

Cadena lineal

Considere un modelo de 2 núcleos atómicos acomodados linealmente como se muestra en la Figura 1 y un electrón libre. El Hamiltoniano de este sistema se puede representar en forma matricial como sigue:

$$H = t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

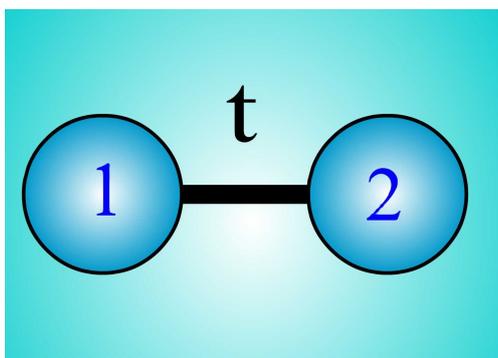


Figura 1: Cadena lineal de dos núcleos atómicos.

Este Hamiltoniano se llama *de amarre fuerte*. En una cadena lineal como la que estamos estudiando cada núcleo tiene dos vecinos, uno a su derecha y otro a su izquierda, este hecho es de fundamental importancia ya que impondrá las condiciones de frontera a este problema pues los núcleos en los extremos de la cadena tendrán también dos vecinos inmediatos¹.

Obtener el Hamiltoniano del sistema en forma matricial simplifica muchos cálculos, pues a partir de esta matriz se pueden conocer los valores para la energía al resolver la ecuación de Shrodinger $H\psi = E\psi$. Resolver esta ecuación, se reduce a un problema de valores propios que tiene soluciones distintas de 0 solo si,

$$\det(H - IE) = \det \begin{pmatrix} -E & -1 \\ -1 & -E \end{pmatrix} = 0$$

Resolviendo, se obtienen 2 eigenvalores para la energía,

$$E_1 = -1$$

$$E_2 = 1$$

Las eigenfunciones asociadas a estos eigenvalores, respectivamente son (ver figura 2):

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

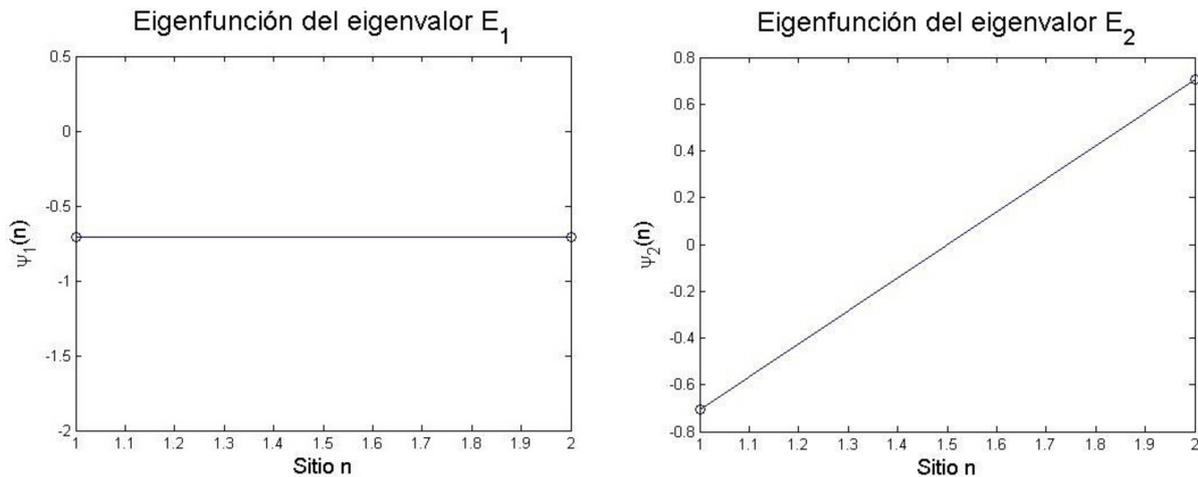


Figura 2: Eigenfunciones para una cadena lineal de dos partículas.

El eigenvalor E_1 se refiere a la energía más baja del sistema, si se observa en la figura 2, Ψ_1 tiene un comportamiento constante, ya que en el sitio uno la eigenfunción vale $\frac{1}{\sqrt{2}}$ y en el sitio dos vale $\frac{1}{\sqrt{2}}$ que se puede interpretar también como una curvatura nula, lo que está estrechamente relacionado con qué tanta energía está almacenada, pues a mayor curvatura se piensa que hay mayor energía. Así, observando la eigenfunción Ψ_2 que en el sitio uno vale $\frac{1}{\sqrt{2}}$ mientras que en el sitio dos vale $-\frac{1}{\sqrt{2}}$ entonces se tiene una curvatura distinta de cero que podemos atribuir a su correspondiente eigenvalor E_2 que es mayor a la energía E_1 .

