

Un problema de bosones que interaccionan. Cálculos analíticos y numéricos.

Jorge Calvo Ibar

Dirigido por:

David Zueco y Uta Naether

24 de junio de 2014

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Objetivos	2
2. Oscilador Armónico	3
2.1. Oscilador Armónico Clásico	3
2.2. Oscilador Armónico Cuántico	4
3. Modelos Tight Binding Bosónicos	7
3.1. El método de cálculo de bandas Tight Binding - Funciones de Wannier.	7
3.2. Bandas de energía con el modelo Tight Binding para el caso de cadena infinita de osciladores acoplados (1D).	8
4. Modelos Tight Binding en una topología Diente de Sierra	11
4.1. Diente de sierra, caso de frecuencias iguales.	11
4.2. Diente de sierra, caso de frecuencias distintas.	13
4.3. Cálculo de las bandas planas para dos frecuencias distintas	15
4.4. Cálculo de las bandas planas para casos más particulares	20
5. Diente de sierra con interacción no lineal	23
5.1. Single Excitation	23
5.2. Método numérico 1	27
5.3. Método numérico 2	28
5.3.1. Construyendo la base:	28
5.3.2. Construyendo la matriz:	29
5.4. Comprobación de los métodos numéricos	31
5.5. Resultados	34
5.5.1. Caso lineal	34
5.5.2. Caso no lineal	37
6. Conclusiones	41
A. Cálculo de bandas de cadena infinita de osciladores acoplados	43
B. Cálculo de las bandas en topología de tipo dientes de sierra para frecuencias iguales	45
C. Cálculo de las bandas en topología de tipo dientes de sierra para frecuencias distintas	49
D. Método Alternativo de cálculo de la condición de Banda Plana	53
E. Método numérico 1	55
E.1. Explicación del programa	55
E.2. Resumen del código	58
F. Método numérico 2	59
F.1. Explicación del programa	59
F.2. Resumen del código	63
G. Código Método 2 - Modificación para comprobar los auto estados localizados	65

H. Código Método 2 - Modificación para comprobar los auto estados localizados, frecuencias distintas	67
I. Código Método 2 - Modificación para el caso no lineal	69

Índice de figuras

3.1. Potencial periódico al que se someten las partículas y sus funciones de onda de partículas localizadas. (Imagen modificada de [4])	7
3.2. Cadena de osciladores.	8
3.3. Bandas de la cadena de osciladores acoplados. (Notar que $k \in [-\pi, \pi]$, la primera zona de Brillouin.)	9
4.1. Disposición en diente de sierra de los sitios.	11
4.2. Bandas de energía $\Omega = 2$, $J' = 1$, $J = 2$ y $\omega_a = 3$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ azul y $\epsilon_- \rightarrow$ rojo	14
4.3. Bandas de energía $J = 5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ azul y $\epsilon_- \rightarrow$ rojo	17
4.4. Bandas de energía $J = -5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ azul y $\epsilon_- \rightarrow$ rojo	18
4.5. Bandas de energía $J \in [-10, 10]$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ rojo y $\epsilon_- \rightarrow$ azul	19
4.6. Bandas de energía $J \in [-10, 10]$, $k \in [-\pi, \pi]$, $\omega = 1$ y $a = 0,1$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ rojo y $\epsilon_- \rightarrow$ azul	20
4.7. Bandas de energía $J \in [-10, 10]$, $k \in [-\pi, \pi]$, $\omega = 1$ y $a = 2$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ rojo y $\epsilon_- \rightarrow$ azul	20
5.1. Disposición en diente de sierra de los sitios.	23
5.2. Bandas de energía $J = 5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ azul y $\epsilon_- \rightarrow$ rojo	25
5.3. Bandas de energía obtenidas numéricamente $J = 5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con <i>Línea Verde</i> \rightarrow Nivel de energía máximo de la banda de energía superior, <i>Línea Rosa</i> \rightarrow Nivel de energía mínimo de la banda de energía superior, <i>Líneas Azul y Rojo</i> \rightarrow niveles de energía intermedios que aparecen debido a condiciones de frontera libres y <i>Línea Negra</i> \rightarrow Nivel de energía de la banda plana.	26
5.4. Gap de energía $J = 5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$	26
5.5. Un autoestado localizado.	34
5.6. Autovalores para el caso de 7 sitios y 2 excitaciones calculados por el Método 2 en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.	37
5.7. Autovalores para el caso de 7 sitios y 2 excitaciones calculados por el Método 2 en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.	38
5.8. Autovalores para el caso de 7 sitios y 3 excitaciones calculados por el Método 2 en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.	38
5.9. Autovalores para el caso de 9 sitios y 2 excitaciones calculados por el Método 2 en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.	39
5.10. Autovalores para el caso de 9 sitios y 3 excitaciones calculados por el Método 2 en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.	39
A.1. Cadena de osciladores.	43
B.1. Disposición en diente de sierra de los sitios.	45
C.1. Disposición en diente de sierra de los sitios.	49
E.1. Disposición en diente de sierra de los sitios.	55

Capítulo 1

Introducción

En física aprendemos a modelizar de la forma más simple posible los fenómenos naturales. Intentamos capturar lo esencial y escribirlo con letras griegas en un Hamiltoniano. Sabemos que nuestro modelo es aproximado y efectivo, pero nos damos por satisfechos si explica el experimento. Pero, por muy simples que sean, los modelos relevantes rara vez son fáciles de resolver. Más allá del oscilador armónico o un sistema de dos estados pocos problemas admiten una solución exacta.

Es por ello que la física, además de esa búsqueda de la simplicidad, sea también una búsqueda de aproximaciones. Teoría de perturbaciones, aproximaciones armónicas, líquidos de Fermi, etc ... conforman una serie de herramientas que hacen resolubles esos modelos simples, pero difíciles a la vez.

Una alternativa a las aproximaciones es la resolución numérica. Simulaciones por ordenador permiten explorar modelos más allá de regímenes perturbativos así como comprobar las aproximaciones. La combinación de simulación y aproximaciones forman la vida de la mayoría de los físicos teóricos. Como la vida no puede ser tan sencilla, las simulaciones no son la solución final. Problemas muy importantes son demasiado “grandes” para solucionarlos con ordenador. Cuando decimos “grandes” queremos decir que el número de grados de libertad necesarios son tantos que los ordenadores no pueden con ellos. Un ejemplo típico es el plegamiento de proteínas. En mecánica cuántica este problema es todavía más grave. En materia condensada, por ejemplo, estamos acostumbrados a trabajar con objetos con muchos grados de libertad (ej. un sólido). El éxito de esta física, inherentemente many body, ha sido desarrollar teorías donde los electrones son esencialmente libres. Si queremos atacar problemas donde las interacciones juegan un papel estamos perdidos. El problema crece exponencialmente con el número de grados de libertad, y ¡tenemos muchos! Para explicar esto un poco mejor, debemos pensar en que cada, por ejemplo, electrón “vive” en un espacio de Hilbert de dimensión D . Para tratar N electrones usamos el producto tensorial que sabemos crece de manera exponencial como D^N . Es por ello, que dichos problemas no se puedan simular con ordenador [1].

La visión anterior es muy negativa. En realidad la dinámica de esos electrones interactuantes no va a visitar ese enorme espacio de Hilbert. Típicamente solo visitará una parte exponencialmente pequeña del mismo. Es por eso, que no debe obsesionarnos el tamaño sino identificar ese pequeño subespacio relevante. Debemos buscar simetrías, cantidades conservadas, física esperable, etc ... Si identificamos la parte relevante somos capaces de resolver el problema [2].

En este Trabajo Fin de Grado presentamos un acercamiento numérico a un problema difícil. Se trata de bosones interactuantes que viven en una topología entre una y dos dimensiones. El problema tiene su interés en problemas de frustración. Explicamos las cantidades conservadas del problema y generamos varios códigos que permiten resolver el modelo exactamente en redes no tan pequeñas. Discutimos la teoría de bandas del modelo en el régimen lineal, donde es resoluble analíticamente. Encontramos los parámetros del modelo donde existen bandas planas. Estudiamos el papel de la interacción en estas bandas planas.

1.1. Objetivos

Los principales objetivos que abordaremos a lo largo de este trabajo son los siguientes:

1. Estudiaremos un sistema de bosones interactuantes tanto el caso lineal como el no lineal.
2. En el caso lineal obtendremos las bandas de energía y las condiciones que han de cumplirse para su existencia.
3. Estudiaremos el sistema para diferente número de tamaños del mismo así como de excitaciones.
4. La resolución del caso no lineal nos obligará a obtener un método numérico eficiente que permita obtener la dependencia del sistema con la no linealidad.
5. Todo esto permitirá obtener propiedades del sistema como la degeneración de los autoestados localizados de las bandas planas, la dependencia con el tamaño del sistema etc.

Capítulo 2

Oscilador Armónico

[3] En este trabajo centraremos principalmente nuestra atención en un modelo de bosones acoplados y sobre todo la resolución numérica del mismo. Por completitud estudiaremos a modo introductorio, el caso de un solo bosón, para así tener una visión general del problema el sistema más conocido en física, el oscilador armónico, empezaremos brevemente recordando el caso clásico para a continuación meternos directamente el caso cuántico.

2.1. Oscilador Armónico Clásico

Un oscilador armónico clásico es aquel cuerpo cuyo movimiento viene determinado por el ya conocido potencial cuadrático $V(x)$, función de la posición x del mismo¹:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (2.1)$$

Por lo tanto usando la relación entre fuerza y potencial y la segunda ley de Newton podemos obtener la ecuación diferencial que determinará el movimiento:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} = -kx \quad (2.2)$$

Resolviendo la ecuación diferencial de coeficientes constantes se obtiene la ecuación del movimiento:

$$x = x_M \cos(\omega t - \phi) \quad \text{con} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (2.3)$$

En donde x_M es la amplitud del movimiento y ω su frecuencia. Vamos a obtener su energía, sumando energía cinética y potencial y observaremos que no depende del tiempo puesto que nos encontramos en un sistema conservativo:

$$E = T + V = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \dots = \frac{1}{2}m\omega^2 x_M^2 \quad (2.4)$$

Que como se puede ver al sustituir la solución de la ecuación diferencial se obtiene una energía que se mantiene constante en el tiempo tal y como es propia de los sistemas conservativos. Si ahora fijamos un valor de la energía total E y expresamos la energía total en función del momento p y la posición x podemos escribir:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{p^2}{a^2} + \frac{x^2}{b^2} \quad \text{con:} \quad a = \sqrt{2m}, \quad b = \sqrt{\frac{2}{m\omega^2}} \quad (2.5)$$

Es decir en el espacio de p y x es una elipse de semiejes a y b de manera que cuando la posición es máxima (x_M) el momento es mínimo ($p = 0$), o lo que es lo mismo cuando la energía potencial es máxima la cinética es mínima e igualmente a la inversa.

¹Consideraremos el caso del oscilador unidimensional para hacer más simple la discusión.

2.2. Oscilador Armónico Cuántico

Veamos ahora el caso cuántico, para obtener el Hamiltoniano haremos uso del principio de correspondencia cambiando las variables clásica de la ecuación (2.5) x y p por sus correspondientes operadores X y P , con la relación de conmutación $[X, P] = i\hbar$:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (2.6)$$

Es decir el problema de la obtención de los valores de la energía para este sistema se reduce al cálculos de los autovalores y autovectores de la ecuación:

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (2.7)$$

Pero para resolver el problema más fácilmente definiremos un serie de nuevos operadores en primer lugar adimensionalizaremos los ya existentes:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \quad (2.8)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P \quad (2.9)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{\hbar\omega} H \quad (2.10)$$

Quedando la relación de conmutación $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ y el Hamiltoniano²:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (2.11)$$

Si ahora definimos dos operadores a^\dagger y a conocidos como los operadores de creación y destrucción, por que, como veremos más adelante crean y destruyen un cuanto de energía:

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \quad (2.12)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad (2.13)$$

Calculemos su conmutador teniendo en cuenta la relación de conmutación entre \hat{X} y \hat{P} tenemos:

$$[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = \frac{1}{2}((\hat{X} + i\hat{P})(\hat{X} - i\hat{P}) - (\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P})) = \dots = -i(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}) = 1 \quad (2.14)$$

Dándonos cuenta que: $a^\dagger a = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1)$, podemos expresar el Hamiltoniano:

$$\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2}, \quad \text{definimos el operador } N, \text{ número, como: } N = a^\dagger a \quad (2.15)$$

De manera que si un estado es autovector del operador número también lo será del operador Hamiltoniano, es decir el operador Hamiltoniano conmuta con el operador número ($[H, N] = 0$), de manera que la ecuación a resolver siendo ν un autovalor de N es:

$$H|\phi_\nu\rangle = (\nu + 1/2)\hbar\omega|\phi_\nu\rangle \quad (2.16)$$

El operador N se denomina operador número porque si lo aplicamos sobre un autoestado del Hamiltoniano $|\phi_n\rangle$ de autovalor $\hbar\omega(n + 1/2)$ se obtiene:

$$N|\phi_n\rangle = \left(\frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)|\phi_n\rangle = \dots = n|\phi_n\rangle \quad (2.17)$$

Es decir su autovalor es el número de cuantos o excitaciones $\hbar\omega$, puede además demostrar que los autovalores n son valores reales enteros y iguales o mayores que cero $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

² Donde: $H = \hbar\omega\hat{H}$

Pueden además demostrarse las siguientes relaciones de conmutación:

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (2.18)$$

$$[N, a] = -a \quad (2.19)$$

Veamos ahora como actúan los operadores de creación y destrucción sobre los autovalores del Hamiltoniano. Hagamos actuar en primer lugar el operador número sobre el estado $a^\dagger |\phi_n\rangle$:

$$Na^\dagger |\phi_n\rangle = (a^\dagger N + a^\dagger) |\phi_n\rangle = (n+1)a^\dagger |\phi_n\rangle$$

Luego $a^\dagger |\phi_n\rangle \propto |\phi_{n+1}\rangle$. Obtenemos la constante de proporcionalidad obteniendo la norma de $a^\dagger |\phi_n\rangle$ suponiendo que los $|\phi_n\rangle$ están normalizados:

$$\|a^\dagger |\phi_n\rangle\|^2 = \langle \phi_n | aa^\dagger | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | (N+1) | \phi_n \rangle = (n+1) \langle \phi_n | \phi_n \rangle = n+1$$

Es decir que:

$$\boxed{a^\dagger |\phi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\phi_{n+1}\rangle} \quad (2.20)$$

Continuemos ahora con el operador destrucción. Para ello hagamos actuar en primer lugar el operador número sobre el estado $a |\phi_n\rangle$:

$$Na |\phi_n\rangle = (aN - a) |\phi_n\rangle = (n-1)a |\phi_n\rangle$$

Luego $a |\phi_n\rangle \propto |\phi_{n-1}\rangle$. Obtenemos la constante de proporcionalidad obteniendo la norma de $a |\phi_n\rangle$ suponiendo que los $|\phi_j\rangle$ están normalizados:

$$\|a |\phi_n\rangle\|^2 = \langle \phi_n | a^\dagger a | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | N | \phi_n \rangle = n \langle \phi_n | \phi_n \rangle = n$$

Es decir que:

$$\boxed{a |\phi_n\rangle = \sqrt{n} |\phi_{n-1}\rangle} \quad (2.21)$$

Es decir los operadores a^\dagger y a crean y destruyen respectivamente una “excitación” $\hbar\omega$.

Sabiendo ya como actúan sobre los elementos de la base de autoestados del Hamiltoniano $\{|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle, \dots\}$, N , a^\dagger y a podemos expresarlos matricialmente:

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \quad a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n+1} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Capítulo 3

Modelos Tight Binding Bosónicos

3.1. El método de cálculo de bandas Tight Binding - Funciones de Wannier.

[5] Consideremos una situación típica en la cual contamos con varias partículas, bosones, que se encuentran sometidas a la acción de un potencial periódico por ejemplo de una red de átomos. El potencial será suficientemente fuerte para que las partículas que crean el potencial puedan considerarse localizadas. En este caso que las funciones de onda tienen una cola que se extiende más allá del sitio n del átomo correspondiente de manera que la barrera entre pozos sea alta pero no infinita. En otras palabras consideraremos un acoplamiento interatómico entre los primeros vecinos es lo que se denomina la aproximación de enlace fuerte o Tight Binding. En dicha aproximación es conveniente expandir la base del Hamiltoniano en una base local que dé cuenta de las funciones de onda de cada partícula por separado, los estados de Wannier:

$$|\phi_{\vec{R}n}\rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_k e^{-i\vec{k}\vec{R}} |\phi_{\vec{k}n}\rangle \quad \leftrightarrow \quad |\phi_{\vec{k}n}\rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} |\phi_{\vec{R}n}\rangle \quad (3.1)$$

En donde \vec{R} es la coordenada que denota los centros de los átomos, el sumatorio en \vec{k} está extendido a la primera zona de Brillouin y “n” indica el índice del sitio o partícula. Estas funciones de Wannier al aparecer un acoplamiento entre los sitios de la red cada uno de los N niveles degenerados se separan y forman bandas de energía. Obtendremos dichas bandas de energía primero en el caso más sencillo en geometrías de disposición de osciladores en una sola dimensión y luego veremos un caso entre 1 y 2 dimensiones.

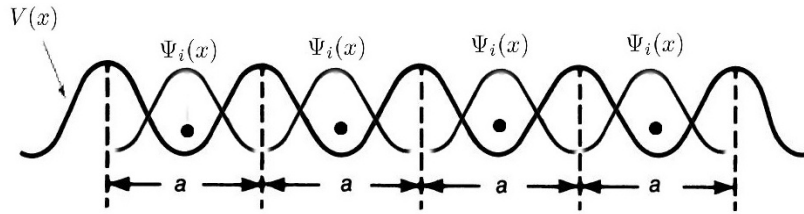


Figura 3.1: Potencial periódico al que se someten las partículas y sus funciones de onda de partículas localizadas. (Imagen modificada de [4])

3.2. Bandas de energía con el modelo Tight Binding para el caso de cadena infinita de osciladores acoplados (1D).

Consideraremos el caso de una cadena infinita de osciladores bosónicos sometidos a un potencial periódico acoplados a través de J que controla este acoplamiento entre primeros vecinos:

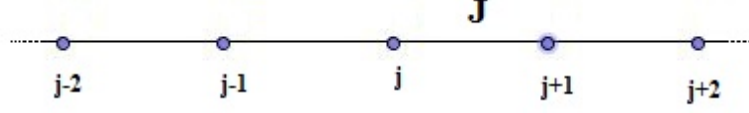


Figura 3.2: Cadena de osciladores.

Así el Hamiltoniano típico de este sistema haciendo uso de los ya mencionados operadores de creación y destrucción de excitaciones es:

$$H = \sum_{j=0}^{N-1} [\omega a_j^\dagger a_j - J(a_j a_{j+1}^\dagger + a_j^\dagger a_{j+1})] \quad (3.2)$$

En donde $N \rightarrow \infty$, el número de osciladores. Para simplificarlo deberemos hacer uso de los estados de Wannier. Para ello la ecuación (3.1) induce una transformación en los operadores al espacio Fourier, es decir el espacio de las k 's. Para que sea dimensionalmente correcto tiene que aparecer el parámetro de red a en el exponente. Para evitar tantas constantes podemos proceder como si el parámetro de red fuese $a = 1$ y con zona de Brillouin $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}] = [-\pi, \pi]$. Con j indicamos el sitio o átomo de la red:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} a_j \rightarrow a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} a_k \quad (3.3)$$

$$a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} a_j^\dagger \rightarrow a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} a_k^\dagger \quad (3.4)$$

Además de estas expresiones deberemos de hacer uso de las relaciones de conmutación:

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad [a_k, a_{k'}] = 0 \quad [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0 \quad (3.5)$$

Podemos demostrar fácilmente estas relaciones de conmutación. Empecemos con la relación que nos indica el carácter bosónico $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \text{ definiendo... } a_i = \frac{1}{2}(\hat{x}_i + i\hat{p}_i) \quad a_i^\dagger = \frac{1}{2}(\hat{x}_i - i\hat{p}_i) \quad (3.6)$$

Sustituyendo:

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= \frac{1}{2}((\hat{x}_i + i\hat{p}_i)(\hat{x}_j - i\hat{p}_j) - (\hat{x}_j - i\hat{p}_j)(\hat{x}_i + i\hat{p}_i)) = \frac{1}{2}(\hat{x}_i\hat{x}_j - i\hat{x}_i\hat{p}_j + i\hat{p}_i\hat{x}_j + \hat{p}_i\hat{p}_j - \hat{x}_j\hat{x}_i - i\hat{x}_j\hat{p}_i + i\hat{p}_j\hat{x}_i - \hat{p}_j\hat{p}_i) = \\ &= -\frac{i}{2}([\hat{x}_i, \hat{p}_j] + [\hat{x}_j, \hat{p}_i]) \equiv -\frac{i}{2}(i\delta_{ij} + i\delta_{ij}) = \delta_{ij} \end{aligned}$$

Con:

$$\hat{x}_i = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_i \quad \hat{p}_i = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} p_i \rightarrow [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \rightarrow [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\delta_{ij}$$

Continuemos con la siguiente relación de conmutación (recuerdo, $N \rightarrow \infty$):

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} [a_k, a_{k'}^\dagger] &= a_k a_{k'}^\dagger - a_{k'}^\dagger a_k = \frac{1}{N} \sum_{jj'}^{N-1} \left[a_j a_{j'}^\dagger e^{i(kj-k'j')} - a_{j'}^\dagger a_j e^{i(kj-k'j')} \right] = \frac{1}{N} \sum_{jj'}^{N-1} e^{i(kj-k'j')} [a_j a_{j'}^\dagger - a_{j'}^\dagger a_j] = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{jj'}^{N-1} e^{i(kj-k'j')} \delta_{jj'} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(k-k')j} = \frac{1}{N} N \delta(k-k') \equiv \delta_{kk'} \end{aligned}$$

Demostremos por último las dos que nos quedan. Empecemos por $[a_k, a_{k'}]$:

$$\begin{aligned} [a_k, a_{k'}] &= a_k a_{k'} - a_{k'} a_k = \frac{1}{2} [(\hat{x}_k + i\hat{p}_k)(\hat{x}_{k'} + i\hat{p}_{k'}) - (\hat{x}_{k'} + i\hat{p}_{k'})(\hat{x}_k + i\hat{p}_k)] = \\ &= \frac{1}{2} i([\hat{x}_k, \hat{p}_{k'}] + [\hat{p}_k, \hat{x}_{k'}]) = 0 \end{aligned}$$

Haciendo uso de $[\hat{x}_k, \hat{p}_{k'}] = 0$ si $k \neq k'$ y si $k = k'$ entonces $[\hat{x}_k, \hat{p}_k] + [\hat{p}_k, \hat{x}_k] = [\hat{x}_k, \hat{p}_k] - [\hat{x}_k, \hat{p}_k] = 0$, quedan así demostradas todas las relaciones de conmutación. Por tanto si sustituimos las ecuaciones (3.3) y (3.4) en el Hamiltoniano (3.2) y tenemos en cuenta las relaciones de conmutación ya demostradas (3.5), tenemos finalmente simplificado y diagonalizado el Hamiltoniano:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \omega_k a_k^\dagger a_k \quad (3.8)$$

En donde a la banda de energía la hemos llamado: $\omega_k = \omega - 2J \cos(k)$, los cálculos para la obtención de este resultado pueden consultarse en el **Apéndice A**. Así las bandas de energía para por ejemplo una frecuencia $\omega = 2$ y un acoplamiento $J = 1/2$ tenemos:

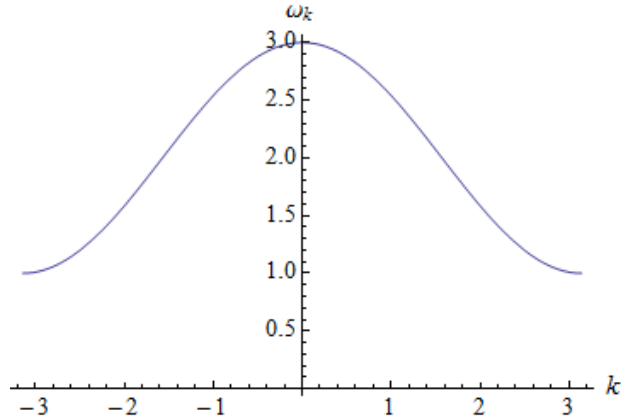


Figura 3.3: Bandas de la cadena de osciladores acoplados. (Notar que $k \in [-\pi, \pi]$, la primera zona de Brillouin.)

