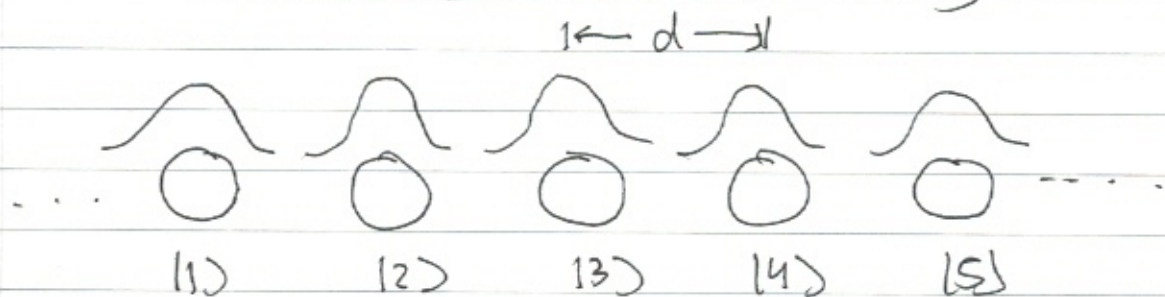


Modelo Tight-Binding



$|n\rangle$ = orbitales moleculares del n -ésimo átomo
 N long, CBC.

Como los orbitales están localizados, tenemos
 $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

Take $|\psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$

reemplazamos en $\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$

$$\sum_a C_a \hat{H} |a\rangle = E \sum_b C_b |b\rangle \quad | < a |$$

$$\sum_a C_a \underbrace{\langle a | \hat{H} | a \rangle}_{H_{aa}} = E \sum_b C_b \underbrace{\langle a | b \rangle}_{\delta_{ab}}$$

$$\boxed{\sum_a C_a H_{aa} = E C_a}$$

(1)

$$H_{\text{efectivo}} |m\rangle = E_{\text{atom}} |m\rangle$$

(3)

$$\Rightarrow H_{nm} = \langle n | H | m \rangle = E_{\text{atom}} \langle n | m \rangle + \sum_{j \neq m} \langle n | V_j | m \rangle$$

$\sum_{j \neq m} \langle n | V_j | m \rangle$: amplitud de prob. que vía la interacción con un ión $\neq m$ -ésimo, el e^- del m -ésimo ión puede ser transferido al ión n -ésimo ($n \neq m$)

Esto sólo ocurre si n y m son muy cercanos

$$\Rightarrow \sum_{j \neq m} \langle n | V_j | m \rangle = \begin{cases} V_0 & n = m \\ V & n = m \pm 1 \\ 0 & \text{cero contrario} \end{cases}$$

$$(4) \Rightarrow H_{nm} = E_0 \delta_{nm} + V [\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m}] \quad \leftarrow \text{matriz tré-diagonal}$$

donde $E_0 \equiv E_{\text{atom}} + V_0$

usando (4) en (1)'