A continuación se resuelve el problema de una cadena lineal de 3 núcleos atómicos con un sólo electrón² con condiciones de frontera periódicas, es decir, el núcleo n -ésimo tiene como vecinos al núcleo situado en el sitio 1 y al situado en el sitio $n - 1$. Ver Figura 3.

El hamiltoniano del sistema es:

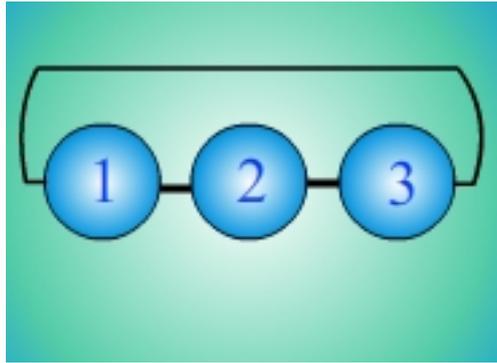


Figura 3: Cadena lineal de tres partículas con condiciones periódicas.

$$H = t \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Para resolver el problema de eigenvalores:

$$\det \begin{pmatrix} -E & -1 & -1 \\ -1 & -E & -1 \\ -1 & -1 & -E \end{pmatrix} = 0$$

Con polinomio característico $(E + 2)(E - 1)^2 = 0$, obteniéndose tres eigenvalores de la energía:

$$E_1 = -2$$

$$E_{2,3} = 1$$

Las eigenfunciones correspondientes a estos eigenvalores se muestran en la figura 4.

Para una cadena lineal de 4 núcleos atómicos se tiene un hamiltoniano como el que sigue:

$$H = t \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Resolviendo el problema de eigenvalores se obtienen los valores de la energía.

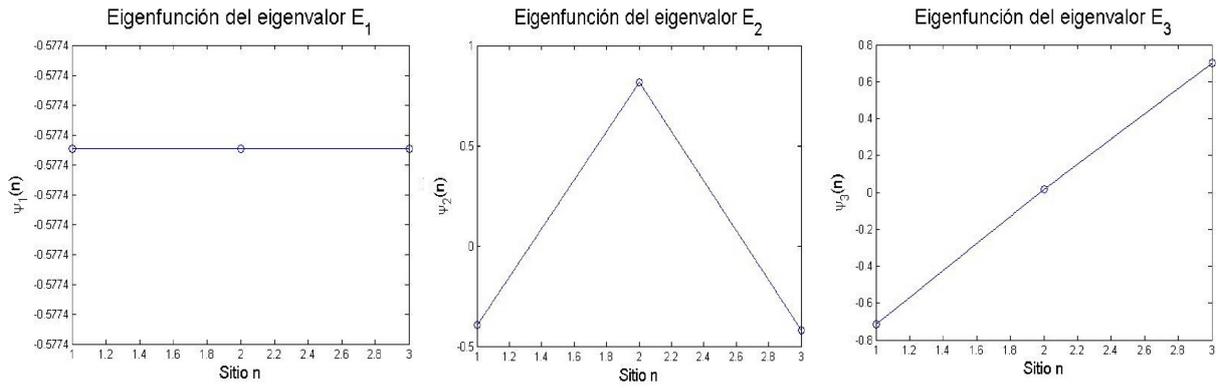


Figura 4: Eigenfunciones para una cadena lineal de tres partículas con condiciones periódicas.

$$E_1 = -2$$

$$E_{2,3} = 0$$

$$E_4 = 2$$

Con las siguientes eigenfunciones.