Capítulo 4

Modelos Tight Binding en una topología Diente de Sierra

En este capítulo nos centraremos en la obtención teórica de las bandas de energía en un modelo tipo Tight Binding con una distribución de osciladores en forma de diente de sierra. Obtendremos las bandas de manera teórica de un modelo de osciladores acoplados linealmente, para luego desarrollar un método numérico que permita también obtenerlo. Este desarrollo nos permitirá luego poder incluir interacciones no lineales que no son accesibles para una resolución analítica. Los cálculos teóricos del modelo lineal nos permitirán compararlo con el numérico y comprobar el funcionamiento correcto del método numérico planteado. Hemos escogido una disposición en diente de sierra porque es un arreglo a caballo entre una disposición en una dimensión, como hemos visto en la sección anterior, y una red geométrica en dos dimensiones; además de contener propiedades interesantes como bandas planas. En la literatura también es conocido por mostrar el fenómeno de la frustración del espín.

4.1. Diente de sierra, caso de frecuencias iguales.

Consideremos tal y como hemos dicho que tenemos nuestros osciladores en una disposición de diente de sierra. En este caso llamaremos a los operadores creación/destrucción de la fila superior como a_j^\dagger y a_j y a los de la fila de abajo como b_j^\dagger y b_j . Consideraremos además que la frecuencia de oscilación de los osciladores de la fila superior y la inferior es la misma, ω ya trataremos el caso de frecuencias distintas en la siguiente sección. En cuanto al acoplamiento, será de carácter lineal igual que el usado en la sección anterior con dos constantes de acoplamiento: J' que regula el acoplamiento entre los osciladores de la fila superior con la inferior y J que regula el acoplamiento entre los osciladores de la fila inferior, como se muestra en la siguiente figura:

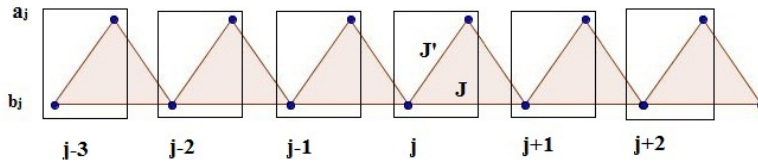


Figura 4.1: Disposición en diente de sierra de los sitios.

Con todo lo dicho hasta ahora el Hamiltoniano a trata, del cual obtendremos las bandas de energía:

$$H = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\omega (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) \right] + J \sum_{j=0}^{N-1} \left[b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right] + J' \sum_{j=0}^{N-1} \left[a_j^\dagger b_j + a_j^\dagger b_{j+1} + b_j^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger a_j \right] \quad (4.1)$$

Notar que el carácter lineal de los acoplamientos permite que se siga conservando que el operador Hamiltoniano conmute con el operador número $N_j = a_j^\dagger a_j$ (igual para las b 's) cumpliéndose las relaciones de conmutación (3.5) así como las combinaciones de operadores a 's y b 's ($[a_j, b_{j'}] = [a_j^\dagger, b_{j'}] = [a_j, b_{j'}^\dagger] = 0$, así como en el espacio Fourier, con demostraciones análogas a la sección anterior).

Así al tratarse de un modelos con acoplamientos a primeros vecinos tipo Tight Binding o de enlace fuerte podemos simplificar nuestro Hamiltoniano si pasamos los operadores, tal y como hemos hecho en el anterior capítulo, al espacio Fourier como sigue¹:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} a_j \longrightarrow a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} a_k \quad b_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} b_j \longrightarrow b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} b_k \quad (4.2)$$

$$a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} a_j^\dagger \longrightarrow a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} a_k^\dagger \quad b_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} b_j^\dagger \longrightarrow b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} b_k^\dagger \quad (4.3)$$

Sustituyendo estas últimas expresiones en la ecuación (4.1) y haciendo uso de las relaciones de conmutación ya demostradas $[a_i, a_j^\dagger] = [b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}$ $[a_i, b_j^\dagger] = 0$, obtenemos la expresión:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\omega a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k (\omega + 2J \cos k) + J' (a_k^\dagger b_k (1 + e^{-ik}) + b_k^\dagger a_k (1 + e^{ik})) \right]$$

Para diagonalizar la matriz podemos observar que si definimos los vectores:

$$\vec{c}_k = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} \quad \vec{c}_k^\dagger = \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix}$$

Podemos expresarlo como:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & \omega + 2J \cos k \end{pmatrix} \vec{c}_k + \vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} 0 & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & 0 \end{pmatrix} \vec{c}_k \right]$$

O lo que es lo mismo:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} \omega & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & \omega + 2J \cos k \end{pmatrix} \vec{c}_k \quad (4.4)$$

Es decir es una matriz diagonal por cajas, si diagonalizamos cada caja:

$$\begin{vmatrix} \omega - \epsilon & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & (\omega + 2J \cos k) - \epsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$(\omega - \epsilon)(\omega + 2J \cos k - \epsilon) - 2J'^2(1 + \cos k) = 0$$

$$\epsilon^2 - \epsilon(2\omega + 2J \cos k) + 2 \cos k(J\omega - J'^2) + (\omega^2 - 2J'^2) = 0$$

Resolviendo la ecuación de segundo grado obtenemos finalmente las bandas de energía buscadas:

$$\epsilon = J \cos k + \omega \pm \sqrt{J^2 \cos^2 k + 2J'^2(\cos k + 1)} \quad (4.5)$$

Analizaremos la existencia de bandas planas en las siguientes secciones (4.3 y 4.4) en las que consideraremos un caso más general en que las frecuencias de oscilación son distintas para los osciladores de la fila de arriba en relación con los de abajo en la topología de diente de sierra. Las bandas planas son aquellas en las que como su nombre indica son niveles de energía “planos” en los que por tanto se caracterizan por una velocidad de grupo nula ($\frac{d\epsilon}{dk} = 0$). Además en el caso de la cadena de infinitos osciladores estas bandas se caracterizan por estar infinitamente degeneradas. Para ver los cálculos realizados en esta sección en más detalle consúltese el **Apéndice B** al final del escrito.

¹Haciendo iguales consideraciones que capítulo anterior en lo que respecta al parámetro de red con una primera zona de Brillouin $k \in [-\pi, \pi]$ (véase la página 8).

4.2. Diente de sierra, caso de frecuencias distintas.

Por generalizar el modelo consideraremos ahora que las frecuencias de los osciladores de la fila de arriba² tienen una frecuencia ω_a y los osciladores de la fila de abajo tienen una frecuencia ω_b . Con estos retoques el Hamiltoniano queda:

$$H = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\omega_a a_j^\dagger a_j + \omega_b b_j^\dagger b_j \right] + J \sum_{j=0}^{N-1} \left[b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right] + J' \sum_{j=0}^{N-1} \left[a_j^\dagger b_j + a_j^\dagger b_{j+1} + b_j^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger a_j \right] \quad (4.6)$$

Igual que en el caso anterior buscaremos obtener las bandas de energía y como se trata de un modelo Tight Binding aplicaremos un método análogo a la sección anterior. Para ello empezaremos pasando los operadores de creación y destrucción al espacio Fourier:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} a_j \longrightarrow a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} a_k \quad b_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} b_j \longrightarrow b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} b_k \quad (4.7)$$

$$a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} a_j^\dagger \longrightarrow a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} a_k^\dagger \quad b_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} b_j^\dagger \longrightarrow b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} b_k^\dagger \quad (4.8)$$

Sustituyendo estas últimas expresiones en la ecuación (4.1) y haciendo uso de las relaciones de conmutación, obtenemos la expresión:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\omega_a a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k (\omega_b + 2J \cos k) + J' (a_k^\dagger b_k (1 + e^{-ik}) + b_k^\dagger a_k (1 + e^{ik})) \right]$$

Para diagonalizar la matriz podemos observar que si definimos los vectores:

$$\vec{c}_k = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} \quad \vec{c}_k^\dagger = \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix}$$

Podemos expresarlo como:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} \omega_a & 0 \\ 0 & \omega_b + 2J \cos k \end{pmatrix} \vec{c}_k + \vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} 0 & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & 0 \end{pmatrix} \vec{c}_k \right]$$

O lo que es lo mismo:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} \omega_a & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & \omega_b + 2J \cos k \end{pmatrix} \vec{c}_k \quad (4.9)$$

Es decir es una matriz diagonal por cajas, si diagonalizamos cada caja:

$$\begin{vmatrix} \omega_a - \epsilon & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & (\omega_b + 2J \cos k) - \epsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$(\omega_a - \epsilon)(\omega_b + 2J \cos k - \epsilon) - 2J'^2(1 + \cos k) = 0$$

$$\epsilon^2 - \epsilon((\omega_a + \omega_b) + 2J \cos k) + 2 \cos k(J\omega_a - J'^2) + (\omega_a \omega_b - 2J'^2) = 0$$

Resolviendo la ecuación de segundo grado:

$$\epsilon = J \cos k + \frac{\omega_a + \omega_b}{2} \pm \sqrt{\left(J \cos k + \frac{\omega_a + \omega_b}{2} \right)^2 - 2 \cos k(J\omega_a - J'^2) - (\omega_a \omega_b - 2J'^2)} \quad (4.10)$$

²Véase figura 4.1, página 11.

Podemos obtener una ecuación más sencilla si lo podemos en función de la frecuencia media Ω :

$$\Omega = \frac{\omega_a + \omega_b}{2} \quad \rightarrow \quad \omega_b = 2\Omega - \omega_a$$

Obtenemos así finalmente una versión simplificada de las bandas de energía:

$$\boxed{\epsilon = J \cos k + \Omega \pm \sqrt{(J \cos k + (\Omega - \omega_a))^2 + 2J'^2(1 + \cos k)}} \quad (4.11)$$

Para ver los cálculos realizados en más detalle consúltase el **Apéndice C** al final del escrito. Podemos a modo de prueba representar las bandas para $\Omega = 2$, $J' = 1$, $J = 2$ y $\omega_a = 3$ y ver así su aspecto:

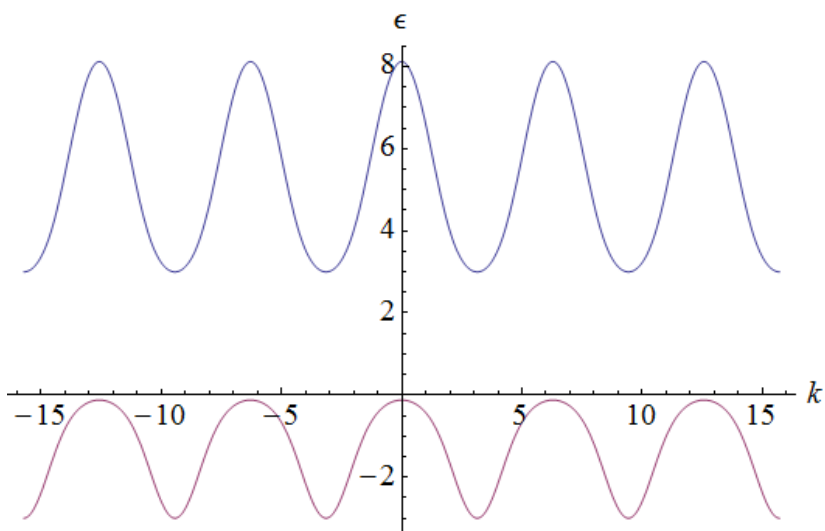


Figura 4.2: Bandas de energía $\Omega = 2$, $J' = 1$, $J = 2$ y $\omega_a = 3$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ azul y $\epsilon_- \rightarrow$ rojo

4.3. Cálculo de las bandas planas para dos frecuencias distintas

Como necesitamos comprobar que el cálculo numérico que desarrollaremos en el capítulo siguiente obtendremos las condiciones que hay que imponer a la ecuación anterior (4.11) para que aparezcan bandas planas y así precisar de una manera más de comprobar que nuestro cálculo numérico es correcto. Además desarrollaremos por casos las distintas condiciones que tienen que cumplirse para que aparezcan bandas planas y ver la dependencia de la energía con los distintos parámetros del sistema. Por tanto partiendo de la última expresión:

$$\epsilon_{\pm} = J \cos k + \Delta\Omega + \omega_a \pm \sqrt{(J \cos k + \Delta\Omega)^2 + 2J'^2(1 + \cos k)} \quad (4.12)$$

En donde hemos expresado la ecuación anterior (4.11) en función de $\Delta\Omega = \Omega - \omega_a$, para buscar las bandas planas imponemos que la velocidad de grupo es nula es decir:

$$\frac{d\epsilon_{\pm}}{dk} = -J \sin k \mp \frac{J'^2 \sin k + J \sin k (J \cos k + \Delta\Omega)}{\sqrt{(J \cos k + \Delta\Omega)^2 + 2J'^2(1 + \cos k)}} = 0 \quad (4.13)$$

Procedemos a despejar J' en función de J :

$$J^2[(J \cos k + \Delta\Omega)^2 + 2J'^2(1 + \cos k)] = J^2(J \cos k + \Delta\Omega)^2 + J'^4 + 2JJ'^2(J \cos k + \Delta\Omega)$$

$$2J'^2 J^2(1 + \cos k) = J'^4 + 2J^2 J'^2(1 + \cos k) - 2J^2 J'^2 + 2JJ'^2 \Delta\Omega$$

$$J'^4 - 2J'^2 J^2 + 2J'^2 J \Delta\Omega = 0$$

Obteniendo finalmente para casos $J' \neq 0$, la relación:

$$\boxed{J' = \pm \sqrt{2J(J - \Delta\Omega)}} \quad (4.14)$$

Notemos una cosa:

$$J'^4 - 2J'^2 J^2 + 2J'^2 J \Delta\Omega = 0$$

$$J'^2(J'^2 - 2J^2 + 2J \Delta\Omega) = 0$$

$$\left(\frac{J'}{J}\right)^2 = 2\left(1 - \frac{\Delta\Omega}{J}\right)$$

$$\boxed{J' = J \sqrt{2\left(1 - \frac{\Delta\Omega}{J}\right)}} \quad (4.15)$$

Luego si $J > 0$ entonces $J' > 0$ y viceversa, luego esta es en realidad la ecuación correcta. De hecho si se considera que el signo de J' es arbitrario y no depende de J entonces cuando se procede a usar la fórmula 6 del artículo [6] uno encuentra problemas al calcular así los estados localizados. Podemos obtener el mismo resultado (Ecuación (4.14) y (4.15)) con otros métodos alternativos de cálculo para ello véase el **Apéndice D**.

Notemos que si las dos frecuencias son iguales ($\Delta\Omega = 0$) entonces: $J' = \sqrt{2}J$ es la condición para que aparezca una banda plana. Se tiene que cumplir $2J(J - \Delta\Omega) \geq 0$ si y solo si:

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{Si: } J \geq 0 & \longrightarrow J \geq \Delta\Omega \\ \text{Si: } J \leq 0 & \longrightarrow J \leq \Delta\Omega \end{array}}$$

Sustituyendo (4.15) en (4.14) tenemos:

$$\epsilon_{\pm} = J \cos k + \Omega \pm |J \cos k + 2J - \Delta\Omega| \quad (4.16)$$

Veamos los distintos casos:

Caso 1: Si $J \cos k + 2J - \Delta\Omega > 0$, obtenemos como soluciones:

$$a) \quad \epsilon_+ = 2J \cos k + 2J + \omega_a$$

$$b) \quad \epsilon_- = -2J + \omega_b$$

Si llamamos $\xi \equiv 2J - \Delta\Omega$. Entonces: $J \cos k + \xi > 0$, imponiendo para que se cumpla $\forall k$ tenemos:

Caso de $J > 0$: Si $\xi > J \longrightarrow 2J - \Delta\Omega > J \longrightarrow J > \Delta\Omega$

Caso de $J < 0$: Si $\xi > -J \longrightarrow 2J - \Delta\Omega > -J \longrightarrow J > \frac{\Delta\Omega}{3}$

Caso 2: Si $J \cos k + 2J - \Delta\Omega < 0$, obtenemos como soluciones:

$$a) \quad \epsilon_+ = -2J + \omega_b$$

$$b) \quad \epsilon_- = 2J \cos k + 2J + \omega_a$$

Si llamamos $\xi \equiv 2J - \Delta\Omega$. Entonces: $J \cos k + \xi < 0$, imponiendo para que se cumpla $\forall k$ tenemos:

Caso de $J > 0$: Si $\xi < J \longrightarrow 2J - \Delta\Omega < J \longrightarrow J < \Delta\Omega$

Caso de $J < 0$: Si $\xi < -J \longrightarrow 2J - \Delta\Omega < -J \longrightarrow J < \frac{\Delta\Omega}{3}$

Recordando que se tenía que cumplir que: $2J(J - \Delta\Omega) \geq 0$, tenemos:

Caso A: Se tiene que cumplir una de estas condiciones siguientes:

- $J \in [0, +\infty)$ si $\Delta\Omega < 0$
- $J \in [\Delta\Omega, +\infty)$ si $\Delta\Omega > 0$

Tenemos dos casos posibles según lo dicho anteriormente:

Caso 1 de $J > 0$:

$$\text{Entonces } J > \Delta\Omega \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} \epsilon_+ = 2J \cos k + 2J + \omega_a \\ \epsilon_- = -2J + \omega_b \end{cases}$$

Por ejemplo si tomamos $J = 5$, $\omega_a = 6$ y un valor de $\Delta\Omega$ que nos garantice que $\omega_b > 0$ y que se cumple que $J < \Delta\Omega$ por ejemplo $\Delta\Omega = -2$ con estos datos tenemos:

$$\begin{cases} \epsilon_+ = 10 \cos k + 16 \\ \epsilon_- = -8 \end{cases}$$

Si lo representamos en la primera zona de Brillouin pero usando directamente la ecuación (4.11) directamente con los datos y condiciones impuestos obtenemos:

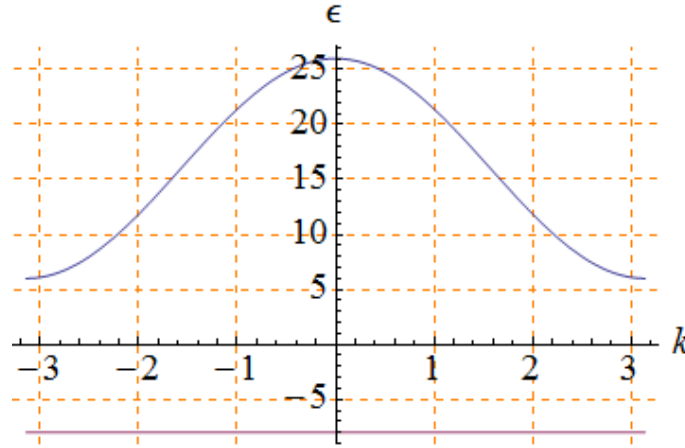


Figura 4.3: Bandas de energía $J = 5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ azul y $\epsilon_- \rightarrow$ rojo

Caso 2 de $J > 0$: Entonces $J < \Delta\Omega \quad \longrightarrow \quad$ Caso imposible

Caso B: Se tiene que cumplir una de estas condiciones siguientes:

- $J \in (-\infty, \Delta\Omega]$ si $\Delta\Omega < 0$
- $J \in (-\infty, 0]$ si $\Delta\Omega > 0$

Tenemos dos casos posibles según lo dicho anteriormente:

Caso 1 de $J < 0$: Entonces $J > \Delta\Omega/3 \rightarrow$ Caso imposible

Caso 2 de $J < 0$: Entonces $J < \Delta\Omega/3 \rightarrow \begin{cases} \epsilon_+ = -2J + \omega_b \\ \epsilon_- = 2J \cos k + 2J + \omega_a \end{cases}$

