las funciones de Green y la densidad espectral son homogéneas en el tiempo; es decir

$$G_{AB}^{\alpha}(t, t') = G_{AB}^{\alpha}(t - t') \quad \text{con} \quad \alpha \equiv ret, av, c. \quad (3.8a)$$

$$S_{AB}(t, t') = S_{AB}(t - t') \quad (3.8b)$$

### 3.2. Ecuación de Movimiento de las Funciones de Green

De la ecuación de movimiento para operadores en la imagen de Heisenberg si  $\hat{A}_s$  no depende explícitamente del tiempo es

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = [\hat{A}_H, \hat{H}_H](t) \quad (3.9)$$

y de

$$\frac{d}{dt}\theta(t - t') = \delta(t - t') = -\frac{d}{dt'}\theta(t - t') \quad (3.10)$$

surge directamente la ecuación de movimiento para las funciones de Green, (ver **ejercicio ??**), y asumiendo que  $\partial \hat{A}_s / \partial t = 0$ , obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{AB}^{\alpha}(t, t') = \hbar \delta(t - t') \left\langle [\hat{A}, \hat{B}]_{-\epsilon} \right\rangle + \left\langle \left\langle [\hat{A}, \hat{H}]_{-}(t); \hat{B}(t') \right\rangle \right\rangle^{\alpha} \quad (3.11)$$

Las soluciones según  $\alpha$  depende de las condiciones de frontera

$$G_{AB}^r(t, t') = 0 \quad \text{para} \quad t < t' \quad (3.12)$$

$$G_{AB}^a(t, t') = 0 \quad \text{para} \quad t > t' \quad (3.13)$$

$$G_{AB}^c(t, t') = \begin{cases} -i \left\langle \hat{A}(t - t'), \hat{B}(0) \right\rangle & \text{para} \quad t > t' \\ -i \in \left\langle \hat{B}(0), \hat{A}(t - t') \right\rangle & \text{para} \quad t < t' \end{cases} \quad (3.14)$$

Obsérvese el segundo término de la derecha de la ecuación (3.10): Función de Green de mayor orden (jerarquía), está construida con más operadores que la original  $G_{AB}$ . Para esta nueva Función de Green se puede escribir su correspondiente ecuación de movimiento (del tipo (3.11)) y por lo tanto aparecerán nuevas funciones de Green de orden superior. Por ejemplo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\langle \left\langle [\hat{A}, \hat{H}]_{-}(t); \hat{B}(t') \right\rangle \right\rangle^{\alpha} = \hbar \delta(t - t') \left\langle \left[ [\hat{A}, \hat{H}]_{-}(t); \hat{B}(t) \right]_{-\epsilon} \right\rangle + \left\langle \left\langle \left[ [\hat{A}, \hat{H}]_{-}, \hat{H} \right]_{-}(t); \hat{B}(t') \right\rangle \right\rangle^{\alpha} \quad (3.15)$$

lo que conduce a una cadena de ecuaciones de movimiento. Siempre y cuando exista una razón puede romperse y en ese caso tendremos una solución aproximada.

La representación en términos de la energía o frecuencia resulta muy útil a la hora de trabajar con las funciones de Green, ésta se basa en hacer una transformada de Fourier a las funciones

de Green de forma similar como hicimon en el capítulo de Funciones de Green de una partícula y la podemos hacer para sistemas homogéneo en el tiempo  $\partial H/\partial t = 0$ .

$$G_{AB}^{\alpha}(\omega) = \left\langle \left\langle \hat{A}; \hat{B} \right\rangle \right\rangle_{\omega}^{\alpha} = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') G_{AB}^{\alpha}(t-t') e^{i\omega(t-t')} \quad (3.16)$$

$$G_{AB}^{\alpha}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{AB}^{\alpha}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} \quad (3.17)$$

con

$$\delta(\omega - \omega') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{-i\omega(t-t')} \quad (3.18)$$

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(t-t')} \quad (3.19)$$

La ecuación (3.11) queda de la forma (ver ejercicio ??)

$$\omega \left\langle \left\langle \hat{A}; \hat{B} \right\rangle \right\rangle_{\omega}^{\alpha} = \left\langle \left[ \hat{A}, \hat{B} \right]_{-\epsilon} \right\rangle + \left\langle \left\langle \left[ \hat{A}, \hat{H} \right]_{-} ; \hat{B} \right\rangle \right\rangle_{\omega}^{\alpha} \quad (3.20)$$

Donde como antes hemos usado la notación  $\hat{H}/\hbar \rightarrow \hat{H}$ . Nótese que ésta no es una ecuación diferencial en el tiempo sino algebraica en las frecuencias, pero de todas formas aparece una cadena que debe romperse. Las condiciones de frontera (3.12) - (3.14) aparecen en la representación de energía o frecuencia como comportamientos analíticos de las  $G_{AB}(\omega)$  en el plano complejo.

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_0 - \mu \hat{N}, \quad \hat{H}_0 = \sum_{n,\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_n(\mathbf{k}) \hat{c}_{n\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{n\mathbf{k},\sigma}; \quad \hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{n\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{n\mathbf{k},\sigma} \quad (3.21)$$

con  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  la energía de los electrones en la banda  $n$ , el lo que sigue nos vamos a restringir a una sola banda

### 3.2.1. Propiedades del sistema electrónico

Todas las propiedades del sistema electrónico las vamos a encontrar a partir de la función de Green de una partícula (un electrón) y de la densidad espectral. La función de Green está dada por

$$G_{AB}^{\alpha}(\omega) \equiv G_{\mathbf{k},\sigma}^{\alpha}(\omega) = \left\langle \left\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}; \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \right\rangle \right\rangle_{\omega}^{\alpha} \quad \text{con } \alpha \equiv r, a, c; \quad (3.22)$$

En la solución de cualquier problema, un posible primer paso sería resolver la ecuación de movimiento para la función de Green, ver (??)

$$\omega G_{\mathbf{k},\sigma}^{\alpha}(\omega) = \left\langle \left[ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \right]_{+} \right\rangle + \left\langle \left\langle \left[ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{H}_0 \right]_{-}; \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \right\rangle \right\rangle^{\alpha} \quad (3.23)$$

Teniendo en cuenta:

$$\left[ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^{\dagger} \right]_{+} = \left[ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \right]_{+} = 0 \quad \text{y} \quad \left[ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^{\dagger} \right]_{+} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}$$



Demuestre (ver ejercicio ??) que

$$\left[ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{H}_0 \right]_- = (\omega(\mathbf{k}) - \omega_F) \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \quad (3.24)$$

Con  $\omega_F = \mu/\hbar$ . Por lo tanto la ecuación de movimiento (3.23) queda

$$\omega G_{\mathbf{k},\sigma}^\alpha(\omega) = 1 + (\omega(\mathbf{k}) - \omega_F) G_{\mathbf{k},\sigma}^\alpha(\omega) \quad (3.25)$$

De esta ecuación despejamos la función de Green y recordando que para satisfacer las condiciones de frontera (3.12) y (3.13) en la representación de energía aparecen los  $\pm i0^+$ , tenemos

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{r,a}(\omega) = \frac{1}{\omega - (\omega(\mathbf{k}) - \omega_F) \pm i0^+} \quad (3.26)$$

Las singularidades de la función de Green corresponden a las posibles excitaciones del sistema. Utilizando  $\omega$  como complejo, las escribimos en forma combinada. Ver (??).

$$G_{\mathbf{k},\sigma}(\omega) = \frac{1}{\omega - (\omega(\mathbf{k}) - \omega_F)} \quad (3.27)$$

Siguiendo el esquema planteado es importante conocer la densidad espectral, por ejemplo en la representación de frecuencia. Una forma de calcularla esquemáticamente es la siguiente (ver ejercicio ??).

### 3.3. Función de Green para operadores de campo

Consideremos el hamiltoniano

$$H_0 = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r})$$

$$G_{\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}')\psi_{\sigma}(\mathbf{r})}^{\alpha}(\omega) \equiv G_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \left\langle \left\langle \psi_{\sigma}(\mathbf{r}); \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}') \right\rangle \right\rangle_{\omega}^{\alpha} \quad \text{con } \alpha \equiv r, a, c; \quad (3.28)$$

$$\omega G_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \left\langle \left[ \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}') \right]_{+} \right\rangle + \left\langle \left\langle \left[ \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \hat{H}_0 \right]_{-}; \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}') \right\rangle \right\rangle^{\alpha} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \omega G_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \left\langle \left\langle h(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}); \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}') \right\rangle \right\rangle^{\alpha} \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + h(\mathbf{r}) \left\langle \left\langle \psi_{\sigma}(\mathbf{r}); \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}') \right\rangle \right\rangle^{\alpha} \\ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + h(\mathbf{r}) G_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \end{aligned} \quad (3.30)$$

Con lo que obtenemos

$$(\omega - h(\mathbf{r})) G_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.31)$$

Así que  $G_\sigma^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  cumple la ecuación diferencial de la función de Green de una partícula, lo que es consistente dado que el sistema es de partículas independientes. Las funciones  $G_\sigma^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  se pueden relacionar con  $G_\sigma^\alpha(\mathbf{k}, \omega)$  haciendo un cambio de base, y similar a lo que encontramos para estas funciones, la función de Green  $G_\sigma^{r/a}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  no depende de la temperatura, mientras que  $G_\sigma^c(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$  si. Estas funciones serán la base para la teoría de perturbaciones y los diagramas de Feynman en el siguiente capítulo.

### 3.4. Representación espectral,

En general podemos hacer la representación espectral de la función de Green  $G_{AB}$ , sin embargo para dar una interpretación a los propagadores vamos a hacer la representación espectral de  $G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega)$ , para ello partamos de la función de Green

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\alpha(t, t') = \left\langle \left\langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}; \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle_\omega^\alpha \quad (3.32)$$

Consideremos este promedio a  $T=0K$  para la función de Green retardada, así

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\alpha(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \phi_0^N | [\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}(t), \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}(t')]_+ | \phi_0^N \rangle$$

Donde  $|\phi_0^N\rangle$  es el estado base del sistema de  $N$  partículas, como  $G$  depende de  $t - t'$ , podemos hacer  $t' = 0$

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^c(t) &= -i \langle \phi_0^N | T \left[ e^{iHt/\hbar} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} e^{-iHt} \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger \right]_+ | \phi_0^N \rangle \\ &= -i\theta(t) \langle \phi_0^N | e^{iHt} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} e^{-iHt} \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle + i\theta(-t) \langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger e^{iHt} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} e^{-iHt} | \phi_0^N \rangle \quad (3.33) \\ &= -i\theta(t) e^{iE_0^N t} \langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} e^{-iHt} \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle + i\theta(-t) \langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger e^{iHt} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} | \phi_0^N \rangle e^{-iE_0^N t} \end{aligned}$$

Llamemos a  $|\phi_m^{N+1}\rangle$  la función de onda del sistema con  $N+1$  partículas, y energía  $E_m^{N+1}$ , donde  $m$  corre sobre todos los números cuánticos, y  $|\phi_m^{N+1}\rangle$  describe los diferentes estados excitados del sistema con  $N+1$  partículas, similarmente  $|\phi_m^{N-1}\rangle$  describe los diferentes estados de un sistema con  $N-1$  partículas, ahora usando las relaciones de completitud de estos estados podemos escribir

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^c(t) &= \sum_{mn} \left( -i\theta(t) e^{i\omega_0^N t} \langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} | \phi_m^{N+1} \rangle \langle \phi_m^{N+1} | e^{-iHt} | \phi_n^{N+1} \rangle \langle \phi_n^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle \right. \\ &\quad \left. + i\theta(-t) \langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger | \phi_m^{N-1} \rangle \langle \phi_m^{N-1} | e^{iHt} | \phi_n^{N-1} \rangle \langle \phi_n^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} | \phi_0^N \rangle e^{-i\omega_0^N t} \right) \\ &= \sum_m \left( -i\theta(t) e^{-i(\omega_m^{N+1} - \omega_0^N)t} \langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} | \phi_m^{N+1} \rangle \langle \phi_m^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle \right. \\ &\quad \left. + i\theta(-t) e^{-i(\omega_0^N - \omega_m^{N-1})t} \langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger | \phi_m^{N-1} \rangle \langle \phi_m^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} | \phi_0^N \rangle \right) \quad (3.34) \end{aligned}$$

Usando

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{-ixt}}{x + i0^+} \quad (3.35)$$

Podemos calcular la transformada de Fourier

Hagamos la integral

$$\begin{aligned} -i \int dt \theta(t) e^{i\omega t} e^{-i(\omega_m^{N+1} - \omega_0^N)t} &= \frac{1}{2\pi} \int dx dt \frac{e^{i(\omega - (\omega_m^{N+1} - \omega_0^N) - x)t}}{x + i0^+} \\ &= \int dx \frac{\delta(\omega - (\omega_m^{N+1} - \omega_0^N) - x)}{x + i0^+} \\ &= \frac{1}{\omega - (\omega_m^{N+1} - \omega_0^N) + i0^+} \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$i\theta(-t) e^{-i(\omega_0^N - \omega_m^{N-1})t} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} i \int dt \theta(-t) e^{i\omega t} e^{-i(\omega_0^N - \omega_m^{N-1})t} &= -\frac{1}{2\pi} \int dx dt \frac{e^{i(\omega - (\omega_0^N - \omega_m^{N-1}) + x)t}}{x + i0^+} \\ &= -\int dx \frac{\delta(\omega - (\omega_0^N - \omega_m^{N-1}) + x)}{x + i0^+} \\ &= \frac{-1}{-\omega + (\omega_0^N - \omega_m^{N-1}) + i0^+} \\ &= \frac{1}{\omega - (\omega_0^N - \omega_m^{N-1}) - i0^+} \end{aligned} \quad (3.38)$$

así

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^c(t) = \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_m^{N+1} \rangle \langle \phi_m^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle}{\omega - (\omega_m^{N+1} - \omega_0^N) + i0^+} + \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger | \phi_m^{N-1} \rangle \langle \phi_m^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_0^N \rangle}{\omega - (\omega_0^N - \omega_m^{N-1}) - i0^+} \quad (3.39)$$

La retardada y avanzada dan

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{r(a)}(\omega) = \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_m^{N+1} \rangle \langle \phi_m^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle}{\omega - (\omega_m^{N+1} - \omega_0^N) \pm i0^+} + \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger | \phi_m^{N-1} \rangle \langle \phi_m^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_0^N \rangle}{\omega - (\omega_0^N - \omega_m^{N-1}) \pm i0^+} \quad (3.40)$$

Podemos en el denominador sumar y restar la energía de

$$\omega_m^{N+1} - \omega_0^N = \omega_m^{N+1} - \omega_0^{N+1} + \omega_0^{N+1} - \omega_0^N \quad (3.41)$$