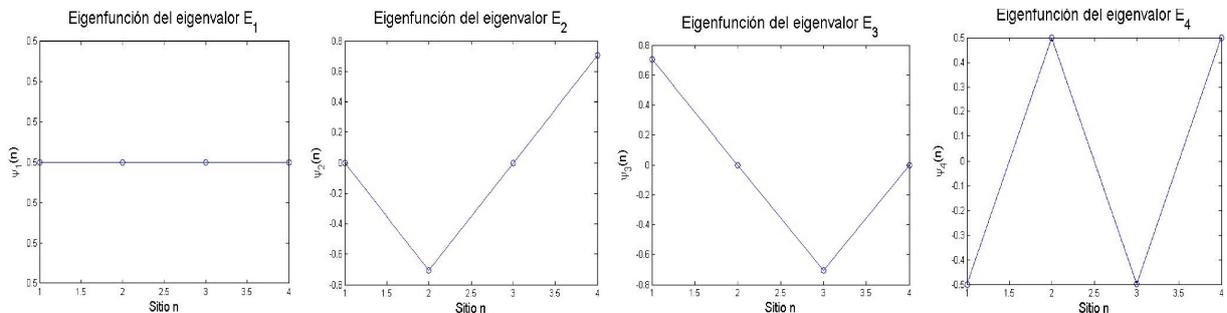


Figura 5: Eigenfunciones para una cadena lineal de cuatro partículas con condiciones periódicas.

La cuestión ahora se torna a pensar en el caso de N núcleos atómicos, ¿qué pasa en los casos en que N es un número entero muy muy grande, tanto que pueda llegar a considerarse como una cadena infinita? Para dar respuesta a esta pregunta se escribió un programa en Matlab que diagonaliza la matriz hamiltoniana para el caso de cadenas lineales de 10, 20, 30,

40, 100, 200, 300 y 400 partículas con condiciones periódicas. Se graficaron los eigenvalores en cada caso. Observando que para un número N cada vez mayor la curva que muestra el comportamiento de la energía se acerca cada vez más a un continuo. Véase figura 6.

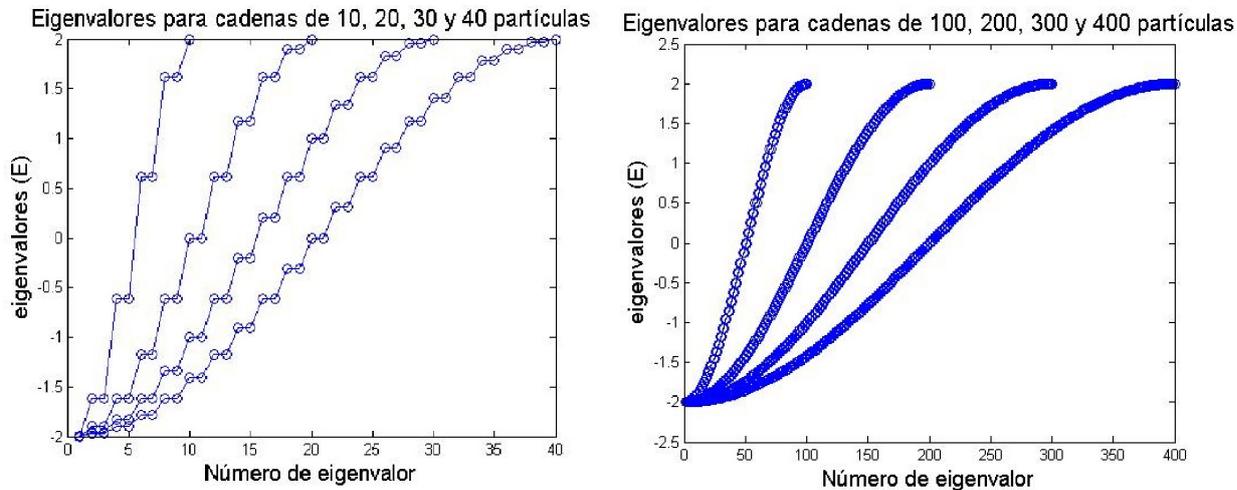


Figura 6: Eigenvalores para cadenas lineales desde diez hasta cuatrocientas partículas.

Como se sabe, para diagonalizar una matriz H^3 se encuentra la matriz de cambio de base U , la cual es de la forma: $U = (\Psi_1(n), \Psi_2(n), \Psi_3(n), \dots)$ es decir, es la matriz que contiene como vectores columna a las eigenfunciones Ψ_m donde m es el eigenvalor correspondiente.

En la figura 7, se muestran las gráficas de las eigenfunciones correspondientes a la energía más baja (E_1) y a la energía más alta (E_{40}) y en la figura 8 se muestra una renormalización de la energía de una arreglo lineal de 40 núcleos atómicos.