Por ejemplo si tomamos $J = -5$, $\omega_a = 6$ y un valor de $\Delta\Omega$ que nos garantice que $\omega_b > 0$ y que se cumple que $J < \Delta\Omega/3$ por ejemplo $\Delta\Omega = -2$ con estos datos tenemos:

$$\begin{cases} \epsilon_+ = 12 \\ \epsilon_- = -10 \cos k - 4 \end{cases}$$

Si lo representamos en la primera zona de Brillouin pero usando directamente la ecuación (4.11) directamente con los datos y condiciones impuestos obtenemos:

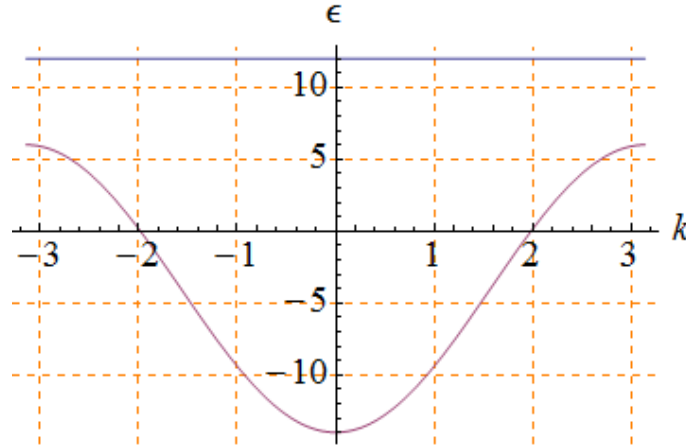


Figura 4.4: Bandas de energía $J = -5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ azul y $\epsilon_- \rightarrow$ rojo

Debemos darnos cuenta que si no se cumplen las condiciones para J de los casos **Caso A** y **Caso B** entonces no existirá un J' ya que $2J(J - \Delta\Omega) < 0$ y no existirá la raíz, por lo tanto la introducción de dos frecuencias distintas implica que han de cumplirse unas condiciones que restrinjan J para que puedan aparecer ondas planas. Podemos hacer una representación conjunta del **Caso A** y el **Caso B** en tres dimensiones representando las ecuaciones (4.12) imponiendo la condición (4.15) para valores fijos de $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ en función de $k \in [-\pi, \pi]$ y $J \in [-10, 10]$, así podemos ver la evolución de las bandas. Sin embargo hay un intervalo de la gráfica que no es válido cuando $J \in [-2, 0]$ ya que en ese intervalo $2J(J - \Delta\Omega) < 0$ y J' sería complejo y no existiría esa solución. Por tanto sabiendo esto la representación sería:

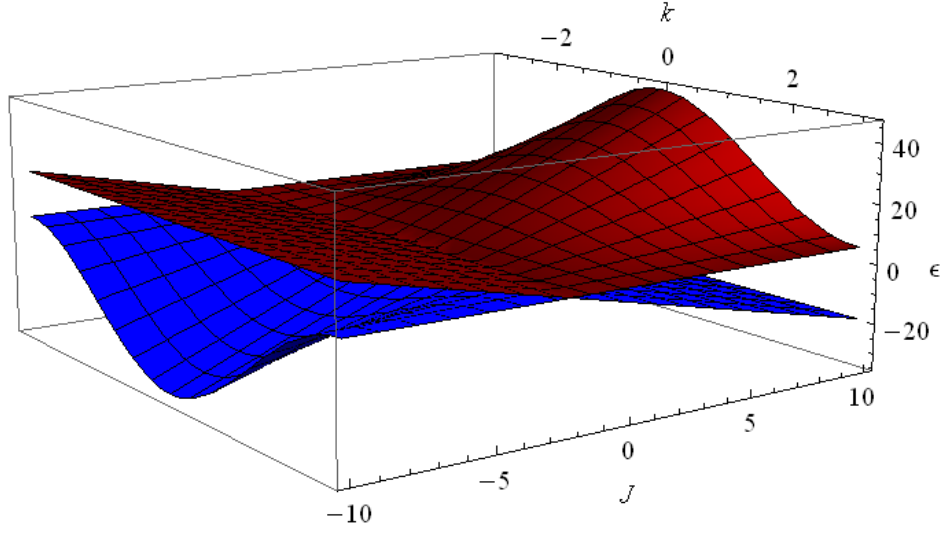


Figura 4.5: Bandas de energía $J \in [-10, 10]$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ rojo y $\epsilon_- \rightarrow$ azul

4.4. Cálculo de las bandas planas para casos más particulares

Podemos ahora explorar algunos casos más sencillos. Empecemos por el ya mencionado caso de $\Delta\Omega = 0$, entonces $\omega_a = \omega_b \equiv \omega$ y la ecuación (4.12) queda:

$$\epsilon_{\pm} = J \cos k + \omega \pm \sqrt{(J \cos k)^2 + 2J'^2(1 + \cos k)}$$

En donde como ya hemos mencionado antes la condición de que existan bandas planas es $J' = \sqrt{2}J$ si hacemos $\Delta\Omega = 0$ en la ecuación (4.15). Sustituyendo la condición de banda plana en la ecuación anterior se obtiene:

$$\begin{cases} \epsilon_+ = 2J(\cos k + 1) + \omega \\ \epsilon_- = \omega - 2J \end{cases}$$

Si parametrizamos J' como $J' = \sqrt{a}J$ con a una constante de manera que si $a = 2$ existirá una banda plana. Podemos representar en 3D para el caso por ejemplo de $\omega = 1$ y para dos casos de a , el primero para $a = 0,5$ y el segundo para ver la banda plana en $a = 2$. Los intervalos de representación serán $k \in [-\pi, \pi]$ (primera zona de Brillouin) y $J \in [-10, 10]$ obteniendo:

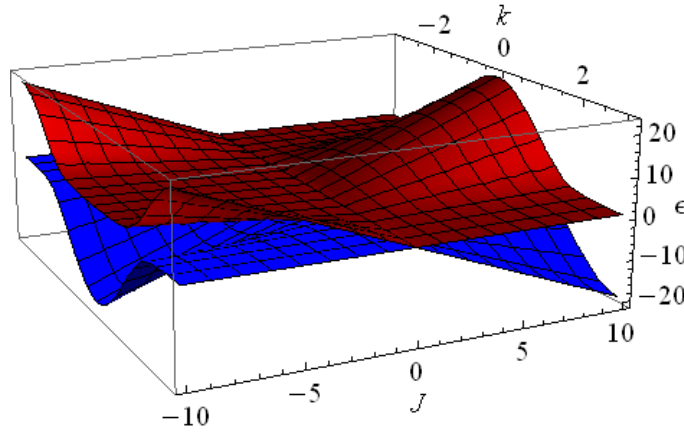


Figura 4.6: Bandas de energía $J \in [-10, 10]$, $k \in [-\pi, \pi]$, $\omega = 1$ y $a = 0,1$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ rojo y $\epsilon_- \rightarrow$ azul

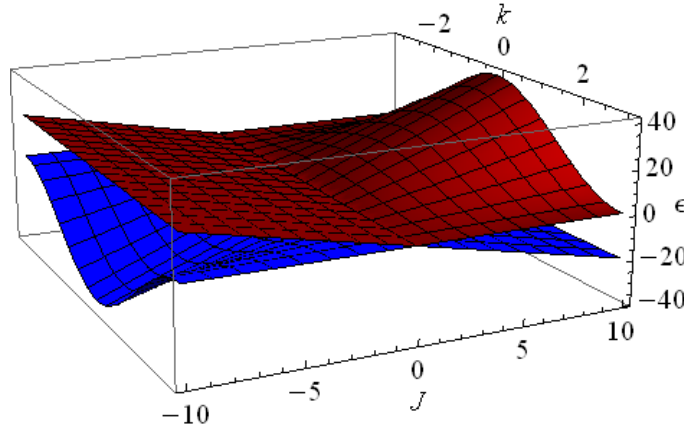


Figura 4.7: Bandas de energía $J \in [-10, 10]$, $k \in [-\pi, \pi]$, $\omega = 1$ y $a = 2$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ rojo y $\epsilon_- \rightarrow$ azul

Otros casos son por ejemplo si $J' = 0$ es el caso de 1 dimensión con algunas sitios más que no están conectados a nada. Entonces la expresión inicial para las bandas de energía queda (llamando $\Delta\Omega \equiv \Omega - \omega_a$):

$$\epsilon_{\pm} = J \cos k + \Omega \pm \sqrt{(J \cos k + \Delta\Omega)^2} = J \cos k + \Omega \pm |J \cos k + \Delta\Omega|$$

Tenemos varios casos:

1. Si $J > 0$:

$$\begin{aligned} a) \text{ Si } |J \cos k + \Delta\Omega| > 0 \quad \forall k \text{ ó } \Delta\Omega > J: & \begin{cases} \epsilon_+ = 2J \cos k + \omega_b \\ \epsilon_- = \omega_a \end{cases} \\ b) \text{ Si } |J \cos k + \Delta\Omega| < 0 \quad \forall k \text{ ó } \Delta\Omega < J: & \begin{cases} \epsilon_+ = \omega_a \\ \epsilon_- = 2J \cos k + \omega_b \end{cases} \end{aligned}$$

2. Si $J < 0$:

$$\begin{aligned} a) \text{ Si } |J \cos k + \Delta\Omega| > 0 \quad \forall k \text{ ó } \Delta\Omega < J: & \begin{cases} \epsilon_+ = 2J \cos k + \omega_b \\ \epsilon_- = \omega_a \end{cases} \\ b) \text{ Si } |J \cos k + \Delta\Omega| < 0 \quad \forall k \text{ ó } \Delta\Omega > J: & \begin{cases} \epsilon_+ = \omega_a \\ \epsilon_- = 2J \cos k + \omega_b \end{cases} \end{aligned}$$

Veamos ahora el caso de $J = 0$ y $J \neq 0$, entonces la expresión general para las bandas queda:

$$\epsilon_{\pm} = \Omega \pm \sqrt{(\Omega - \omega_a)^2 + 2J'^2(1 + \cos k)}$$

Imponiendo que la velocidad de grupo es nula:

$$\frac{d\epsilon_{\pm}}{dk} = - \frac{J' \sin k}{\sqrt{\Delta\Omega^2 + 2J'^2(1 + \cos k)}}$$

En donde hemos supuesto que:

$$\frac{d\Omega}{dk} = \frac{dJ'^2}{dk} = \frac{d\Delta\Omega}{dk} = 0$$

Suponiendo esto a la vista de la expresión de la velocidad de grupo esta nunca se hará cero $\forall k$ si no se incumplen las condiciones anteriores, es decir en principio no tiene bandas plana para valores constantes de Ω , J' y $\Delta\Omega$.

Por último veamos el caso más sencillo si $J = J' = 0$ entonces (llamando $\Delta\Omega \equiv \Omega - \omega_a$):

$$\epsilon_{\pm} = \Omega \pm |\Delta\Omega|$$

- Si $\Delta\Omega > 0$: $\epsilon_{\pm} = \omega_{b,a}$
- Si $\Delta\Omega < 0$: $\epsilon_{\pm} = \omega_{a,b}$

Es decir en este caso no hay bandas, porque no existe transmisión. En el límite en el que J y J' se aproximan a cero las bandas tienden a hacerse cada vez más planas.

Capítulo 5

Diente de sierra con interacción no lineal

Uno de nuestros principales objetivos es obtener un método numérico que permita obtener los autovalores y autovectores para el caso en el que acoplamiento de nuestra topología en diente de sierra no sea lineal. El Hamiltoniano no lineal que analizaremos en este capítulo es:

$$H = \sum_{j=1}^N \left[\omega_a c_{2j}^\dagger c_{2j} + \omega_b c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J \sum_{j=1}^N \left[c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1} \right] \\ + J' \sum_{j=1}^N \left[c_{2j}^\dagger c_{2j-1} + c_{2j}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j-1}^\dagger c_{2j} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j} \right] + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^N a_j^\dagger a_j^\dagger a_j a_j$$

Con U la constante de acoplamiento del término no lineal. Si aplicamos un operador $a_j^\dagger a_j^\dagger a_j a_j$ sobre un estado cualquiera $|\dots, n_j, \dots\rangle$ obtenemos $n_j(n_j - 1) |\dots, n_j, \dots\rangle$. Es decir en el caso de que nos encontremos en el caso de una excitación $n_j = 1$ y $n_{j'} = 0$ con $j \neq j'$ es cero. En otras palabras, el término no lineal no afecta cuando solo hay una excitación.

En este capítulo primero analizaremos el caso de una excitación para luego desarrollar los métodos numéricos que nos permitirán abordar el Hamiltoniano no lineal. Explicaremos el método numérico usando el Hamiltoniano lineal y cuando lo usemos para abordar el caso no lineal indicaremos las modificaciones pertinentes. A continuación compararemos los resultados analíticos del capítulo anterior para comprobar que el método numérico es correcto. Finalizaremos viendo, el comportamiento de los niveles de energía en el caso no lineal. Utilizando el método numérico que desarrollaremos para resolverlo.

5.1. Single Excitation

Empecemos recordando que el Hamiltoniano a tratar para el caso de una excitación equivale al caso lineal como acabamos de mencionar:

$$H = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\omega_a a_j^\dagger a_j + \omega_b b_j^\dagger b_j \right] + J \sum_{j=0}^{N-1} \left[b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right] + J' \sum_{j=0}^{N-1} \left[a_j^\dagger b_j + a_j^\dagger b_{j+1} + b_j^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger a_j \right] \quad (5.1)$$

Que representa la siguiente topología en forma de diente de sierra que ya hemos mencionado:

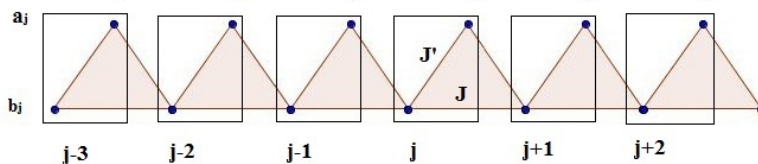


Figura 5.1: Disposición en diente de sierra de los sitios.

Empezaremos por el caso más sencillo. El caso de una única excitación en toda la red y por tanto como ya hemos dicho que el Hamiltoniano conmuta con el operador número. Al ser el caso lineal en el que los operadores de creación y destrucción van por parejas. Es decir conservan el número de excitaciones, entonces la base de autovectores de una sola excitación es por ejemplo para el caso de 5 sitios:

$$\{|1, 0, 0, 0, 0\rangle, |0, 1, 0, 0, 0\rangle, |0, 0, 1, 0, 0\rangle, |0, 0, 0, 1, 0\rangle, |0, 0, 0, 0, 1\rangle\}$$

Puede observarse que los términos que acompañan a la constante J actúan sobre los sitios de la fila inferior intercambiando una excitación con dos sitios contiguos de dicha fila, luego precisamos que el número de sitios sea impar y a partir de un mínimo de 3 sitios para que así puedan actuar correctamente los operadores (ya que no hemos definido condiciones de contorno periódicas). Así uno puede construirse “con lápiz y papel” o por los métodos numéricos que hemos desarrollado, que explicaremos en las siguientes secciones, la matriz del Hamiltoniano usando la base anterior:

$$\begin{pmatrix} \omega_b & J' & J & 0 & 0 \\ J' & \omega_a & J' & 0 & 0 \\ J & J' & \omega_b & J' & J \\ 0 & 0 & J' & \omega_a & J' \\ 0 & 0 & J & J' & \omega_b \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

Cabe notar que hay unas dos cajas, si estuviéramos en el caso de 7 sitios serían 3 cajas y así sucesivamente. Veamos si se cumplen los resultados del capítulo anterior. Para ello calcularemos los autovalores para distintos tamaños de redes 3, 5, 7... y compararemos con un caso concreto de bandas de energía para ver si coinciden los cálculos teóricos con los numéricos. Notar que en el caso teórico se ha supuesto que el número de sitios tiende a infinito. Sin embargo este puede no ser nuestro caso ya que solo podremos obtener resultados numéricos para un número finito de sitios. Por ello veremos si hay alguna dependencia de los niveles de energía para un número de sitios creciente. Luego si queremos calcular para un número alto de sitios precisaremos de un método eficiente para obtener la matriz del Hamiltoniano que crecerá conforme añadamos sitios y excitaciones. Veamos si puede haber alguna dependencia con el número de sitios en nuestro caso de una excitación. Como sabemos como tiene que ser la matriz podemos construirla fácilmente y usando un programa como *Mathematica* obtener de manera sencilla sus autovectores numéricamente para un caso concreto. A partir de ahora numeraremos los nodos empezando por 1 en el primer nodo así hasta N , así los nodos de abajo pasarán a ser nodos impares¹ $b_j \rightarrow c_{2j-1}$ y $b_j^\dagger \rightarrow c_{2j-1}^\dagger$ e igualmente para los de “arriba” que serán los nodos pares $a_j \rightarrow c_{2j}$ y $a_j^\dagger \rightarrow c_{2j}^\dagger$. Siguiendo esta notación el Hamiltoniano quedaría finalmente²:

$$H = \sum_{j=1}^N \left[\omega_a c_{2j}^\dagger c_{2j} + \omega_b c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J \sum_{j=1}^N \left[c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J' \sum_{j=1}^N \left[c_{2j}^\dagger c_{2j-1} + c_{2j}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j-1}^\dagger c_{2j} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j} \right] \quad (5.3)$$

Vayamos con el caso concreto tomemos el **Caso A** de la página 17. Tomamos $J = 5$, $\omega_a = 6$ y $\Delta\Omega = -2$. Además imponemos la condición que viene dada por la ecuación (4.15) obteniendo $J' \simeq 8,37$, con estos datos obtenemos:

$$\begin{cases} \epsilon_+ = 10 \cos k + 16 \\ \epsilon_- = -8 \end{cases} \quad (5.4)$$

¹Nota: El índice j empezará en 1 y no en cero 0

²Ahora N es el número de nodos.

Si lo representamos en la primera zona de Brillouin obtenemos:

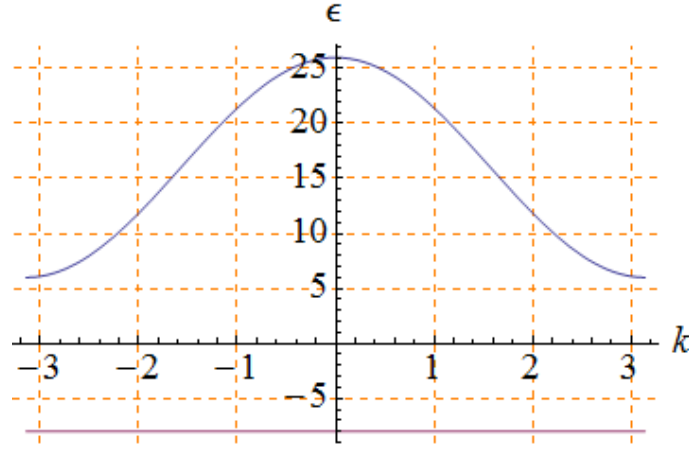


Figura 5.2: Bandas de energía $J = 5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con $\epsilon_+ \rightarrow$ azul y $\epsilon_- \rightarrow$ rojo

Ahora calculamos, numéricamente usando *Mathematica*, los autovalores de las matrices del tipo (5.2) para numero de sitios desde 5 hasta 21 obtenemos como resultado:

Cuadro 5.1: Autovalores con $J = 5$, $\omega_a = 6$, $\Delta\Omega = -2$ y $J' = 8,37$.

Sitios	Autovalores													
5	-8,00	-4,60	-4,00	12,60	22,00	-	-	-	-	-	-	-	-	-
7	-8,00	-4,39	-4,24	9,84	17,24	23,56	-	-	-	-	-	-	-	-
9	-8,00	-4,34	-4,29	8,44	13,94	19,90	24,36	-	-	-	-	-	-	-
11	-8,00	-4,32	-4,31	7,66	11,77	16,84	21,54	24,82	-	-	-	-	-	-
13	-8,00	-4,32	-4,31	7,20	10,34	14,52	18,86	22,60	25,11	-	-	-	-	-
15	-8,00	-4,32	-4,32	6,90	9,35	12,80	16,63	20,31	23,33	25,31	-	-	-	-
17	-8,00	-4,32	-4,32	6,70	8,66	11,51	14,84	18,25	21,37	23,85	25,45	-	-	-
19	-8,00	-4,32	-4,32	6,56	8,15	10,54	13,42	16,51	19,51	22,16	24,23	25,55	-	-
21	-8,00	-4,32	-4,32	6,46	7,78	9,79	12,29	15,05	17,86	20,49	22,77	24,52	25,62	-

Observamos a la vista de los datos que el autovalor más pequeño $\epsilon = -8$ corresponde con la banda plana predicha por la teoría y el autovalor de mayor energía tiene conforme se acerca a valores cada vez más grandes del número de sitios a su valor teórico³ $\epsilon = 26$ (valor máximo de $\epsilon_+ = 10 \cos k + 16$). Además la cuarta columna de autovalores corresponden al autovalor más pequeño posible de la banda de energía que corresponde tal y como hemos visto antes a $\epsilon = 6$ (valor mínimo de $\epsilon_+ = 10 \cos k + 16$), es decir podemos concluir que nuestro cálculo nos a hecho aparecer dos niveles de energía entre las dos bandas calculadas de forma teórica que tienden a ser el mismo para valores altos del número de sitios, que interpretamos como un efecto de las condiciones de borde abiertas de nuestra topología.