$$\sum_m C_m H_{nm} = E C_n$$

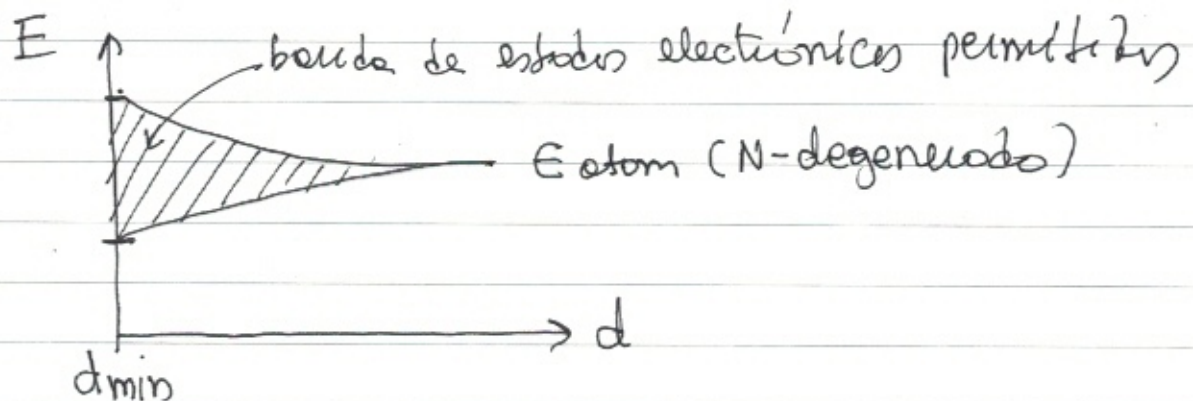
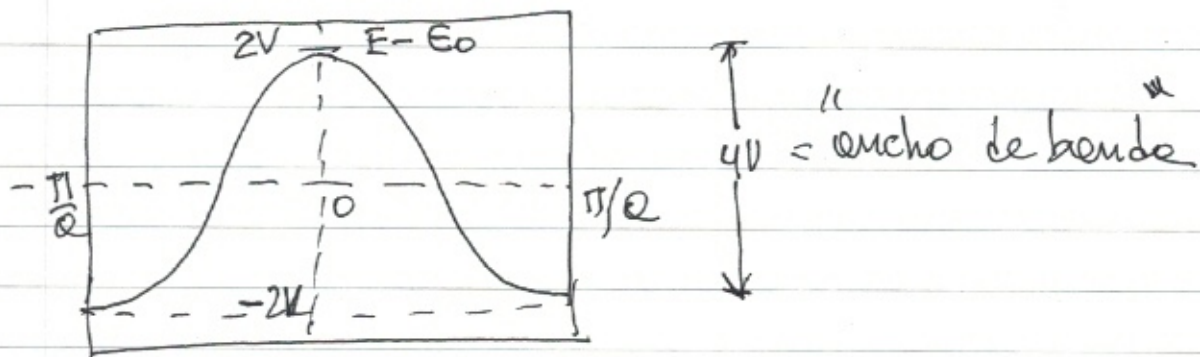
$$\Rightarrow [E_0 C_n + V C_m (\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1})]$$

o sea,
$$E_0 C_n + V [C_{n+1} + C_{n-1}] = E C_n \quad (5)$$

Tomando,
$$C_n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i k n a}$$

$$\Rightarrow \frac{E_0}{N} e^{i k n a} + \frac{V}{N} [e^{i k (n+1) a} + e^{i k (n-1) a}] = \frac{E}{N} e^{i k n a}$$

$$\Rightarrow E = E_0 + 2V \cos(k a) \quad (6)$$



Si introducimos el tiempo .

$$i \frac{dC_n}{dt} = E_0 C_n + V (C_{n+1} + C_{n-1}) = 0 \quad (7)$$

Ejercicio tomar $C_n(0) = \delta_{n0}$, $-50 \leq n \leq 50$

y calcular numérica/. la evolución de $|C_n(t)|^2$
para $Vt = 0, 10, 20$.

Calcular la evolución de $\sigma = \frac{\sum_n n^2 |C_n(t)|^2}{\sum_n |C_n(t)|^2}$
y plotear.