En el límite termodinámico,  $\omega_0^{N+1} - \omega_0^N \rightarrow \mu/\hbar$ , y  $\omega_m^{N+1} - \omega_0^{N+1}$  es la frecuencia de excitación del sistema de  $N$  partículas,  $\omega_0^{N+1} - \omega_0^N$ , las cuales podemos medir respecto al estado base, en resumen

$$\omega_0^{N+1} - \omega_0^N \rightarrow \mu/\hbar \quad (3.42)$$

$$\omega_m^{N+1} - \omega_0^{N+1} \equiv \tilde{\omega}_m^{N+1} \quad (3.43)$$

con esto

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^c(\omega) = \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_m^{N+1} \rangle \langle \phi_m^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle}{\omega - \mu/\hbar - \tilde{\omega}_m^{N+1} + i0^+} + \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger | \phi_m^{N-1} \rangle \langle \phi_m^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_0^N \rangle}{\omega - \mu/\hbar + \tilde{\omega}_m^{N-1} - i0^+} \quad (3.44)$$

o en términos de energía

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^c(E) = \hbar \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_m^{N+1} \rangle \langle \phi_m^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle}{E - \mu - \tilde{E}_m^{N+1} + i0^+} + \hbar \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger | \phi_m^{N-1} \rangle \langle \phi_m^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_0^N \rangle}{E - \mu + \tilde{E}_m^{N-1} - i0^+} \quad (3.45)$$

y

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{r(a)}(\omega) = \hbar \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_m^{N+1} \rangle \langle \phi_m^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle}{E - \mu - \tilde{E}_m^{N+1} \pm i0^+} + \hbar \sum_m \frac{\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger | \phi_m^{N-1} \rangle \langle \phi_m^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_0^N \rangle}{E - \mu + \tilde{E}_m^{N-1} \pm i0^+} \quad (3.46)$$

En general vemos que los polos están en el plano inferior(superior) complejo para la función de Green retardada (avanzada), mientras que la causal tiene polos en la parte inferior para  $E = \mu + \tilde{E}_m^{N+1} > \mu$  y en la parte superior para  $E = \mu - \tilde{E}_m^{N-1} < \mu$ . La primera parte la podemos interpretar como una función de Green de electrones, en donde una partícula se propaga con energías mayores al potencial químico de  $\mathbf{k}$  a  $\mathbf{k}'$ , de los elementos de matriz podemos observar que este propagador existe si el estado excitado  $\phi_m^{N+1}$  tiene el estado  $\mathbf{k}', \sigma$  y  $\mathbf{k}, \sigma$  ocupado y desocupado respectivamente, así mismo el estado  $|\phi_0^N\rangle$  debe tener estos estados desocupados. Por debajo del potencial químico,  $\phi_m^{N-1}$  tiene los estados desocupados, así que equivale a la propagación de huecos. Examinemos el término diagonal

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^c(E) = \hbar \sum_m \frac{|\langle \phi_m^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle|^2}{E - \mu - \tilde{E}_m^{N+1} + i0^+} + \hbar \sum_m \frac{|\langle \phi_m^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_0^N \rangle|^2}{E - \mu + \tilde{E}_m^{N-1} - i0^+}$$

En este caso la interpretación es directa, el primer término depende la probabilidad de que el estado  $\phi_m^{N+1}$  tenga un electrón en el estado  $\mathbf{k}$ , con  $E > \mu$ , y el segundo término nos da la probabilidad de que el estado  $\phi_m^{N-1}$  tenga el estado  $\mathbf{k}$ ,  $\sigma$ , con  $E < \mu$ . Por último, si los estados  $\phi_0^N$  son estados propios de  $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ , los números cuánticos  $m$  y  $\mathbf{k}$  deben ser iguales, así

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^c(E) = \hbar \frac{1}{E - \mu - \tilde{E}_{\mathbf{k}}^{N+1} + i0^+} + \hbar \frac{1}{E - \mu + E_{\mathbf{k}}^{N-1} - i0^+} \quad (3.47)$$

Escribiendo  $\tilde{E}_{\mathbf{k}}^{N+1} = E_{\mathbf{k}}^{N+1} - E_0^{N+1} \equiv \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ ,  $E > \mu$ ,  $\tilde{E}_{\mathbf{k}}^{N-1} = E_{\mathbf{k}}^{N-1} - E_0^{N-1} \equiv \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}$ ,  $E < \mu$ , pero si medimos todo respecto al potencial químico  $\varepsilon_{\mathbf{k}} \rightarrow \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ , y las energías  $E$  también son definidas respecto a este potencial así

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^c(E) = \frac{1 - n_{\mathbf{k}}}{E - \mu - (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) + i0^+} + \frac{n_{\mathbf{k}}}{E - \mu + (\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}) - i0^+} \quad (3.48)$$

Hemos puesto los números de ocupación para hacer el énfasis de la región en donde estamos, redefiniendo todas las energías respecto al potencial químico o energía de Fermi

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^c(E) = \frac{1 - n_{\mathbf{k}}}{E - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i0^+} + \frac{n_{\mathbf{k}}}{E - \varepsilon_{\mathbf{k}} - i0^+} \quad (3.49)$$

y el términos de frecuencia escribimos

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^c(\omega) &= \frac{1 - n_{\mathbf{k}}}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} + i0^+} + \frac{n_{\mathbf{k}}}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} - i0^+} \\ &= \frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} + i0^+ \operatorname{sgn}(\omega_{\mathbf{k}})} \end{aligned} \quad (3.50)$$

De tal manera que la función signo es positiva si  $\omega_{\mathbf{k}} > 0$ , es decir por encima del potencial químico, y negativa si  $\omega_{\mathbf{k}} < 0$  es decir por debajo del potencial químico.

Es posible demostrar que la densidad espectral es dada por

$$\rho_{\mathbf{k}\mathbf{k},\sigma}(E) = \sum_m \left| \langle \phi_m^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle \right|^2 \delta(E - \mu - \tilde{E}_m^{N+1}) + \sum_m \left| \langle \phi_m^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_0^N \rangle \right|^2 \delta(E - \mu + \tilde{E}_m^{N-1}) \quad (3.51)$$

En el caso el hamiltoniano este diagonalizado en la base  $\mathbf{k}$ , y en frecuencias

$$\rho_{\mathbf{k}\mathbf{k},\sigma}(E) \equiv \rho_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \delta(E - \omega_{\mathbf{k}}) \quad (3.52)$$

Y la densidad de estados la definimos como

$$\rho(\omega) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \rho_{\mathbf{k}}(E) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}}) \quad (3.53)$$

Solo vale aclarar que la base  $\mathbf{k}$  la tomamos como ejemplo, pero los resultados son válidos en cualquier base, es importante que el lector examine la representación espectral por ejemplo para la base continua usando operadores de campo.

Ahora vamos a relacionar la densidad espectral  $\rho_{\mathbf{k},\sigma}(E)$  con las funciones de Green, midiendo todo respecto al potencial químico escribimos

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}}^c(\omega) &= \sum_m \frac{|\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_m^{N+1} \rangle|^2}{\omega - \tilde{\omega}_m^{N+1} + i0^+} + \sum_m \frac{|\langle \phi_0^N | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger | \phi_m^{N-1} \rangle|^2}{\omega + \tilde{\omega}_m^{N-1} - i0^+} \\ &= \int d\omega' \frac{\rho_{\mathbf{k},\sigma}(\omega')}{\omega - \omega' \pm i0^+} \\ &= \int d\omega' \frac{\rho_{\mathbf{k},\sigma}(\omega')}{\omega - \omega' + i \operatorname{sgn}(\omega')} = \int d\omega' \frac{\rho_{\mathbf{k},\sigma}(\omega')}{\omega - \omega' + i \operatorname{sgn}(\omega)} \end{aligned} \quad (3.54)$$

Donde escribimos

$$\rho_{\mathbf{k},\sigma}(\omega') = \sum_m \left| \langle \phi_m^{N+1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger | \phi_0^N \rangle \right|^2 \delta(\omega' - \tilde{\omega}_m^{N+1}) + \sum_m \left| \langle \phi_m^{N-1} | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \phi_0^N \rangle \right|^2 \delta(\omega' + \tilde{\omega}_m^{N-1}) \quad (3.55)$$

De forma similar podemos mostrar que

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{r(a)}(\omega) = \int d\omega' \frac{\rho_{\mathbf{k},\sigma}(\omega')}{\omega - \omega' \pm i0^+}$$

en este caso el signo de la parte imaginaria no depende de  $\omega$ . Usando la identidad de Cauchy

$$\frac{1}{\omega - \omega' \pm i0^+} = P \frac{1}{\omega - \omega'} \mp i\pi \delta(\omega - \omega') \quad (3.56)$$

Tenemos que

$$\rho_{\mathbf{k},\sigma}(\omega) = \mp \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left( G^{r(a)} \right) \quad (3.57)$$

y términos de la función de Green Causal

$$\rho_{\mathbf{k},\sigma}(\omega) = -\frac{\operatorname{sgn}(\omega)}{\pi} \operatorname{Im} (G^c(\omega)) \quad (3.58)$$

### 3.5. Ecuación de Dyson

Cunado tenemos un potencial externo, es muy útil poder escribir una ecuación que nos relacione la función de green del sistema sin perturbar ( $g$ ), con la función de green del sistema perturbado

$(G)$ , a esta ecuación se le denomina de Dyson. Vamos a hacer una deducción independiente de la base en que tengamos escrito el hamiltoniano, para ello vamos a escribir la ecuación para la función  $G$  como

$$(\omega - \hat{H}) G = 1 \quad (3.59)$$

El hamiltoniano  $H$  lo escribimos como

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (3.60)$$

con lo que

$$(\omega \hat{1} - \hat{H}_0 - \hat{V}) \hat{G} = \hat{1}, \quad (3.61)$$

la función de Green sin perturbar cumple

$$(\omega \hat{1} - \hat{H}_0) \hat{g} = \hat{1}, \quad (3.62)$$

lo que nos lleva a

$$(\hat{g}^{-1} - \hat{V}) \hat{G} = \hat{1} \quad (3.63)$$

lo cual se puede escribir como

$$\hat{G} = \hat{g} + \hat{g} \hat{V} \hat{G}. \quad (3.64)$$

si tomamos el elemento  $k, k'$  de la propiedad de la multiplicación de las matrices tenemos

$$\hat{G}_{k,k'} = \hat{g}_{k,k'} + \sum_{k_1, k_2} \hat{g}_{k,k_1} \hat{V}_{k_1,k_2} \hat{G}_{k_2,k'} \quad (3.65)$$

si  $g_{kk}$  es diagonal en la base  $k$ , tenemos

$$\hat{g}_{k,k'} = \hat{g}_k \delta_{k,k'}$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned} \hat{G}_{k,k'} &= \hat{g}_k \delta_{k,k'} + \sum_{k_1, k_2} \hat{g}_{k,k_1} \delta_{k,k_1} \hat{V}_{k_1,k_2} \hat{G}_{k_2,k'} \\ &= \hat{g}_{k,k} \delta_{k,k'} + \sum_{k_1} \hat{g}_{k,k} \hat{V}_{k,k_1} \hat{G}_{k_1,k'} \end{aligned} \quad (3.66)$$

que es la generalización de la ecuación de Dyson para una base discreta.

Si ahora tenemos una base continua y en que  $g$  no es diagonal pero el potencial  $V$  si tenemos de [3.65](#)

$$\begin{aligned}
\hat{G}_{x,x'} &= \hat{g}_{x,x'} + \int dx_1 dx_2 \hat{g}_{x,x_1} \hat{V}_{x_1} \delta(x_1 - x_2) \hat{G}_{x_2,x'} \\
&= \hat{g}_{x,x'} + \int dx_1 \hat{g}_{x,x_1} \hat{V}_{x_1} \hat{G}_{x_1,x'}
\end{aligned} \tag{3.67}$$

si  $x$  lo reemplazamos por  $\mathbf{r}$ , esto nos da la ecuación de Dyson en posición

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \int d\mathbf{r}_1 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \omega) \hat{V}(\mathbf{r}_1) \hat{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}', \omega) \tag{3.68}$$

### 3.5.1. Un nivel discreto acoplado al continuo

$$H = H_c + H_0 + V_i \tag{3.69}$$

con

$$\begin{aligned}
H_c &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \omega_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, H_0 = \sum_{\sigma} \omega_0 c_{0\sigma}^\dagger c_{0\sigma} \\
V_i &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( t_{\mathbf{k}0} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + t_{\mathbf{k}0}^* c_{0\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \right)
\end{aligned} \tag{3.70}$$

donde  $H_c$  representa un hamiltoniano de un sistema de electrones con energías  $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$ , mientras  $H_0$  es el hamiltoniano que una electrón en un nivel de energía discreto  $\hbar\omega_0$ .  $H_i$  es el hamiltoniano de hibridización entre los niveles continuos y el nivel discreto, y que depende del parámetro  $t_{\mathbf{k}0}$ . Definiendo las funciones de Green

$$G_{00\sigma}^r(\omega) = \left\langle \left\langle c_{0\sigma}, c_{0\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle^r \tag{3.71}$$

$$G_{\mathbf{k}0\sigma}^r(\omega) = \left\langle \left\langle c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{0\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle^r \tag{3.72}$$

y a partir de la ecuación de Dyson tenemos

$$\hat{g}_k \delta_{k,k'} + \sum_{k_1} \hat{g}_{k,k} \hat{V}_{k,k_1} \hat{G}_{k_1,k'}$$

$$\hat{G}_{00} = \hat{g}_{00} + \sum_{k_1} \hat{g}_{00} \hat{V}_{0,k_1} \hat{G}_{k_1,0} \tag{3.73}$$

Los elementos de matriz  $\hat{V}_{0,k_1}$  son

$$\langle 0 | V_i | \mathbf{k}_1 \rangle = t_{\mathbf{k}_1 0}^* \equiv t_{0\mathbf{k}_1} \tag{3.74}$$

$$\langle \mathbf{k}_1 | V_i | 0 \rangle = t_{\mathbf{k}_1 0} \tag{3.75}$$



$$\langle \mathbf{k}_1 | V_i | \mathbf{k}_2 \rangle = t_{\mathbf{k}_1 0} \delta_{\mathbf{k}_1, 0} \quad (3.76)$$

de tal manera que

$$\hat{G}_{00} = \hat{g}_{00} + \sum_{\mathbf{k}_1} \hat{g}_{00} t_{0\mathbf{k}_1} \hat{G}_{\mathbf{k}_1, 0} \quad (3.77)$$

por otro lado

$$\begin{aligned} \hat{G}_{\mathbf{k}_1, 0} &= \sum_{\mathbf{k}_2} \hat{g}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1} \hat{V}_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \hat{G}_{\mathbf{k}_2, 0} \\ &= \hat{g}_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1} t_{\mathbf{k}_1 0} \hat{G}_{0, 0} \end{aligned} \quad (3.78)$$

así

$$\begin{aligned} \hat{G}_{00} &= \hat{g}_{00} + \sum_{\mathbf{k}_1} \hat{g}_{00} t_{0\mathbf{k}_1} \hat{g}_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1} t_{\mathbf{k}_1 0} \hat{G}_{0, 0} \\ &= \hat{g}_{00} + \hat{g}_{00} \Sigma(\omega) \hat{G}_{0, 0} \end{aligned} \quad (3.79)$$

con

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega) &= \sum_{\mathbf{k}_1} |t_{0\mathbf{k}_1}|^2 \hat{g}_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1} \\ &= \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{|t_{0\mathbf{k}_1}|^2}{\omega - \omega_{\mathbf{k}_1}} \end{aligned} \quad (3.80)$$

si escribimos

$$\hat{g}_{00} = \frac{1}{\omega - \omega_0} \quad (3.81)$$

$$\begin{aligned} \hat{G}_{0, 0} &= \frac{\hat{g}_{00}}{1 - \hat{g}_{00} \Sigma(\omega)} \\ &= \frac{1}{\hat{g}_{00}^{-1} - \Sigma(\omega)} \\ &= \frac{1}{\omega - \omega_0 - \Sigma(\omega)} \end{aligned} \quad (3.82)$$