³Véase ecuación (5.4) y figura 5.2

Así, si representamos todo esto:

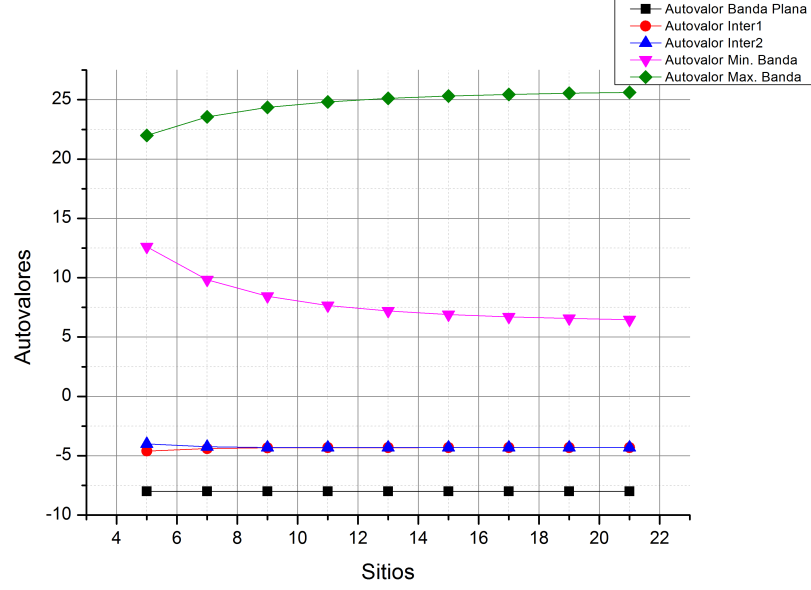


Figura 5.3: Bandas de energía obtenidas numéricamente $J = 5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$ con *Línea Verde* \rightarrow Nivel de energía máximo de la banda de energía superior, *Línea Rosa* \rightarrow Nivel de energía mínimo de la banda de energía superior, *Líneas Azul y Rojo* \rightarrow niveles de energía intermedios que aparecen debido a condiciones de frontera libres y *Línea Negra* \rightarrow Nivel de energía de la banda plana.

Podemos ahora representar el “gap” (“hueco”) de energía entre las dos bandas. Definido como la diferencia de energías entre el nivel más inferior de la banda superior y el valor de la banda plana, observando nuevamente que tiende al valor esperado que en este caso es 14:

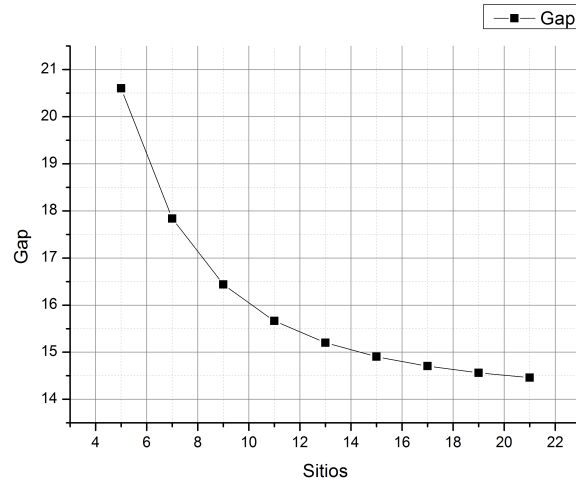


Figura 5.4: Gap de energía $J = 5$, $\Delta\Omega = -2$ y $\omega_a = 6$

Por tanto podemos decir que los cálculos numéricos dependen del tamaño de la red así a mayor número de sitios más se asemeja el cálculo teórico al numérico tendiendo al valor esperado para el tamaño del gap, es decir observamos los efectos del numero finito de sitios.

5.2. Método numérico 1

Empecemos con el primer método para obtener la matriz del Hamiltoniano para un número dado de excitaciones⁴ y de sitios. Usaremos el programa *Mathematica* para programar el método en cuestión. En primer lugar pensamos este método que hemos llamado 1 pero podríamos llamarlo trivial en el sentido de que no presenta ninguna complicación pero sin embargo este es muy ineficiente.

Para este método debemos recordar el aspecto de las matrices de los operadores de creación y destrucción que tienen una dimensión “n+1” donde “n” es el número de excitaciones:

$$c = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \quad c^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n+1} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

Lo que haremos es lo siguiente, definiremos cada operador de creación de cada sitio (cada uno con su espacio) y luego obtendremos su equivalente en el espacio completo de todos los sitios multiplicando tensorialmente cada operador. Por ejemplo si estamos en un caso con 5 nodos de la red de diente de sierra tenemos que definir un operador de creación y otro de destrucción para cada sitio en el espacio completo, es decir, el producto tensorial de los cinco espacios, por ejemplo el operador c_3^\dagger del espacio completo sería⁵: $c_3^\dagger = I(1) \times I(2) \times c_3^\dagger(3) \times I(4) \times I(5)$.

Una vez tenemos todos los operadores definidos los multiplicamos y sumamos de acuerdo con la expresión del Hamiltoniano (5.3). Podría parecer que ya tenemos la matriz del Hamiltoniano, sin embargo el producto tensorial de las bases de cada uno de los espacios no es la base del espacio de los estados de “n” excitaciones que es la que estamos buscando. De hecho la base del espacio⁶ del sitio j en el caso de “n” excitaciones es $A_n^j \equiv \{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n-1\rangle, |n\rangle\}$ y si tenemos N sitios el espacio del operador creación/destrucción del espacio completo es el producto tensorial de espacios es decir $B \equiv \underbrace{A_n^1 \times A_n^2 \times \dots \times A_n^{N-1} \times A_n^N}_{N \text{ veces}}$ y este no es el espacio de los estados de “n” excitaciones ya que

por ejemplo volviendo al ejemplo de 5 sitios y 3 excitaciones la base B contiene $|0, 1, 2, 0, 0\rangle$ pero también contiene estados como $|0, 3, 3, 2, 0\rangle$ en el que la red tiene más de 3 excitaciones⁷.

Por ello deberemos primero encontrar la base que proyecte el Hamiltoniano que hemos obtenido en el espacio de los estados de “n” excitaciones. Deberemos obtener la base de ese espacio. Para ello podemos darnos cuenta del siguiente hecho, los elementos de la base del espacio completo $B \equiv \{|0, 0, \dots, 0, 0\rangle, \dots, |n, n, \dots, n, n\rangle\}$ pueden ordenarse como si fuesen una sucesión de números de N cifras y en la base numérica $n+1$ desde el número $00\dots 00$ hasta el $nn\dots nn$ y de estos seleccionar aquellos cuya suma de cifras sea “n” así obtendremos los estados de “n” excitaciones. Notar que de esta manera cada autoestado tiene asociado un número único. Así por ejemplo el estado $|0, 1, 1, 1, 0\rangle$ que en el caso de tres excitaciones equivale al número en base 4: 01110 o el número decimal 44 que es exclusivo de ese estado, veremos que este hecho nos será útil para el segundo método numérico más eficiente.

Con la base obtenida se calcula la matriz de proyección y multiplicando el Hamiltoniano por esta se obtiene la matriz del Hamiltoniano definitiva y de esta ya podemos obtener los autovalores y autovectores. Sin embargo tenemos un problema que la dimensión de la matriz crece muy deprisa de hecho si tenemos “n” excitaciones y “N” sitios crece como $(n+1)^N$ que por ejemplo para el caso de 3 excitaciones y 7 sitios es $(3+1)^7 = 16384$ un tamaño por lo menos respetable. Esto nos impide llegar a caso con muchos sitios lo que nos impide trabajar en sistemas con un gran número de sitios no pudiendo observar efectos de tamaño finito, así como una gran lentitud en los cálculos numéricos. Para ver una explicación más detallada del programa desarrollado en *Mathematica* consúltase el **Apéndice E**.

⁴Más de una excitación.

⁵Con: $I(i)$ matriz identidad del espacio i -ésimo.

⁶Es decir el espacio de las matrices (5.5)

⁷En concreto 8.

5.3. Método numérico 2

5.3.1. Construyendo la base:

Como hemos dicho el problema está en la dimensión de la matriz del Hamiltoniano que crece demasiado deprisa para nuestros propósitos. Es por ello que precisamos de un método que reduzca dicho tamaño y así reduzca los tiempos de cálculo. El método alternativo consistirá en calcular la matriz del Hamiltoniano directamente en la base de los autovectores con “n” excitaciones. Para construir la matriz necesitamos construir la base, por ello hacemos uso de lo expuesto en la sección anterior. Como en el conjunto de todos los estados de la base completa B se encuentran los estados de la base buscada (es decir es un subespacio de B) podemos construir la base completa que va desde el estado $|0, 0, \dots, 0, 0\rangle$ hasta el $|n, n, \dots, n, n\rangle$ y de ella seleccionar aquellos estados que contengan solo “n” excitaciones.

Para construir la base completa podemos recurrir a la propiedad de que esta puede ser ordenada como si cada estado fuese un número de “N” cifras (si hay “N” sitios) en la base numérica “n+1” (si hay n excitaciones). Así el estado $|0, 0, \dots, 0, 1\rangle$ equivale al número $00\dots 01$ de manera que la base completa es la sucesión de números en base “n+1” de “N” cifras en orden ascendente desde el $00\dots 00$ hasta el $nn\dots nn$. Como *Mathematica* permite generar tanto números como vectores de “N” componentes que sean un número en una base determinada generando esa sucesión de vectores cuyas componentes son como las cifras de los números de la sucesión podemos seleccionar aquellos vectores cuya suma de componentes sea “n” y tendremos así la base construida.

De esta manera la posición del número en la sucesión inicial desde el $00\dots 00$ hasta el $nn\dots nn$ tiene asignado un número que se corresponde con su posición en la lista menos uno. Así por ejemplo para una excitación base 2 el $|0, 0, \dots, 0, 0\rangle \equiv 00\dots 00$ equivale en decimal 0 y su posición en la sucesión es la 1 ó $|0, 0, \dots, 0, 1, 0\rangle \equiv 00\dots 010$ equivale al número en decimal al 2 y su posición es la 3 en la sucesión, de manera que cada estado tiene asociado un número propio y podemos “transformar” un estado en otro simplemente sumando la cantidad adecuada en cada caso. Esta propiedad la usaremos más adelante.

Concluiré esta subsección con un ejemplo consideremos el caso de 5 sitios y una excitación (base 2), primero construimos la base completa (sucesión inicial):

$$\begin{pmatrix} |0, 0, 0\rangle \\ |0, 0, 1\rangle \\ |0, 1, 0\rangle \\ |0, 1, 1\rangle \\ |1, 0, 0\rangle \\ |1, 0, 1\rangle \\ |1, 1, 0\rangle \\ |1, 1, 1\rangle \end{pmatrix}$$

Seguidamente seleccionamos los estados que tengan 1 excitación y creamos la sucesión complementaria de los números decimales a los cuales equivalen:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} (0, 0, 1) \\ (0, 1, 0) \\ (1, 0, 0) \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

Así tenemos construida la base buscada.

5.3.2. Construyendo la matriz:

Una vez que ya tenemos la base buscada tanto como una sucesión de vectores como una sucesión de números tenemos ahora que construir la matriz. Para comenzar deberemos ver como actúan los operadores de creación y destrucción recordemos que:

$$c|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (5.7)$$

$$c^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (5.8)$$

Es decir que por ejemplo si: $c_1^\dagger|1, 1, 0\rangle = \sqrt{2}|2, 1, 0\rangle$ ó $c_2|1, 1, 0\rangle = \sqrt{1}|1, 0, 0\rangle$. En el método numérico modificaremos el estado $| \rangle$ (un estado cualquiera) y luego multiplicaremos por el coeficiente $\sqrt{}$ (un coeficiente cualquiera, por ejemplo en (5.8) es $\sqrt{n+1}$). Podemos así darnos cuenta que el operador c_1^\dagger en nuestro caso equivale a sumar el número en base 3: 100 al número en base 3 (estado de partida) 110 obteniendo $100 + 110 = 210$ así mismos el caso de c_2 equivale a $110 - 010 = 100$, resta puesto que es el operador destrucción.

Ambos casos para simplificar los cálculos y no tener que sumar o restar vectores podemos hacerlo en su equivalente decimal así: $9 + 12 = 21$ y $12 - 3 = 9$. Es decir los operadores equivalen a los números: $c_1^\dagger \equiv 9$ y $c_2 \equiv -3$. Por ello que los operadores c^\dagger y c equivalen a las listas de números que representan todos los operadores creación y destrucción respectivamente, así en nuestro ejemplo de 3 sitios y una excitación (base 2) serían:

$$c^\dagger \equiv \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad c \equiv \begin{pmatrix} -4 \\ -2 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

Así para el caso de c^\dagger , tenemos que $c_1^\dagger \equiv 4$, $c_2^\dagger \equiv 2$ y $c_3^\dagger \equiv 1$. Es decir los operadores de creación y destrucción están asociados a las potencias $\pm(n+1)^j$ donde “n+1” es la base numérica de los números de las sucesiones que coincide con el número de excitaciones menos uno y j equivale a la posición de la cifra (o componente si es un vector) que indica la posición del sitio en el arreglo usado y el signo viene a ser positivo si crea una excitación o negativo si la destruye. Para poder construir la matriz debemos recordar la forma del Hamiltoniano (luego veremos el caso no lineal):

$$H = \sum_{j=1}^N \left[\omega_a c_{2j}^\dagger c_{2j} + \omega_b c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J \sum_{j=1}^N \left[c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J' \sum_{j=1}^N \left[c_{2j}^\dagger c_{2j-1} + c_{2j}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j-1}^\dagger c_{2j} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j} \right]$$

Para obtener la matriz del Hamiltoniano en la base del subespacio de “n” excitaciones lo que haremos será dividirlo en la suma de operadores más sencillos, consideraremos cada pareja de operadores de creación y destrucción como un único operador: $c_{2j}^\dagger c_{2j}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1}$, $c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j}^\dagger c_{2j+1}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j}$ y $c_{2j+1}^\dagger c_{2j}$. Para obtener la matriz del Hamiltoniano obtendremos todas las imágenes de los elementos de la base, para ello haremos actuar los operadores anteriores sobre cada elemento de la base sumando a cada componente del vector (5.6) las correspondientes componentes de los vectores c^\dagger y c (Eq. (5.9)). Como estos operadores conservan el número de excitaciones la suma de estos tres números (c^\dagger , c y (5.6)) será un número que este en la lista dada por (5.6) y por tanto un vector de la base. Pongamos un ejemplo el operador $c_1^\dagger c_3$, para el caso de 3 sitios y 1 excitación, que actuará sobre los elementos de la base en (5.6) $\{|0, 0, 1\rangle, |0, 1, 0\rangle, |1, 0, 0\rangle\}$ que equivalen a los números (los estado son como número binarios) (véase (5.6)) 1, 2, 4. Los operadores c_1^\dagger y c_3 equivalen a sumar 4 y sumar -1 (haciendo uso de (5.9)). Así $c_1^\dagger c_3$ equivale a sumar 3. De manera que las imágenes de los vectores de la base 1, 2, 4 son 4, 5, 7. Notar que 4 si que es un vector de la base pero no lo son 5 y 7. Notemos que las imágenes de 2 y 4 ó $|0, 1, 0\rangle$ y $|1, 0, 0\rangle$ son cero ya que no tienen excitaciones en el tercer sitio.

Usaremos este método con los seis últimos operadores ⁸ ya que los dos primeros ($c_{2j}^\dagger c_{2j}$ y $c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1}$) son matrices diagonales como veremos. Una vez hallamos obtenido las imágenes de todos los vectores de la base sobre los seis tipos de operadores para cada valor de j , para cada sitio, ya podríamos construir las matrices. Comparando las imágenes de los vectores de la base con los vectores de la base. Así en el ejemplo anterior compararemos 1, 2, 4 con 4, 5, 7. De esta manera podemos construir la matriz del operador $c_1^\dagger c_3$. Comparando la primera imagen 4 con la base colocaremos en la primera columna de la matriz de $c_1^\dagger c_3$ 1 si coincide con la imagen y 0 si no por tanto la primera columna es $(0 \ 0 \ 1)^T$ (en vertical). El resto de imágenes 5 y 7 no coinciden con ningún vector de la base original y las columnas de la matriz serán $(0 \ 0 \ 0)^T$. De esta manera quedan solucionados los problemas del tipo que $c_3|0, 1, 0\rangle = 0$ y con nuestro método: $010 - 001 = 001 \leftrightarrow 2 - 1 = 1$.

⁸ $c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1}$, $c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j}^\dagger c_{2j+1}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j}$ y $c_{2j+1}^\dagger c_{2j}$

Por tanto la matriz del ejemplo $c_1^\dagger c_3$ queda:

$$c_1^\dagger c_3 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

Solo nos falta calcular los factores $\sqrt{\cdot} \times \sqrt{\cdot}$, que aparecen al hacer actuar un operador destrucción c_i y seguidamente operador creación c_j^\dagger , usando la sucesión de los vectores iniciales (5.6) antes de obtener sus imágenes y sabiendo como actúan los operadores (5.8) y (5.9). De manera que, volviendo al ejemplo, usando ahora la lista de vectores (que no de los números 1, 2 y 4):

$$\begin{pmatrix} (0, 0, 1) \\ (0, 1, 0) \\ (1, 0, 0) \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

Usando (5.8) y (5.9) calculamos los factores $\sqrt{\cdot} \times \sqrt{\cdot}$ del ejemplo anterior usando (5.11), al aplicar $c_1^\dagger c_3$ sobre cada elemento de la base, obteniendo:

$$\begin{pmatrix} \sqrt{0+1}\sqrt{1} \\ \sqrt{0+1}\sqrt{0} \\ \sqrt{1+1}\sqrt{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

Multiplicamos cada columna de la matriz (5.10) por su coeficiente $\sqrt{\cdot} \times \sqrt{\cdot}$, en este caso queda igual pero no siempre ocurre esto. Así, la primera columna la multiplicaríamos por el primer elemento de la lista anterior 1 y las otras dos por 0. Si se diera el caso de que, al cambiar los operadores de creación y destrucción por sumas o restas de números dieran una imagen que no es correcta al aplicarlo sobre un estado de la base. Como cuando el operador destrucción actúa sobre un sitio donde no hay excitaciones, entonces el factor $\sqrt{\cdot} \times \sqrt{\cdot}$ es cero por (5.7).

Así construimos las matrices a partir de los estados de la base comparándolos con sus imágenes (notar que compararemos números decimales entre sí ya que hemos reducido tanto la base como las imágenes de la misma a dos listas de números decimales) y multiplicaremos cada elemento de la matriz recién construida por su factor correspondiente $\sqrt{\cdot} \times \sqrt{\cdot}$. Así repitiendo el proceso para todo j obtenemos todos los operadores que como hemos dicho son las parejas de operadores creación y destrucción. Solo quedan las matrices de los operadores $c_{2j}^\dagger c_{2j}$ y $c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1}$, que son dos matrices diagonales. En la que en la primera los elementos impares de la diagonal son nulos y viceversa en la segunda con sus correspondientes factores $\sqrt{\cdot} \times \sqrt{\cdot}$.

El Hamiltoniano lo construimos finalmente multiplicando y sumando todas las matrices (las que representan a las parejas: $c_{2j}^\dagger c_{2j}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1}$, $c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j}^\dagger c_{2j+1}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j}$ y $c_{2j+1}^\dagger c_{2j}$) y a continuación podemos obtener con la matriz ya construida los autovalores y autovectores, matriz que no tenemos que proyectar porque la hemos construido en la base que nos interesaba.

Obtendremos ahora la dimensión de la matriz para compararla con el método anterior y ver si realmente hemos simplificado el cálculo. Para ello necesitamos calcular el número de elementos de la base dado un “N” y un “n”. El problema se puede simplificar a el número de combinaciones de meter “n” bolas (excitaciones) en “N” cajas (“sitios”), o lo que es lo mismo ordenar (“N-1”) “separadores” y n “bolas” es decir $(N-1+n)!$, pero como podemos intercambiar dos bolas o separadores entre sí sin cambiar de estado tenemos entonces que quitar las permutaciones de estos obteniendo:

$$\frac{(N-1+n)!}{n!(N-1)!} = \binom{N-1+n}{n}$$

Que si lo comparamos con $(n+1)^N$ se puede demostrar que $\binom{N-1+n}{n} < (n+1)^N$ de hecho para $n = 5$ y $N = 7$ tenemos que $\binom{7-1+5}{5} = 462 \ll (5+1)^7 = 279936$. Esto solo es el tamaño del lado de la matriz cuadrada, el total de números de cada matriz corresponde al cuadrado de esas cantidades. Podemos ver en detalle explicado el programa hecho para *Mathematica* y para ello consúltase el **Apéndice F**.

5.4. Comprobación de los métodos numéricos

Un primer chequeo que podemos hacer para comprobar que el nuevo programa calcula correctamente la matriz del Hamiltoniano comparamos los valores de los autovalores en ambos casos. Usaremos como parámetros $\omega_a = 2$, $J = 5$, $\Delta\Omega = -2$ y 5 sitios compraremos para distinto número de excitaciones $n = 1, 2, 3$. Con esto en las tablas 5.2, 5.3 y 5.4 se puede notar, que la diferencia de los valores obtenidos es del orden del error numérico:

Cuadro 5.2: Caso de $n = 1$ excitaciones.

Método 2	Método 1	DIFERENCIA (%)
18,00	18,00	0,00E+00
8,60	8,60	0,00E+00
-8,00	-8,00	0,00E+00
-8,60	-8,60	1,24E-13
-12,00	-12,00	0,00E+00

Cuadro 5.3: Caso de $n = 2$ excitaciones.

Método 2	Método 1	DIFERENCIA (%)
36,00	36,00	2,76E-13
26,60	26,60	0,00E+00
17,20	17,20	0,00E+00
10,00	10,00	0,00E+00
9,40	9,40	9,45E-14
6,00	6,00	0,00E+00
0,60	0,60	1,99E-12
7,85E-15	-2,83E-16	103,61
-3,40	-3,40	3,01E-13
-16,00	-16,00	0,00E+00
-16,60	-16,60	0,00E+00
-17,20	-17,20	0,00E+00
-20,00	-20,00	0,00E+00
-20,60	-20,60	-4,83E-13
-24,00	-24,00	4,14E-13

Cuadro 5.4: Caso de $n = 3$ excitaciones.