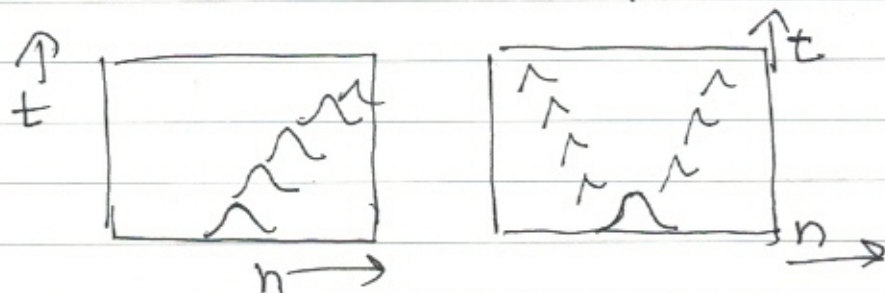
Tomar un pulso gaussiano inicial

$$C_n(0) = e^{\frac{-(n-n_0)^2}{\alpha^2}} e^{ik n a}$$

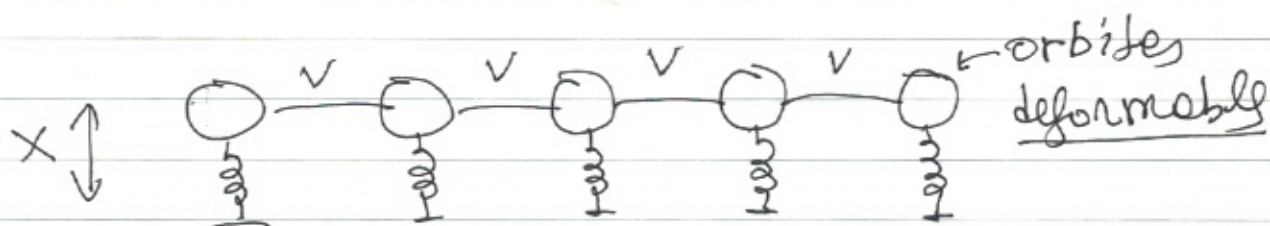
$$a \equiv 1$$

$$k = 0, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}$$

graficar la evolución de $|C_n(t)|^2$ en un density
plot.



Interacción electrón-fonón



$$i \frac{dC_n}{dt} + E C_n + V(C_{n+1} + C_{n-1}) = \alpha X C_n = 0$$

$$m X'' + k X = \alpha |C_n|^2$$

pequeño $\Rightarrow X \approx \frac{\alpha}{k} |C_n|^2$

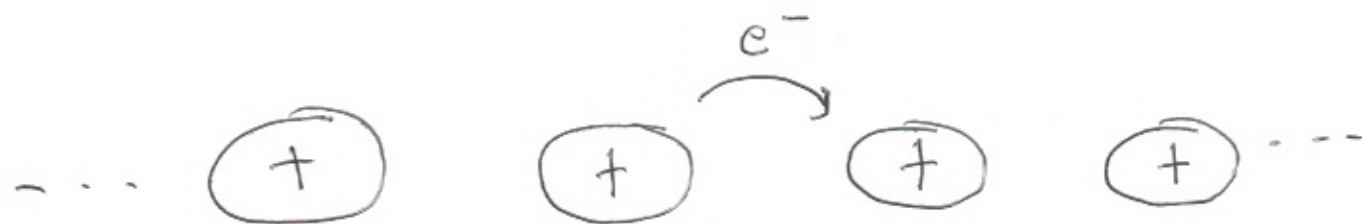
$$\Rightarrow i \dot{C}_n + E C_n + V(C_{n+1} + C_{n-1}) - \left(\frac{\alpha^2}{k}\right) |C_n|^2 C_n$$

$$\therefore \boxed{i \frac{dC_n}{dt} + V[C_{n+1} + C_{n-1}] + \chi |C_n|^2 C_n = 0} \quad \chi = -\frac{\alpha^2}{k}$$

Ec. DNLS.

Ejercicio tomar $C_n(0) = \delta_{n0}$ y seguir la evolución de $|C_n|$ para toda la cadena, para $\chi = 0, 1, 2, 3, 4$ ($N = 10$, $\chi_{\max} = 20$)

Modelo Semiclásico del Problema electrón - fonón Acoplados.



