

**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO**

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA  
ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA



**Influencia de las correlaciones en las funciones de distribución de los electrones debido a la teoría cinética cuántica aplicado en el análisis de filmes ferromagnéticos expuestos a pulsos láser en femtosegundos**

TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE  
LICENCIADO EN FÍSICA

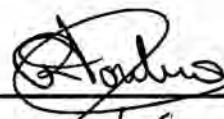
**Johan Zet Briones Paz**

Callao, 20 de julio de 2016  
**PERÚ**



---

Bach. Johan Zet Briones Paz



---

Dr. Richard Toribio Saavedra

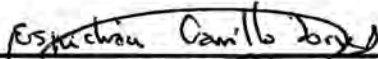
## HOJA DE PRESENTACIÓN

### INFLUENCIA DE LAS CORRELACIONES EN LAS FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN DE LOS ELECTRONES DEBIDO A LA TEORÍA CINÉTICA CUÁNTICA APLICADO EN EL ANÁLISIS DE FILMES FERROMAGNÉTICOS EXPOSTOS A PULSOS LÁSER EN FEMTOSEGUNDOS

**Johan Zet Briones Paz**

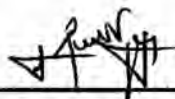
Tesis presentada a consideración del cuerpo de docentes de la facultad de Ciencias Naturales y Matemática de la Universidad Nacional del Callao, como parte de los requisitos para obtener el Título de Licenciado en Física

Aprobado por:



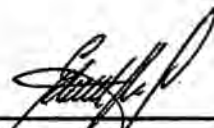
---

Dr. Jorge Abel Espichan Carrillo



---

Lic. Rolando Manuel Vega de la Peña



---

Lic. Edward Vilchez Canchucaya

CALLAO-PERÚ  
JULIO, 2016

# FICHA CARTALOGRÁFICA

**Johan Zet Briones Paz**

**INFLUENCIA DE LAS CORRELACIONES EN LAS FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN DE LOS ELECTRONES DEBIDO A LA TEORÍA CINÉTICA CUÁNTICA APLICADO EN EL ANÁLISIS DE FILMES FERROMAGNÉTICOS EXPOSTOS A PULSOS LÁSER EN FEMTOSEGUNDOS. (2016)**

Xvi 75p. 29.7 cm (UNAC, Licenciado en Física, 2016).

Tesis, Universidad Nacional del Callao, Facultad de Ciencias Naturales y Matemática.

Física

1. UNAC/FCNM II. Título (Serie)

# Índice general

<b>RESUMEN</b>	<b>3</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>4</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>5</b>
<b>1. PLANTEAMIENTO DE LA INVESTIGACIÓN</b>	<b>7</b>
1.1. Determinación del problema . . . . .	7
1.2. Formulación del problema . . . . .	8
1.3. Objetivos de la investigación . . . . .	8
1.4. Justificación . . . . .	9
<b>2. MARCO TEÓRICO</b>	<b>10</b>
2.1. Desmagnetización ultra-rápida . . . . .	10
2.2. Modelado del elemento Níquel ferromagnético . . . . .	12
2.3. Sistema de muchas partículas . . . . .	16
2.4. Formulación del Hamiltoniano . . . . .	19
2.5. Teoría cinética Cuántica . . . . .	20
<b>3. VARIABLES E HIPÓTESIS</b>	<b>32</b>
3.1. Variable de la investigación . . . . .	32
3.2. Operacionalización de variables . . . . .	32
3.3. Hipótesis general e hipótesis específicas . . . . .	33
<b>4. METODOLOGÍA</b>	<b>34</b>
4.1. Tipo de investigación . . . . .	34
4.2. Diseño de la investigación . . . . .	34