### 3.5.2. Cadena Tight Binding seminfinita

Consideremos una cadena Tight Binding seminfinita unidimensional, descrita por el hamiltoniano,

$$H = \sum_{i\sigma} t_0 n_{i\sigma} + \sum_{i\sigma} \left( t c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + t^* c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) \quad (3.83)$$

como la cadena es seminfinita, que podemos definir para  $i = 1, 2, \dots$  si agregamos un sitio más, la función de green debe ser la misma, esta perturbación la podemos escribir como

$$V = \sum_{\sigma} \left( t c_{0\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + t^* c_{1\sigma}^\dagger c_{0,\sigma} \right) \quad (3.84)$$

las funciones de green  $g_{11}$  y  $g_{00}$  denotarían las funciones sin perturbar de la cadena seminfinita y del átomo adicional, usando la ecuación de Dyson tenemos

$$G_{00} = g_{00} + g_{00} V_{01} G_{10} \quad (3.85)$$

$$G_{10} = g_{11} V_{10} G_{00} \quad (3.86)$$

con lo cual

$$G_{00} = g_{00} + g_{00} V_{01} g_{11} V_{10} G_{00} \quad (3.87)$$

ahora debemos hacer dos observaciones, la primera, es que la función de green  $g_{00}$  corresponde a la de un átomo aislado y que podemos escribir como

$$g_{00}^r = \frac{1}{\omega - t_0} \quad (3.88)$$

como la función de green  $G_{00}$  describe la función de green de superficie de una cadena seminfinita, igual que  $g_{11}$ , tenemos

$$G_{00} = g_{11} \quad (3.89)$$

$$G_{00} = g_{00} + g_{00} |t|^2 G_{00}^2 \quad (3.90)$$

$$|t|^2 G_{00}^2 - (\omega - t_0) G_{00} + 1 = 0 \quad (3.91)$$

$$\begin{aligned}
G_{00} &= \frac{(\omega - t_0) \pm \sqrt{(\omega - t_0)^2 - 4|t|^2}}{2|t|^2} \\
&= \frac{1}{|t|} \left( \frac{(\omega - t_0)}{2|t|} \pm \sqrt{\frac{(\omega - t_0)^2}{4|t|^2} - 1} \right)
\end{aligned} \tag{3.92}$$

si  $\frac{(\omega - t_0)^2}{2|t|} < 1$

$$\begin{aligned}
G_{00} &= \frac{1}{|t|} \left( \frac{\omega - t_0}{2|t|} \pm i \sqrt{1 - \frac{(\omega - t_0)^2}{4|t|^2}} \right) \\
&= \frac{1}{|t|} e^{\pm i\phi}
\end{aligned} \tag{3.93}$$

con

$$\cos \phi = \frac{\omega - t_0}{2|t|} \tag{3.94}$$

con esta función de Green la densidad de estados es (con el signi menos)

$$\begin{aligned}
\rho_{00} &= \frac{1}{\pi|t|} \left( \sqrt{1 - \frac{(\omega - t_0)^2}{4|t|^2}} \right) \\
&= \frac{1}{2\pi|t|^2} \sqrt{4|t|^2 - (\omega - t_0)^2}
\end{aligned} \tag{3.95}$$

Consideremos dos cadenas seminfinitas y que unimos, a cada una la vamos a denotar por LL y RR y la autoenergía por  $\Sigma_{LR}$  o  $\Sigma_{RL}$

Así

$$G_{LL} = g_{LL} + g_{LL}\Sigma_{LR}G_{RL} \tag{3.96}$$

$$G_{RL} = g_{RR}\Sigma_{RL}G_{LL} \tag{3.97}$$

$$G_{LL} = g_{LL} + g_{LL}\Sigma_{LR}g_{RR}\Sigma_{RL}G_{LL} \tag{3.98}$$

$$G_{LL} = (1 - g_{LL}\Sigma_{LR}g_{RR}\Sigma_{RL})^{-1} g_{LL} \tag{3.99}$$

Ahora las cadenas son simétricas, así

$$g_{LL} = g_{RR} = \frac{1}{|t|} e^{\pm i\phi} \quad (3.100)$$

$$\begin{aligned} G_{LL} &= \left( 1 - \frac{1}{|t|^2} e^{i\phi} t e^{i\phi} t^* \right)^{-1} \frac{1}{|t|} e^{i\phi} \\ &= \frac{1}{|t|} \frac{e^{i\phi}}{1 - e^{2i\phi}} \\ &= \frac{1}{|t|} \frac{1}{e^{-i\phi} - e^{i\phi}} \\ &= -\frac{1}{|t|} \frac{1}{2i \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i}} \\ &= \frac{i}{2|t|} \frac{1}{\sin \phi} \end{aligned} \quad (3.101)$$

si tomamos la otra solución obtenemos

$$\begin{aligned} G_{LL}^r &= -\frac{i}{2|t|} \frac{1}{\sin \phi} \\ &= -i \frac{1}{\sqrt{4|t|^2 - (\omega - t_0)^2}} \end{aligned} \quad (3.102)$$

la densidad de estados es

$$\rho_{00}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{4|t|^2 - (\omega - t_0)^2}} \quad (3.103)$$

Ahora relacionemos las funciones de Green en TB con las de Bloch

$$c_{n,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{n,\mathbf{k}}, \quad c_{n,i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{n,\mathbf{k}}^\dagger \quad (3.104)$$

Si tenemos una función de Green  $G(\mathbf{k}, \omega)$  y  $G_{ii}(\omega)$

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k},\sigma}(\omega) &= \left\langle \left\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}; \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle_\omega^\alpha \\ &= \frac{1}{N} \left\langle \left\langle \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_i; \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} c_j^\dagger \right\rangle \right\rangle_\omega^\alpha \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left\langle \left\langle c_i; c_j^\dagger \right\rangle \right\rangle_\omega^\alpha \end{aligned}$$

Así

$$G_{\mathbf{k},\sigma}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} G_{i,j} \quad (3.105)$$

La relación inversa es

$$\begin{aligned} G_{ij,\sigma}(\omega) &= \left\langle \left\langle \hat{c}_{i\sigma}; \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle_\omega^\alpha \\ &= \left\langle \left\langle \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}}; \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}}^\dagger \right\rangle \right\rangle_\omega^\alpha \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\sigma}(\omega) \end{aligned}$$

Usando  $G_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\sigma}$  de una cadena infinita obtenemos

$$\begin{aligned} G_{ij,\sigma}(\omega) &= -\frac{i}{2t} \frac{e^{-ik_0a|i-j|}}{\sin k_0a} \\ &= -\frac{i}{2t} \frac{e^{-i\phi|i-j|}}{\sin \phi} \end{aligned} \quad (3.106)$$

con

$$\frac{\omega - \omega_0}{2t} = \cos \phi \quad (3.107)$$

que coincide con nuestro resultado para  $G_{01}$ , a prtir de  $G_{01}$  podemos calcular  $G_{ij}$  dado que  $G_{ij}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$ , así que conociendo  $G_{00}$  y  $G_{10}$  se puede inferir  $G_{ij}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$

### 3.5.3. Cálculo de la función de Green usando soluciones asintóticas

Un método para encontrar la función de Green en una dimensión es usar las soluciones asintóticas de la ecuación diferencial. Como  $G(x, x')$  cumple la ecuación homogénea para  $x \neq x'$  podemos escribir (no vamos a notar la dependencia con  $\omega$ )

$$G(x, x') = \begin{cases} A\varphi_{<}(x)\varphi_{>}(x'), & x < x' \\ A'\varphi_{<}(x')\varphi_{>}(x), & x > x'. \end{cases} \quad (3.108)$$

Donde las funciones  $\varphi_{<(>)}(x)$  son soluciones de la ecuación de diferencial que cumple las condición de frontera a izquierda (derecha), por ejemplo  $\varphi_{<}(a) = 0$ ,  $\varphi_{<}(b) = 0$ ,  $a < b$ . Esta superposición nos asegura que  $G(x, x')$  cumple la ecuación de diferencial tanto para el operador  $H(x)$  como

para  $H(x')$ . Las constantes  $A$  y  $A'$  se determinan a partir de las condiciones de frontera en  $x = x'$ . Si consideramos la ecuación de Schrödinger, Integrando la ecuación diferencial

$$\left( \omega - V(x) + \frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (3.109)$$

entre  $x' - \epsilon$  y  $x' + \epsilon$  obtenemos

$$\int_{x' - \epsilon}^{x' + \epsilon} dx \left( \omega - V(x) + \frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) G(x, x') = \int_{x' - \epsilon}^{x' + \epsilon} dx \delta(x - x'). \quad (3.110)$$

Tomando el límite cuando  $\epsilon \rightarrow 0$  encontramos

$$\frac{dG(x, x + 0^+)}{dx} - \frac{dG(x, x + 0^-)}{dx} = \frac{2m}{\hbar}, \quad (3.111)$$

integrando nuevamente

$$G(x, x + 0^+) = G(x, x + 0^-), \quad (3.112)$$

reemplazando la suposición (3.108) en las condiciones de frontera (3.111) y (3.112) obtenemos

$$\begin{aligned} A\varphi_{<}(x)\varphi_{>}(x) &= A'\varphi_{<}(x)\varphi_{>}(x) \\ A'\varphi_{<}(x)\frac{d\varphi_{>}(x)}{dx} - A'\frac{d\varphi_{<}(x)}{dx}\varphi_{>}(x) &= \frac{2m}{\hbar} \end{aligned} .$$

De donde se obtiene

$$\begin{aligned} A &= A' \\ A &= \frac{2m}{\hbar W(x)} \end{aligned} \quad (3.113)$$

Con  $W(x)$  el Wroskiano

$$W(x) = \left( \varphi_{<}(x) \frac{d\varphi_{>}(x)}{dx} - \frac{d\varphi_{<}(x)}{dx} \varphi_{>}(x) \right) \quad (3.114)$$

El cual es independiente de  $x$ . Con esto podemos escribir finalmente

$$\begin{aligned} G(x, x', \omega) &= \frac{2m}{\hbar W(x)} (\varphi_{<}(x)\varphi_{>}(x')\theta(x' - x) + \varphi_{<}(x')\varphi_{>}(x)\theta(x - x')) \\ G(x, x', \omega) &= \frac{2m}{\hbar W(x)} (\varphi_{<}(x)\varphi_{>}(x')\theta(x' - x) + \varphi_{<}(x')\varphi_{>}(x)\theta(x - x')) \end{aligned} \quad (3.115)$$

### 3.5.3.1. Función de Green de un pozo de potencial infinito

Consideremos un pozo de potencial infinito con fronteras en  $x = 0$ , y  $x = a$ . Las soluciones asintóticas son

$$\begin{aligned}\varphi_{<}(x) &= e^{-ikx} + ae^{ikx} \\ \varphi_{>}(x) &= e^{ikx} + be^{-ikx}\end{aligned}$$

Con

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}}\omega \quad (3.116)$$

donde  $a$  y  $b$  están dados por las condiciones de frontera de las funciones de onda  $\varphi_{<}$  en  $x = 0$  y de  $\varphi_{>}$  en  $x = L$ . Para la condición de “extremos fijos”  $\varphi_{<}(0) = \varphi_{>}(L) = 0$ , con lo cual

$$a = -1, b = -e^{i2kL} \quad (3.117)$$

En este caso, el lector puede mostrar que

$$\begin{aligned}G(x, x') &= -i \frac{2m}{\hbar^2(1 - ab)} \varphi_{<}(x) \varphi_{>}(x') \\ &= -i \frac{2m}{\hbar^2 k(1 - ab)} \left( e^{-ikx} + ae^{ikx} \right) \left( e^{ikx'} + be^{-ikx'} \right), \quad x < x'\end{aligned} \quad (3.118)$$

reemplazando el valor de  $a$  y  $b$ , tenemos

$$G(x, x') = -i \frac{2m}{\hbar^2 k(1 - e^{i2kL})} \left( e^{-ikx} - e^{ikx} \right) \left( e^{ikx'} - e^{-ik(x'-2L)} \right), \quad x < x' \quad (3.119)$$

De los polos de  $G$  encontramos que el espectro de energía está dado por

$$e^{i2kL} = 1, \quad (3.120)$$

$$k = \frac{n\pi}{L}, \quad \omega_n = \frac{\hbar\pi^2}{2mL^2} n^2. \quad (3.121)$$

En la figura 3.1 se ilustra la densidad local de estados, donde vemos que cuando  $\omega$  coincide con las frecuencias propias del sistema tenemos máximos en  $\rho(x, \omega)$  son proporcionales a la densidad de probabilidad correspondiente a esa frecuencia propia.