Método 2	Método 1	DIFERENCIA (%)
54,00	54,00	-3,68E-13
44,60	44,60	0,00E+00
35,20	35,20	-3,03E-13
28,00	28,00	0,00E+00
27,40	27,40	3,76E-13
25,81	25,81	-3,99E-13
24,00	24,00	0,00E+00
18,60	18,60	0,00E+00
18,00	18,00	5,53E-13
14,60	14,60	0,00E+00
9,20	9,20	2,32E-13
8,60	8,60	-3,51E-13
5,20	5,20	0,00E+00
2,00	2,00	5,11E-13
1,40	1,40	0,00E+00
0,80	0,80	2,51E-13
-2,00	-2,00	0,00E+00
-2,60	-2,60	-3,92E-13
-6,00	-6,00	0,00E+00
-7,40	-7,40	-2,76E-13
-8,00	-8,00	0,00E+00
-8,60	-8,60	-1,24E-13
-11,40	-11,40	0,00E+00
-12,00	-12,00	-8,29E-13
-15,40	-15,40	0,00E+00
-24,00	-24,00	-4,14E-13
-24,60	-24,60	0,00E+00
-25,20	-25,20	0,00E+00
-25,81	-25,81	-3,99E-13
-28,00	-28,00	3,55E-13
-28,60	-28,60	0,00E+00
-29,20	-29,20	3,41E-13
-32,00	-32,00	3,11E-13
-32,60	-32,60	3,05E-13
-36,00	-36,00	0,00E+00

Otro método de comprobación que aplicaremos es calcular con el **Método 2**, los autovalores para el caso de “single excitation” (una sola excitación) para los número de sitios desde 5 hasta 17 y comprobar la dependencia del gap con el tamaño de la red de osciladores dispuestos en forma de diente de sierra. Es decir que conforme se va aumentando el número de sitios el tamaño del gap tiende al valor teórico, para un número muy grande de sitios, asintóticamente. Así tenemos que los autovalores son:

Cuadro 5.5: Autovalores calculados a través del **Método 2** para distinto número de sitios y una excitación. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = 5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.

Sitios		Autovalores									
5	-8,00	-4,60	-4,00	12,60	22,00						
7	-8,00	-4,39	-4,24	9,84	17,24	23,56					
9	-8,00	-4,34	-4,29	8,44	13,94	19,90	24,36				
11	-8,00	-4,32	-4,31	7,66	11,77	16,84	21,54	24,82			
13	-8,00	-4,32	-4,31	7,20	10,34	14,52	18,86	22,60	25,11		
15	-8,00	-4,32	-4,32	6,90	9,35	12,80	16,63	20,31	23,33	25,31	
17	-8,00	-4,32	-4,32	6,70	8,66	11,51	14,84	18,25	21,37	23,85	25,45

Si se obtienen las diferencias con los ya calculados en la primera sección de este capítulo que se calcularon construyendo la matriz directamente por que se sabía cual era su forma. No se obtienen diferencias superiores a 10^{-13} lo cual verifica el correcto funcionamiento del método presentando exactamente la misma dependencia del gap con el tamaño de la red. Este caso recordemos que corresponde al **Caso A** de la página 17, lo que nos sirve de conexión entre el cálculo analítico y numérico.

5.5. Resultados

5.5.1. Caso lineal

Entre los resultados que podemos comprobar primero para el caso no lineal se encuentra la fórmula citada en la referencia [7] y [6] en la que nos dan una expresión analítica para obtener los autoestados localizados, es decir para el caso de una única excitación y en el caso de que las filas superior e inferior de la topología en diente de sierra con frecuencias iguales, encontramos que los autoestados de la banda plana son:

$$|\Gamma_j\rangle = \frac{1}{2}(c_{2j}^\dagger + c_{2j+2}^\dagger - \sqrt{2}c_{2j+1}^\dagger)|0\rangle \quad (5.13)$$

Notemos que la fórmula dada en bibliografía [6] no es la expresión de arriba. Es una errata que se subsana consultando la bibliografía que proporciona ese artículo que es [8]. Para comprobar el resultado con el programa es sencillo, no hay más que construir el estado y obtener su imagen haciendo actuar el Hamiltoniano recién obtenido, obtener la norma del vector imagen, dividirla por la norma del vector y obtener así el valor del autovector. En donde aplicando estas modificaciones al **Método 2** podemos comprobar que la expresión (5.10) funciona. Así por ejemplo para un caso concreto de valores $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Notar que los autoestados localizados tienen la forma en la topología de:

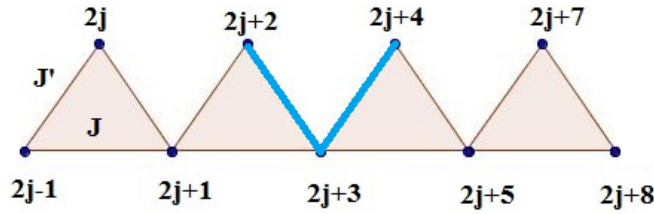


Figura 5.5: Un autoestado localizado.

De manera que para este caso particular de nueve sitios la degeneración de los autoestados localizados es de 3. Veamos la degeneración del autoestado localizado para el caso de una excitación. Veremos en la siguiente sección para el caso de más de una excitación. Si “m” es la degeneración el número de sitios “N” que es un número impar como ya hemos mencionado antes sigue: $N = 2m + 3$ empezando para el caso de 5 sitios que es el mínimo número de sitios en el cual tiene sentido que puedan aparecer estos autoestados localizados tal y como se puede observar en el dibujo. Es decir la degeneración es: $m = \frac{N-3}{2}$ en donde si obtenemos los autovalores para el caso de una excitación y varios sitios con el **Método 2** como en el cuadro 5.5 obtenemos que la degeneración del autoestado localizado⁹ coincide exactamente con la expresión mencionada. Así en función del número de sitios (en el caso de una excitación) la degeneración del autoestado localizado para el cuadro 5.5 obtuvimos con el **Método 2**, resultado válido solo para una excitación¹⁰:

Sitios	Degeneración
5	1
7	2
9	3
11	4
13	5
15	6
17	7

Cuadro 5.6: Degeneración de los autoestados localizados obtenidos a través del **Método 2** en función del número de sitios y una excitación. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana. (Caso de la tabla anterior 5.5)

Para ver cual es la modificación que hay que añadir al código del **Método 2** para comprobar que (5.13) es un autoestado localizado, consúltese el **Apéndice G**.

⁹El autoestado cuyo autovalor es el de la banda plana en el caso anterior era $\epsilon = -8$.

¹⁰En la siguiente sección veremos el caso general.

Nosotros vamos a intentar obtener una formula más general del caso anterior para los autoestados localizados para el caso de dos frecuencias distintas de la fila superior e inferior de sitios del arreglo de diente de sierra para el caso de una sola excitación. Para ello veamos el ejemplo de 5 sitios y una excitación que sabemos la forma de la matriz. Si aplicamos uno de los autoestados (5.13) para el caso de frecuencias iguales obtenemos:

$$\begin{pmatrix} \omega_b & J' & J & 0 & 0 \\ J' & \omega_a & J' & 0 & 0 \\ J & J' & \omega_b & J' & J \\ 0 & 0 & J' & \omega_a & J' \\ 0 & 0 & J & J' & \omega_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ -\sqrt{2}/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} J' - \sqrt{2}J \\ \omega_a - \sqrt{2}J' \\ J' - \sqrt{2}\omega_b + J' \\ -\sqrt{2}J' + \omega_a \\ -\sqrt{2}J + J' \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

Que claramente no es autovector en el caso de frecuencias distintas como cabría esperar. Definamos tres constantes A , B y C , y veamos que valor podemos darles para que el anterior estado sea autovector del Hamiltoniano:

$$\begin{pmatrix} \omega_b & J' & J & 0 & 0 \\ J' & \omega_a & J' & 0 & 0 \\ J & J' & \omega_b & J' & J \\ 0 & 0 & J' & \omega_a & J' \\ 0 & 0 & J & J' & \omega_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ A/2 \\ -B\sqrt{2}/2 \\ C/2 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} AJ' - B\sqrt{2}J \\ A\omega_a - B\sqrt{2}J' \\ AJ' - B\sqrt{2}\omega_b + CJ' \\ -B\sqrt{2}J' + C\omega_a \\ -B\sqrt{2}J + CJ' \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

Con ello imponemos:

$$J'A - B\sqrt{2}J = 0 \quad (5.16)$$

$$J'C - B\sqrt{2}J = 0 \quad (5.17)$$

Es decir se tiene que cumplir que $A = C$. Con ello podemos hallar la relación entre A y B :

$$J'A - B\sqrt{2}J = 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{A}{B} = \sqrt{2} \frac{J}{J'} = \sqrt{\frac{J}{J - \Delta\Omega}} \quad (5.18)$$

En donde hemos hecho uso de la condición de banda plana: $J' = J\sqrt{2\left(1 - \frac{\Delta\Omega}{J}\right)}$. Por último establecemos la condición para que los elementos del vector imagen sean proporcionales a los del vector inicial y así sea autoestado:

$$\frac{A\omega_a - B\sqrt{2}J'}{A} = \frac{B\omega_b - J'\frac{A+B}{\sqrt{2}}}{B} \quad (5.19)$$

Sustituimos la condición (5.18) para que dicha relación garantice que es un autoestado si se cumple (5.19), obteniendo:

$$\frac{-\sqrt{2}J^2 + (\sqrt{2}(\omega_b - \omega_a) + J')J + \sqrt{2}J'}{\sqrt{2}J} = 0$$

Obteniendo la relación entre J y J' para que el estado sea autovector:

$$J' = \frac{\sqrt{2}J(J - 2\Delta\Omega)}{J + \sqrt{2}} \quad (5.20)$$

Pero al mismo tiempo queremos que existan bandas planas, ya que estamos buscando los autoestados localizados. Por ello a de cumplirse simultáneamente:

$$J' = J\sqrt{2\left(1 - \frac{\Delta\Omega}{J}\right)} \quad (5.21)$$

Igualando ambas expresiones:

$$J\sqrt{2\left(1 - \frac{\Delta\Omega}{J}\right)} = \frac{\sqrt{2}J(J - 2\Delta\Omega)}{J + \sqrt{2}}$$

Podemos obtener así una relación que debe cumplirse entre J y $\Delta\Omega$ para que se cumplan simultáneamente (5.20) y (5.21) (siempre que $\Delta\Omega \neq -\frac{2\sqrt{2}}{3}$):

$$J = \frac{2\Delta\Omega^2 + \sqrt{2}\Delta\Omega - 1 \pm \sqrt{1 + 2\sqrt{2}\Delta\Omega + 4\Delta\Omega^2 + 4\sqrt{2}\Delta\Omega^3 + 4\Delta\Omega^4}}{2\sqrt{2} + 3\Delta\Omega}$$

Luego las condiciones que han de cumplirse para que tengamos un autoestado localizado son:

$$J' = J \sqrt{2 \left(1 - \frac{\Delta\Omega}{J} \right)} \quad (5.22)$$

$$J = \frac{2\Delta\Omega^2 + \sqrt{2}\Delta\Omega - 1 \pm \sqrt{1 + 2\sqrt{2}\Delta\Omega + 4\Delta\Omega^2 + 4\sqrt{2}\Delta\Omega^3 + 4\Delta\Omega^4}}{2\sqrt{2} + 3\Delta\Omega} \quad (5.23)$$

Además cumpliéndose:

$$A = C \quad (5.24)$$

$$\frac{A}{B} = \sqrt{2} \frac{J}{J'} = \sqrt{\frac{J}{J - \Delta\Omega}} \quad (5.25)$$

Así, el autoestado localizado es:

$$|\Gamma_j\rangle = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{J}{J - \Delta\Omega}} c_{2j}^\dagger + \sqrt{\frac{J}{J - \Delta\Omega}} c_{2j+2}^\dagger - \sqrt{2} c_{2j+1}^\dagger \right) |0\rangle \quad (5.26)$$

Para ver cual es la modificación que hay que añadir al código del **Método 2** para comprobar que (5.26) es un autoestado localizado, consúltese el **Apéndice H**. Con estos resultados de esta sección y sobre todo la *Figura 5.5* no ayudará enormemente en la sección siguiente a obtener la degeneración de los autoestados localizados, para un caso general de “N” sitios y “n” excitaciones.

5.5.2. Caso no lineal

Con el método numérico ya obtenido y comprobado su correcto funcionamiento y sus coincidencias con el caso no lineal ya podemos obtener los niveles de energía del caso no lineal recuerdo que era:

$$H = \sum_{j=1}^N \left[\omega_a c_{2j}^\dagger c_{2j} + \omega_b c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J \sum_{j=1}^N \left[c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1} \right] \\ + J' \sum_{j=1}^N \left[c_{2j}^\dagger c_{2j-1} + c_{2j}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j-1}^\dagger c_{2j} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j} \right] + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^N a_j^\dagger a_j^\dagger a_j a_j$$

Observamos que si aplicamos un operador $a_j^\dagger a_j^\dagger a_j a_j$ sobre un estado cualquiera $|\dots, n_j, \dots\rangle$ obtenemos como ya dijimos $n_j(n_j - 1)|\dots, n_j, \dots\rangle$, es decir son una matriz diagonal donde el elemento j de la diagonal es $n_j(n_j - 1)$ con n_j el número de excitaciones del sitio j en el estado inicial. Por tanto una vez añadida esta matriz diagonal que le corresponde al término no lineal podemos, usando el **Método 2** de cálculo, obtener los autovalores del sistema que queríamos estudiar. Podemos así obtener dichos autovalores en función de la constante de acoplamiento U . Por ejemplo

podemos ver el caso anterior de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$ y aplicaremos las condiciones para $J' = J\sqrt{2\left(1 - \frac{\Delta\Omega}{J}\right)}$

para que exista una banda plana. Nuestro caso constará de 7 sitios y 2 excitaciones. Así podremos observar como se comportan los niveles degenerados que aparecen para $U = 0$ para valores distintos y podremos ver un caso con mayor número de excitaciones en la que estas energías se sumarán. En nuestro caso para una excitación encontrábamos un nivel degenerado de energía de 12 como se ve en la *Figura 4.4*, en el caso de dos, tenemos, 24 la suma de las energías de ambas excitaciones cuando se encuentran degeneradas en el caso de $U = 0$. Veamos la dependencia de los autovalores:

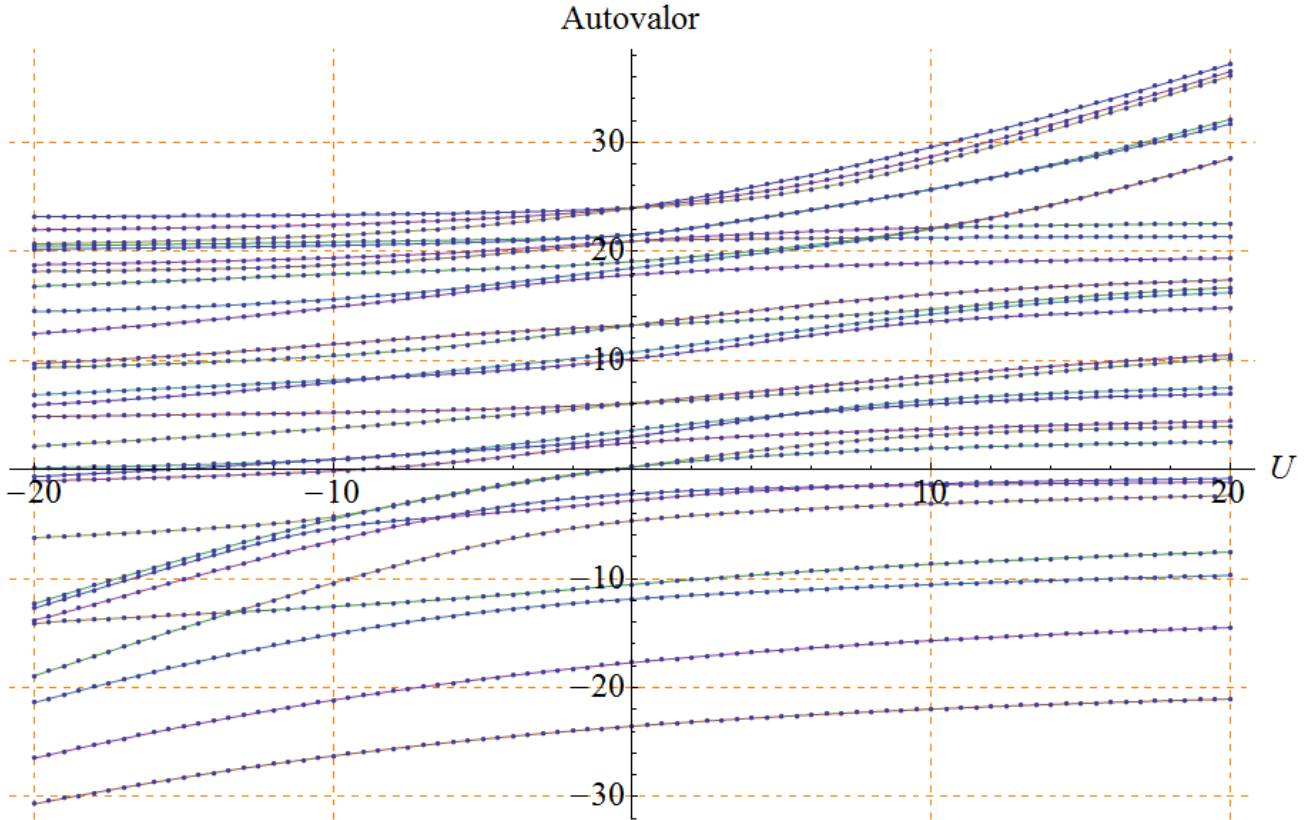


Figura 5.6: Autovalores para el caso de 7 sitios y 2 excitaciones calculados por el **Método 2** en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.

Para ver cual es la modificación que hay que añadir al código del **Método 2** para añadir el término no lineal, consúltese el **Apéndice I**.

Podemos ampliar la zona de interés, la banda plana de valor 24, con 3 autoestados degenerados para el caso de $U = 0$:

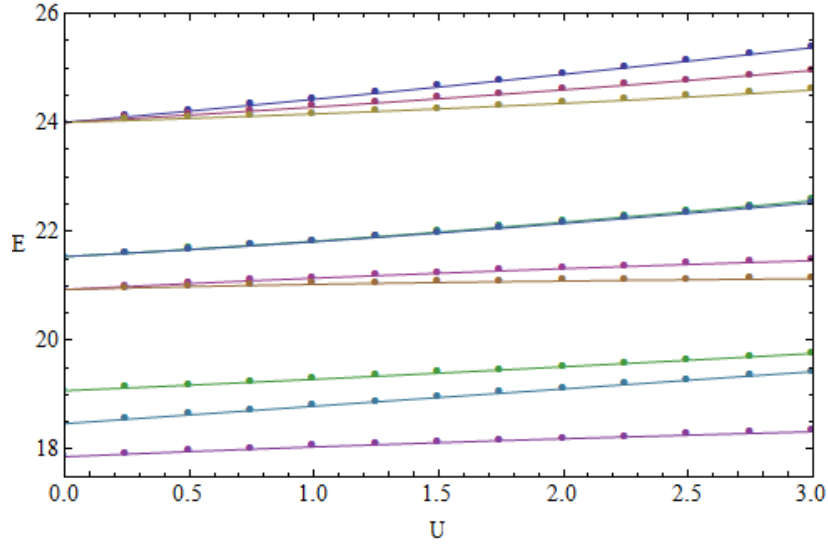


Figura 5.7: Autovalores para el caso de 7 sitios y 2 excitaciones calculados por el **Método 2** en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.

Para el caso de 7 sitios pero tres excitaciones, observándose 4 autoestados degenerados en $U = 0$:

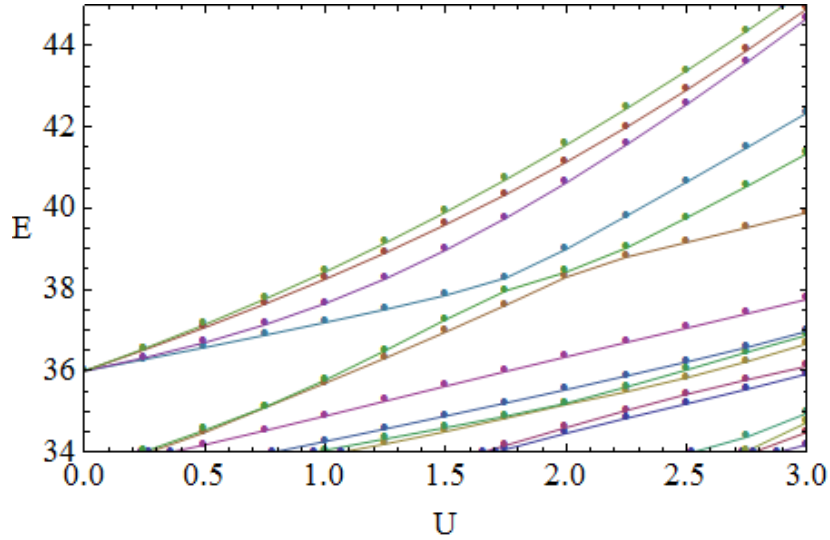


Figura 5.8: Autovalores para el caso de 7 sitios y 3 excitaciones calculados por el **Método 2** en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.

Pueden observarse que al aumentar el valor del parámetro U los niveles de energía que estaban degenerados se separan con forme aumenta la no linealidad, puede observarse que la degeneración en el caso de dos y tres excitaciones es respectivamente de tres y cuatro al contrario que en una excitación que para siete sitios recordando la *Figura 5.5* tendría una degeneración de 2. Puede observarse que el nivel degenerado en el caso lineal para dos excitaciones corresponde con la suma de dos excitaciones de 12 (recordando la *Figura 4.4*) y el caso de tres excitaciones el nivel degenerado en el caso lineal es 36, la suma de tres excitaciones de 12. Veamos ahora el caso equivalente de 9 sitios.

Podemos aumentar también el número de sitios a el caso de 9 sitios y 2 excitaciones, observándose 6 autoestados degenerados en $U = 0$:

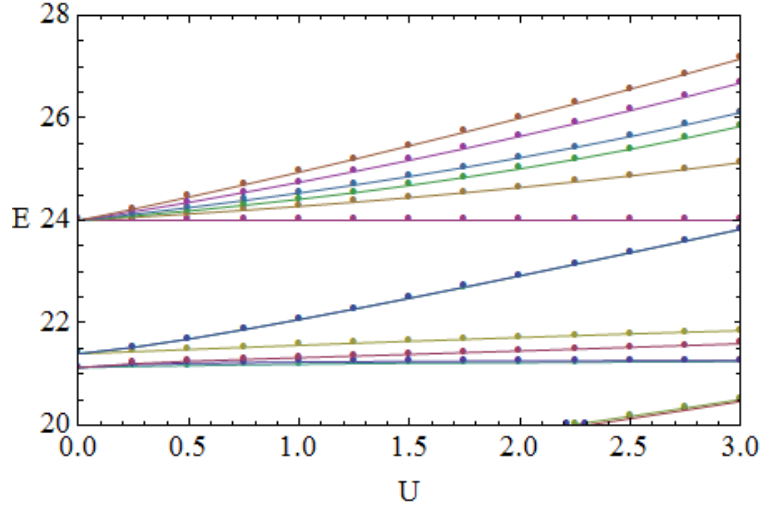


Figura 5.9: Autovalores para el caso de 9 sitios y 2 excitaciones calculados por el **Método 2** en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.