4.3. Población y muestra . . . . .	35
4.4. Técnicas e instrumentos de recolección de datos . . . . .	35
4.5. Plan de análisis estadísticos de datos . . . . .	35
<b>5. RESULTADOS</b>	<b>36</b>
5.1. Ecuación de tasa de transición general con los términos de correlación	36
<b>6. DISCUSIÓN DE RESULTADOS</b>	<b>52</b>
6.1. Máxima probabilidad de cambio de espín ( $asf = 1$ ) . . . . .	52
6.2. Obviando términos de correlación . . . . .	53
6.3. Análisis de las distribuciones para diferentes probabilidades de cambio de espín . . . . .	53
<b>7. CONCLUSIONES</b>	<b>58</b>
<b>8. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>60</b>
A. Matriz de consistencia	62
B. Ecuaciones diferenciales inhomogeneas (IDE) para valores espe- rados de tres operadores	63
C. Solución de las IDE bajo la aproximación de Markov	66

# RESUMEN

El comportamiento de la magnetización después de la excitación láser en femtosegundos de Ni, debido a la dispersión de los electrones excitados en fonones, es calculado comúnmente con una combinación de la regla de oro de Fermi y la ecuación de movimiento de Boltzmann, ambos basados en la aproximación de Markov. El presente trabajo presenta el análisis de las correlaciones, cuyo comportamiento es consecuencia del uso de la teoría cinética cuántica con la teoría de la matriz de densidad aproximada, y que a su vez no es considerada en la teoría de Fermi-Boltzmann. El análisis se hace para un Hamiltoniano que describe la desmagnetización ultra-rápida de un material ferromagnético después de la excitación con un pulso láser de femtosegundos, debido a dispersiones del tipo electrones-fonones. Se verá una explicación cualitativa y cuantitativa debido a dicho efecto.

Estas correlaciones representan una gran influencia en las funciones de distribución para los estados de un solo electrón. Las funciones de distribución  $f$  muestran distorsiones como una función de la energía de un solo electrón, con regiones donde  $f$  es ligeramente mayor que 1, incluso para tiempos en los que el sistema se ha acercado al equilibrio térmico. Se muestra que estas distorsiones surgen debido a las correlaciones  $\zeta_k$ , que también exhiben distorsiones. La función de distribución modificada  $f' = f + asf \cdot \text{Re}\{\zeta_k\}$ , donde  $asf$  es la probabilidad de que un giro del espín del electrón se produzca durante una dispersión de electrones-fonones, también presenta distorsiones para la situación de no equilibrio, pero es una distribución de Fermi-Dirac cuando se acerca al equilibrio.

# ABSTRACT

The behavior of the magnetization after femtosecond laser excitation of Ni, due to the scattering of excited electrons in phonons, is commonly calculated with a combination of Fermi's golden rule and the equation of motion of Boltzmann, both based on Markov approximation. This paper presents the analysis of correlations, whose behavior is a result of using quantum kinetic theory with density matrix approximation, and which in fact is not considered in the theory of Fermi-Boltzmann. The analysis is made for a Hamiltonian describing the ultrafast demagnetization of ferromagnetic material after excitation with femtosecond laser pulse due to electron-phonon dispersion type. A qualitative and quantitative explanation of this effect will be shown.

These correlations represent a major influence on the distribution functions for single-electron states. The distribution functions  $f$  show distortions as a function of the energy of a single electron, with regions where  $f$  is slightly greater than 1, even for times when the system is at thermal equilibrium. Showing that these distortions arise due to correlations  $\zeta_k$ , which also exhibited distortions. The modified distribution function  $f' = f + asf \cdot \mathbf{Re} \{ \zeta_k \}$ , where  $asf$  is the probability that the spin of the electron produced during electron-phonon scattering changes, presents distortions for the nonequilibrium situation, but it is a Fermi-Dirac distribution as it approaches equilibrium.