Para el caso en que  $a=b=0$  obtenemos la función de Green de un sistema 1D infinito

$$\begin{aligned}G(x, x') &= -i \frac{2m}{\hbar^2} \varphi_{<}(x) \varphi_{>}(x') \\ &= -i \frac{2m}{\hbar^2 k} e^{ik(x'-x)}, \quad x < x'\end{aligned} \quad (3.122)$$

y para ambas condiciones de  $x$  y  $x'$

$$G(x, x') = A e^{ik|x'-x|}$$

con

$$A_0 = -i \frac{2m}{\hbar^2 k} \quad (3.123)$$

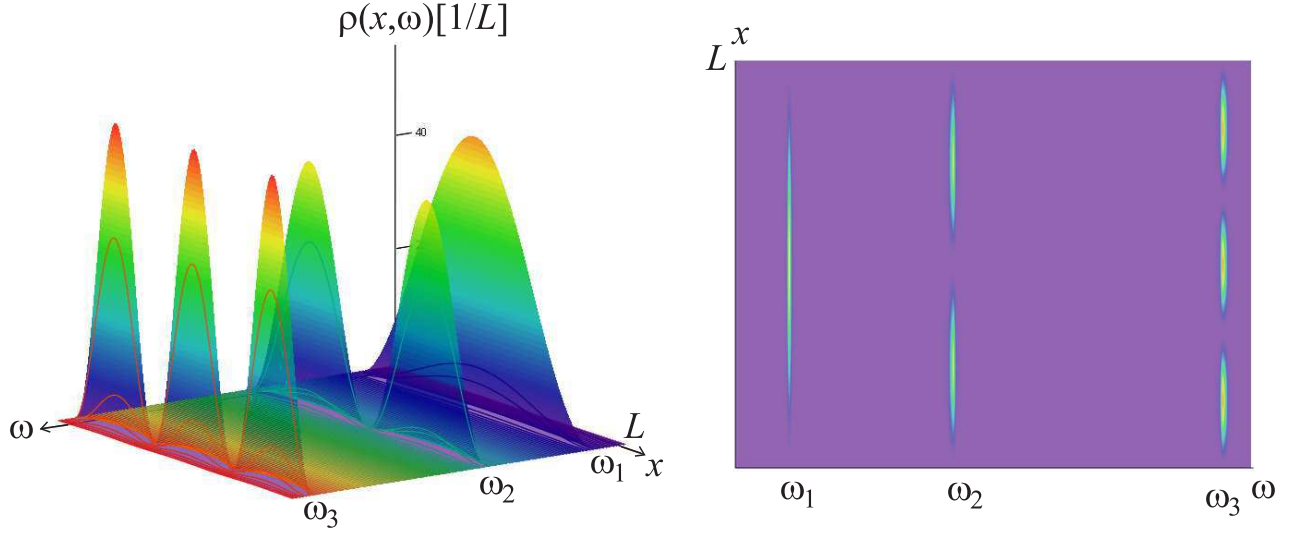


Figura 3.1. Densidad de estados para un pozo de potencial infinito

### 3.5.4. Potencial de contacto

Como un primer ejemplo consideremos el caso de un potencial delta de Dirac, éste puede modelar una delgada barrera de potencial que acopla dos regiones, como dos metales separados por una capa de óxido. El potencial lo escribimos como

$$V(x) = U_0 \delta(x). \quad (3.124)$$

Por sencillez vamos a considerar el problema unidimensional, se deja al lector que relacione lo que encontremos al caso de un sistema tridimensional. La ecuación de Dyson la escribimos como (en este caso  $x$  denota la coordenada en una dimensión)

$$G(x, x', \omega) = g(x, x', \omega) + \int g(x, x_1, \omega) V(x_1) G(x_1, x', \omega) dx_1, \quad (3.125)$$

reemplazando el potencial

$$G(x, x', \omega) = g(x, x', \omega) + U_0 g(x, 0, \omega) G(0, x', \omega). \quad (3.126)$$

De esta ecuación podemos encontrar  $G(0, x', \omega)$

$$\begin{aligned} G(0, x', \omega) &= g(0, x', \omega) + U_0 g(0, 0, \omega) G(0, x', \omega) \\ G(0, x', \omega) &= [1 - U_0 g(0, 0, \omega)]^{-1} g(0, x', \omega), \end{aligned} \quad (3.127)$$

y reemplazando en 3.126 obtenemos

$$G(x, x', \omega) = g(x, x', \omega) + U_0 g(x, 0, \omega) [1 - U_0 g(0, 0, \omega)]^{-1} g(0, x', \omega). \quad (3.128)$$



La función  $g^r(x, x', \omega)$  sin perturbar corresponde a un sistema infinito unidimensional, la cual se puede escribir como

$$g(x, x', \omega) = A_0 e^{ik|x-x'|}. \quad (3.129)$$

Con  $k = \sqrt{2m\omega/\hbar}$ . Con esto

$$G(x, x', \omega) = A_0 \left( e^{ik|x-x'|} + U_0 A e^{ik(|x|+|x'|)} [1 - U_0 A_0]^{-1} \right). \quad (3.130)$$

### 3.6. Función de Green para el grafeno

Consideremos la ecuación de Dirac que describe las propiedades del espectro de energía alrededor del valle **K**.

$$\begin{pmatrix} U - E_F & -i\hbar v_F (\partial_x - i\partial_y) \\ -i\hbar v_F (\partial_x + i\partial_y) & U - E_F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (3.131)$$

Las soluciones de un grafeno infinito las podemos escribir como

$$\psi(x, y) = e^{ikx+iqy} \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} \quad (3.132)$$

Obteniéndose el espectro de energía

$$E = \pm v_F \hbar \sqrt{k^2 + q^2} + U - E_F \quad (3.133)$$

Si suponemos una juntura plana,  $q$  es fijo y hagamos  $U = 0$ , los vectores de onda en dirección  $x$  son dados por

$$k_{\pm} = \pm k \quad (3.134)$$

$$k = \sqrt{\frac{(E + E_F)^2}{\hbar^2 v_F^2} - q^2} \quad (3.135)$$

Encontrando los vectores propios obtenemos

$$\begin{aligned} u_B &= \frac{k + iq}{\sqrt{k^2 + q^2}} u_A = u_A e^{i\alpha} \\ \sin \alpha &= \frac{q}{\sqrt{k^2 + q^2}}, \quad \cos \alpha = \frac{k}{\sqrt{k^2 + q^2}} \\ e^{i\alpha} &= \frac{k + iq}{|E + E_F|} \end{aligned} \quad (3.136)$$

Para  $k$  negativo la relación es

$$u_B = -\frac{(k - iq)}{\sqrt{k^2 + q^2}} u_A = -e^{-i\alpha} u_A \quad (3.137)$$

Las dos soluciones para construir la función de Green son

$$\psi_{>}(x) = e^{ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix}, \psi_{<}(x) = e^{-ikx} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \quad (3.138)$$

Estas son las soluciones en la banda de conducción, si estamos en la de valencia debemos invertir los signos de  $k$ . Cuando se tienen ecuaciones matriciales la función de Green es una matriz y para  $x$  cumple la ecuación

$$\left( E - \vec{H}_q(x) \right) \hat{G}(x, x', q) = \delta(x - x'), \quad (3.139)$$

mientras que para  $x'$  cumple

$$\hat{G}(x, x', q) \left( E - \overleftarrow{H}_{-q}(x') \right) = \delta(x - x'). \quad (3.140)$$

Por lo tanto se puede construir de la forma

$$\begin{aligned} \hat{G}(x, x', q) &= A \psi_{<}(x) (\beta \bar{\psi}_{>}(x'))^T, x < x' \\ &= B \psi_{>}(x) (\beta \bar{\psi}_{<}(x'))^T, x > x' \end{aligned}$$

La matriz  $\beta$  se encuentra para la norma de los espinores ea invariante de Lorentz, ver. Para el caso de bordes zig-zag paralelos al eje  $y$  usamos  $\beta = \sigma_z$ . Las soluciones traspuestas  $\bar{\psi}^T(x')$  cumplen la ecuación

$$\bar{\psi}^T (E - \overleftarrow{H}_{-q}) = 0 \quad (3.141)$$

$$(E - \vec{H}_{-q}^T) \bar{\psi} = 0 \quad (3.142)$$

El valor negativo de  $q$  aparece debido a que al hacer la transformada de Fourier las soluciones en  $y'$  se les asocia un  $q$  negativo

$$\hat{G}(x, x', q) = \int dy (y - y') e^{iq(y - y')} G(x, x', y - y') \quad (3.143)$$

6

$$G(x, x', y - y') = \frac{1}{2\pi} \int dq e^{iq(y - y')} G(x, x', q) \quad (3.144)$$

Como  $\vec{H}_{-q}^T = \vec{H}_q$ ,  $\bar{\psi}(x') = \psi(x')$ , de tal manera que las soluciones transpuestas son

$$\begin{aligned}\bar{\psi}_{>}^T &= e^{ikx} (1, e^{i\alpha}), \\ \bar{\psi}_{<}^T &= e^{-ikx} (1, -e^{-i\alpha}).\end{aligned}\quad (3.145)$$

Si queremos construir una función de green en  $x$  la ecuación diferencial es

$$(E - H_q(x)) \hat{G}(x, x') = \delta(x - x') \quad (3.146)$$

Integrando esta ecuación obtenemos

$$\begin{aligned}\int_{x=x'-0}^{x=x'+0} dx ((E_F + E) \sigma_0 + i\hbar v_F \sigma_x \partial_x + \hbar v_F q \sigma_y) \hat{G}(x, x') &= \int_{x=x'-0}^{x=x'+0} dx \delta(x - x'), \\ \hat{G}(x, x') \Big|_{x=x'+0} - \hat{G}(x, x') \Big|_{x=x'-0} &= \frac{-i}{\hbar v_F} \sigma_x,\end{aligned}\quad (3.147)$$

Usando

$$\hat{G}(x, x') = \begin{cases} A\psi_{<}(x)\bar{\psi}_{>}^T(x')\beta, & x < x' \\ B\psi_{>}(x)\bar{\psi}_{<}^T(x')\beta, & x > x' \end{cases} \quad (3.148)$$

Obtenemos

$$\begin{aligned}B\psi_{>}(x)\bar{\psi}_{<}^T(x) - A\psi_{<}(x)\bar{\psi}_{>}^T(x) &= -\frac{i}{\hbar v} \sigma_x \beta \\ B \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix} (1, -e^{-i\alpha}) - A \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\alpha} \end{pmatrix} (1, e^{i\alpha}) &= -\frac{i}{\hbar v} \sigma_x \beta \\ \begin{pmatrix} -A + B & -Ae^{i\alpha} - Be^{-i\alpha} \\ Be^{i\alpha} + Ae^{-i\alpha} & A - B \end{pmatrix} &= -\frac{i}{\hbar v} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (3.149)$$

que conduce a dos ecuaciones linealmente independientes para  $A$  y  $B$ , cuya solución es

$$A = B, A = -i / (2\hbar v \cos \alpha) \quad (3.150)$$

Con esto para  $x < x'$

$$\hat{G}(x, x') = \frac{-i}{2\hbar v \cos \alpha} e^{-ik(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & 1 \end{pmatrix} \quad (3.151)$$

Con esta función de Green podemos por ejemplo calcular la densidad espectral como

$$\rho(E, q) = \frac{1}{\pi} \text{Tr} \left( -\text{Im} \hat{G}(x, x, q) \right) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\hbar v \cos \alpha} \quad (3.152)$$

y la desidad de estados como la integral de  $\rho(E, q)$

$$\begin{aligned}\rho(E) &= \frac{1}{2\pi} \int \rho(E, q) dq \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \rho(E, \alpha) \frac{dq}{d\alpha} d\alpha\end{aligned}\tag{3.153}$$

Usando

$$\begin{aligned}\sin \alpha &= \frac{\hbar v_F q}{E} \\ \cos \alpha d\alpha &= \frac{\hbar v_F}{E} dq\end{aligned}$$

encontramos

$$\begin{aligned}\rho(E) &= \frac{1}{2\pi} \frac{E}{\hbar v_F} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \rho(E, \alpha) \cos \alpha d\alpha \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\pi} \frac{E}{(\hbar v_F)^2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\alpha \\ &= \frac{E}{2\pi (\hbar v_F)^2}\end{aligned}\tag{3.154}$$

que nos muestra que la densidad de estado es lineal con  $E$ . Si tenemos en cuenta la degeneración de valle y espín debemos incluir un factor 4 adicional.

# Introducción a los aislantes topológicos

## 4.1. Fase de Berry

Consideremos un estado  $\psi$  al cual se le puede adicionar una fase (por ejemplo con un transformación de calibración, gauge)

$$|\psi\rangle \rightarrow e^{i\alpha} |\psi\rangle, \quad (4.1)$$

esta fase es arbitraria y no es un observable. Sin embargo, si tenemos dos estados no ortogonales podemos definir la fase relativa entre ellos como

$$\gamma_{12} = -\arg \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (4.2)$$

aquí el  $\arg(z)$  se define en el intervalo  $(-\pi, \pi)$ . Esta fase también se puede definir a partir de

$$e^{-i\gamma_{12}} = \frac{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle}{|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|}. \quad (4.3)$$

Si hacemos una transformación gauge local

$$|\psi_i\rangle \rightarrow e^{i\alpha_i} |\psi_i\rangle \quad (4.4)$$

la fase  $\gamma_{12}$  no es invariante

$$e^{-i\gamma_{12}} \rightarrow e^{-i\gamma_{12} + i(\alpha_2 - \alpha_1)} \quad (4.5)$$

Ahora supongamos que tenemos  $N$  estados, con  $N \geq 3$ , lo cuales organizamos de una manera cíclica, la fase de Berry  $\gamma_L$  es definida como

$$\gamma_L = -\arg e^{-i(\gamma_{12} + \gamma_{21} + \dots + \gamma_{N1})} \quad (4.6)$$

Si hacemos una transformación gauge local obtenemos

$$\gamma_L \rightarrow -\arg e^{-i(\gamma_{12} + \gamma_{23} + \dots + \gamma_{N-1,N} + \gamma_{N1}) + i(\alpha_2 - \alpha_1 + \alpha_3 - \alpha_2 + \dots + \alpha_N - \alpha_{N-1} + \alpha_1 - \alpha_N)} = \gamma_L \quad (4.7)$$

Así  $\gamma_L$  es invariante de calibración y puede ser un observable del sistema. Ahora asumamos que el estado  $\psi_j$ , no depende de un índice discreto sino de un parámetro  $\mathbf{R}$  continuo en un espacio  $\wp$   $D$ -dimensional. Podemos considerar un camino suave  $\Gamma$  en el que el parámetro  $\mathbf{R}$  varía continuamente, sobre el camino y en una vecindad abierta suponemos que el estado varía

suavemente. La fase relativa entre dos estados vecinos de la curva, correspondientes al parámetro  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{R} + d\mathbf{R}$

$$e^{-i\Delta\gamma} = \frac{\langle \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}+d\mathbf{R}) \rangle}{|\langle \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}+d\mathbf{R}) \rangle|} \quad (4.8)$$

en el límite de  $d\mathbf{R} \rightarrow 0$  podemos escribir

$$\begin{aligned} \Delta\gamma &= i \ln \left( \frac{\langle \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}+d\mathbf{R}) \rangle}{|\langle \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}+d\mathbf{R}) \rangle|} \right) \\ &\simeq i \ln \left( \frac{\langle \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}) \rangle + \langle \psi(\mathbf{R}) | d\mathbf{R} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} | \psi(\mathbf{R}) \rangle}{|\langle \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}) \rangle + d\mathbf{R} \cdot \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \psi(\mathbf{R}) \rangle|} \right) \\ &= i \ln \left( \frac{1 + d\mathbf{R} \cdot \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \psi(\mathbf{R}) \rangle}{|1 + d\mathbf{R} \cdot \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \psi(\mathbf{R}) \rangle|} \right) \\ &= i \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \psi(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R} \\ &= A(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

donde  $A(\mathbf{R})$  define la conexión de Berry,

$$A(\mathbf{R}) = i \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \psi(\mathbf{R}) \rangle. \quad (4.10)$$

Aquí  $\nabla_{\mathbf{R}} | \psi(\mathbf{R}) \rangle$  es definida para que cualquier estado  $\phi$  del espacio de Hilbert  $|\phi\rangle$ ,  $\langle \phi | \nabla_{\mathbf{R}} | \psi(\mathbf{R}) \rangle = \nabla_{\mathbf{R}} \langle \phi | \psi(\mathbf{R}) \rangle$ . La conexión de Berry se puede escribir también como

$$\begin{aligned} A(\mathbf{R}) &= i (\langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \rangle - \nabla_{\mathbf{R}} \langle \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}) \rangle) \\ &= i (\langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \rangle - \langle \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}) \rangle - \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \rangle) \\ &= -i \langle \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}) \rangle, \end{aligned} \quad (4.11)$$

así

$$\begin{aligned} A(\mathbf{R}) &= \frac{1}{2} i (-\langle \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}) \rangle) \\ &= -Im \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \rangle \end{aligned} \quad (4.12)$$