Si aumentamos en el caso de 9 sitios a tres excitaciones, observándose 10 autoestados degenerados en $U = 0$:

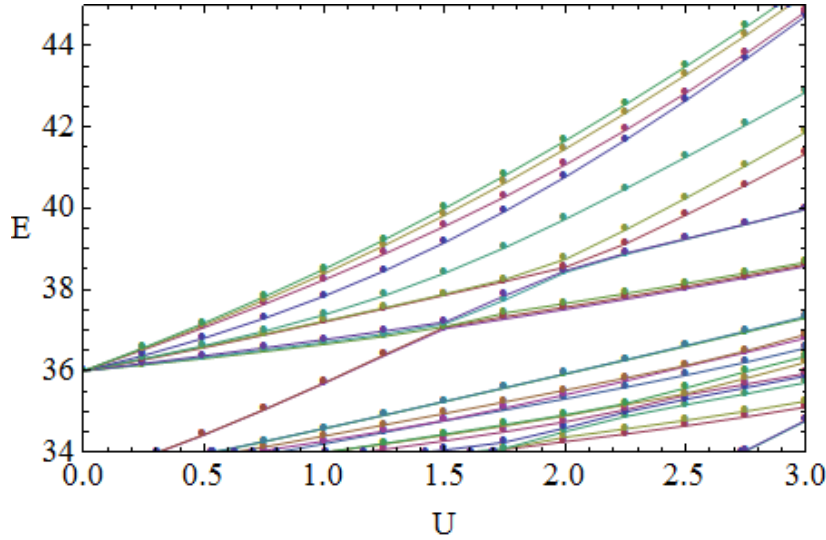


Figura 5.10: Autovalores para el caso de 9 sitios y 3 excitaciones calculados por el **Método 2** en función del parámetro no lineal “U”. Para valores de $\omega_a = 6$, $J = -5$ y $\Delta\Omega = -2$. Aplicando las condiciones para J' para que exista una banda plana.

Como vemos sucede como en el caso anterior sin apreciarse cambios cualitativos significativos. Los niveles de energía en el caso lineal (24 y 36 en $U = 0$) son los mismos que en el caso de 7 sitios. Sin embargo mientras la degeneración es 6 y 10 respectivamente para dos y tres excitaciones para 9 sitios, en el caso de 7 sitios es 3 y 4. Si recordamos la *Figura 4.4* para 7 sitios tenía dos posibles “lugares” en la topología donde podía existir un autoestado localizado. Sin embargo tenemos 2 excitaciones es decir, tenemos que ver las maneras de repartir 2 excitaciones (indistinguibles) en dos lugares distintos y lo mismo para el caso de 3 excitaciones o para los casos de 9 sitios en los que hay 3 “lugares”, donde puede haber un autoestado localizado. Si llamamos a N el número de lugares donde puede existir un autoestado localizado en una topología diente de sierra y a n el número de excitaciones entonces la degeneración es $\binom{N-1+n}{n}$, expresión que se obtiene de manera equivalente a como lo hicimos en la *Sección 5.3.2*, por ejemplo en el último caso: $\binom{9-1+3}{3} = \frac{5!}{3!2!} = 10$, tal y como hemos dicho.

Capítulo 6

Conclusiones

Un numero elevado de grados de libertad en modelos físicos requiere aproximaciones para poder tratarlo. Cuando esas son insuficientes, se recurre irremediabilmente al calculo numérico adicional. Sin embargo, este camino se complica innecesariamente, cuando no hacemos uso de las simetrías y cantidades conservadas del sistema.

Nuestro estudio se basaba en intentar obtener un método numérico que nos permitiese resolver un sistema de bosones interactuantes. Desde un principio comenzamos recordando conceptos básicos como el oscilador armónico cuántico y clásico. El hecho más importante fue que el Hamiltoniano cuántico conmutase con el operador número lo que nos permitió encontrar una base de autovectores comunes de la cual haríamos uso a lo largo de todo el escrito.

Una vez repasados los conceptos básicos que guiaran nuestro recorrido, procedimos a estudiar un modelo simple: Una cadena infinita de osciladores acoplados dispuestos en un arreglo de una dimension. Tras simplificarlo haciendo uso de la aproximación Tight-Binding, podíamos reducir los acoplamientos entre los osciladores a primeros vecinos. El paso al espacio Fourier fue determinante para la diagonalización y la obtención de las bandas de energía. Tras todo esto nos pusimos manos a la obra, ya por fin, en la topología definitiva, en diente de sierra. Topología a caballo entre una y dos dimensiones de ahí nuestro interés. Generalizamos para frecuencias diferentes y obtuvimos de nuevo pasando al espacio Fourier obteniendo las bandas de energía.

Pero ahí no termino nuestro estudio analítico del caso lineal sino que obtuvimos las condiciones para el caso más general que debían de cumplir los niveles de energía para que fuesen bandas planas. Con todo esto ya estábamos preparados para, una vez que desarrollásemos el método numérico para la resolución del caso no lineal, tener material suficiente para comprobar nuestro método numérico.

El primer caso numérico concreto que estudiamos consistió en considerar una única excitación. En este caso no había ningún problema ya que sabíamos de antemano la forma de nuestro Hamiltoniano lineal para el caso de una excitación. Esta sección nos permitió no solo observar la dependencia del sistema con el tamaño finito, ya que en los cálculos analíticos se habían considerado cadenas infinitas, sino que evidenció las consecuencias de haber usado condiciones de contorno abiertas.

Una vez hilvanada toda la riqueza del caso lineal pretendíamos acercarnos al no lineal. Sin embargo antes de eso debíamos de desarrollar un método, que permitiese obtener el Hamiltoniano del sistema para más de una excitación. En un primer intento pretendimos resolver el sistema obteniendo las matrices de los operadores de creación/destrucción haciendo el producto tensorial de todos los espacios de cada uno de los sitios de nuestra red. El método estaba evocado al fracaso ya que un aumento ligero en el número de sitios excitaciones disparaba el tamaño de la matriz. Además requería proyectar la matriz al espacio de los autovalores comunes del Hamiltoniano y el operador número

Llegados a este punto la respuesta para poder continuar parecía clara debía de dar con un método que nos permitiese obtener la base de ese subespacio, que conservaba el numero de excitaciones. Para así reducir el tamaño de nuestras matrices así como del tiempo de cálculo. Una vez obtenido procedimos a comparar ambos métodos, así como con los cálculos analíticos, para comprobar que efectivamente calculaban correctamente la matriz del Hamiltoniano. Además comprobamos usando una expresión para los autoestados localizados que encontramos en la bibliografía.

Finalmente usamos el método más eficiente para calcular los niveles de energía con el caso no lineal. Para ello no tuvimos más que hacer una pequeña modificación al método para añadir el término no lineal. Obtenidos los niveles de energía en función de la constante no lineal de acoplamiento pudimos observar el desdoblamiento de energía, así como obtener la expresión analítica que daba la degeneración de los autoestados localizados. Para ello fue clave tanto conocer la forma de los autoestados, que nos proporcionó la bibliografía, como el desdoblamiento que observamos de los niveles de energía. Esta vez habíamos obtenido la degeneración de los autoestados localizados para cualquier número de excitaciones. Hemos así obtenido un método numérico que nos ha permitido resolver un caso no tratable numéricamente, el caso no lineal.

Las principales conclusiones son: Primero el cálculo analítico de las bandas para el caso más general de frecuencias distintas nos ha llevado a la conclusión que estas solo existen bajo determinadas condiciones. En segundo lugar en cuanto al cálculo numérico del caso lineal teníamos: El tamaño finito del sistema es importante, es decir conforme aumentamos el tamaño del sistema se aprecia una mejor concordancia por ejemplo en el cálculo del gap con respecto al cálculo analítico. En tercer lugar hemos concluido que debíamos de llegar a un método que redujera los tiempos de cálculo para poder abordar así casos de más excitaciones y sitios. En cuarto lugar en el caso no lineal vimos el desdoblamiento de los niveles de energía degenerados en una banda plana para el caso lineal. Ello y el conocimiento previo de la “topología” de los autoestados localizados no permitió obtener la degeneración de los niveles de energía de la banda plana en función del número de sitios del arreglo y de las excitaciones.

Apéndice A

Cálculo de bandas de cadena infinita de osciladores acoplados

Consideraremos el caso de una cadena infinita de osciladores bosónicos sometidos a un potencial periódico acoplados a través de J que controla este acoplamiento entre primeros vecinos:

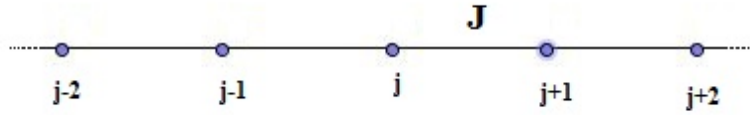


Figura A.1: Cadena de osciladores.

Vamos a obtener la bandas de energía del Hamiltoniano:

$$H = \sum_{j=0}^{N-1} [\omega a_j^\dagger a_j - J(a_j a_{j+1}^\dagger + a_j^\dagger a_{j+1})] \quad (\text{A.1})$$

Para ello haremos uso de las ecuaciones:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} a_j \longrightarrow a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} a_k \quad (\text{A.2})$$

$$a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} a_j^\dagger \longrightarrow a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} a_k^\dagger \quad (\text{A.3})$$

Además de estas expresiones deberemos de hacer uso de las relaciones de conmutación:

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad [a_k, a_{k'}] = 0 \quad [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0 \quad (\text{A.4})$$

Empecemos el desarrollo substituyendo las ecuaciones (A.1) y (A.3) en el Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \left[\omega \sum_{kk'}^{N-1} \left(a_k^\dagger a_{k'} e^{i(k-k')j} \right) - J \sum_{kk'}^{N-1} \left(a_k a_{k'}^\dagger e^{i(k'(j+1)-kj)} + a_{k'}^\dagger a_k e^{i(k'j-k(j+1))} \right) \right] = \\
&= \frac{1}{N} \left\{ \sum_{kk'}^{N-1} \omega a_k^\dagger a_{k'} \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(k-k')j} - J \sum_{kk'}^{N-1} a_k a_{k'}^\dagger e^{ik'} \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(k'-k)j} - J \sum_{kk'}^{N-1} a_{k'}^\dagger a_k e^{-ik} \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(k'-k)j} \right\} =
\end{aligned}$$

Puede demostrarse que $\sum_{j=0}^{N-1} e^{i(k-k')j} = \delta(k-k')$. Haciendo uso de esta expresi3n podemos continuar el c3lculo anterior:

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N} \left\{ \sum_{kk'}^{N-1} \omega a_k^\dagger a_{k'} N \delta(k-k') - J \sum_{kk'}^{N-1} a_k a_{k'}^\dagger e^{ik'} N \delta(k'-k) - J \sum_{kk'}^{N-1} a_{k'}^\dagger a_k e^{-ik} N \delta(k'-k) \right\} = \\
&= \sum_{k=0}^{N-1} \left[\omega a_k^\dagger a_k - J(a_k a_k^\dagger e^{ik} + a_k^\dagger a_k e^{-ik}) \right] = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\omega a_k^\dagger a_k - 2J a_k^\dagger a_k \left(\frac{e^{ik} + e^{-ik}}{2} \right) \right] - J \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ik} = \\
&= \sum_{k=0}^{N-1} \left[\omega a_k^\dagger a_k - 2J a_k^\dagger a_k \cos(k) \right] - JN \delta(1) = \sum_{k=0}^{N-1} \left[(\omega - 2J \cos(k)) a_k^\dagger a_k \right] = \sum_{k=0}^{N-1} \omega_k a_k^\dagger a_k
\end{aligned}$$

Obteniendo as3 la relaci3n buscada:

$$\boxed{H = \sum_{k=0}^{N-1} \omega_k a_k^\dagger a_k} \tag{A.5}$$

Apéndice B

Cálculo de las bandas en topología de tipo dientes de sierra para frecuencias iguales

Nuestro objetivo es encontrar las bandas de energía para el siguiente Hamiltoniano:

$$H = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\omega (a_j^\dagger a_j + b_j^\dagger b_j) \right] + J \sum_{j=0}^{N-1} \left[b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right] + J' \sum_{j=0}^{N-1} \left[a_j^\dagger b_j + a_j^\dagger b_{j+1} + b_j^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger a_j \right] \quad (\text{B.1})$$

Que representa un conjunto de osciladores de frecuencia ω acoplados a través de las constantes J' y J en un modelo Tight Binding para una topología tal y como se muestra en la figura:

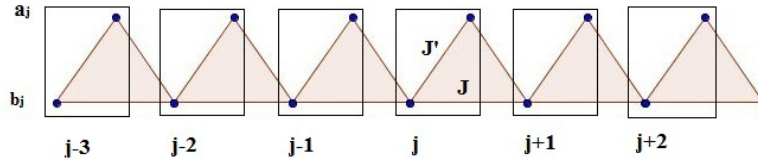


Figura B.1: Disposición en diente de sierra de los sitios.

Para obtener las bandas de energía en primer lugar pasaremos los operadores de creación y destrucción al espacio Fourier usando para ello:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} a_j \longrightarrow a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} a_k \quad b_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} b_j \longrightarrow b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} b_k \quad (\text{B.2})$$

$$a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} a_j^\dagger \longrightarrow a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} a_k^\dagger \quad b_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} b_j^\dagger \longrightarrow b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} b_k^\dagger \quad (\text{B.3})$$

Con todo esto sustituyendo las expresiones (B.2) y (B.3) en el Hamiltoniano (B.1) obtenemos, reorganizando los sumatorios:

$$H = \frac{1}{N} \left(\omega \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \sum_{kk'}^{N-1} \left[e^{ij(k-k')} (a_k^\dagger a_{k'} + b_k^\dagger b_{k'}) \right] \right\} + J \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \sum_{kk'}^{N-1} \left[e^{ij(k-k')} (e^{-ik} b_k^\dagger b_{k'} + e^{ik} b_k^\dagger b_{k'}) \right] \right\} + \right. \\ \left. + J' \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \sum_{kk'}^{N-1} \left[e^{ij(k-k')} (a_k^\dagger b_{k'} + b_k^\dagger a_{k'}) + e^{ij(k-k')} (a_k^\dagger b_{k'} e^{-ik'} + b_k^\dagger a_{k'} e^{ik}) \right] \right\} \right)$$

Reorganizando los sumatorios, tenemos:

$$H = \frac{1}{N} \left(\omega \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger a_{k'} + b_k^\dagger b_{k'}) \left[\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} \right] + J \sum_{kk'}^{N-1} (e^{-ik} b_k^\dagger b_{k'} + e^{ik} b_k^\dagger b_{k'}) \left[\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} \right] + \right. \\ \left. + J' \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger b_{k'} + b_k^\dagger a_{k'}) \left[\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} \right] + J' \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger b_{k'} e^{-ik'} + b_k^\dagger a_{k'} e^{ik}) \left[\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} \right] \right)$$

Haciendo uso de la propiedad $\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} = N\delta(k-k')$, tenemos:

$$H = \frac{1}{N} \left(\omega \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger a_{k'} + b_k^\dagger b_{k'}) N\delta(k-k') + J \sum_{kk'}^{N-1} (e^{-ik} b_k^\dagger b_{k'} + e^{ik} b_k^\dagger b_{k'}) N\delta(k-k') + \right. \\ \left. + J' \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger b_{k'} + b_k^\dagger a_{k'}) N\delta(k-k') + J' \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger b_{k'} e^{-ik'} + b_k^\dagger a_{k'} e^{ik}) N\delta(k-k') \right)$$

$$H = \omega \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + J \sum_{k=0}^{N-1} (e^{-ik} b_k^\dagger b_k + e^{ik} b_k^\dagger b_k) + J' \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger b_k + b_k^\dagger a_k) + J' \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger b_k e^{-ik} + b_k^\dagger a_k e^{ik})$$

En donde usamos las relaciones de conmutación:

$$[a_i, a_j^\dagger] = [b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad [a_i, b_j^\dagger] = 0$$

Continuando con el cálculo:

$$H = \omega \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + J \sum_{k=0}^{N-1} b_k^\dagger b_k 2 \cos k + J' \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger b_k + b_k^\dagger a_k) + J' \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger b_k e^{-ik} + b_k^\dagger a_k e^{ik}) \\ H = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\omega a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k (\omega + 2J \cos k) + J' (a_k^\dagger b_k (1 + e^{-ik}) + b_k^\dagger a_k (1 + e^{ik})) \right]$$

Si ahora definimos los siguientes vectores:

$$\vec{c}_k = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} \quad \vec{c}_k^\dagger = \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{B.4})$$

Sustituyendo:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & \omega + 2J \cos k \end{pmatrix} \vec{c}_k + \vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} 0 & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & 0 \end{pmatrix} \vec{c}_k \right]$$

Obteniendo finalmente una matriz que es diagonal por cajas:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} \omega & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & \omega + 2J \cos k \end{pmatrix} \vec{c}_k \quad (\text{B.5})$$

Si no vemos claro que sea diagonal por cajas podemos definir estos vectores:

$$\vec{h} = \begin{pmatrix} \vdots \\ a_{k-1} \\ b_{k-1} \\ a_k \\ b_k \\ a_{k+1} \\ b_{k+1} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

$$\vec{h}^\dagger = \begin{pmatrix} \dots & a_{k-1}^\dagger & b_{k-1}^\dagger & a_k^\dagger & b_k^\dagger & a_{k+1}^\dagger & b_{k+1}^\dagger & \dots \end{pmatrix} \quad (\text{B.7})$$

De manera que nos queda finalmente esta matriz:

$$H = \vec{h}^\dagger \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \omega & J'(1 + e^{-i(k-1)}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & J'(1 + e^{i(k-1)}) & \omega + 2J \cos(k-1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & \omega & J'(1 + e^{-ik}) & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & J'(1 + e^{ik}) & \omega + 2J \cos(k) & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega & J'(1 + e^{-i(k+1)}) & \dots & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & J'(1 + e^{i(k+1)}) & \omega + 2J \cos(k+1) & \dots & \dots \\ \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \vec{h} \quad (\text{B.8})$$

Con todo ello si diagonalizamos cada caja, obtenemos:

$$\begin{vmatrix} \omega - \epsilon & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & (\omega + 2J \cos k) - \epsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$(\omega - \epsilon)(\omega + 2J \cos k - \epsilon) - 2J'^2(1 + \cos k) = 0$$

$$\epsilon^2 - \epsilon(2\omega + 2J \cos k) + 2 \cos k(J\omega - J'^2) + (\omega^2 - 2J'^2) = 0$$

Resolviendo la ecuación de segundo grado, obtenemos finalmente las bandas de energías buscadas:

$$\boxed{\epsilon = J \cos k + \omega \pm \sqrt{J^2 \cos^2 k + 2J'^2(\cos k + 1)}} \quad (\text{B.9})$$

Apéndice C

Cálculo de las bandas en topología de tipo dientes de sierra para frecuencias distintas

Nuestro objetivo es encontrar las bandas de energía para el siguiente Hamiltoniano:

$$H = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\omega_a a_j^\dagger a_j + \omega_b b_j^\dagger b_j \right] + J \sum_{j=0}^{N-1} \left[b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right] + J' \sum_{j=0}^{N-1} \left[a_j^\dagger b_j + a_j^\dagger b_{j+1} + b_j^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger a_j \right] \quad (C.1)$$

Que representa un conjunto de osciladores de frecuencia ω_a (fila superior de osciladores [Véase la siguiente figura]) y ω_b (fila inferior de osciladores) acoplados a través de las constantes J' y J en un modelo Tight Binding para una topología tal y como se muestra en la figura:

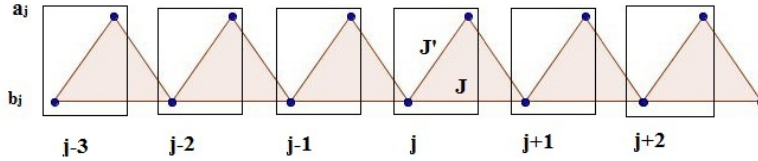


Figura C.1: Disposición en diente de sierra de los sitios.