# INTRODUCCIÓN

Cuando una película ferromagnética es irradiada con un pulso láser óptico en femtosegundos (fs), existe una desmagnetización dentro de los primeros 100 fs, seguido por una remagnetización que lleva al sistema a su estado inicial de equilibrio en una escala de tiempo mucho mayor [1, 2, 3]. A pesar de las muchas investigaciones, tanto experimentales como teóricas, los mecanismos detallados acerca de este efecto no están totalmente claros. Procesos de cambio de espín durante las dispersiones de electrones con otros electrones o con cuasipartículas (fonones [4], magnones [5]) son tomados como posibles mecanismos. Generalmente estas dispersiones son descritas a través de la regla de oro de Fermi y las ecuaciones de transición de Boltzmann (teoría FB) las cuales están basadas en la aproximación de Markov (ver Ref. [4]). La regla de oro de Fermi es solamente válida para una escala de tiempo que es considerablemente más largo que el tiempo de oscilación de la perturbación, porque sólo entonces la función Sinc ( $\text{sen}(x)/x$ ), que aparece en la teoría de perturbaciones, puede ser reemplazada por la función de distribución de Dirac. Sin embargo, la escala de tiempo de unos 100 fs es mucho menor que el tiempo de oscilación típico de las cuasipartículas, y por lo tanto la pre-condición para la aplicación de la teoría FB en la dispersión de electrones hacia las cuasipartículas no es suficiente. Una descripción más precisa es posible usando la teoría cinética cuántica como la teoría de la matriz de densidad (Teoría DM por sus siglas en inglés) [6, 7, 8].

La idea principal es, entonces, utilizar otro tipo de cálculo y ver si el resultado es el mismo o no y por qué. Esta teoría alternativa y sus resultados se estudiaron primero en semiconductores [8]. Schilp et. al. mostró resultados muy interesantes en el análisis de un semiconductor irradiado con un pulso láser de femtosegundos bajo un enfoque cinético cuántico basado en el formalismo de la matriz de densidad. Esta investigación dió algunas pistas sobre los posibles resultados que se puedan esperar usando un tipo diferente de cálculo de la regla de oro de Fermi.

El objetivo principal de esta tesis es complementar los resultados obtenidos con esta nueva técnica, dando explicación a los términos adicionales del tipo cinético cuántico, es decir, los términos de correlación.

## Descripción general de la tesis

En el primer capítulo se da el planteamiento del problema a resolver, formulando el problema y los objetivos ha alcanzar.

En el segundo capítulo se explica la teoría. Este capítulo contiene una breve introducción a la desmagnetización ultra-rápida y explicación de la interacción electrón-fonones como su mecanismo microscópico. Siguiendo con algunas características de níquel que se utilizan para las simulaciones, así como el método matemático utilizado para el sistema de muchas partículas que va a ser modelada, terminando con la construcción del Hamiltoniano.

El tercer capítulo presenta las variables e hipótesis, donde brevemente se explica cómo encontrar la ecuación de movimiento necesaria para la modelización de la desmagnetización ultra-rápida, ya que las ecuaciones se obtuvieron en un trabajo anterior [9]. También se destacan las consideraciones que deben tomarse a fin de encontrar una solución analítica y las requeridas para aproximar la cinética cuántica a regla de oro de Fermi.

En el cuarto capítulo se da la metodología utilizada, así como también los procedimientos y análisis utilizados.

En el quinto capítulo se presentan todos los resultados obtenidos a partir del análisis analítico, y en el sexto capítulo la discusión de los mismos. Finalmente, en el séptimo capítulo se enumeran las conclusiones de los resultados presentados.

En el anexo todas las ecuaciones de movimiento de los valores esperados de tres operadores son dados, así como la matriz de consistencia.

# Capítulo 1

## PLANTEAMIENTO DE LA INVESTIGACIÓN

### 1.1. Determinación del problema

Una de las reglas fundamentales de la mecánica cuántica es el llamado principio de exclusión de Pauli. Este principio establece que no más de un electrón puede ocupar el mismo estado al mismo tiempo. Este principio se aplica solamente para partículas cuya función de onda sea antisimétrica, en otras palabras, fermiones. A continuación se demostrará si un sistema de varias partículas también mantiene este principio, empezando con un estado arbitrario  $|\Psi(t)\rangle$  el cual puede ser expresado como función de los vectores bases fermiónicos de Fock  $|i\rangle$ .