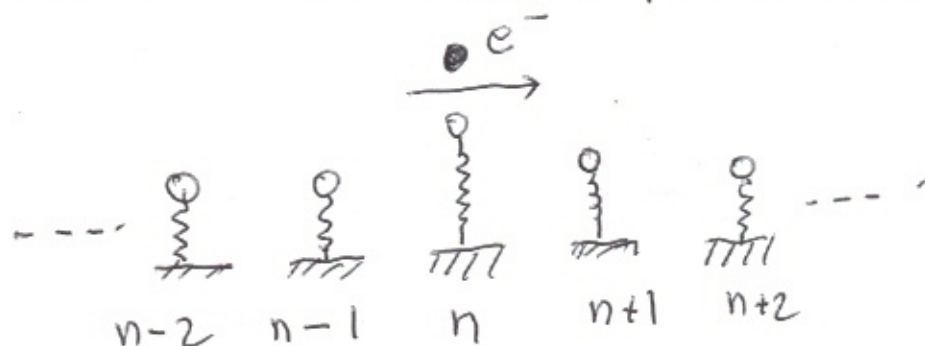
arreglo periódico de iones deformables



En la vecindad del e^- , la molécula se deforma. La polarización actúa sobre el e^- . Al alejarse el e^- , el ion queda oscilando. (fonones)

Problema e^- -fonón cuántico es complejo.

Modelo Sencillo: iones modelados como osciladores desacoplados (tipo Einstein)



osciladores se describen clásicamente:

$$m \ddot{u}_n + k u_n = \underbrace{\alpha |C_n|^2}_{\text{campo externo debido al } e^-}$$

EL e^- se describe cuánticamente:

$$i \dot{C}_n + V (C_{n+1} + C_{n-1}) + \underbrace{\alpha u_n C_n}_{\text{interacción } e^- \text{--} \text{ión (e}^-\text{-fonón)}} = 0$$

Next: despreciamos la inercia del oscilador

$$m \ddot{u}_n \approx 0$$

$$\Rightarrow u_n \approx (\alpha/k) |C_n|^2$$

$$\Rightarrow \boxed{i \dot{C}_n + V (C_{n+1} + C_{n-1}) + (\alpha^2/k) |C_n|^2 C_n = 0}$$

Ec. de S. no lineal discreta (DNLS)

Ecuación
efectiva
para el e^- .

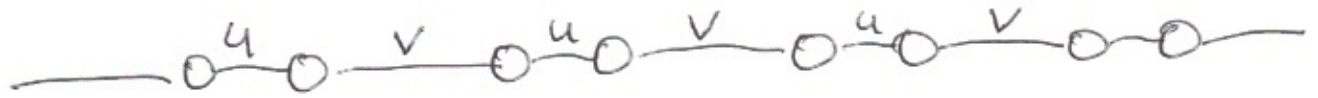
Caso más general:

$$i \dot{C}_n + E_n C_n + V_{n,n+1} C_{n+1} + V_{n,n-1} C_{n-1} + \chi |C_n|^2 C_n = 0$$

$E_n \rightarrow$ tipo ión n -ésimo

$V_{nm} \rightarrow$ distancia entre iones n y $n+1$

Caso SSH : Dimerización de la Cadena 1D



o sea,

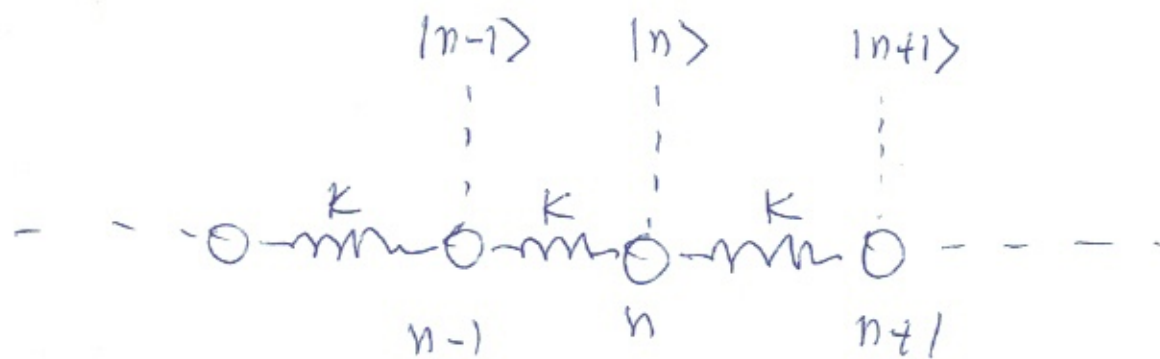
$$V_{2n-1, 2n} = u$$

$$V_{2n, 2n+1} = v$$

$E_n = \text{cte}$ (iones del mismo tipo)

↳ puede tomarse como cero.