Donde hemos usado la conservación de la norma  $\nabla_{\mathbf{R}} \langle \psi(\mathbf{R}) | \psi(\mathbf{R}) \rangle = 0$ . Si hacemos una transformación gauge

$$|\psi(\mathbf{R})\rangle \rightarrow e^{i\alpha(\mathbf{R})} |\psi(\mathbf{R})\rangle \quad (4.13)$$

La conexión de Berry se transforma en

$$\begin{aligned} A(\mathbf{R}) &\rightarrow i \langle \psi(\mathbf{R}) | e^{-i\alpha(\mathbf{R})} \left( i e^{i\alpha(\mathbf{R})} (\nabla_{\mathbf{R}} \alpha(\mathbf{R})) | \psi(\mathbf{R}) \rangle + e^{i\alpha(\mathbf{R})} \nabla_{\mathbf{R}} | \psi(\mathbf{R}) \rangle \right) \\ &= A(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}} \alpha(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Por lo tanto,  $A(\mathbf{R})$  no es invariante de calibración local. Si consideramos un camino cerrado  $\Gamma$  la fase de Berry se define como

$$\gamma(\Gamma) = -\arg e^{-i \oint d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R})}. \quad (4.15)$$

Es claro que si hacemos una transformación gauge

$$\begin{aligned}\gamma(\Gamma) &\rightarrow -\arg e^{-i \oint d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) + i \oint d\mathbf{R} \cdot \nabla \alpha(\mathbf{R})} \\ &= \gamma(\Gamma)\end{aligned}$$

Debido a que la fase de Berry involucra una integral de línea cerrada, podemos relacionar la fase de Berry con una integral de superficie. Para ello vamos a considerar que el parámetro  $\mathbf{R}$  está en un espacio bidimensional que denotamos con las coordenadas  $x$  y  $y$ . El camino encerrado por  $\Gamma$  define una superficie  $S_\Gamma$ , de tal manera que la fase de Berry corresponde a la frontera de esta superficie. Definimos la curvatura de Berry como

$$B = \partial_x A_y(\mathbf{R}) - \partial_y A_x(\mathbf{R}) \quad (4.16)$$

Esta cantidad es invariante gauge

$$\begin{aligned}B &\rightarrow \partial_x (A_y(\mathbf{R}) - \partial_y \alpha(\mathbf{R})) - \partial_y (A_x(\mathbf{R}) - \partial_x \alpha(\mathbf{R})) \\ &= B,\end{aligned} \quad (4.17)$$

y el flujo de Berry como

$$d\Phi = B dx dy \quad (4.18)$$

Usando el teorema de Stokes

$$\oint_\Gamma \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \int_{S_\Gamma} B(\mathbf{R}) dx dy \quad (4.19)$$

Para lo cual el estado  $|\psi(\mathbf{R})\rangle$  debe ser una función suave de  $\mathbf{R}$ , en la vecindad abierta de  $S_\Gamma$ . Si  $|\psi(\mathbf{R})\rangle$  no es suave podemos hacer una transformación gauge  $|\psi(\mathbf{R})\rangle \rightarrow |\psi'(\mathbf{R})\rangle$  en la que  $|\psi'(\mathbf{R})\rangle$  es una función suave. Con lo cual podemos siempre encontrar el gauge (una función  $\alpha$  adecuada) en la que podemos escribir

$$e^{-i \oint_\Gamma \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}} = e^{-i \int_{S_\Gamma} B(\mathbf{R}) dx dy} \quad (4.20)$$

ó

$$\gamma(\Gamma) = -\arg e^{-i \int_{S_\Gamma} B(\mathbf{R}) dx dy} \quad (4.21)$$

En el caso en que el parámetro  $\mathbf{R}$  este definido en un espacio tridimensional, y si  $|\psi(\mathbf{R})\rangle$  es suave en la vecindad de la superficie  $S_\Gamma$  en el espacio tridimensional (necesariamente la superficie no es plana), podemos aplicar nuevamente el teorema de stokes,

$$\oint_\Gamma \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \int_{S_\Gamma} B(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} \quad (4.22)$$

con

$$B(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad (4.23)$$

Aún si  $|\psi(\mathbf{R})\rangle$  no es suave la relación

$$\gamma(\Gamma) = -\arg e^{-i \oint_{\Gamma} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}} = -\arg e^{-i \int_{S_{\Gamma}} B(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S}} \quad (4.24)$$

se mantiene. La fase de Berry también es invariante bajo cambios suaves de la superficie  $S_{\Gamma}$  siempre que la curvatura de Berry sea suave en el camino  $\Gamma$ .

#### 4.1.1. Fase de Berry y dinámica adiabática

Consideremos que tenemos un hamiltoniano  $H(\mathbf{R})$ , suponemos que  $H(\mathbf{R})$  es una función suave del parámetro  $\mathbf{R}$ . Para un valor determinado de  $\mathbf{R}$  tenemos la solución

$$H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle. \quad (4.25)$$

Donde los estados  $|n(\mathbf{R})\rangle$  forman una base *instantánea*, es decir que para un valor fijo de  $\mathbf{R}$  estos son un conjunto ortonormal y completo. Para cada parámetro  $\mathbf{R}$  podemos tomar un gauge que especifica una fase para cada estado  $|n(\mathbf{R})\rangle$ . Ahora permitamos que este parámetro evolucione en el tiempo, y que cambia suavemente  $\mathbf{R}(t)$ , en  $t = 0$ , tenemos  $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}_0$ , y el estado del sistema es

$$|\psi(t=0)\rangle = |n(\mathbf{R}_0)\rangle. \quad (4.26)$$

Ahora dejamos evolucionar el tiempo de 0 a  $T$ , lo que nos define una trayectoria  $\mathbf{R}(t)$  cambia en el espacio  $D$ , dimensional. Esta trayectoria la podemos ver como una camino  $\Gamma$  donde asumimos que  $\mathbf{R}$  y  $|n(\mathbf{R})\rangle$  cambian suavemente. La evolución del estado del sistema es dado por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle. \quad (4.27)$$

Suponemos que al evolucionar  $\mathbf{R}(t)$  en cada instante de tiempo los gaps entre los estados  $E_n$  se mantiene finito, así podemos tomar una evolución lenta de  $\mathbf{R}(t)$  de tal manera que no se induzcan transiciones entre los estados, esta evolución debe ser suficientemente suave comparada con la diferencia de la frecuencia entre los estados, por lo cual recibe el nombre de adiabática. Esto nos permite que cada estado evolucione de acuerdo a un factor de fase el cual vamos a encontrar. Hacemos el ansatz

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt'} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (4.28)$$

que nos conduce a

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt'} \left( -\hbar \frac{d\gamma_n(t)}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle + E_n(\mathbf{R}(t)) |n(\mathbf{R}(t))\rangle + i\hbar \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \right). \quad (4.29)$$



Expandiendo  $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$  en una base fija en  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0$ ,

$$\begin{aligned} |n(\mathbf{R}(t))\rangle &= \sum_m a_m(\mathbf{R}) |m(\mathbf{R}_0)\rangle \\ \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle &= \frac{d\mathbf{R}(t)}{dt} \cdot |\nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R})\rangle \\ &= \frac{d\mathbf{R}(t)}{dt} \cdot \sum_m \nabla_{\mathbf{R}} a_m(\mathbf{R}) |m(\mathbf{R}_0)\rangle \end{aligned} \quad (4.30)$$

por lo tanto

$$\left( -\hbar \frac{d\gamma_n(t)}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle + E_n(\mathbf{R}(t)) |n(\mathbf{R}(t))\rangle + i\hbar \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \right) = H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (4.31)$$

$$-\hbar \frac{d\gamma_n(t)}{dt} |n(\mathbf{R})\rangle + i\hbar \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R})\rangle = 0 \quad (4.32)$$

$$\frac{d\gamma_n(t)}{dt} = i \langle n(\mathbf{R}) | \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R})\rangle \quad (4.33)$$

$$d\gamma_n(t) = i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle \cdot d\mathbf{R}(t)$$

Así que sobre el camino la fase cambia en

$$\gamma_n(\Gamma) = i \int_{\Gamma} \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle \cdot d\mathbf{R} \quad (4.34)$$

De forma similar si no dejamos los estados parametrizados con  $\mathbf{R}$  sino con  $t$ ,  $|n(t)\rangle$ , tendríamos un resultado equivalente

$$\gamma_n(\Gamma) = i \int_0^t \langle n(t') | \partial_{t'} |n(t')\rangle \cdot dt' \quad (4.35)$$

Volviendo a nuestro resultado, cuando tenemos un cambio adiabático y cíclico en el hamiltoniano, lo que equivale a tener una curva  $\Gamma$  cerrada,  $R(T) = R_0$ , lo que nos conduce a una fase

$$\gamma_n(\Gamma) = i \oint_{\Gamma} \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle \cdot d\mathbf{R} \quad (4.36)$$

la cual debe ser un múltiplo entre de  $2\pi$ . Esto nos muestra que la fase de Berry está cuantizada y su valor es invariante gauge. La forma en que el parámetro  $\mathbf{R}(t)$  depende del tiempo no es relevante y la fase llega a tener un aspecto geométrico.

### 4.1.2. Expresiones para la curvatura de Berry

Vimos que la conectividad de Berry se puede escribir como  $A(\mathbf{R}) = -Im \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \rangle$ , con lo cual la componente  $i$  de la curvatura de Berry es

$$\begin{aligned} B_i &= \epsilon_{ijk} \partial_j A_k = -Im \epsilon_{ijk} \partial_j \langle n | \partial_k n \rangle \\ &= -Im \epsilon_{ijk} \langle \partial_j n | \partial_k n \rangle - Im \epsilon_{ijk} \langle \partial n | \partial_j \partial_k n \rangle \\ &= -Im \epsilon_{ijk} \langle \partial_j n | \partial_k n \rangle \end{aligned} \quad (4.37)$$

donde  $\epsilon_{kij}$  es el símbolo de Levi-Civita, estamos usando la notación de suma sobre índices repetidos y no estamos notando explícitamente el parámetro  $\mathbf{R}$ . El término  $\epsilon_{ijk} \langle \partial n | \partial_j \partial_k n \rangle$  se anula al hacer la suma dado que  $\partial_j \partial_k = \partial_k \partial_j$ , pero  $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{ikj}$ . Miremos explícitamente este resultado para  $B_z$

$$\begin{aligned} B_z &= \partial_x A_y - \partial_y A_x \\ &= -Im (\partial_x \langle n | \partial_y n \rangle - \partial_y \langle n | \partial_x n \rangle) \\ &= -Im (\langle \partial_x n | \partial_y n \rangle + \langle n | \partial_x \partial_y n \rangle - \langle \partial_y n | \partial_x n \rangle - \langle n | \partial_y \partial_x n \rangle) \\ &= -Im (\langle \partial_x n | \partial_y n \rangle - \langle \partial_y n | \partial_x n \rangle) \end{aligned} \quad (4.38)$$

Usando una relación de completez en un instante dado, tenemos que

$$\mathbf{B}^{(n)} = -Im \sum_{n' \neq n} \langle \nabla n | n' \rangle \times \langle n' | \nabla n \rangle. \quad (4.39)$$

El término  $n = n'$  es cero por ello se ha excluido. Para calcular el término  $\langle n' | \nabla n \rangle$  escribimos la ecuación de Schrödinger para el estado  $n$  y hacemos gradiente

$$\begin{aligned} \nabla (H | n \rangle) &= \nabla (E_n | n \rangle) \\ (\nabla H) | n \rangle + H | \nabla n \rangle &= (\nabla E_n) | n \rangle + E_n | \nabla n \rangle. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Operando con el estado  $\langle n' |$

$$\begin{aligned} \langle n' | (\nabla H) | n \rangle + \langle n' | H | \nabla n \rangle &= E_n \langle n' | \nabla n \rangle \\ \langle n' | (\nabla H) | n \rangle + E_{n'} \langle n' | \nabla n \rangle &= E_n \langle n' | \nabla n \rangle, \end{aligned} \quad (4.41)$$

con lo cual

$$\langle n' | \nabla n \rangle = \frac{\langle n' | (\nabla H) | n \rangle}{E_n - E_{n'}}$$

con este resultado obtenemos que la curvatura de Berry se puede expresar como

$$\mathbf{B}^{(n)} = -Im \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n | (\nabla H) | n' \rangle \times \langle n' | (\nabla H) | n \rangle}{(E_n - E_{n'})^2} \quad (4.42)$$

Esto nos muestra que si hay fuente de monopolos de  $\mathbf{B}$  son debidos a degeneramientos. De esta relación podemos sumar todas las intensidades  $\mathbf{B}^{(n)}$

$$\begin{aligned}
\sum_n \mathbf{B}^{(n)} &= -Im \sum_n \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n | (\nabla H) | n' \rangle \times \langle n' | (\nabla H) | n \rangle}{(E_n - E_{n'})^2} \\
&= -\frac{1}{2} Im \sum_n \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n | (\nabla H) | n' \rangle \times \langle n' | (\nabla H) | n \rangle + \langle n' | (\nabla H) | n \rangle \times \langle n | (\nabla H) | n' \rangle}{(E_n - E_{n'})^2} \\
&= -\frac{1}{2} Im \sum_n \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n | (\nabla H) | n' \rangle \times \langle n' | (\nabla H) | n \rangle - \langle n | (\nabla H) | n' \rangle \times \langle n' | (\nabla H) | n \rangle}{(E_n - E_{n'})^2} \\
&= 0
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Esto nos da una ligadura sobre las curvaturas de las bandas y por tanto sobre las fases de Berry.

#### 4.1.3. Ejemplo: Sistema de 2 niveles

Consideremos el hamiltoniano de un sistema de dos niveles dado por

$$\begin{aligned}
H(\mathbf{d}) &= \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\
&= d_x \sigma_x + d_y \sigma_y + d_z \sigma_z
\end{aligned} \tag{4.44}$$

Donde  $\mathbf{d}$  juega el papel del parámetro  $\mathbf{R}$ , o en función de éste,  $\sigma_i$  son las matrices de Pauli, con  $\sigma_0 = 1$ .