Si observamos la eigenfunción del eigenvalor más bajo E_1 , que como en los ejemplos anteriores, en cada sitio tiene un mismo valor, en general, se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\Psi_1(n) = \frac{1}{\sqrt{40}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

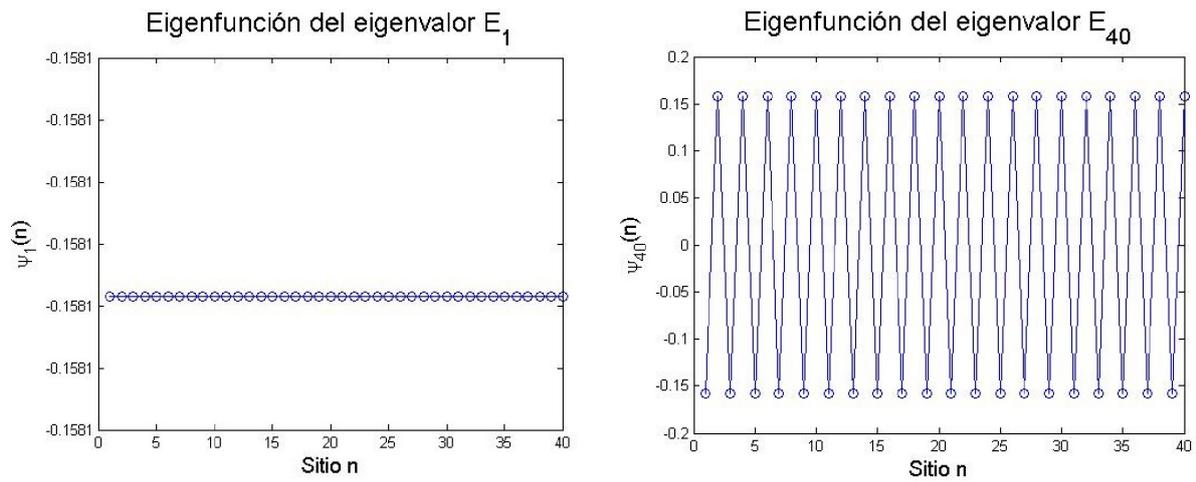


Figura 7: Eigenfunciones correspondientes a la menor energía y a la máxima para una cadena de cuarenta partículas.

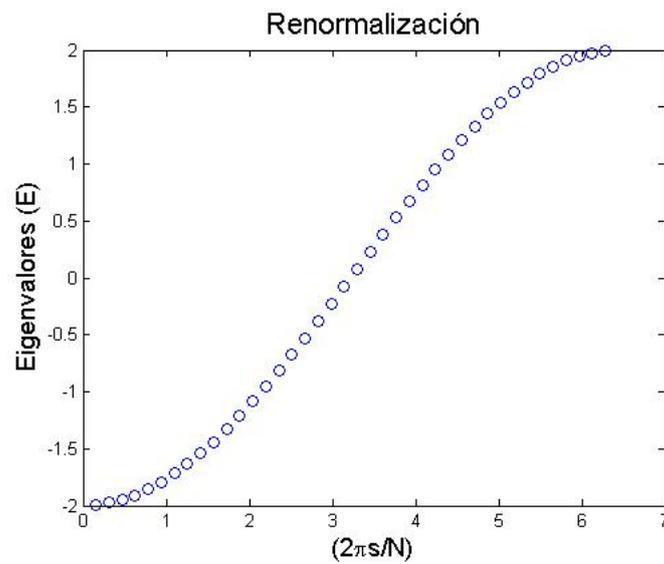


Figura 8: Eigenvalores de la energía renormalizados.

Lo cual puede ser confirmado al recurrir a la ecuación de valores propios $H\psi = E\psi$, es decir,

$$t \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ -2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix} = -2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Esto significa que $E_1 = -2$ el valor más bajo de la energía que además se confirma al observar la figura 6, en donde todas las curvas nacen en -2 . Este resultado es de gran importancia, ya que, se relaciona con el número de vecinos que tiene cada núcleo en la cadena, se concluye de lo anterior que, para condiciones periódicas: *La energía del estado base es igual a: menos el número de vecinos.*

Ahora, si se observa a Ψ_{40} es fácil ver que está oscilando entre un valor y otro en cada sitio; en la figura se ve que Ψ_{40} está normalizada, entonces se puede escribir como sigue:

$$\Psi_1(n) = \frac{1}{\sqrt{40}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ \cdot \\ \cdot \\ -1 \end{pmatrix}$$

Y multiplicando por la matriz hamiltoniana como se hizo anteriormente,

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ \cdot \\ \cdot \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ 2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ -2 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ \cdot \\ \cdot \\ -1 \end{pmatrix}$$