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i d_i(t) |i\rangle, \quad (1.1)$$

con los coeficientes dependientes del tiempo  $d_i(t)$ , los cuales están regidos por el principio de normalización

$$\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \sum_{i,j} d_i^* d_j \langle i|j\rangle = \sum_i d_i^* d_i \langle i|i\rangle = \sum_i |d_i|^2 = 1. \quad (1.2)$$

La probabilidad de que un estado electrónico  $|k\rangle$  este ocupado es

$$p_k = \langle\Psi(t)|c_k^\dagger c_k|\Psi(t)\rangle = \sum_{i,j} d_i^* d_j \langle i|c_k^\dagger c_k|j\rangle. \quad (1.3)$$

Usando la acción de los operadores de creación y aniquilación  $c_k^\dagger$ ,  $c_k$  en los vectores base, se obtiene

$$p_k = \sum_i |d_i|^2 \langle i|c_k^\dagger c_k|i\rangle \leq \sum_i |d_i|^2 \leq 1 \quad (1.4)$$

al considerar un sistema interactivo de varios electrones con una perturbación «externa» debido a la interacción electrón-fonón. Por un lado, se puede resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y obtener la expresión para  $d_i(t)$ ; pero por el otro, en la teoría de la densidad de matriz una incoherente mixtura de estados  $|\Psi\rangle$  es considerada, lo cual es generado debido al acoplamiento con el reservorio o «heat bath». En el primer tipo de teoría se obtiene una probabilidad dependiente del tiempo  $p_k(t) \leq 1$ . En el segundo tipo uno obtiene números de ocupación dependientes del tiempo los cuales también tienen que ser mas pequeño o igual que 1, porque cada  $|\Psi\rangle$  de la mixtura incoherente tiene números de ocupación menores o iguales a 1.

Esto significa que los valores físicos de la función de distribución para los electrones no deberían ser mayores que 1 y mucho menos negativos. Es en este sentido que el presente proyecto está orientado a encontrar por qué las fluctuaciones aparecen y como afectan al estudio del sistema simulado a través de la teoría cinética cuántica.

## 1.2. Formulación del problema

Se pretende resolver y analizar los siguientes interrogantes:

1. ¿Es la aparición de estas fluctuaciones en la función de distribución para electrones un error numérico, el cual pueda ser corregido?
2. ¿Será posible que la aparición de estas fluctuaciones en la función de distribución para electrones afectan la correcta simulación del sistema analizado?

## 1.3. Objetivos de la investigación

### Objetivo general

Estudiar e interpretar como y por qué estas fluctuaciones aparecen en las funciones de distribución y encontrar las posibles limitaciones en el uso de la teoría cinética cuántica en un sistema ferromagnético.

### Objetivos específicos

1. Estudiar la dinámica en no-equilibrio de la desmagnetización de un sistema ferromagnético.
2. Estudiar la teoría cinética cuántica en el marco de sistemas de varias partículas.

3. Estudiar si alguna ecuación general puede ser derivada, tal que describa estas fluctuaciones.
4. Estudiar el lenguaje de programación C++ para realizar las simulaciones.

## 1.4. Justificación

La justificación para realizar este estudio radica en lo pionero que es el estudio de materiales ferromagnéticos interactuando con pulsos láser en femtosegundos a través de la teoría cinética cuántica. Explicar y/o amortiguar las fluctuaciones en la función de distribución para electrones, complementando la posible implementación de este nuevo tipo de cálculo para el uso de la teoría FB, dando la certeza a la comunidad científica de poder decidir si el uso de la teoría FB ha sido la correcta o no en la escala de tiempo de los femtosegundos.

## Capítulo 2

# MARCO TEÓRICO

### 2.1. Desmagnetización ultra-rápida

Varios experimentos realizados en materiales ferromagnéticos, después de haber sido expuesto a pulsos láser, exploran la capacidad de manipular su magnetización. Tales experimentos mostraron una desmagnetización dentro de la región pico-segundos, como la que se encuentra por Vaterlaus et al [10] para Gd, seguido de una re-magnetización que alcanza el estado de equilibrio después de algún tiempo después. Uno en particular, realizado en 1996 por Beaurepaire [1] mostró una desmagnetización de Ni dentro 1 ps, lo que eventualmente dió lugar a nuevos experimentos en metales de transición ferromagnéticos (Fe, Ni, Co) [11] observando así una reducción de su tiempo de desmagnetización alrededor de 100 fs.