Elevemos al cuadrado  $H$

$$\begin{aligned}
H^2 &= d_x^2 \sigma_x^2 + d_y^2 \sigma_y^2 + d_z^2 \sigma_z^2 + d_x d_y (\sigma_y \sigma_x + \sigma_x \sigma_y) + \dots \\
&= (d_x^2 + d_y^2 + d_z^2) \sigma_0 \\
&= |\mathbf{d}|^2 \sigma_0
\end{aligned} \tag{4.45}$$

donde hemos usado que las matrices de Pauli anticonmutan. Por lo tanto los valores propios de  $H$  son

$$E_{\pm} = \pm |d| \tag{4.46}$$

De  $H$  y  $d$  podemos hacer una representación esférica,  $\theta \in [0, \pi)$ ,  $\varphi \in [0, 2\pi)$

$$\cos \theta = \frac{d_z}{|\mathbf{d}|}, \quad e^{i\varphi} = \frac{d_x + id_y}{\sqrt{d_x^2 + d_y^2}}$$

Los estados propios los encontramos a partir de

$$H = |\mathbf{d}| \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cos \varphi - i \sin \theta \sin \varphi \\ \sin \theta \cos \varphi + i \sin \theta \sin \varphi & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,\pm} \\ u_{2,\pm} \end{pmatrix} = \pm |\mathbf{d}| \begin{pmatrix} u_{1,\pm} \\ u_{2,\pm} \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

$$(\cos \theta \mp 1) u_{1,\pm} = -\sin \theta e^{-i\varphi} u_{2,\pm} \quad (4.48)$$

$$\frac{u_{1,\pm}}{u_{2,\pm}} = \frac{-\sin \theta}{(\cos \theta \mp 1)} e^{-i\varphi}$$

Usando  $\cos \theta + 1 = 2 \cos^2 \frac{\theta}{2}$  y  $\sin \theta = 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$ , tenemos

$$\frac{u_{1,+}}{u_{2,+}} = \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{\sin \frac{\theta}{2}} e^{-i\varphi}, \quad \frac{u_{1,-}}{u_{2,-}} = \frac{-\sin \frac{\theta}{2}}{\cos \frac{\theta}{2}} e^{-i\varphi} \quad (4.49)$$

Con esto los vectores propios pueden ser escritos como

$$|u_+(\mathbf{d})\rangle = e^{i\alpha_+(\theta,\varphi)} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}, \quad |u_-(\mathbf{d})\rangle = e^{i\alpha_-(\theta,\varphi)} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.50)$$

Estos estados están normalizados. Aquí  $\alpha_{\pm}$  corresponde a un gauge en particular. Consideremos el gauge  $\alpha_+ = 0$  para todo  $\theta$  y  $\varphi$ . En este caso si  $\theta$  es fijo y si usamos  $\varphi = 0 \rightarrow 2\pi$  el estado no está bien definido, dado que cuando  $\varphi = 2\pi$  nos aparece un signo relativo  $(-1)$  entre las dos componentes del vector, que no aparece en  $\varphi = 0$ , de tal manera que tenemos una discontinuidad en  $\varphi = 0$ . Para levantar esta discontinuidad podemos tomar el gauge  $\alpha_+ = \varphi/2$ , y denotando el gauge por este caso  $S$

$$|u_+(\mathbf{d})\rangle_S = \left( \cos \frac{\theta}{2}, \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \right)^T \quad (4.51)$$

Este gauge incluye un prefactor de -1, cuando giramos en el círculo de  $\varphi$ , cancelando la singularidad en  $\varphi$  para un fijo  $\theta$ . Sin embargo al dejar variar  $\theta$  tenemos dos puntos especiales en  $\theta = 0$ , y  $\theta = \pi$ . en este gauge el polo norte

$$|u_+(0,0,1)\rangle_S = (1,0)^T \quad (4.52)$$

y el estado está bien definido, sin embargo el polo sur

$$|u_+(0,0,-1)\rangle_S = (0, e^{i\varphi})^T \quad (4.53)$$

el estado no está bien definido (de allí la notación  $S$ ), dado que su valor depende de cómo nos acerquemos a él (el ángulo  $\varphi$ ). Podemos tomar otro gauge para solucionar esto, el que llamaremos  $N$ , en que que  $\alpha_+ = -\varphi/2$ ,

$$|u_+(\mathbf{d})\rangle_N = \left( \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}, \sin \frac{\theta}{2} \right)^T \quad (4.54)$$

En este caso el estado en el polo sur está bien definido, sin embargo en el polo norte no, lo que nos muestra que podemos remover la singularidad localmente pero no globalmente. Ahora calculemos la conexión y la curvatura de Berry, en el gauge  $S$ , para el estado obtenemos

$$\begin{aligned} A_{\theta,S} &= \langle u_+ | \partial_\theta | u_+ \rangle \\ &= \left( \cos \frac{\theta}{2}, \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \right) \left( -\frac{1}{2} \sin \frac{\theta}{2}, \frac{1}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \right)^T \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} A_{\varphi,S} &= i \langle u_+ | \partial_\varphi | u_+ \rangle \\ &= i \left( \cos \frac{\theta}{2}, \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \right) \left( 0, i \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \right)^T \\ &= -\sin^2 \frac{1}{2} \theta \end{aligned} \quad (4.56)$$

Y la curvatura de Berry en estas coordenadas es

$$\begin{aligned} B_{\theta\varphi,S} &= \partial_\theta A_\varphi - \partial_\varphi A_\theta \\ &= -\sin \frac{1}{2} \theta \cos \frac{1}{2} \theta \\ &= -\frac{1}{2} \sin \theta \end{aligned} \quad (4.57)$$

En el gauge  $N$

$$\begin{aligned} A_{\theta,N} &= 0 \\ A_{\varphi,N} &= \cos^2 \frac{1}{2} \theta \\ B_{\theta\varphi,N} &= -\frac{1}{2} \sin \theta. \end{aligned}$$

La conectividad depende del gauge pero la curvatura no, como era de esperarse el flujo que conduce a la fase de Berry es

$$\gamma_+ = \int d\theta d\varphi B_{\theta\varphi} = 2\pi,$$

la cual es invariante Gauge. Ahora vamos a calcular la curvatura de Berry de ambos estados en un sistema cartesiano  $(d_x, d_y, d_z)$ , para ello usamos la ecuación (4.42),

$$\mathbf{B}^{(+)} = -Im \frac{\langle + | \nabla_{\mathbf{d}} H | - \rangle \times \langle - | \nabla_{\mathbf{d}} H | + \rangle}{(|d| + |d|)^2} = -\frac{1}{4} \frac{1}{|d|^2} Im (\langle + | \nabla_{\mathbf{d}} H | - \rangle \times \langle - | \nabla_{\mathbf{d}} H | + \rangle) \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{(-)} &= -Im \frac{\langle - | (\nabla_{\mathbf{d}} H) | + \rangle \times \langle + | (\nabla_{\mathbf{d}} H) | - \rangle}{(-|d| - |d|)^2} = -\frac{1}{4} \frac{1}{|d|^2} Im (\langle - | (\nabla_{\mathbf{d}} H) | + \rangle \times \langle + | (\nabla_{\mathbf{d}} H) | - \rangle) \\ &= -\mathbf{B}^{(+)} \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$\nabla_{\mathbf{d}} H = \sigma \quad (4.61)$$

Vamos a usar el gauge  $N$ , así

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

con lo cual

$$\langle - | \sigma | + \rangle = (\cos \theta \cos \varphi - i \sin \varphi, \cos \theta \sin \varphi + i \cos \varphi, -\sin \theta)$$

$$\langle + | \sigma | - \rangle = (\cos \theta \cos \varphi + i \sin \varphi, \cos \theta \sin \varphi - i \cos \varphi, -\sin \theta)$$

así

$$|\mathbf{d}| \langle + | \sigma | - \rangle \times \langle - | \sigma | + \rangle = 2i\mathbf{d} \quad (4.63)$$

con esto la curvatura es

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{(+)} &= \frac{1}{4} \frac{1}{|\mathbf{d}|^2} \text{Im} \left( \frac{2i\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|} \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{|\mathbf{d}|^2} \hat{\mathbf{d}} \end{aligned} \quad (4.64)$$

Aquí vemos que el campo es singular en  $d = 0$ , y que es equivalente al de una carga puntual, a partir de esto definimos el número de Chern como la fase de Berry/ $2\pi$  a partir del flujo encerrado por una esfera de radio  $d$  que contiene el origen,

$$\begin{aligned} Ch &= \frac{\gamma^+}{2\pi} = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}^{(+)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_S 4\pi d^2 \hat{\mathbf{d}} \cdot \frac{1}{2} \frac{1}{|\mathbf{d}|^2} \hat{\mathbf{d}} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (4.65)$$

en general el número de Chern nos da el número de monopolos encerrados por la superficie.

## 4.2. Fase de Berry y estados de Bloch

La fase de Berry juega un papel importante en el espacio de los vectores para la topología de aislantes y superconductores. Para ello consideremos los estados de Bloch en el espacio del momentum cristalino  $\mathbf{k}$

$$H_{\mathbf{k}} |u_n(\mathbf{k})\rangle = E_n(\mathbf{k}) |u_n(\mathbf{k})\rangle \quad (4.66)$$

La conectivida de Berry es definida como

$$A^{(n)}(\mathbf{k}) = i \langle u_n(\mathbf{k}) | \partial_{\mathbf{k}} |u_n(\mathbf{k})\rangle \quad (4.67)$$

La cual nos da una medida de la razón de cambio de la función de Bloch en el espacio  $\mathbf{k}$ , de tal manera que ésta desvanece si  $u_n(\mathbf{k})$  no cambia. Si hacemos un cambio de calibración tenemos que

$$|u_n(\mathbf{k})\rangle \rightarrow e^{i\phi_n(\mathbf{k})} |u_n(\mathbf{k})\rangle \quad (4.68)$$

esto cambia  $A^{(n)}(\mathbf{k})$  como

$$\mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k}) \rightarrow \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k}) - \partial_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) \quad (4.69)$$

Para trabajar con una cantidad invariante se define la “intensidad de campo” de la conexión de Berry, o la curvatura como ya vimos, a partir de

$$F_{ij}^{(n)}(\mathbf{k}) = \partial_{k_i} A_{kj}^{(n)}(\mathbf{k}) - \partial_{k_j} A_{ki}^{(n)}(\mathbf{k}) \quad (4.70)$$

Esto es análogo al campo vectorial ( $\mathbf{A}$ ) y al campo magnético ( $\mathbf{F}$ ). A partir de  $F_{ij}^{(n)}(\mathbf{k})$  vamos a definir más adelante un invariante topológico denominado el número de Chern. Otro invariante que podemos construir a partir de  $A^{(n)}(\mathbf{k})$  es la fase de Berry, la cual se define en este caso como la integral de línea cerrada de  $A^{(n)}(\mathbf{k})$  en el espacio  $\mathbf{k}$ . Tomando un gauge (lo cual es siempre posible) en el que  $A^{(n)}(\mathbf{k})$  no es singular en el camino, la integral es

$$\oint_C d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k}) \quad (4.71)$$

haciendo un cambio de calibración

$$\oint_C d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k}) \rightarrow \oint_C d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k}) - \oint_C d\mathbf{k} \cdot \partial_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) \quad (4.72)$$

la última integral debe ser un multiplo entero de  $2\pi$ , dado que en un camino cerrado  $e^{i\phi_n(\mathbf{k})}$  debe estar univaluado. Por lo tanto, la cantidad

$$\exp(i \oint_C d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k})) \quad (4.73)$$

es invariante de calibración y es la fase de Berry, la cual puede variar continuamente y tomar cualquier valor real, en general esta fase no es un invariante topológico, sin embargo si una simetría es impuesta y si un posible camino  $C$  es considerado, la fase de Berry puede estar cuantizada y dar un invariante topológico.

### 4.2.1. Número de Chern

El número de Chern es uno de las cantidades más fundamentales en fases topológicas. En sistemas 2D el número de Chern de la banda  $n$  es definido a partir de la intensidad de campo como

$$\begin{aligned} Ch_1^{(n)} &= \frac{1}{2\pi} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy}^{(n)}(\mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{2dBZ} dS_k \hat{\mathbf{k}}_z \cdot F_{xy}^{(n)}(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{k}}_z. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Donde la integral abarca la primera zona de Brillouin. El cual es análogo a un Flujo magnético. Usando el teorema de stokes

$$\begin{aligned} Ch_1^{(n)} &= \frac{1}{2\pi} \int_{2dBZ} dS_k \hat{\mathbf{k}}_z \cdot F_{xy}^{(n)}(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{k}}_z \\ &= \frac{1}{2\pi} \oint_{C_{2dBZ}} d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (4.75)$$

que es la fase de Berry para un camino que encierra la 1BZ. Debido a la periodicidad de  $\mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k})$  y si  $\mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k})$  no tiene singularidades sobre la frontera de la 1BZ, esta integral es cero, por ejemplo si en la sección camino  $C_1$  tenemos el valor  $\mathbf{A}_1^{(n)}(\mathbf{k})$ , en una sección opuesta de la 1BZ tenemos  $\mathbf{A}_2^{(n)}(\mathbf{k})$ , pero por la periodicidad de  $\mathbf{A}$   $\mathbf{A}_2^{(n)}(\mathbf{k}) = \mathbf{A}_1^{(n)}(\mathbf{k})$ , o dicho de otra manera  $\mathbf{A}_2^{(n)}(\mathbf{k}) = \mathbf{A}_1^{(n)}(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = \mathbf{A}_1^{(n)}(\mathbf{k})$ . Si  $\mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k})$  tiene una singularidad en un punto  $\mathbf{k}_0$  del camino, podemos hacer una transformación de calibración en una región  $R$  que incluya el punto  $\mathbf{k}_0$  de tal manera que  $\mathbf{A}^{(n)'}(\mathbf{k})$  no tenga singularidades en  $R$ . Con esto el número de Chern resulta ser una integral de la función gauge  $\phi_k$  en la frontera de  $R$ ,  $\partial R$

$$Ch_1^{(n)} = \frac{1}{2\pi} \int_{\partial R} d\mathbf{k} \cdot \partial_{\mathbf{k}} \phi_n(\mathbf{k}) \quad (4.76)$$

Debido a que  $e^{i\phi_n(\mathbf{k})}$  es una función única sobre  $\partial R$  (aclarar),  $Ch_1^{(n)}$  debe ser entero. Para un aislante 2D, el número total de Chern de las bandas ocupadas es

$$Ch = \sum_{E_n < E_F} Ch^{(n)} \quad (4.77)$$

Este número es de importancia ya que está relacionado con la conductancia Hall

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} Ch \quad (4.78)$$

Bajo simetría de inversión temporal la conectividad y la curvatura o fortaleza se transforman como



$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^{(n)}(\mathbf{k}) &\rightarrow \mathbf{A}^{(n)}(-\mathbf{k}) \\
F_{ij}^{(n)}(\mathbf{k}) &= \partial_{k_i} A_{k_j}^{(n)}(\mathbf{k}) - \partial_{k_j} A_{k_i}^{(n)}(\mathbf{k}) \rightarrow -\partial_{k_i} A_{k_j}^{(n)}(-\mathbf{k}) - \partial_{k_j} A_{k_i}^{(n)}(-\mathbf{k}) \\
&= -F_{ij}^{(n)}(-\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{4.79}$$

con esto

$$\begin{aligned}
Ch &= \sum_{E_n < E_F} Ch^{(n)} \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{E_n < E_F} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy}^{(n)}(\mathbf{k}) \\
&= - \sum_{E_n < E_F} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy}^{(n)}(-\mathbf{k}) \\
&= - \sum_{E_n < E_F} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy}^{(n)}(\mathbf{k}) \\
&= -Ch
\end{aligned} \tag{4.80}$$

y por lo tanto  $Ch = 0$ . Para que  $Ch$  sea diferente de cero debemos romper inversión temporal, que es lo que sucede en el efecto Hall cuántico.