Para obtener las bandas de energía en primer lugar pasaremos los operadores de creación y destrucción al espacio Fourier usando para ello:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} a_j \longrightarrow a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} a_k \quad b_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{ikj} b_j \longrightarrow b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{-ikj} b_k \quad (C.2)$$

$$a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} a_j^\dagger \longrightarrow a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} a_k^\dagger \quad b_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-ikj} b_j^\dagger \longrightarrow b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ikj} b_k^\dagger \quad (C.3)$$

Con todo esto sustituyendo las expresiones (C.2) y (C.3) en el Hamiltoniano (C.1) obtenemos, reorganizando los sumatorios:

$$H = \frac{1}{N} \left(\sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \sum_{kk'}^{N-1} \left[e^{ij(k-k')} (\omega_a a_k^\dagger a_{k'} + \omega_b b_k^\dagger b_{k'}) \right] \right\} + J \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \sum_{kk'}^{N-1} \left[e^{ij(k-k')} (e^{-ik} b_k^\dagger b_{k'} + e^{ik} b_k^\dagger b_{k'}) \right] \right\} + \right. \\ \left. + J' \sum_{j=0}^{N-1} \left\{ \sum_{kk'}^{N-1} \left[e^{ij(k-k')} (a_k^\dagger b_{k'} + b_k^\dagger a_{k'}) + e^{ij(k-k')} (a_k^\dagger b_{k'} e^{-ik'} + b_k^\dagger a_{k'} e^{ik}) \right] \right\} \right)$$

Reorganizando los sumatorios, tenemos:

$$H = \frac{1}{N} \left(\sum_{kk'}^{N-1} (\omega_a a_k^\dagger a_{k'} + \omega_b b_k^\dagger b_{k'}) \left[\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} \right] + J \sum_{kk'}^{N-1} (e^{-ik} b_k^\dagger b_{k'} + e^{ik} b_k^\dagger b_{k'}) \left[\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} \right] + \right. \\ \left. + J' \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger b_{k'} + b_k^\dagger a_{k'}) \left[\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} \right] + J' \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger b_{k'} e^{-ik'} + b_k^\dagger a_{k'} e^{ik}) \left[\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} \right] \right)$$

Haciendo uso de la propiedad $\sum_{j=0}^{N-1} e^{ij(k-k')} = N\delta(k-k')$, tenemos:

$$H = \frac{1}{N} \left(\sum_{kk'}^{N-1} (\omega_a a_k^\dagger a_{k'} + \omega_b b_k^\dagger b_{k'}) N\delta(k-k') + J \sum_{kk'}^{N-1} (e^{-ik} b_k^\dagger b_{k'} + e^{ik} b_k^\dagger b_{k'}) N\delta(k-k') + \right. \\ \left. + J' \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger b_{k'} + b_k^\dagger a_{k'}) N\delta(k-k') + J' \sum_{kk'}^{N-1} (a_k^\dagger b_{k'} e^{-ik'} + b_k^\dagger a_{k'} e^{ik}) N\delta(k-k') \right)$$

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} (\omega_a a_k^\dagger a_k + \omega_b b_k^\dagger b_k) + J \sum_{k=0}^{N-1} (e^{-ik} b_k^\dagger b_k + e^{ik} b_k^\dagger b_k) + J' \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger b_k + b_k^\dagger a_k) + J' \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger b_k e^{-ik} + b_k^\dagger a_k e^{ik})$$

En donde usamos las relaciones de conmutación:

$$[a_i, a_j^\dagger] = [b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad [a_i, b_j^\dagger] = 0$$

Continuando con el cálculo:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} (\omega_a a_k^\dagger a_k + \omega_b b_k^\dagger b_k) + J \sum_{k=0}^{N-1} b_k^\dagger b_k 2 \cos k + J' \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger b_k + b_k^\dagger a_k) + J' \sum_{k=0}^{N-1} (a_k^\dagger b_k e^{-ik} + b_k^\dagger a_k e^{ik}) \\ H = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\omega_a a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k (\omega_b + 2J \cos k) + J' (a_k^\dagger b_k (1 + e^{-ik}) + b_k^\dagger a_k (1 + e^{ik})) \right]$$

Si ahora definimos los siguientes vectores:

$$\vec{c}_k = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} \quad \vec{c}_k^\dagger = \begin{pmatrix} a_k^\dagger & b_k^\dagger \end{pmatrix} \quad (C.4)$$

Sustituyendo las anteriores expresiones:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} \omega_a & 0 \\ 0 & \omega_b + 2J \cos k \end{pmatrix} \vec{c}_k + \vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} 0 & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & 0 \end{pmatrix} \vec{c}_k \right]$$

Obteniendo finalmente una matriz que es diagonal por cajas:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \vec{c}_k^\dagger \begin{pmatrix} \omega_a & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & \omega_b + 2J \cos k \end{pmatrix} \vec{c}_k \quad (\text{C.5})$$

Si no vemos claro que sea diagonal por cajas podemos definir estos vectores:

$$\vec{h} = \begin{pmatrix} \vdots \\ a_{k-1} \\ b_{k-1} \\ a_k \\ b_k \\ a_{k+1} \\ b_{k+1} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (\text{C.6})$$

$$\vec{h}^\dagger = \begin{pmatrix} \dots & a_{k-1}^\dagger & b_{k-1}^\dagger & a_k^\dagger & b_k^\dagger & a_{k+1}^\dagger & b_{k+1}^\dagger & \dots \end{pmatrix} \quad (\text{C.7})$$

De manera que nos queda finalmente esta matriz:

$$H = \vec{h}^\dagger \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \omega_a & J'(1 + e^{-i(k-1)}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & J'(1 + e^{i(k-1)}) & \omega_b + 2J \cos(k-1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & \omega_a & J'(1 + e^{-ik}) & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & J'(1 + e^{ik}) & \omega_b + 2J \cos(k) & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_a & J'(1 + e^{-i(k+1)}) & \dots & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & J'(1 + e^{i(k+1)}) & \omega_b + 2J \cos(k+1) & \dots & \dots \\ \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \vec{h} \quad (\text{C.8})$$

Con todo ello si diagonalizamos cada caja, obtenemos:

$$\begin{vmatrix} \omega_a - \epsilon & J'(1 + e^{-ik}) \\ J'(1 + e^{ik}) & (\omega_b + 2J \cos k) - \epsilon \end{vmatrix} = 0$$

$$(\omega_a - \epsilon)(\omega_b + 2J \cos k - \epsilon) - 2J'^2(1 + \cos k) = 0$$

$$\epsilon^2 - \epsilon((\omega_a + \omega_b) + 2J \cos k) + 2 \cos k(J\omega_a - J'^2) + (\omega_a \omega_b - 2J'^2) = 0$$

Resolviendo la ecuación de segundo grado, obtenemos finalmente las bandas de energías buscadas:

$$\epsilon = J \cos k + \frac{\omega_a + \omega_b}{2} \pm \sqrt{\left(J \cos k + \frac{\omega_a + \omega_b}{2} \right)^2 - 2 \cos k(J\omega_a - J'^2) - (\omega_a \omega_b - 2J'^2)} \quad (\text{C.9})$$

Podemos obtener una ecuación más sencilla si lo podemos en función de la frecuencia media Ω :

$$\Omega = \frac{\omega_a + \omega_b}{2} \quad \rightarrow \quad \omega_b = 2\Omega - \omega_a$$

$$\epsilon = J \cos k + \Omega \pm \sqrt{(J \cos k + (\Omega - \omega_a))^2 + 2J'^2(1 + \cos k)} \quad (\text{C.10})$$

Apéndice D

Método Alternativo de cálculo de la condición de Banda Plana

Si partimos de la ecuación (4.12) del **capítulo 4** tenemos:

$$\epsilon_{\pm} = J \cos k + \Delta\Omega + \omega_a \pm \sqrt{(J \cos k + \Delta\Omega)^2 + 2J'^2(1 + \cos k)} \quad (\text{D.1})$$

Podemos obtener la misma condición de banda plana¹ del **apartado 4.3** del **capítulo 4** por otro método desarrollando el cuadrado de dentro de la raíz:

$$J^2 \cos^2 k + \Delta\Omega^2 + 2J\Delta\Omega \cos k + 2J'^2 + 2J'^2 \cos k \quad (\text{D.2})$$

Si identificamos con $(a + b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$ tenemos:

$$a^2 \equiv J^2 \cos^2 k$$

$$2ab \equiv 2J\Delta\Omega \cos k$$

$$b^2 \equiv 2J'^2 + 2J'^2 \cos k$$

Cogiendo la segunda ecuación y sustituyendo la primera obtenemos así b:

$$2J \cos kb = 2J\Delta\Omega \cos k \quad \longrightarrow \quad b = \frac{J\Delta\Omega + J'^2}{J}$$

Siempre y cuando $\cos k \neq 0$. Teniendo en cuenta la tercera ecuación podemos obtener la relación entre J y J' para que sea una suma al cuadrado:

$$b = \frac{J\Delta\Omega + J'^2}{J} = \pm \sqrt{2J'^2 + \Delta\Omega^2}$$

Elevando al cuadrado ambos miembros y siempre y cuando $J' \neq 0$, obtenemos de nuevo la relación buscada:

$$\boxed{J' = \pm \sqrt{2J(J - \Delta\Omega)}} \quad (\text{D.3})$$

¹Ecuaciones: (4.14) y (4.15).

Apéndice E

Método numérico 1

E.1. Explicación del programa

Necesitamos un programa que nos construya esta matriz:

$$H = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\omega_a a_j^\dagger a_j + \omega_b b_j^\dagger b_j \right] + J \sum_{j=0}^{N-1} \left[b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right] + J' \sum_{j=0}^{N-1} \left[a_j^\dagger b_j + a_j^\dagger b_{j+1} + b_j^\dagger a_j + b_{j+1}^\dagger a_j \right]$$

Para así poder obtener sus autovalores, sus autovectores y explorar algunos aspectos de no linealidad. Para ello optamos por usar el programa de *Mathematica* y en primer lugar pensamos el método trivial. Es decir construir cada uno de los operadores a , a^\dagger y b , b^\dagger mediante el producto tensorial de los distintos espacios. Para facilitar la implementación no usaremos la notación de usar autovalores de “arriba” a y a^\dagger y de “abajo” b y b^\dagger . Según el operador creación/destrucción pertenezca a un nodo de arriba o de abajo en la distribución de diente de sierra. Numeraremos los nodos empezando por 1 en el primer nodo así hasta N , así los nodos de abajo pasarán a ser nodos impares¹ $b_j \rightarrow c_{2j-1}$ y $b_j^\dagger \rightarrow c_{2j-1}^\dagger$ e igualmente para los de “arriba” que serán los nodos pares $a_j \rightarrow c_{2j}$ y $a_j^\dagger \rightarrow c_{2j}^\dagger$. Siguiendo esta notación el Hamiltoniano quedaría finalmente²:

$$H = \sum_{j=1}^N \left[\omega_a c_{2j}^\dagger c_{2j} + \omega_b c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J \sum_{j=1}^N \left[c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J' \sum_{j=1}^N \left[c_{2j}^\dagger c_{2j-1} + c_{2j}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j-1}^\dagger c_{2j} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j} \right]$$

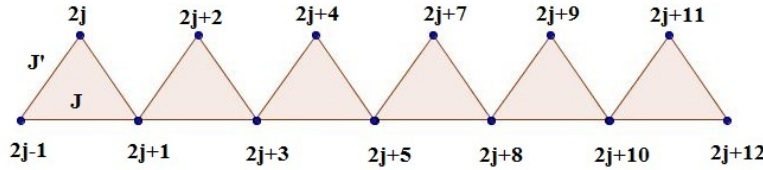


Figura E.1: Disposición en diente de sierra de los sitios.

Empecemos con el programa trivial, definiendo en primer lugar algunas variables:

```
sitios = 5;
dim = 4;
n = dim - 1;
Id = IdentityMatrix[dim];
```

¹Nota: El índice j empezará en 1 y no en 0

²Ahora N es el número de nodos.

En donde “sitios” es el número de nodos de la distribución de diente de sierra y “dim” es la dimensión de las matrices de cada subespacio así si recordamos el aspecto de las matrices de los operadores de creación y destrucción:

$$c = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \quad c^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{n+1} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix}$$

Encontramos que una matriz de un operador de creación/destrucción en un espacio de “n” excitaciones tendrá la matriz una dimensión de $n + 1$, tal y como lo hemos definido. Notar que Id es la matriz identidad. Definimos los operadores de creación y destrucción:

```
a = Table[0, {i, 1, dim}, {j, 1, dim}];
For[i = 1, i < dim, i++, a[[i, i + 1]] = Sqrt[i];]
adag = Transpose[a];
```

Donde “a” es operador de destrucción y “adag” el de creación (simplemente la traspuesta de la anterior).

Como estamos en un caso con 5 nodos de la red de diente de sierra tenemos que definir un operador de creación y otro de destrucción para cada sitio en el espacio completo es decir en el producto tensorial de los cinco espacios es decir por ejemplo el operador c_3^\dagger del espacio completo sería³: $c_3^\dagger = I(1) \times I(2) \times c_3^\dagger(3) \times I(4) \times I(5)$. Por tanto:

```
a1 = SparseArray[KroneckerProduct[a, Id, Id, Id, Id]];
a1d = SparseArray[KroneckerProduct[adag, Id, Id, Id, Id]];
a2 = SparseArray[KroneckerProduct[Id, a, Id, Id, Id]];
a2d = SparseArray[KroneckerProduct[Id, adag, Id, Id, Id]];
a3 = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, a, Id, Id]];
a3d = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, Id, adag, Id]];
a4 = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, Id, a, Id]];
a4d = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, Id, Id, adag]];
a5 = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, Id, Id, a]];
a5d = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, Id, Id, Id, adag]];
```

Como puede observarse si queremos obtener la matriz del hamiltoniano por este método para el caso de “n” excitaciones y “N” sitios o nodos de la red de diente de sierra, la dimensión de la matriz del hamiltoniano será de: $(n + 1)^N$ que por ejemplo para el caso de 3 excitaciones y 7 sitios es $(3 + 1)^7 = 16384$ un tamaño por lo menos respetable. Tras esto damos valores a ω_a , ω_b (que en el programa llamamos respectivamente ω_1 y ω_2), J y J' (que en el programa llamamos respectivamente J_1 y J_2) pero el valor de ω_b vendrá dado en función de el parámetro ya definido $\Delta\Omega = \frac{\omega_b - \omega_a}{2}$ (que en el programa llamaremos Ω). Seguidamente definiremos el Hamiltoniano en función de estos parámetros:

```
Ω = -2.; (*Ω ≡ ΔΩ*)
ω1 = 6.;
ω2 = 2. * Ω + ω1;
J1 = -5;
J2 = Sqrt[2 * J1 * (J1 - Ω)];
```

(*El Hamiltoniano*)

```
H = SparseArray[ω1 * (a2d.a2 + a4d.a4) + ω2 * (a1d.a1 + a3d.a3 + a5d.a5) + J1 * (a1d.a3 + a3d.a1 + a3d.a5 + a5d.a3) +
J2 * (a2d.a1 + a4d.a3 + a2d.a3 + a4d.a5 + a1d.a2 + a3d.a4 + a3d.a2 + a5d.a4)];
```

³Con: $I(i)$ matriz identidad del espacio i-ésimo.

Hay que notar que este Hamiltoniano esta definido para todo el espacio de autoestados del operador número. Es decir la base del espacio completo es, para el caso de “N” sitios, como el producto tensorial de “N” bases $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n-1\rangle, |n\rangle\} \times \dots (N \text{ veces}) \dots \times \{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |n-1\rangle, |n\rangle\}$. Es decir la base del espacio “completo” es:

$$\{|0, 0, 0, \dots, 0, 0\rangle, |0, 0, 0, \dots, 0, 1\rangle, |0, 0, 0, \dots, 0, 2\rangle, \dots, |n, n, n, \dots, n, n-1\rangle, |n, n, n, \dots, n, n\rangle\}$$

Puede uno darse cuenta que cada ket consta de N números que indican el número de excitaciones en cada sitio y que hay un total de tantos estados como la cantidad maneras de llenar un conjunto de N “cajas” (“sitios”) con pelotas (“excitaciones”) indistinguibles si en cada caja caben como máximo “n” excitaciones, es decir $(n+1)^N$ elementos de la base. Para generar la base completa puede darse uno cuenta que puede ordenarla pensando en que cada estado fuese un número en base $(n+1)$ de manera que por ejemplo el estado $|0, 0, 0, \dots, 0, 2\rangle$ es el número en base $(n+1)$: $000 \dots 02$. Así los estados pueden ordenarse de manera ascendente desde el $000 \dots 00$ hasta el número $nnn \dots nn$ en base $(n+1)$, de hecho se puede comprobar que la cantidad de números es: $\{n+n(n+1)+n(n+1)^2+\dots+n(n+1)^{N-2}+(n+1)^{N-1}\}+1 = 1 + \sum_{k=0}^{N-1} (n+1)^k = (n+1)^N$. De esta manera podemos generar la base del espacio completo usando la función de *Mathematica* `IntegerDigits` [“número a combertir a vector”, “base a la que convertir el número”, “número de dígitos”] que genera un vector de un número determinado de dígitos a partir de un número proporcionado en la base numérica pedida. Así en la variable que llamaremos “Basis” tendremos la base completa:

```
Basis = Table [IntegerDigits[m, dim, sitios], {m, 0, (dim)sitios - 1}];
Res = Table [If[Sum[Basis[[j]][[i]], {i, 1, sitios}] == n, j, 0], {j, 1, (dim)sitios}] ;
Res2 = Select[Res, # != 0 &];
```

En donde en las variables “Res” y “Res2” hemos seleccionado el conjunto de estados con solo “n” excitaciones en total. Hay que darse que cuenta que en el vector “Res2” solo hemos guardado una serie de números que corresponden con la posición que ocupan en la lista inicial que iba desde $000 \dots 00$ hasta $nnn \dots nn$, así el $000 \dots 00$ y el $000 \dots 01$ representan los números 1 y 2 respectivamente en la lista de números “Res2” de estados con un número determinado de excitaciones. A partir de estos deberemos contruir la matriz que proyecte el Hamiltoniano en este subespacio.

```
Proyec = Table [KroneckerDelta[m, i] * KroneckerDelta[m, j] * KroneckerDelta[i, j], {m, Res2}, {i, 1, (dim)sitios}, {j, 1, (dim)sitios}] ;
Proyec2 = Sum[Proyec[[m]][[]][[]], {m, 1, Length[Res2]}];
```

En donde “Proyec2” es la matriz que proyectará el Hamiltoniano “H” en el subespacio de estados con “n” excitaciones. Finalmente proyectamos y obtenemos los autovalores y autovectores:

```
HProyec = Projec2.H;
Eigenvalues[HProyec]
Eigenvectors[HProyec]
```

Así obtendríamos los autovalores y autovectores sin embargo el problema que tiene este método es que el tamaño de la matriz crece rápidamente tal y como hemos dicho con $(n+1)^N$, lo cual nos impide que podamos ejecutar casos para un número apreciable de sitios y excitaciones.

E.2. Resumen del código

El resumen de todo el código usado es:

```
sitios = 5;
dim = 4;
n = dim - 1;
Id = IdentityMatrix[dim];
```

```
a = Table[0, {i, 1, dim}, {j, 1, dim}];
For[i = 1, i < dim, i++, a[[i, i + 1]] = Sqrt[i];]
adag = Transpose[a];
```

```
a1 = SparseArray[KroneckerProduct[a, Id, Id, Id, Id]];
a1d = SparseArray[KroneckerProduct[adag, Id, Id, Id, Id]];
a2 = SparseArray[KroneckerProduct[Id, a, Id, Id, Id]];
a2d = SparseArray[KroneckerProduct[Id, adag, Id, Id, Id]];
a3 = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, a, Id, Id]];
a3d = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, adag, Id, Id]];
a4 = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, Id, a, Id]];
a4d = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, Id, adag, Id]];
a5 = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, Id, Id, a]];
a5d = SparseArray[KroneckerProduct[Id, Id, Id, Id, adag]];
```

```
 $\Omega = -2.$ ; (* $\Omega \equiv \Delta\Omega^*$ )
 $\omega 1 = 6.$ ;
 $\omega 2 = 2. * \Omega + \omega 1$ ;
J1 = -5;
J2 =  $\sqrt{2 * J1 * (J1 - \Omega)}$ ;
```

```
(*El Hamiltoniano*)
```

```
H = SparseArray[ $\omega 1 * (a2d.a2 + a4d.a4) + \omega 2 * (a1d.a1 + a3d.a3 + a5d.a5) + J1 * (a1d.a3 + a3d.a1 + a3d.a5 + a5d.a3) +$   
 $J2 * (a2d.a1 + a4d.a3 + a2d.a3 + a4d.a5 + a1d.a2 + a3d.a4 + a3d.a2 + a5d.a4)$ ];
```

```
Basis = Table [IntegerDigits[m, dim, sitios], {m, 0, (dim)sitios - 1}];
Res = Table [If[Sum[Basis[[j]][[i]], {i, 1, sitios}] == n, j, 0], {j, 1, (dim)sitios}] ;
Res2 = Select[Res, #  $\neq$  0 &];
```

```
Proyec = Table [KroneckerDelta[m, i] * KroneckerDelta[m, j] * KroneckerDelta[i, j], {m, Res2}, {i, 1, (dim)sitios},  
{j, 1, (dim)sitios}] ;
Proyec2 = Sum[Proyec[[m]][[]][[]], {m, 1, Length[Res2]}];
```

```
HProyec = Proyec2.H;
Eigenvalues[HProyec]
Eigenvectors[HProyec]
```


Apéndice F

Método numérico 2

F.1. Explicación del programa

Vamos ahora a presentar un método alternativo al programa anterior que consistirá en construir la matriz del Hamiltoniano directamente en el espacio de los autovectores con un número “n” de excitaciones. Primero definimos como antes los parámetros: dim^1 , n, *sitios*, ω_1 , ω_2 , Ω , J_1 y J_2 .

```
 $\Omega = -2.;$     (* $\Omega \equiv \Delta\Omega$ *)  
 $\omega_1 = 6.;$   
 $\omega_2 = 2. * \Omega + \omega_1;$   
 $J_1 = -5;$   
 $J_2 = \sqrt{2 * J_1 * (J_1 - \Omega)};$ 
```

También:

```
sitios = 3;  
dim = 2;  
dim2 = dim * 1. 0;  
n = dim2 - 1;
```

Definimos la base del subespacio con “n” excitaciones:

```
Basis = SparseArray [Table [1, 0 * IntegerDigits[m, dim, sitios], {m, 0, (dim)sitios - 1}]] ;  
Res = SparseArray [Table [If[Sum[Basis[[j]][[i]], {i, 1, sitios}] == n, j - 1, 0, 0, 0], {j, 1, (dim)sitios}}] ;  
W = Select[Res, # ≠ 0, 0 &];  
Vec = Table [If[Sum[Basis[[j]][[i]], {i, 1, sitios}] == n, Basis[[j]][[]], 0, 0], {j, 1, (dim)sitios}}] ;  
Vec2 = Select[Vec, # ≠ Cero &];  
L = Length[Vec2];
```

Definimos de forma análoga al caso anterior en *Basis* la base del espacio completo, en *W* definimos una lista de números que corresponden a todos los autoestados de un determinado número de excitaciones por ejemplo supongamos que en *Basis* tenemos la base completa de una excitación como máximo por sitios y un conjunto de 3 sitios tendríamos en este caso:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

¹En donde *dim2*, juega el mismo papel que *dim*, solo que lo definimos como un real y no como un entero para agilizar los cálculos.