Cadena Aniónica



$$H_{\text{armónico}} = \sum_n \frac{1}{2} K (U_{n+1} - U_n)^2$$

↓
estrechamiento /expulsión de los "resortes"

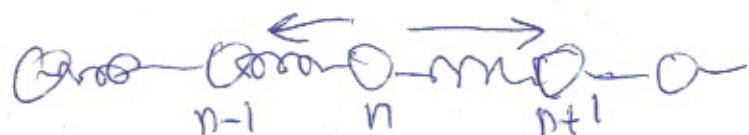
$$H_e = V \sum_n (C_n C_{n+1}^* + C_n^* C_{n+1}) \leftarrow \text{"hopping" de electrones}$$

$$H_{e-l} = \chi \sum_n (U_{n+1} - U_{n-1}) |C_n|^2$$

✓
energía de interacción $\propto \vec{p} \cdot \vec{E}$

$p \sim$ carga $\times$ desplazamiento
(ión)

$$P_{\text{neto at } n} \sim q(U_{n+1} - U_n) - q(U_n - U_{n-1}) = q(U_{n+1} - U_{n-1})$$



$$y \quad E \propto e \propto |C_n|^2$$

$$\Rightarrow H_{e-e} = \chi \sum_n (U_{n+1} - U_{n-1}) |C_n|^2$$

$$H = \sum_n \frac{1}{2} K (U_{n+1} - U_n)^2 + V \sum_n (C_n C_{n+1}^* + h.c.) + \chi \sum_n (U_{n+1} - U_{n-1}) |C_n|^2$$

$$i \dot{C}_n = \frac{\partial H}{\partial C_n^*} = V (C_{n+1} + C_{n-1}) + \chi (U_{n+1} - U_{n-1}) C_n$$

$$\begin{aligned} m \ddot{U}_n &= - \frac{\partial H}{\partial U_n} = - \frac{K}{2} (2U_n + 2U_n - 2U_{n+1} - 2U_{n-1}) \\ &= - \frac{2K}{2} (2U_n - U_{n+1} - U_{n-1}) \\ &\quad + \chi (|C_{n-1}|^2 - |C_{n+1}|^2) \end{aligned}$$

neglecting oscillator frequency, $m \ddot{U}_n \approx 0$

$$K(2U_n - U_{n+1} - U_{n-1}) = \chi (|C_{n-1}|^2 - |C_{n+1}|^2)$$

$$\underbrace{U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n}_{(U_{n+1} - U_n) - (U_n - U_{n-1})} = \underbrace{\chi (|C_{n+1}|^2 - |C_{n-1}|^2)}_{\chi [|C_{n+1}|^2 + |C_n|^2 - (|C_n|^2 + |C_{n-1}|^2)]}$$

$$U_{n+1} - U_n = |C_{n+1}|^2 + |C_n|^2$$

$$U_n - U_{n-1} = |C_n|^2 + |C_{n-1}|^2$$

This implies,

$$U_{n+1} - U_{n-1} = 2|C_n|^2 + |C_{n+1}|^2 + |C_{n-1}|^2$$

$$\Rightarrow \boxed{i \dot{C}_n = V(C_{n+1} - C_{n-1}) + \chi (|C_{n+1}|^2 + 2|C_n|^2 + |C_{n-1}|^2) C_n}$$

$$P = \sum |C_n|^2$$

$$H_{\text{eff}} = V \sum_n (C_n C_{n+1}^* + C_n^* C_{n+1}) + \chi \sum_n (|C_{n+1}|^2 |C_{n+2}|^2 + |C_n|^4)$$

cantidades conservadas

$$\frac{dP}{dt} = 0 \quad (\text{easy}) \quad \checkmark$$

(proximo capitulo)

$$\frac{dH_{\text{eff}}}{dt} = 0$$