#### 4.2.2. Pares de Kramers e índice $Z_2$

Como vimos anteriormente, cuando tenemos simetría de inversión temporal los estados  $|\mathbf{k} \uparrow\rangle$ , y su inversión temporal  $|\mathbf{k} \downarrow\rangle$  tienen la misma energía  $E_{\uparrow}(\mathbf{k}) = E_{\downarrow}(-\mathbf{k})$ , siendo ambos estados ortogonales, a este degeneramiento los llamamos degeneramiento de Kramers. Si a los estados propios de  $H(\mathbf{k})$  le asociamos el estado de Kramers  $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ , a  $H(-\mathbf{k})$  le asociamos el estado  $|u_{n'}(-\mathbf{k})\rangle$ , con banda  $n'$ , y este estado cumple

$$|u_{n'}(-\mathbf{k})\rangle = T |u_n(\mathbf{k})\rangle. \tag{4.81}$$

Para distinguir los dos estados vamos a usar la notación  $|u_n^I(\mathbf{k})\rangle \equiv |u_n(\mathbf{k})\rangle$ , y  $|u_n^{II}(\mathbf{k})\rangle \equiv |u_{n'}(-\mathbf{k})\rangle$ . Así que podemos escribir

$$|u_n^{II}(\mathbf{k})\rangle = e^{i\alpha_n(\mathbf{k})} T |u_n^I(-\mathbf{k})\rangle. \tag{4.82}$$

Debemos recalcar que  $|u_n^{II}(\mathbf{k})\rangle$  es el estado propio de  $H(-\mathbf{k})$ .

Ahora vamos a definir un nuevo invariante topológico denominado índice  $Z_2$ . Aunque hay varias formas para definirlo, vamos a escribirlo a partir del número de Chern de espín. Para ello

supongamos que tenemos un sistema 2D donde la dirección de espín  $S_z$  está bien definida, el hamiltoniano lo podemos escribir como

$$H = \begin{pmatrix} H_{\uparrow}(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & H_{\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (4.83)$$

En cada sector del hamiltoniano podemos definir un número de chern  $Ch_{\uparrow(\downarrow)}$ , asociados a los estados de  $H_{\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{k})$ . Debido a que con el espín se invierte con IT, tenemos que no necesariamente  $Ch_{\uparrow(\downarrow)}$  sea cero, sin embargo su suma es cero,

$$Ch_{\uparrow} + Ch_{\downarrow} = 0$$

Para ver esto partamos de

$$\begin{aligned} Ch_{\uparrow} &= \sum_{E_n < E_F} Ch_{\uparrow}^{(n)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{E_n < E_F} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy,\uparrow}^{(n)}(\mathbf{k}) \\ &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{E_n < E_F} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy,\downarrow}^{(n)}(-\mathbf{k}) \\ &= -\frac{1}{2\pi} \sum_{E_n < E_F} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy,\downarrow}^{(n)}(\mathbf{k}) \\ &= -Ch_{\downarrow} \end{aligned}$$

En general la interacción espín orbita rompe que el espín se conserve (el hamiltinao es por ejemplo 2x2 en el espacio de espín, y asociamos dos vectores propios, pero cada vector propio no tiene un espín en z definido, y por lo tanto las dos componentes del espinor son diferentes de cero. Cuando aplicamos el operador T a uno de los estados, debido a la matriz  $\sigma_y$  invertimos las componentes del espinor, y conjugamos y esos dos estados forman el par de kramers). y el número de Chern de espín no está bien definido. Pero podemos definir unos números de Chern análogos al espín para los pares de kramers, en donde podemos dividir el espacio de Hilbert en los espacios I y II. e introducir los números de Chern de estos espacios

$$Ch_I = \frac{1}{2\pi} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy}^{I(-)}(\mathbf{k}) \quad (4.84)$$

$$Ch_{II} = \frac{1}{2\pi} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy}^{II(-)}(\mathbf{k}) \quad (4.85)$$

Donde las intensidades de fortaleza (curvatura de Berry)  $F_{xy}^{I,II(-)}$  son asociadas a las conectividades

$$A^{I(-)} = i \sum_{E_n < E_F} \langle u_n^I(\mathbf{k}) | \partial_{\mathbf{k}} | u_n^I(\mathbf{k}) \rangle \quad (4.86)$$

$$A^{II(-)} = i \sum_{E_n < E_F} \langle u_n^{II}(\mathbf{k}) | \partial_{\mathbf{k}} | u_n^{II}(\mathbf{k}) \rangle \quad (4.87)$$

Estos números cumplen la misma propiedad de los números de Chern de espín

$$Ch_I + Ch_{II} = 0 \quad (4.88)$$

La demostración es similar,

$$\begin{aligned} Ch_I &= \frac{1}{2\pi} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy}^{I(-)}(\mathbf{k}) \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy}^{II(-)}(-\mathbf{k}) \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{2dBZ} dk_x dk_y F_{xy}^{II(-)}(\mathbf{k}) \\ &= -Ch_{II} \end{aligned} \quad (4.89)$$

Aunque esto es análogo con el espín debemos tener cuidado dado que  $Ch_I$  o  $Ch_{II}$  no están bien definidos debido a que el índice I ó II es arbitrario. Si cambiamos de notación este proceso cambio de signo cada índice de Chern,  $.Ch_I = Ch'_{II} = -Ch'_{II}$  y viceversa, así que para definir una cantidad robusta ante el cambio de subíndices definimos el índice  $Z_2$

$$(-1)^{\nu_{2d}} \equiv (-1)^{Ch_I} = (-1)^{Ch_{II}} \quad (4.90)$$

Esta definición nos dice que el índice  $Z_2$  preserva la paridad del número de Chern (I o II). Un aislante con  $(-1)^{\nu_{2d}} = -1$  es topológico, diferente a un aislante ordinario y se suele denominar ‘‘quantum spin Hall insulator’’

Ahora vamos a definir el pindice  $Z_2$  para sistemas tridimensionales con simetría de inversión temporal. Para ello consideremos el momentum asociado al punto  $\Gamma$  de alta simetría de 1ZB, este punto al tener vector de onda cero,  $\mathbf{k} = 0$ , tiene simetría de inversión temporal. Como podemos tener varias zonas, llamemos a este momentum  $\Gamma_i$ , el cual satisface

$$\Gamma_i = -\Gamma_i + G, \quad (4.91)$$

donde  $G$  simboliza un vector de la red recíproca  $\mathbf{K}_n$ , así

$$\Gamma_i = \frac{G}{2} = \frac{n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3}{2} \quad (4.92)$$

Con  $n_i = 0, 1$  podemos definir 8 puntos gamma que formarían los 8 vértices dentro de la zona de Brillouin, que nos podemos imaginar como un prisma. Si fijamos  $n_1 = 0$ , tendríamos 4 puntos  $\Gamma$ , los cuales nos definen un plano (con los vectores  $\mathbf{b}_2$  y  $\mathbf{b}_3$ ), y fijando  $n_1 = 1$  tenemos otro plano paralelo al anterior, así de esta manera si fijamos  $n_2 = 0$  ó 1 obtenemos otros dos planos, y si fijamos  $n_3 = 0$  ó 1 dos más. Así en total tenemos 6 planos que encierran la ZB. Así un plano de inversión temporal lo definimos como aquel que obtenemos al fijar un  $n_i$ , el cual denotamos  $\Sigma_{n_i}^i$ , por ejemplo el plano  $\Sigma_0^2$  simboliza  $n_2 = 0$ . A cada plano lo podemos definir un índice  $Z_2$  como  $(-1)^{Ch_I(\Sigma_{n_i}^i)}$ , de esta manera tendríamos un total de 6 índices, sin embargo hay las siguientes ligaduras

$$(-1)^{Ch_I(\Sigma_1^1)-Ch_I(\Sigma_0^1)} = (-1)^{Ch_I(\Sigma_1^2)-Ch_I(\Sigma_0^2)} \quad (4.93)$$

$$= (-1)^{Ch_I(\Sigma_1^3)-Ch_I(\Sigma_0^3)} \quad (4.94)$$

Con lo cual solo es necesario definir los siguientes 4 índices

$$(-1)^{\nu_{2D,i}} = (-1)^{Ch_I(\Sigma_1^i)}, i = 1, 2, 3 \quad (4.95)$$

$$(-1)^{\nu_{3D}} = (-1)^{Ch_I(\Sigma_1^1)-Ch_I(\Sigma_0^1)} \quad (4.96)$$

Los primeros tres índices tiene un carácter cuasi-2D y pueden ser -1, incluso para un hamiltoniano que no dependa del vector de onda  $k_i$  si  $(-1)^{Ch_I(\Sigma_0^i)} = -1$ . El otro índice  $Z_2$   $(-1)^{\nu_{3D}}$  tiene un carácter tridimensional y se suele llamar el índice  $Z_2$  3D. Un aislante con índice  $Z_2$  3D no trivial es llamado un aislante topológico fuerte.

Ahora consideremos el efecto del operador de inversión (se denota como  $I$  o  $P$  por paridad) se tiene que

$$P^{-1}H(\mathbf{k})P = H(-\mathbf{k}) \quad (4.97)$$

Por lo tanto un estado en  $\mathbf{k} = \Gamma_i$  es estado propio de  $H(\mathbf{k})$  y de  $P$  dado que  $P^{-1}H(\Gamma_i)P = H(\Gamma_i)$ , es importante resaltar que los puntos  $\Gamma_i$  se definen tan que

$$T^{-1}H(\Gamma_i)T = H(\Gamma_i) \quad (4.98)$$

. Dado que el operador de inversión temporal conmuta con  $P$ ,  $[T, P]_- = 0$ , entonces un par de Kramers de la misma energía es estado propio de  $T$  y  $P$ , así que

$$P|u_n^I(\Gamma_i)\rangle = \xi_i|u_n^I(\Gamma_i)\rangle \quad (4.99)$$

$$P|u_n^{II}(\Gamma_i)\rangle = \xi_i|u_n^{II}(\Gamma_i)\rangle \quad (4.100)$$

con  $\xi_i = \pm 1$ , donde hemos usado que  $P^2 = 1$ . Con los valores propios  $\xi_i$ , los índices  $Z_2$  se pueden calcular como

$$(-1)^{\nu_{2d}} = \prod_i \xi_i, \quad (4.101)$$

donde la productoria va sobre todos los puntos  $\Gamma_i$  no equivalentes en 2D. En sistemas 3d tenemos que

$$(-1)^{\nu_{2d,a}} = \prod_{\substack{i \\ n_a=1, n_b \neq a}} \xi_{i=(n_1 n_2 n_3)} \quad (4.102)$$

$$(-1)^{\nu_{3d}} = \prod_i \xi_i \quad (4.103)$$

el producto en la última ecuación es tomado sobre los 8 puntos  $\Gamma_i$  dentro de la zona de Brillouin.

### 4.3. Ejemplos de Aislante topológicos

El modelo de Zhang efectivo dentro de la aproximación  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  de un aislante topológico 3D es

$$H = E_0(\mathbf{k}) + \begin{pmatrix} M(\mathbf{k}) & A_1 k_z & 0 & A_2 k_- \\ A_1 k_z & -M(\mathbf{k}) & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & M(\mathbf{k}) & -A_1 k_z \\ A_2 k_+ & 0 & -A_1 k_z & -M(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.104)$$

donde

$$\begin{aligned} E_0(\mathbf{k}) &= C + D_1 k_z^2 + D_2 (k_x^2 + k_y^2) \\ M(\mathbf{k}) &= M - B_1 k_z^2 - B_2 (k_x^2 + k_y^2) \\ k_{\pm} &= k_x \pm i k_y \end{aligned} \quad (4.105)$$

Vamos a hacer una simplificación haciendo  $B_1 = B_2 = m_1$  y llamemos  $M = m_0$ , con esto quitando el termino  $E_0$  el hamiltoniano es

$$H = (m_0 - m_1 k^2) \tau_z \sigma_0 + A_1 k_z \tau_x \sigma_z + A_2 (k_x \tau_x \sigma_x - k_y \tau_x \sigma_y) \quad (4.106)$$

Donde las matrices de Pauli  $\sigma$  están en el espacio de espín, y las  $\tau$  en el espacio de paridad,  $\tau \otimes \sigma$ , con  $\sigma$  el espacio de mayor tamaño. Este hamiltoniano tiene dos puntos invariantes,  $k_1 = 0$ , y  $k_2 \rightarrow \infty$ , que son los puntos invariantes de inversión temporal,

$$H(k_1) = m_0 \tau_z \quad (4.107)$$

$$H(k_2) = -m_1 k^2 \tau_z \quad (4.108)$$

Los valores propios de energía son

$$E(k_1) = \pm m_0 \quad (4.109)$$

$$E(k_2) = \mp m_1 \quad (4.110)$$

Las energías de los estados ocupados son dados para  $E < 0$ . El operador de paridad en esta base es  $P = \tau_z$ , así que si  $m_0 > 0$ , es estado de valencia es  $(0, 1)$  y su paridad  $\xi_1 = -1$ , si  $m_1 > 0$ , el estado de valencia es  $(1, 0)$ ,  $\xi_2 = +1$ . Con esto

$$(-1)^{\nu_{3d}} = \prod_i \xi_i = -1 \quad (4.111)$$

en general podemos escribir

$$(-1)^{\nu_{3d}} = \prod_i \xi_i = -\text{sgn}(m_0 m_1) \quad (4.112)$$

#### 4.4. Modelo 1D

Consideremos una red lineal con dos átomos por celda primitiva, que denotamos con  $A$  y  $B$ . Vamos a suponer que la interacción es sólo a primeros vecinos, cuyo hamiltoniano es

$$H = \sum_i (t + \delta t) c_{A,i}^\dagger c_{B,i} + (t - \delta t) c_{A,i+1}^\dagger c_{B,i} + h.c. \quad (4.113)$$

$$c_{A,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} a_k \quad (4.114)$$

$$c_{B,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} b_k \quad (4.115)$$

Con esta transformación obtenemos

$$H = \frac{1}{N} \sum_{i,k,k'} \{ (t + \delta t) \left( e^{i(k'-k)R_i} b_{k'}^\dagger a_k + e^{-i(k'-k)R_i} a_k^\dagger b_{k'} \right) \quad (4.116)$$

$$+ (t - \delta t) \left( e^{i(k'-k)R_i} e^{ika} a_{k'}^\dagger b_k + e^{-i(k'-k)R_i} e^{-ika} b_k^\dagger a_{k'} \right) \}. \quad (4.117)$$

$$H = \sum_k \{ (t + \delta t) (b_k^\dagger a_k + a_k^\dagger b_k) + (t - \delta t) (e^{ika} a_k^\dagger b_k + e^{-ika} b_k^\dagger a_k) \} \quad (4.118)$$

$$= \sum_k (a_k^\dagger, b_k^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & (t + \delta t) + (t - \delta t) e^{ika} \\ (t + \delta t) + (t - \delta t) e^{-ika} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} \quad (4.119)$$