Como se ve las filas son los estados: $|0, 0, 0\rangle, |0, 0, 1\rangle, |0, 1, 0\rangle, \dots$, notemos que estos los podemos interpretar como números en base 2: 000, 001, 010, ..., (aquí hay como máximo una excitación por sitios pero si hubiera “n” excitaciones sería una lista de números en base “n” desde el 000 hasta el nnn) que para agilizar los cálculos podemos usar directamente sus números decimales: $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$. Con ello en W es la lista de números decimales² de esa lista que corresponden a un determinado estado con “n” excitaciones en nuestro caso 1 excitación. En nuestro caso es:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

En cuanto a la variable $Vec2$ corresponde con el conjunto de estados con “n” excitaciones y no sus correspondientes números decimales que es W . En nuestro caso es la parte derecha de la anterior fórmula es decir: $\{|0, 0, 1\rangle, |0, 1, 0\rangle, |1, 0, 0\rangle\}$. A continuación definimos los operadores creación A y destrucción a :

$$\begin{aligned} A &= \text{Table}[(\text{dim2})^{\text{sitios}-l}, \{l, 1, \text{sitios}\}]; \\ a &= \text{Table}[-(\text{dim2})^{\text{sitios}-l}, \{l, 1, \text{sitios}\}]; \end{aligned}$$

Primero recordemos que:

$$c|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (\text{F.1})$$

$$c^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (\text{F.2})$$

Es decir que por ejemplo si: $c_1^\dagger|1, 1, 0\rangle = \sqrt{2}|2, 1, 0\rangle$ ó $c_2|1, 1, 0\rangle = \sqrt{1}|1, 0, 0\rangle$. Con A y a solo modificaremos el estado $| \rangle$ el coeficiente $\sqrt{}$ lo añadiremos a parte, podemos así darnos cuenta que el operador c_1^\dagger en nuestro caso equivale a sumar el número en base 3: 100 al número en base 3 (estado de partida) 110 obteniendo $100 + 110 = 210$ así mismos el caso de c_2 equivale a $110 - 010 = 100$.

Ambos casos para simplificar los cálculos y no tener que sumar o restar vectores podemos hacerlo en su equivalente decimal así: $9 + 12 = 21$ y $12 - 3 = 9$. Es decir los operadores equivalen a los números: $c_1^\dagger \equiv 9$ y $c_2 \equiv -3$. Por ello que las variables A y a equivalen a las listas de números que representan todos los operadores creación y destrucción respectivamente, así en nuestro ejemplo de 3 sitios y una excitación (base 2) serían:

$$A = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad a = \begin{pmatrix} -4 \\ -2 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{F.3})$$

Para continuar con el programa debemos de recordar la forma del Hamiltoniano:

$$H = \sum_{j=1}^N \left[\omega_a c_{2j}^\dagger c_{2j} + \omega_b c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J \sum_{j=1}^N \left[c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1} \right] + J' \sum_{j=1}^N \left[c_{2j}^\dagger c_{2j-1} + c_{2j}^\dagger c_{2j+1} + c_{2j-1}^\dagger c_{2j} + c_{2j+1}^\dagger c_{2j} \right]$$

Para obtener la matriz del Hamiltoniano en la base del subespacio de “n” excitaciones lo que haremos será dividirlo en la suma de operadores más sencillos, consideraremos cada pareja de operadores de creación y destrucción como un único operador: $c_{2j}^\dagger c_{2j}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j+1}$, $c_{2j+1}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j}^\dagger c_{2j-1}$, $c_{2j}^\dagger c_{2j+1}$, $c_{2j-1}^\dagger c_{2j}$ y $c_{2j+1}^\dagger c_{2j}$. Para obtener la matriz del Hamiltoniano obtendremos todas las imágenes de los elementos de la base, para ello haremos actuar los operadores anteriores sobre cada elemento de la base sumando a cada componente del vector W las correspondientes componentes de los vectores A y a . Como estos operadores conservan el número de excitaciones la suma de estos tres números (A , a y W) será un número que este en la lista dada por W y por tanto un vector de la base. Será en el vector $Imag-j$ (nombrando a los operadores anteriores $j = 1, \dots, 6$)³ en donde guardaremos las imágenes de cada uno de los elementos de la base al actuar el operador j . Sin embargo recordemos que $c_3|0, 1, 0\rangle = 0$ y con nuestro método: $010 - 001 = 001 \leftrightarrow 2 - 1 = 1$. Para solucionar esto haremos uso de la variable $Imagconst-j$ que calculará los factores $\sqrt{} \times \sqrt{}$ de la imágenes del operador j haciendo uso de la matriz $Vec2$ que guarda los vectores de los elementos de la base en sus filas, de manera que si se da el caso que si el método anterior arroja un número que no corresponde realmente con la imagen del vector como cuando el operador destrucción actúa sobre un sitio

²La variable Res es una variable intermedia entre $Basis$ y W

³Notar que hay un conjunto de 8 operadores pero el caso de los dos primeros es especial y son matrices diagonales que podremos construir directamente, nuestro problema importante será determinar las 6 últimas matrices, para cada valor de j .

donde no hay excitaciones entonces el factor es cero y cuando construyamos la matriz y multipliquemos los elementos de la misma por estos factores obtendremos un cero, asegurándonos así que el método es correcto. Además por asegurarnos todo elemento que sea negativo en el nuevo vector *Imag-j* se cambiará automáticamente por cero, así tenemos:

```

Imagconst1 = Table [Table [((Vec2[[m]][[2 * j - 1]] + 1,0)0,5) * ((Vec2[[m]][[2 * j + 1]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ;
Imag1 = Table [Table [If [Imagconst1[[j]][[m]] < 10-10, 0,0, (A[[2 * j - 1]] + a[[2 * j + 1]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ;

Imagconst2 = Table [Table [((Vec2[[m]][[2 * j + 1]] + 1,0)0,5) * ((Vec2[[m]][[2 * j - 1]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ;
Imag2 = Table [Table [If [Imagconst2[[j]][[m]] < 10-10, 0,0, (a[[2 * j - 1]] + A[[2 * j + 1]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ;

Imagconst3 = Table [Table [((Vec2[[m]][[2 * j]] + 1,0)0,5) * ((Vec2[[m]][[2 * j - 1]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;
Imag3 = Table [Table [If [Imagconst3[[j]][[m]] < 10-10, 0,0, (A[[2 * j]] + a[[2 * j - 1]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;

Imagconst4 = Table [Table [((Vec2[[m]][[2 * j]] + 1,0)0,5) * ((Vec2[[m]][[2 * j + 1]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;
Imag4 = Table [Table [If [Imagconst4[[j]][[m]] < 10-10, 0,0, (A[[2 * j]] + a[[2 * j + 1]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;

Imagconst5 = Table [Table [((Vec2[[m]][[2 * j - 1]] + 1,0)0,5) * ((Vec2[[m]][[2 * j]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;
Imag5 = Table [Table [If [Imagconst5[[j]][[m]] < 10-10, 0,0, (A[[2 * j - 1]] + a[[2 * j]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;

Imagconst6 = Table [Table [((Vec2[[m]][[2 * j + 1]] + 1,0)0,5) * ((Vec2[[m]][[2 * j]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;
Imag6 = Table [Table [If [Imagconst6[[j]][[m]] < 10-10, 0,0, (A[[2 * j + 1]] + a[[2 * j]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;

```

A continuación lo que hacemos es comparando los distintos vectores *Imag-j* con el vector original *W* para obtener la matriz que representa a cada uno de los 6 operadores en la base de partida multiplicando cada elemento de la matriz por los factores de *Imagconst-j*. Esto lo haremos para cada valor de j y luego sumaremos todas las matrices en cada caso:

```

MatImag1 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag1[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst1[[j]][[m]], 0,0], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }], {l, 1, L}, {m, 1, L}];

MatImag2 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag2[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst2[[j]][[m]], 0,0], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }], {l, 1, L}, {m, 1, L}];

MatImag3 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag3[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst3[[j]][[m]], 0,0], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }], {l, 1, L}, {m, 1, L}];

MatImag4 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag4[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst4[[j]][[m]], 0,0], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }], {l, 1, L}, {m, 1, L}];

MatImag5 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag5[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst5[[j]][[m]], 0,0], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }], {l, 1, L}, {m, 1, L}];

MatImag6 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag6[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst6[[j]][[m]], 0,0], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }], {l, 1, L}, {m, 1, L}];

```

Por último solo nos quedan las matrices de los operadores $c_{2j}^\dagger c_{2j}$ y $c_{2j-1}^\dagger c_{2j-1}$ que son dos matrices diagonales en la que en la primera los elementos impares de la diagonal son nulos y viceversa en la segunda, haciéndolo para cada valor de j obtenemos:

```

MatId1 = SparseArray [Table [Sum [(If[l == m, 1,0,0,0]) * Vec2[[m]][[2 * j - 1]], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2} + 1$ }], {l, 1, L}, {m, 1, L}]] ;
MatId2 = SparseArray [Table [Sum [(If[l == m, 1,0,0,0]) * Vec2[[m]][[2 * j]], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }], {l, 1, L}, {m, 1, L}]] ;

```

Para finalizar solo nos queda definir el Hamiltoniano multiplicando y sumando todas las matrices y a continuación obtener los autovalores y autovectores:

```
H = SparseArray[ω1 * MatId2 + ω2 * MatId1 + J1 * (MatImag1 + MatImag2) + J2 * (MatImag3 + MatImag4 + MatImag5 + MatImag6)];
```

```
Eigenvalues[H]  
Eigenvectors[H]
```

Si obtenemos la dimensión de la matriz para comparar con el método anterior para ver si realmente hemos simplificado el cálculo. Para ello necesitamos calcular el número de elementos de la base dado un “N” y un “n”. El problema se puede simplificar a el número de combinaciones de meter “n” bolas (excitaciones) en “N” cajas (“sitios”), o lo que es lo mismo ordenar (N-1) “separadores” y n “bolas” es decir $(N-1+n)!$, pero como podemos intercambiar dos bolas o separadores entre sí sin cambiar de estado tenemos entonces que quitar las permutaciones de estos obteniendo:

$$\frac{(N-1+n)!}{n!(N-1)!} = \binom{N-1+n}{n}$$

Que si lo comparamos con $(n+1)^N$ se puede demostrar que $\binom{N-1+n}{n} < (n+1)^N$ de hecho para $n = 5$ y $N = 7$ tenemos que $\binom{7-1+5}{5} = 462 \ll (5+1)^7 = 279936$. Esto solo es el tamaño del lado de la matriz cuadrada el total de números de cada matriz corresponde al cuadrado de esas cantidades.

F.2. Resumen del código

El resumen de todo el código usado es:

```
 $\Omega = -2.;$      $(*\Omega \equiv \Delta\Omega*)$   
 $\omega 1 = 6.;$   
 $\omega 2 = 2.*\Omega + \omega 1;$   
 $J1 = -5;$   
 $J2 = \sqrt{2 * J1 * (J1 - \Omega)};$ 
```

```
sitios = 3;  
dim = 2;  
dim2 = dim * 1. 0;  
n = dim2 - 1;
```

```
Basis = SparseArray [Table [1, 0 * IntegerDigits[m, dim, sitios], {m, 0, (dim)sitios - 1}]] ;  
Res = SparseArray [Table [If[Sum[Basis[[j]][[i]], {i, 1, sitios}] == n, j - 1, 0, 0, 0], {j, 1, (dim)sitios}}] ;  
W = Select[Res, # != 0, 0 &];  
Vec = Table [If[Sum[Basis[[j]][[i]], {i, 1, sitios}] == n, Basis[[j]][[]], 0, 0], {j, 1, (dim)sitios}] ;  
Vec2 = Select[Vec, # != Cero &];  
L = Length[Vec2];
```

```
A = Table [(dim2)sitios-l, {l, 1, sitios}] ;  
a = Table [-(dim2)sitios-l, {l, 1, sitios}] ;
```

```
Imagconst1 = Table [Table [(Vec2[[m]][[2 * j - 1]] + 1, 0)0,5] * ((Vec2[[m]][[2 * j + 1]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ;  
Imag1 = Table [Table [If [Imagconst1[[j]][[m]] < 10-10, 0, 0, (A[[2 * j - 1]] + a[[2 * j + 1]] + W[[m]])],  
{m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ;
```

```
Imagconst2 = Table [Table [(Vec2[[m]][[2 * j + 1]] + 1, 0)0,5] * ((Vec2[[m]][[2 * j - 1]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ;  
Imag2 = Table [Table [If [Imagconst2[[j]][[m]] < 10-10, 0, 0, (a[[2 * j - 1]] + A[[2 * j + 1]] + W[[m]])],  
{m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ;
```

```
Imagconst3 = Table [Table [(Vec2[[m]][[2 * j]] + 1, 0)0,5] * ((Vec2[[m]][[2 * j - 1]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;  
Imag3 = Table [Table [If [Imagconst3[[j]][[m]] < 10-10, 0, 0, (A[[2 * j]] + a[[2 * j - 1]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;
```

```
Imagconst4 = Table [Table [(Vec2[[m]][[2 * j]] + 1, 0)0,5] * ((Vec2[[m]][[2 * j + 1]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;  
Imag4 = Table [Table [If [Imagconst4[[j]][[m]] < 10-10, 0, 0, (A[[2 * j]] + a[[2 * j + 1]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;
```

```
Imagconst5 = Table [Table [(Vec2[[m]][[2 * j - 1]] + 1, 0)0,5] * ((Vec2[[m]][[2 * j]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;  
Imag5 = Table [Table [If [Imagconst5[[j]][[m]] < 10-10, 0, 0, (A[[2 * j - 1]] + a[[2 * j]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;
```

```
Imagconst6 = Table [Table [(Vec2[[m]][[2 * j + 1]] + 1, 0)0,5] * ((Vec2[[m]][[2 * j]])0,5), {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;  
Imag6 = Table [Table [If [Imagconst6[[j]][[m]] < 10-10, 0, 0, (A[[2 * j + 1]] + a[[2 * j]] + W[[m]])], {m, 1, L}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ;
```

```
MatImag1 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag1[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst1[[j]][[m]], 0, 0], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ,  
{l, 1, L}, {m, 1, L}]];
```

```
MatImag2 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag2[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst2[[j]][[m]], 0, 0], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}+1}{2} - 1$ }] ,  
{l, 1, L}, {m, 1, L}]];
```

```
MatImag3 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag3[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst3[[j]][[m]], 0, 0], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ,  
{l, 1, L}, {m, 1, L}]];
```

MatImag4 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag4[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst4[[j]][[m]], 0, 0], {j, 1, $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ,
{l, 1, L}, {m, 1, L}];

MatImag5 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag5[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst5[[j]][[m]], 0, 0], {j, 1, $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ,
{l, 1, L}, {m, 1, L}];

MatImag6 = SparseArray [Table [Sum [If[Imag6[[j]][[m]] == W[[l]], Imagconst6[[j]][[m]], 0, 0], {j, 1, $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] ,
{l, 1, L}, {m, 1, L}];

MatId1 = SparseArray [Table [Sum [(If[l == m, 1, 0, 0, 0]) * Vec2[[m]][[2 * j - 1]], {j, 1, $\frac{\text{sitios}-1}{2} + 1$ }] , {l, 1, L}, {m, 1, L}]] ;
MatId2 = SparseArray [Table [Sum [(If[l == m, 1, 0, 0, 0]) * Vec2[[m]][[2 * j]], {j, 1, $\frac{\text{sitios}-1}{2}$ }] , {l, 1, L}, {m, 1, L}]] ;

H = SparseArray[ω_1 *MatId2+ ω_2 *MatId1+J1*(MatImag1+MatImag2)+J2*(MatImag3+MatImag4+MatImag5+
MatImag6)];

Eigenvalues[H]

Eigenvectors[H]

Apéndice G

Código Método 2 - Modificación para comprobar los auto estados localizados

No tenemos más que añadir el siguiente código al final del código del **Apéndice F**.

```
Identidad = Table[Table[KroneckerDelta[j, m], {j, 1, sitios}], {m, 1, sitios}];  
AutoVector = Table [(Identidad[[2 * j]] -  $\sqrt{2}$  * Identidad[[2 * j + 1]] + Identidad[[2 * j + 2]]) * 0,5, {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-3}{2}$ }] ;  
MatrixForm[AutoVector]Normalizado = Table [Sum[AutoVector[[j]][[m]] * AutoVector[[j]][[m]], {m, 1, sitios}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-3}{2}$ }] ;  
MatrixForm[Normalizado]AutoVectorNorma = Table [Table[AutoVector[[j]][[m]]/Normalizado[[j]], {m, 1, sitios}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-3}{2}$ }] ;  
MatrixForm[AutoVectorNorma]Imag = Table [Table[Sum[H[[m]][[l]] * AutoVector[[j]][[l]], {l, 1, sitios}], {m, 1, sitios}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-3}{2}$ }] ;  
MatrixForm[Imag]AutoValTeo = Table [Sum[Imag[[j]][[m]] * AutoVector[[j]][[m]]/Normalizado[[j]], {m, 1, sitios}], {j, 1,  $\frac{\text{sitios}-3}{2}$ }] ;  
MatrixForm[AutoValTeo]
```


Apéndice H

Código Método 2 - Modificación para comprobar los auto estados localizados, frecuencias distintas

Deberemos añadir lo siguiente al código expuesto en el **Apéndice F**. Primero cambiaremos la condición inicial para $J1$:

$$J_1 = \frac{-1 + \sqrt{2}\Omega + 2\Omega^2 - \sqrt{1 + 2\sqrt{2}\Omega + 4\Omega^2 + 4\sqrt{2}\Omega^3 + 4\Omega^4}}{2\sqrt{2} + 3\Omega}$$

Segundo añadimos el siguiente código al final:

$$\text{Identidad} = \text{Table}[\text{Table}[\text{KroneckerDelta}[j, m], \{j, 1, \text{sitios}\}], \{m, 1, \text{sitios}\}];$$
$$\text{AutoVector} = \text{Table} \left[\left(\sqrt{\frac{J_1}{J_1 - \Omega}} * \text{Identidad}[[2 * j]] - \sqrt{2} * \text{Identidad}[[2 * j + 1]] \right. \right. \\ \left. \left. + \sqrt{\frac{J_1}{J_1 - \Omega}} * \text{Identidad}[[2 * j + 2]] \right) * 0,5, \{j, 1, \frac{\text{sitios}-3}{2}\} \right];$$
$$\text{MatrixForm}[\text{AutoVector}]\text{Normalizado} = \text{Table} \left[\text{Sum}[\text{AutoVector}[[j]][[m]] * \text{AutoVector}[[j]][[m]], \{m, 1, \text{sitos}\}], \{j, 1, \frac{\text{sitos}-3}{2}\} \right];$$
$$\text{MatrixForm}[\text{Normalizado}] \text{AutoVectorNorma} = \text{Table} \left[\text{Table}[\text{AutoVector}[[j]][[m]]/\text{Normalizado}[[j]], \{m, 1, \text{sitios}\}], \{j, 1, \frac{\text{sitios}-3}{2}\} \right];$$
$$\text{MatrixForm}[\text{AutoVectorNorm}] \text{Imag} = \text{Table} \left[\text{Table} \left[\text{Sum} [H[[m]][[l]] * \text{AutoVector}[[j]][[l]], \{l, 1, \text{sitios}\}], \{m, 1, \text{sitios}\}], \{j, 1, \frac{\text{sitios}-3}{2} \right]$$
$$\text{MatrixForm}[\text{Imag}] \text{AutoValTeo} = \text{Table} \left[\text{Sum}[\text{Imag}[[j]][[m]] * \text{AutoVector}[[j]][[m]] / \text{Normalizado}[[j]], \{m, 1, \text{sitios}\}], \{j, 1, \frac{\text{sitios}-3}{2}\} \right];$$

MatrixForm[AutoValTeo]

Apéndice I

Código Método 2 - Modificación para el caso no lineal

La modificaciones que hay que hacer al código del **Apéndice F** son primero definir la matriz del término no lineal:

```
MatNolineal = Sum[Table[Table[KroneckerDelta[i, j]*Vec2[[i]][[m]]*(Vec2[[j]][[m]]-1), {i, 1, L}], {j, 1, L}], {m, 1, sitios}];
```

En segundo lugar añadir el término no lineal al Hamiltoniano:

```
H =  $\omega_1$  * MatId2 +  $\omega_2$  * MatId1 + J1 * (MatImag1 + MatImag2) + J2 * (MatImag3 + MatImag4 + MatImag5 + MatImag6) + K * 0,5 * MatNolineal;
```

En donde K equivale a $U/2$.

Bibliografía

- [1] **Nature Physics**, **8**, pp264 – 266 (2012) *Goals and opportunities in quantum simulation* J. Ignacio Cirac and Peter Zoller .
- [2] **Preprint: arXiv:1306.2164** *A Practical Introduction to Tensor Networks: Matrix Product States and Projected Entangled Pair States* Román Orús.
- [3] **Quantum Mechanics**, **Vol. 1**, *Autores:* Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu y Franck Laloë, *Capítulo:* 5, págs. 483-500
- [4] **Modern Quantum Mechanics**, *Autor:* J. J. Sakurai, *Capítulo:* 4, págs. 261-266
- [5] **Condensed Matter Field Theory (Second Edition)**, *Autor:* Altland A. y Simons B. D. *Capítulo:* 2, págs. 54-58
- [6] **PHYSICAL REVIEW A** **87**, 0013607 (2013), *Título:* Quantum dynamics in driven sawtooth lattice under uniform magnetic field, *Autores:* Xiaoming Cai, Shu Chen y Yupeng Wang.
- [7] **PHYSICAL REVIEW A** **82**, 184502 (2010), *Título:* Bose condensation in flat bands, *Autores:* Sebastian D. Huber y Ehud Altman.
- [8] **Condensed Matter Physics**, 2005, **Vol. 8**, **No. 4(44)**, **pp. 813–824**, *Título:* Entropy of fermionic models on highly frustrated lattices, *Autores:* A.Honecker y J.Richter.