Esta gran diferencia en los tiempos de desmagnetización plantea preguntas con respecto a cuál es el mecanismo microscópico para la transferencia de momento angular, en tan poco tiempo, desde el sistema de selección para los demás grados de libertad. Para el alcance de esta tesis, se considerará el mecanismo más aceptado dentro de los científicos, la transferencia de momento angular a través del acoplamiento espín-órbita, debido al tipo de dispersión Elliott-Yafet entre los electrones y fonones.

#### 2.1.1. Conservación del momento angular

Partamos de la conservación del valor esperado del momento angular total, esto implica que el cambio en el momento angular debe ser anulado por los cambios de todos los demás valores esperados del momento angular del sistema:

$$\Delta \langle \hat{J} \rangle = \Delta \langle \hat{S}_{e^-} \rangle + \Delta \langle \hat{S}_{\text{magnons}} \rangle + \Delta \langle \hat{L}_{e^-} \rangle + \Delta \langle \hat{L}_{\text{Red}} \rangle + \Delta \langle \hat{L}_{\text{fotón}} \rangle \quad (2.1)$$

Se denotan así los operadores de momento angular total  $\langle \hat{J} \rangle$ , momento angular electrón-espín  $\langle \hat{S}_{e^-} \rangle$ , momento angular de magnones  $\langle \hat{S}_{\text{magnons}} \rangle$ , momento angular orbital de electrones  $\langle \hat{L}_{e^-} \rangle$ , momento angular de fonones  $\langle \hat{L}_{\text{Red}} \rangle$  y momento angular de fotones  $\langle \hat{L}_{\text{fotón}} \rangle$ .

La evidencia experimental nos puede ayudar a reducir la ec. (2.1). Por ejemplo, un experimento usando una técnica de rayos X (X-ray Magnetic Circular Dichroism) en películas delgadas de Ni, realizados por Stamm (Ref. [12]), mostró que la reducción del momento angular de giro no condujo a un aumento del momento orbital electrónico, de hecho, disminuyó pero no en una cantidad considerable, es decir, se puede suponer que  $\Delta \langle \hat{L}_{e^-} \rangle \approx 0$ .

Otro aspecto a tener en cuenta es la pequeña contribución hecha por el pulso de láser, ya que la desmagnetización es muy pequeña inmediatamente después de la acción del pulso láser en contacto con el material ferromagnético [13], que conduce a la suposición de que  $\Delta \langle \hat{L}_{\text{fotón}} \rangle \approx 0$ .

La dispersión de electrones exclusivamente a fonones da sólo una pequeña contribución a la desmagnetización [14]. En la Ref. [14] actualmente se investiga si una combinación de dispersiones en magnones y fonones puede conducir a una mayor contribución de la dispersión exclusivamente a fonones. De todos modos, se requiere una dispersión en fonones. En la siguiente descuidamos la contribución de dispersiones exclusivamente de magnones.

$\Delta \langle \hat{L}_{\text{Red}} \rangle$  es el cambio de la cantidad de movimiento angular de la red debido a la transferencia de momento angular del sistema de electrones para fonones. En total tenemos:

$$\Delta \langle \hat{J} \rangle = \Delta \langle \hat{S}_{e^-} \rangle + \Delta \langle \hat{L}_{\text{Red}} \rangle. \quad (2.2)$$

Esta expresión nos dice que la transferencia de momento angular va desde el sistema de espines electrónicos hacia la red. Debido a este supuesto, nuestro análisis de la desmagnetización ultra-rápida requerirá la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con la interacción electrón-fonón.

### 2.1.2. Teoría de Elliott-Yafet

La teoría Elliott-Yafet propone que la transferencia de momento angular de los electrones a la red está mediada por el acoplamiento espín-órbita. Una consecuencia de este supuesto es que en algunos puntos de la superficie de Fermi el giro no se puede separar en estados «puramente» espín hacia arriba y espín hacia abajo (Para más detalles, véase sec. 2.5.1), sino que consiste en una mezcla de la dirección de giro dominante y otra parte de la opuesta. Por lo tanto el electrón-espín no se conserva en un evento de dispersión, especialmente para los electrones en partes especiales de la zona de Brillouin que son llamados puntos calientes [15].