Concluimos que, para condiciones periódicas *la energía máxima del sistema es igual a: el número de vecinos.*

Nuestro objetivo ahora es dar una expresión mediante la cual se obtenga cualquier eigenfunción de un sistema lineal de N núcleos atómicos, ya que, al tener las eigenfunciones es posible también conocer los eigenvalores correspondientes a la energía, como se ha hecho previamente. Partiendo de la información que se tiene hasta ahora, escribimos las eigenfunciones de la energía más alta y la más baja en términos de exponenciales como sigue:

$$\Psi_1(n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} e^{i0} \\ e^{i0} \\ e^{i0} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ e^{i0} \end{pmatrix}$$

$$\Psi_N(n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} e^{i0} \\ e^{i\pi} \\ e^{i0} \\ e^{i\pi} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

Generalizando proponemos una expresión para las eigenfunciones de la forma:

$$\Psi_m(n) = \begin{pmatrix} e^{ik(m)1} \\ e^{ik(m)2} \\ e^{ik(m)3} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ e^{ik(m)N} \end{pmatrix} \quad (1)$$

Donde n es el sitio en la cadena y m es el índice que corresponde al número de eigenfunción.

Para asegurarnos que esta expresión funciona aplicamos la ecuación de eigenvalores $H\psi = E\psi$.

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik(m)1} \\ e^{ik(m)2} \\ e^{ik(m)3} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ e^{ik(m)N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (e^{ik(m)1})(-e^{ik(m)} - e^{ik(m)(N-1)}) \\ (e^{ik(m)2})(-e^{ik(m)} - e^{-ik(m)}) \\ (e^{ik(m)3})(-e^{ik(m)} - e^{-ik(m)}) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ (e^{ik(m)N})(-e^{ik(m)(1-N)} - e^{-ik(m)}) \end{pmatrix}$$

Donde los paréntesis del lado izquierdo en la última igualdad son nuevamente la Ψ_m que propusimos. Solo hay dos detalles en el resultado anterior, la primera y la última entrada, como era de esperarse debido a las condiciones de frontera impuestas, de modo que, para poder factorizar un término (energía) y obtener nuevamente la eigenfunción Ψ_m se debe cumplir que:

$$e^{-ik(m)N} = 1 \quad (2)$$

Lo que impone nuevas condiciones, ya que para que se cumpla (2) $kN = 2\pi s$ entonces:

$$k = \frac{2\pi s}{N} \quad (3)$$

Con $s = 0, 1, \dots, (N - 1)$.

Así se obtiene el eigenvalor⁴ para la energía:

$$E(k) = -(e^{ik(m)} + e^{-ik(m)}) = -2\cos(ka) \quad (4)$$

Donde hemos definido la posición del N-ésimo núcleo en la cadena como $x = Na$. O también,

$$E(s) = -2\cos\left(\frac{2\pi s}{N}\right) \quad (5)$$

Por un lado se obtuvo la energía mediante graficar a los eigenvalores obtenidos al diagonalizar H (ver Figura 6), por otro lado, obtuvimos una expresión analítica para esa misma

energía. Graficando las dos anteriores se observa que no coinciden estas dos. Ver figura 9. ¿Cuál es la razón por la que no coinciden? La respuesta se encuentra en la degeneración del sistema, si observamos la grafica obtenida por medio de la diagonalización, se ve claramente que a dos eigenvalores les corresponde el mismo valor cada vez.

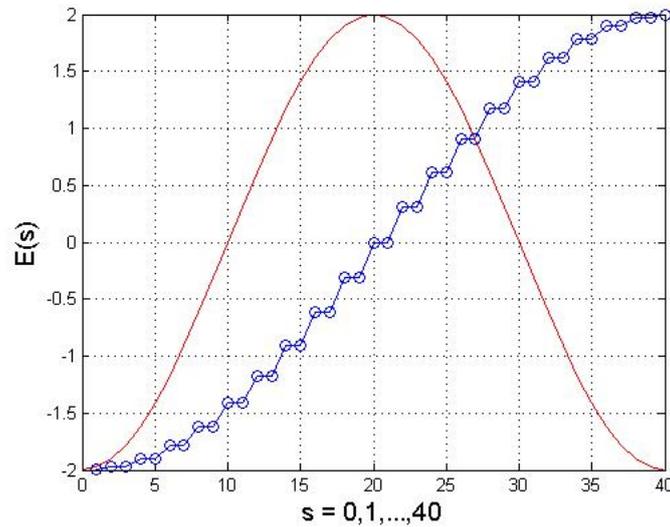


Figura 9: Comparación de resultado numérico (azul) y analítico (rojo) para la energía del sistema.