Definiendo

$$\psi_k = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} \quad (4.120)$$

$$H_k = \begin{pmatrix} 0 & (t + \delta) + (t - \delta) e^{ika} \\ (t + \delta) + (t - \delta) e^{-ika} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.121)$$

$$H = \sum_k \psi_k^\dagger H_k \psi_k \quad (4.122)$$

$$E^2 = 2 (\cos ak) (t^2 - \delta^2) + 2 (\delta^2 + t^2) \quad (4.123)$$

$$\begin{aligned} H_k &= \begin{pmatrix} 0 & (t + \delta) + (t - \delta) (\cos ka + i \sin ka) \\ (t + \delta) + (t - \delta) (\cos ka - i \sin ka) & 0 \end{pmatrix} \\ &= ((t + \delta) + (t - \delta) \cos ka) \sigma_x - \sigma_y (t - \delta) \sin ka \end{aligned}$$

El cual podemos escribir como

$$\begin{aligned} H &= d_x \sigma_x + d_y \sigma_y + d_z \sigma_z \\ d_x &= (t + \delta) + (t - \delta) \cos ka \\ d_y &= -(t - \delta) \sin ka \\ d_z &= 0 \end{aligned} \quad (4.124)$$

Podemos llamar

$$v = t + \delta, w = t - \delta, \frac{v - w}{2} = \delta \quad (4.125)$$

así

$$\begin{aligned} d_x &= v + w \cos ka \\ d_y &= -w \sin ka \end{aligned}$$

$$E = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos ka} \quad (4.126)$$

El gap de la bandas es

$$\Delta = 2|v - w| = 4|\delta| \quad (4.127)$$

Cuando dibujamos el vector  $d$  al variar el vector de onda, lo podemos visualizar centrado en  $d_x = v$  y con radio  $w$ , al hacer una variación de  $k$  de 0 a  $2\pi$  completamos un giro completo. Usando nuestro resultado del modelo de dos niveles con  $\theta = \frac{\pi}{2}$

$$\begin{aligned}
|u.(\mathbf{d})\rangle &= \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ \frac{d_x + i d_y}{\sqrt{d_x^2 + d_y^2}} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{4.128}$$

Calculemos la curvatura y la fase de Berry

$$\begin{aligned}
A(k) &= i \langle u.(k) | \partial_k | u.(k) \rangle \\
&= \frac{i}{2} (-1, e^{-i\varphi}) \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi} i \frac{d\varphi}{dk} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \frac{d\varphi}{dk}
\end{aligned} \tag{4.129}$$

$$\gamma = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\varphi}{dk} = \frac{\varphi(\pi) - \varphi(-\pi)}{2} \tag{4.130}$$

Otra forma de verlo es  $A_\varphi = i \langle u.(\varphi) | \partial_\varphi | u.(\varphi) \rangle = 1/2$ , entonces

$$\begin{aligned}
\gamma &= \int_{\varphi(-\pi)}^{\varphi(\pi)} A_\varphi d\varphi = \frac{\varphi(\pi) - \varphi(-\pi)}{2} \\
&= \pi, v - w = \delta < 0 \\
&= 0
\end{aligned}$$

#### 4.4.1. Analogía con la ecuación de Dirac

Hagamos

$$ka \rightarrow \pi$$

$$\begin{aligned}
\sin(ak) &\rightarrow -\sin ak \\
\cos(ak) &\rightarrow -\cos ak
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d_x &= (t + \delta) - (t - \delta) \cos ka \\
&= 2\delta + 2(t - \delta) \sin^2 k \frac{a}{2} \\
d_y &= (t - \delta) \sin ka
\end{aligned}$$



Vamos a hacer la rotación  $\sigma_z \rightarrow \sigma_y, \sigma_y \rightarrow \sigma_x, \sigma_x \rightarrow \sigma_z$

$$\begin{aligned} H &= \left( 2\delta + 2(t - \delta) \sin^2 k \frac{a}{2} \right) \sigma_z + (t - \delta) \sin ka \sigma_x \\ &\simeq (t - \delta) ak \sigma_x + \left( 2\delta + (t - \delta) k^2 \frac{a^2}{2} \right) \sigma_z \\ &= Ak \sigma_x + (2\delta + m_2 k^2) \sigma_z \end{aligned} \quad (4.131)$$

Si  $\delta < 0$  el término de masa tiene dos contribuciones de signo opuesto, resultando en una forma análoga a la ecuación de un asilante 3D. Cuando  $k \rightarrow 0$ , vemos que tenemos dos estados con  $\pm 2\delta$ , esto quiere decir que el gap es  $4\delta$ , por lo tanto cuando  $\delta \rightarrow 0$ , este gap cambia de signo, a lo que nos referimos a una inversión de bandas..

#### 4.4.2. Estado superficial en 1D

Vamos a ver que para  $\delta < 0$ , tenemos un estado de superficie, para ello vamos a escribir

$$H = Ak \sigma_x + (-m_1 + m_2 k^2) \sigma_z \quad (4.132)$$

$$A(-i\partial_x) \sigma_x \varphi + (-m_1 + m_2 (-\partial_{xx})) \sigma_z \varphi = E \varphi \quad (4.133)$$

Vamos a buscar soluciones de energía cero

$$A(-i\partial_x) \sigma_x \varphi = (m_1 - m_2 (-\partial_{xx})) \sigma_z \varphi \quad (4.134)$$

$$\partial_x \varphi = \frac{1}{A} (m_1 - m_2 (-\partial_{xx})) i \sigma_x \sigma_z \varphi \quad (4.135)$$

usando

$$i \sigma_x \sigma_z = \sigma_y \quad (4.136)$$

$$\partial_x \varphi = \frac{1}{A} (m_1 + m_2 \partial_{xx}) \sigma_y \varphi \quad (4.137)$$

$$\varphi(x) = \phi e^{\lambda x} \quad (4.138)$$

$$\sigma_y \phi = \eta \phi, \phi = \begin{pmatrix} 1 \\ i\eta \end{pmatrix}, \eta = \pm 1 \quad (4.139)$$

$$\lambda = \frac{\eta}{A} (m_1 + m_2 \lambda^2) \quad (4.140)$$

$$m_2 \lambda^2 - A \eta \lambda + m_1 = 0 \quad (4.141)$$

Cuyas soluciones son

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{A \eta \pm \sqrt{A^2 - 4 m_1 m_2}}{2 m_2} \\ &= \frac{A \eta}{2 m_2} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4 m_1 m_2}{A^2}} \right) \end{aligned} \quad (4.142)$$

vamos a poner la condición

$$\varphi(0) = \varphi(-\infty) = 0. \quad (4.143)$$

Entonces debemos tener que  $\lambda < 0$ , así que  $A \eta < 0$ ,  $\eta = -\text{sgn}(A)$ , con esto

$$\lambda = -\xi_{\pm}^{-1} \quad (4.144)$$

$$\xi_{\pm}^{-1} = \frac{|A|}{2 m_2} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4 m_1 m_2}{A^2}} \right) > 0 \quad (4.145)$$

$$\varphi(x) = C \left( \begin{pmatrix} 1 \\ -i \text{sgn}(A) \end{pmatrix} e^{-x/\xi_+} - \begin{pmatrix} 1 \\ -i \text{sgn}(A) \end{pmatrix} e^{-x/\xi_-} \right) \quad (4.146)$$

Si  $m_1 m_2 < 0$ , tenemos una solución con  $\lambda > 0$ , y otra con  $\lambda < 0$ , y las C.F. no se pueden cumplir. En términos de los parámetros del modelo ( $m_2 > 0$ ),

$$\begin{aligned} \xi_{\pm}^{-1} &= \frac{1}{a} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{2|\delta|}{(t-\delta)}} \right) \\ &= \frac{1}{a} \left( 1 \pm \left( 1 - \frac{|\delta|}{(t-\delta)} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.147)$$

$$\xi_+^{-1} \simeq \frac{2}{a} = cte \quad (4.148)$$

$$\xi_-^{-1} = \frac{1}{a} \frac{|\delta|}{(t-\delta)} \rightarrow 0 \quad (4.149)$$

Cuando nos acercamos a la transición topológica el estado de superficie tiene un decaimiento que va como  $\xi_- \simeq 1/\delta \rightarrow \infty$ , y se extiende por todo el volumen, lo cual conlleva a que las dos bandas tengan la solución de  $E = 0$  sin gap.

## 4.5. Estados superficiales en un aislante 3D

Retornando a un hamiltoniano 3D, éste los separamos en dos términos

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_1 \\
 H_0 &= C + D_1 k_z^2 + \begin{pmatrix} M - B_1 k_z^2 & A_1 k_z & 0 & 0 \\ A_1 k_z & -M + B_1 k_z^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M - B_1 k_z^2 & -A_1 k_z \\ 0 & 0 & -A_1 k_z & -M + B_1 k_z^2 \end{pmatrix} \\
 H_1 &= D_2 (k_x^2 + k_y^2) + \begin{pmatrix} -B_2 (k_x^2 + k_y^2) & 0 & 0 & A_2 k_- \\ 0 & B_2 (k_x^2 + k_y^2) & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & -B_2 (k_x^2 + k_y^2) & 0 \\ A_2 k_+ & 0 & 0 & B_2 (k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Tenemos que para  $k_x^2 + k_y^2 = 0$ , y despreciando el término  $D_1$  y  $C$

$$H_0 = \begin{pmatrix} M - B_1 k_z^2 & A_1 k_z & 0 & 0 \\ A_1 k_z & -M + B_1 k_z^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M - B_1 k_z^2 & -A_1 k_z \\ 0 & 0 & -A_1 k_z & -M + B_1 k_z^2 \end{pmatrix} \quad (4.150)$$

el cual podemos expresar como

$$\begin{aligned}
 H_0 &= (M - B_1 k_z^2) \tau_z \sigma_0 + A_1 \tau_x \sigma_z k_z \\
 &= (M + B_1 \partial_{zz}) \tau_z \sigma_0 - i A_1 \tau_x \sigma_z \partial_z
 \end{aligned} \quad (4.151)$$

Las soluciones superficiales deben cumplir

$$((M + B_1 \partial_{zz}) \tau_z \sigma_0 - i A_1 \tau_x \sigma_z \partial_z) \psi = (E - \mu) \psi \quad (4.152)$$

Si  $(E - \mu) = 0$

$$(M + B_1 \partial_{zz}) \tau_z \sigma_0 \psi = i A_1 \tau_x \sigma_z \partial_z \psi \quad (4.153)$$

Multiplicando por  $i \tau_x \sigma_z$  y usando

$$i \tau_x \sigma_z \tau_z \sigma_0 = i \tau_x \tau_z \sigma_z \sigma_0 = \tau_y \sigma_z$$

$$(M + B_1 \partial_{zz}) \tau_y \sigma_z \psi = -A_1 \partial_z \psi$$

tenemos dos soluciones para espín arriba y abajo

$$\psi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z \psi_{\uparrow(\downarrow)} = \pm \psi_{\uparrow(\downarrow)} = s \psi_{\uparrow(\downarrow)}$$

así que

$$(M + B_1 \partial_{zz}) \tau_y \psi_{\uparrow(\downarrow)} = -s A_1 \partial_z \psi_{\uparrow(\downarrow)} \quad (4.154)$$

haciendo el anatz

$$\psi_0 = \phi_0 e^{\lambda z}, \psi_1 = \phi_1 e^{\lambda z} \quad (4.155)$$

$$\tau_y \phi_0 = \eta_0 \phi_0, \eta_0 = \pm 1 \quad (4.156)$$

$$\tau_y \phi_1 = \eta_1 \phi_1, \eta_1 = \pm 1 \quad (4.157)$$

Así para ambas soluciones tenemos

$$(M + B_1 \partial_{zz}) e^{\lambda z} = -\eta s A_1 \partial_z e^{\lambda z}, \eta = \eta_{0(1)} \quad (4.158)$$

Con lo que obtenemos

$$B_1 \lambda^2 + \eta s A_1 \lambda + M = 0$$

cuyas soluciones son

$$\lambda_{\pm}(\eta s) = \frac{-\eta s A_1}{2B_1} \pm \sqrt{\frac{A_1^2}{4B_1^2} - \frac{M}{B_1}}$$

Si consideramos estados que decaigan en  $z \rightarrow \infty$ ,  $\eta s = \text{sgn}(A_1/B_1)$ , y los valores de  $\lambda$  son

$$\lambda_{\pm}^{(-)} = -\frac{1}{2} \left| \frac{A_1}{B_1} \right| \pm \sqrt{\frac{A_1^2}{4B_1^2} - \frac{M}{B_1}} < 0$$

Si decaen en  $z \rightarrow -\infty$ ,  $\eta s = -\text{sgn}(A_1/B_1)$ , así

$$\lambda_{\pm}^{(+)} = \frac{1}{2} \left| \frac{A_1}{B_1} \right| \pm \sqrt{\frac{A_1^2}{4B_1^2} - \frac{M}{B_1}} = -\lambda_{\mp}^{(-)} > 0 \quad (4.159)$$

Llamndo  $\lambda_{\pm}^{(-)} = -\lambda_{\pm}$ ,  $\lambda_{\pm}^{(+)} = +\lambda_{\pm}$

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left| \frac{A_1}{B_1} \right| \pm \sqrt{\frac{A_1^2}{4B_1^2} - \frac{M}{B_1}} \quad (4.160)$$

Tenemos para  $z > 0$

$$\psi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ 0 \end{pmatrix} = \left( e^{-\lambda_+ z} + e^{-\lambda_- z} \right) \begin{pmatrix} \phi_0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.161)$$

$$\psi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_1 \end{pmatrix} = \left( e^{-\lambda_+ z} + e^{-\lambda_- z} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_1 \end{pmatrix} \quad (4.162)$$

Si  $A_1/B_1 > 0$ , tenemos que  $s = +1$  para  $\psi_{\uparrow}$  y  $-1$  para  $\psi_{\downarrow}$ , así  $\eta_0 = 1$  y  $\eta_1 = -1$

$$\tau_y \phi_0 = +\phi_0, \tau_y \phi_1 = -\phi_1 \quad (4.163)$$

$$\phi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \phi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (4.164)$$

El hamiltoniano de superficie es

$$\begin{aligned} H_{surface} &= \begin{pmatrix} \langle \psi_0 | h_0 | \psi_0 \rangle & 0 \\ 0 & \langle \psi_1 | h_1 | \psi_1 \rangle \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \langle \psi_0 | A_2 k_- \tau_x | \psi_1 \rangle \\ \langle \psi_1 | A_2 k_+ \tau_x | \psi_0 \rangle & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & A_2 k_- \langle \psi_0 | \tau_x | \psi_1 \rangle \\ A_2 k_+ \langle \psi_1 | \tau_x | \psi_0 \rangle & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.165)$$

que escrito en matrices 2x2 es

$$H_{surface} = A_2 (\sigma_x k_y - k_x \sigma_y) \quad (4.166)$$