Esto significa que la variable de giro para un solo electrón no conmutan con el Hamiltoniano del sistema, lo que lleva a utilizar estados propios de un solo electrón que son una mezcla de estados espín hacia arriba ( $|\uparrow\rangle$ ) y espín hacia abajo ( $|\downarrow\rangle$ ).

$$|\Psi_{j,k}\rangle = (|a_{j,k}(\mathbf{r})\rangle |\uparrow\rangle + |b_{j,k}(\mathbf{r})\rangle |\downarrow\rangle) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.3)$$

donde  $|a_{j,k}(\mathbf{r})\rangle$ ,  $|b_{j,k}(\mathbf{r})\rangle$  son funciones periódicas de  $\mathbf{r}$  para una determinada  $j, \mathbf{k}$ . Debido a la normalización de  $|\Psi_{k,\uparrow}\rangle$  y  $|\Psi_{k,\downarrow}\rangle$

$$\langle a_{j,k}(\mathbf{r}) | a_{j,k}(\mathbf{r}) \rangle + \langle b_{j,k}(\mathbf{r}) | b_{j,k}(\mathbf{r}) \rangle = 1 = P_{j,k}^\uparrow + P_{j,k}^\downarrow \quad (2.4)$$

Donde  $P_{j,k}^\uparrow$  y  $P_{j,k}^\downarrow$  son las probabilidades de encontrar el electrón que es en el estado de  $\Psi_{j,k}$  con espín hacia arriba o espín hacia abajo.

Se define el carácter giro dominante denotando estados con  $P_{j,k}^\uparrow > P_{j,k}^\downarrow$  como estados con espines dominantes hacia arriba y los que tienen  $P_{j,k}^\uparrow < P_{j,k}^\downarrow$  como estados con espines dominantes hacia abajo.

El llamado espín-mixto  $b_{j,k}^2$

$$b_{j,k}^2 = \min(P_{j,k}^\uparrow, P_{j,k}^\downarrow). \quad (2.5)$$

En una estructura de banda si el electrón es dispersado por la dispersión de electrones-fonones, hay una probabilidad de que el giro cambie. Este proceso se llama dispersión Elliott-Yafet y la probabilidad de que la dispersión cambie de giro es  $a_{sf}$ . Una aproximación para encontrar este valor es tomar la probabilidad de dispersión independiente de los vectores de ondas electrónicos del estado inicial y el estado final. Esta aproximación es una consecuencia de la suposición de que  $a_{sf}$  es dado por  $a_{sf} = pb^2$  con (dependiendo del material [16, 17])  $1 \leq p \leq 10$ , más probablemente  $p$  cerca de 4 [18], donde el factor de espín-mixto  $b^2$  representa un promedio del valor de  $b_k^2$ , en la ec. (2.5), sobre todos los estados implicados en los procesos de dispersión.

## 2.2. Modelado del elemento Níquel ferromagnético

Un modelo simple que puede dar lugar a ferromagnetismo es el modelo de Hubbard. Se puede describir el comportamiento de la banda y la interacción de Coulomb en el lugar. La descripción de los estados propios de electrones se hace dentro del marco de la CLOA (combinación lineal de orbitales atómicos).



La energía electrónica del modelo de Hubbard se da [19] por:

$$E = \sum_{i,j} f(t_{ij}) + \sum_i g(U_i), \quad (2.6)$$

donde el primer término del lado derecho es la energía debido al «salto» de los electrones entre diferentes sitios, pero sin cambiar el giro, con  $t_{ij}$  como el parámetro de salto que resulta de las interacciones con los diferentes sitios, mientras que el segundo término describe la interacción repulsión de Coulomb en el lugar entre las partículas que están en el mismo sitio en función del parámetro de la Hubbard  $U_i$ . La ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano Hubbard, que da en principio, la forma de la ec. (2.6) para la energía, puede ser resuelto en casos especiales bajo ciertas aproximaciones; en particular, la que se utiliza para las simulaciones en esta tesis se explica en los apartados siguientes. Sin embargo, primero se ahondará en el material de nuestro análisis: Níquel.