El modelo que estamos utilizando son N núcleos atómicos con un electrón libre, en mecánica cuántica el análisis para tratar este modelo es la solución del problema de *la partícula libre*, al resolver este problema se encuentra que:

$$\hat{P} = \frac{im}{\hbar} [\hat{x}, \hat{H}]$$

Donde \hat{P} , \hat{x} , \hat{H} son los operadores de momento, de posición y el hamiltoniano del sistema respectivamente.

Conocemos cómo es el operador hamiltoniano \hat{H} , y el objetivo que ahora se tiene es construir al momento mediante esta relación, para este fin se calcula el operador de posición \hat{x} en la base de Weigner, esto es para una matriz de 3×3 :

$$x = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & 2a & 0 \\ 0 & 0 & 3a \end{pmatrix}$$

Operando con el conmutador a las matrices se tiene que,

$$[\hat{x}, \hat{H}] = at \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} - at \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = at \begin{pmatrix} 0 & -1 & -2 \\ 1 & 0 & -1 \\ 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Entonces para el modelo de una cadena lineal de 3 núcleos atómicos el momento está dado por:

$$\hat{P} = \frac{m}{\hbar} at \begin{pmatrix} 0 & -i & -2i \\ i & 0 & -i \\ 2i & i & 0 \end{pmatrix}$$

Para $N = 2$:

$$\hat{P} = \frac{m}{\hbar} at \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Y para $N = 4$:

$$\hat{P} = \frac{m}{\hbar} at \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & -3i \\ i & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i \\ 3i & 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Ahora, para que el momento del sistema se conserve, se debe cumplir que:

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0$$

Sin embargo, al hacer el conmutador del operador \hat{P} con \hat{H} se verifica que no conmutan. Podría argüir que al hacer el conmutador no obtenemos que los operadores conmutan debido a las condiciones de frontera que hemos impuesto desde un principio. Lo que obtenemos en la matriz que representa al operador \hat{P} es la distancia entre sitios, es decir, recordemos una vez más el arreglo de la cadena para 3 núcleos, en él, si no impusieramos la condición de periodicidad, es decir, que el primero de los núcleos tenga como vecino inmediato al tercero, tendríamos que si nos situáramos en el sitio 1, para llegar al sitio 3 habría que recorrer 2 sitios más, ese es el resultado que aparece en la entrada (1, 3) en la matriz de \hat{P} . Nuestras

condiciones requieren un pequeño cambio al respecto, por ello propongamos entonces el siguiente operador de momento, basados en los resultados anteriores para $N = 3$

$$\hat{P} = \frac{m}{\hbar} at \begin{pmatrix} 0 & -i & i \\ i & 0 & -i \\ -i & i & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

cuyos eigenvalores y eigenvectores son, respectivamente:

$$\lambda_1 = -\sqrt{3}$$

$$\lambda_2 = \sqrt{3}$$

$$\lambda_3 = 0$$

$$U = \frac{m}{\hbar} at \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}(-i + \sqrt{3}) & \frac{i}{2}(i + \sqrt{3}) & 1 \\ \frac{i}{2}(i + \sqrt{3}) & -\frac{i}{2}(-i + \sqrt{3}) & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Y el conmutador de \hat{H} y \hat{P} ,

$$[\hat{P}, \hat{H}] = \begin{pmatrix} 0 & -i & i \\ i & 0 & -i \\ -i & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & i \\ i & 0 & -i \\ -i & i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

La matriz U es la matriz de cambio de base que anteriormente ya hemos mencionado, de modo que, una transformación en esta base nos puede regresar una matriz diagonal \hat{P}' cuyas únicas entradas distintas de cero son los eigenvalores de \hat{P} , esta información es de gran importancia, ya que si los eigenvalores son cantidades reales es posible asociarles una cantidad físicamente observable, las matrices que tienen esta propiedad se llaman matrices Hermitianas. Es fácil corroborar que la matriz \hat{P} que hemos propuesto es hermitiana y por lo tanto tiene eigenvalores reales. Lo que a continuación nos interesa es saber si \hat{P} es diagonal en esta base, ya que si lo es, \hat{H} también sería diagonal en esta misma base por que el conmutador de \hat{P} y \hat{H} se anula, en otras palabras, \hat{P} y \hat{H} son observables. Sin embargo, la matriz de cambio de base U no es la misma que se calculó anteriormente, al calcular las eigenfunciones de la matriz H , la explicación que podemos dar al respecto, es que la

base en la que H es diagonal no está completa, pues es una base de eigenfunciones reales, pero es claro que \hat{P} no lo es, y la base que la diagonaliza tampoco lo será, la prueba es que si aplicamos la transformación que hace diagonal a H , que encontramos al principio de estas notas, \hat{P} no es diagonal. Pero, si H fuera diagonal en la base en que \hat{P} también lo es, habremos dado un gran paso, ya que acompletaríamos la base de H . Entonces, apliquemos la transformación a \hat{P} y a \hat{H} .

$$\begin{aligned}
 U\hat{P}U^{-1} &= \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}(-i + \sqrt{3}) & \frac{i}{2}(i + \sqrt{3}) & 1 \\ \frac{i}{2}(i + \sqrt{3}) & -\frac{i}{2}(-i + \sqrt{3}) & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & i \\ i & 0 & -i \\ -i & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{i}{6}(i + \sqrt{3}) & -\frac{i}{6}(-i + \sqrt{3}) & \frac{1}{3} \\ -\frac{i}{6}(-i + \sqrt{3}) & \frac{i}{6}(i + \sqrt{3}) & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} = \\
 &\begin{pmatrix} -\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 U\hat{H}U^{-1} &= \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}(-i + \sqrt{3}) & \frac{i}{2}(i + \sqrt{3}) & 1 \\ \frac{i}{2}(i + \sqrt{3}) & -\frac{i}{2}(-i + \sqrt{3}) & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{i}{6}(i + \sqrt{3}) & -\frac{i}{6}(-i + \sqrt{3}) & \frac{1}{3} \\ -\frac{i}{6}(-i + \sqrt{3}) & \frac{i}{6}(i + \sqrt{3}) & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} = \\
 &\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Lo que acabamos de demostrar es que H es diagonal en la misma base en la que P es también diagonal. Pretendiendo utilizar dicha base para los casos de N núcleos.

Como lo hemos hecho previamente con la energía, buscamos ahora una expresión analítica para el momento P y si aplicamos la ecuación de eigenvalores $P\psi = p\psi$ con 5 y puesto que hemos corroborado que H y P conmutan entonces son diagonales en la misma base y usando 4 llegamos a una expresión como la siguiente:

$$P\psi_m = -\psi(n-1) + \psi(n+1) = (-e^{ik(n-1)} + e^{ik(n+1)})i = -2\text{sen}(ka)e^{ikn} \quad (7)$$

Entonces,

$$p = -2\text{sen}(ka) \quad (8)$$

Con $k = \frac{2\pi s}{N}$ como lo hicimos con la energía anteriormente. Aplicando este resultado para el caso de $N = 3$ tenemos:

$$p_0 = -2\text{sen}\left(\frac{2\pi \cdot 0 \cdot a}{N}\right) = 0$$

$$p_1 = -2\text{sen}\left(\frac{2\pi}{3}\right) = -\sqrt{3}$$

$$p_2 = -2\text{sen}\left(\frac{4\pi}{3}\right) = \sqrt{3}$$

Que son los eigenvalores encontrados al diagonalizar \hat{P}

Probando para $N = 4$:

$$\hat{P} = \frac{m}{\hbar} at \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & i \\ i & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i \\ -i & 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

La matriz de cambio de base y su inversa son:

$$U = \begin{pmatrix} -i & i & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 \\ i & -i & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$U^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{i}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{i}{4} & \frac{1}{4} \\ -\frac{i}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{i}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

El conmutador de \hat{H} y \hat{P} ,

$$[\hat{P}, \hat{H}] = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & i \\ i & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i \\ -i & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & i \\ i & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i \\ -i & 0 & i & 0 \end{pmatrix} =$$

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

Entonces \hat{H} y \hat{P} deben ser diagonales en la misma base.

$$\begin{aligned}
U\hat{P}U^{-1} &= \begin{pmatrix} -i & i & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 \\ i & -i & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & i \\ i & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i \\ -i & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{i}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{i}{4} & \frac{1}{4} \\ -\frac{i}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{i}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
U\hat{H}U^{-1} &= \begin{pmatrix} -i & i & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 \\ i & -i & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & i \\ i & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i \\ -i & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{i}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{i}{4} & \frac{1}{4} \\ -\frac{i}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{i}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Al aplicar la transformación al Hamiltoniano, lo que obtenemos es una matriz que no es diagonal, se obtienen ceros excepto en el bloque representado por:

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

esta es la representación del subespacio \hat{P}_n asociado a los eigenvalores degenerados, por ello es que tiene dimensión 2 ya que en este caso se tienen dos eigenvalores iguales, de hecho, los eigenvalores de \hat{P} y los de \hat{H} son los mismos, y son:

$$\lambda_1 = -\sqrt{-2}$$

$$\lambda_{2,3} = 0$$

$$\lambda_4 = 2$$

Cuando λ es un eigenvalor degenerado de \hat{P} , el bloque que representa a \hat{H} en el subespacio \hat{P}_n , en general, no es diagonal y los eigenvectores que diagonalizan a \hat{P} no diagonalizan a \hat{H} . También se puede probar que la matriz que representa a \hat{P} en el subespacio \hat{P}_n es siempre diagonal e igual a λI , donde I es la matriz identidad. Vamos a usar esta propiedad para encontrar una base de \hat{P}_n compuesta de vectores que también son eigenvectores de \hat{H} . Es posible encontrar en \hat{P}_n una nueva base de eigenvectores en la que \hat{H} sea representado por una matriz diagonal, estos eigenvectores también son de \hat{P} ya que pertenecen al subespacio \hat{P}_n , en otras palabras, siempre es posible escoger en cada subespacio de \hat{P} una base de eigenvectores común a \hat{H} y a \hat{P} .

Lo que se hace, a continuación, es diagonalizar la representación de \hat{H} en la base en que \hat{P} es diagonal, es decir, diagonalicemos:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

La matriz de cambio de base es:

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Que es una base de eigenvectores comunes a ambos operadores, pero estando en el subespacio en que \hat{P} es diagonal.

El caso para $N = 5$, en el que el operador de momento está dado por:

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & i \\ i & 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 & -i \\ -i & 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Cuyos eigenvalores son:

$$\lambda_1 = -\sqrt{\frac{1}{2}(5 + \sqrt{5})}$$

$$\lambda_2 = \sqrt{\frac{1}{2}(5 + \sqrt{5})}$$

$$\lambda_3 = -\sqrt{\frac{1}{2}(5 - \sqrt{5})}$$

$$\lambda_4 = \sqrt{\frac{1}{2}(5 - \sqrt{5})}$$

$$\lambda_5 = 0$$

El hamiltoniano \hat{H} y \hat{P} conmutan. Sin embargo, los eigenvalores de \hat{H} son valores degenerados:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 2 \\ \lambda_2 &= \frac{1}{2}(-1 - \sqrt{5}) \\ \lambda_3 &= \frac{1}{2}(-1 - \sqrt{5}) \\ \lambda_4 &= \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{5}) \\ \lambda_5 &= \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{5})\end{aligned}$$

Pero, se obtiene que la transformación que diagonaliza a \hat{P} , también diagonaliza a \hat{H} . Se puede intuir que el caso de $N = 6$ volverá a tener dificultades, mientras que para el caso $N = 7$ tanto \hat{H} como \hat{P} serán diagonales en la misma base. El gran avance radica en que se está obteniendo una base completa de eigenvectores complejos, que no es suficiente la transformación real que se le aplicaba al hamiltoniano para diagonalizarlo, además es un previo paso para construir la relación de dispersión y extender estos casos a casos más generales.

I. GRAFENO

Ahora nos trasladamos a un espacio bidimensional para escribir el momento del grafeno. El grafeno es conocido por ser un cristal bidimensional con propiedades muy peculiares, ... podemos escribir al momento como:

$$\begin{aligned}(\hat{P}_x)_{jl} &= -\frac{i\hbar}{m}t [x(j) - x(l)] |j|l = \left[-\frac{i\hbar}{m} (e_{jl})_x \right] |j|l \\ (\hat{P}_y)_{jl} &= -\frac{i\hbar}{m}t [y(j) - y(l)] |j|l = \left[-\frac{i\hbar}{m} (e_{jl})_y \right] |j|l\end{aligned}$$

¹ En los ejemplos que resolveremos más adelante se aclararan las condiciones de frontera

² La consideración que permite la validez de este modelo es la no-interacción entre electrones.

³ es decir, H similar a una matriz diagonal D mediante un cambio de base de la forma $H = UDU^{-1}$

⁴ El coeficiente 2 que aparece se debe a la forma en que definimos a las eigenfunciones, ya que nos da 2 veces la parte real de la exponenciales complejas, es decir, dos veces el $\cos(kx)$