### 2.2.1. Níquel

Níquel (Ni) se usa a menudo en experimentos de desmagnetización ultra-rápida. De hecho, es el material que experimenta una desmagnetización dentro de 100 fs, que en comparación con la observada en hierro (Fe) y cobalto (Co) es más rápido. Desde Ni, Fe y Co comparten el mismo grupo de la tabla periódica, se puede pensar que los resultados de las simulaciones para Ni son similares a los esperados para Fe y Co. La siguiente tabla contiene algunas propiedades de níquel que se utilizaron en la elaboración de esta tesis.

Configuración átomo libre:	$18 [Ar] 3d^8 4s^2$
Temperatura de Curie( $T_c$ ):	627 K
Estructura cristalina	Face centered cubic (FCC)
Constante de red	$a = 3.52 \text{ \AA}$
Vectores primitivos	$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (\hat{e}_y + \hat{e}_z)$ $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (\hat{e}_x + \hat{e}_z)$ $\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2} (\hat{e}_x + \hat{e}_y)$
momento magnético por átomo( $T = 293 \text{ K}$ )	$0.616 \mu_B$

Cuadro 2.1: Propiedades de níquel utilizados para las simulaciones en esta tesis [20, 21].

### 2.2.2. Modelo tight-binding

Vamos a centrarnos en el primer término de la ec. (2.6). Se puede simplificar, por ejemplo, después de considerar sólo el potencial de sitios-vecinos más cercanos, obteniéndose:

$$\sum_{i,j} f(t_{ij}) = \epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 - t \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j}, \quad (2.7)$$

con  $\epsilon_0$  que es la energía del electrón en el modelo de átomo libre, que por conveniencia se puede considerar como  $\epsilon_0 = 0$ , y  $\mathbf{R}_j$  son los vectores de posición de los vecinos más cercanos. El parámetro de «salto» corresponde a las integrales de solapamiento y puede ser tomado como un valor proporcional al ancho de banda ( $t_{ij} \rightarrow t$ ). En particular para Ni el parámetro de salto es  $t = 2.7 \text{ eV}$  (calculado en la Ref.[22]).

La periodicidad exhibida en la ec. (2.6) es de vital importancia, ya que surgen efectos característicos en el espectro de energía (bandas de energía). Teniendo en cuenta un modelo tridimensional y las propiedades en Tab. 2.1, un resumen sobre los sitios vecinos desde el origen en la ec. (2.7) se obtiene:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -4t \left[ \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \right], \quad (2.8)$$

donde  $\mathbf{k}$  es un vector tridimensional en el espacio recíproco y restringido en la primera zona de Brillouin.

### 2.2.3. El modelo de Stoner-Wohlfarth

El último término en la ec. (2.6), que es la fuerza de la repulsión de Coulomb de los electrones, puede interpretarse como la interacción sentida cuando dos partículas de espín opuesto se encuentran en el mismo sitio ( $U_i \rightarrow U$ ). El modelo de Stoner-Wohlfarth asume dos bandas asociadas a los diferentes giros (espín hacia arriba y espín hacia abajo), cuyos estados se ocuparon de acuerdo con la distribución estadística de las partículas. En el modelo original de Stoner-Wohlfarth los estados de las dos bandas tienen estados de espín exactos, mientras aquí consideramos bandas con los estados de espín mixto que son espín hacia arriba dominantes y espín hacia abajo dominante. Para fermiones la distribución de Fermi-Dirac:

$$f_{FD}(\epsilon_{\mathbf{k}}, \mu, T_e) = \frac{1}{e^{\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{k_B T_e}\right)} + 1} \quad (2.9)$$

y para los bosones la distribución de Bose-Einstein:

$$f_{BE}(\epsilon_{ph}, T_{ph}) = \frac{1}{e^{\left(\frac{\epsilon_{ph}}{k_B T_{ph}}\right)} - 1} \quad (2.10)$$

donde  $T_e$  y  $T_{ph}$  son las temperaturas de los electrones y fonones respectivamente,  $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  es la relación de dispersión del sistema y  $\epsilon_{ph}$  es la energía del fonón, y  $\mu$  es el potencial químico.

Una división entre las dos bandas de los estados electrónicos expresada como  $U_{exch}$ , tal y como se observa en Fig. 2.1, se genera por la interacción de intercambio.

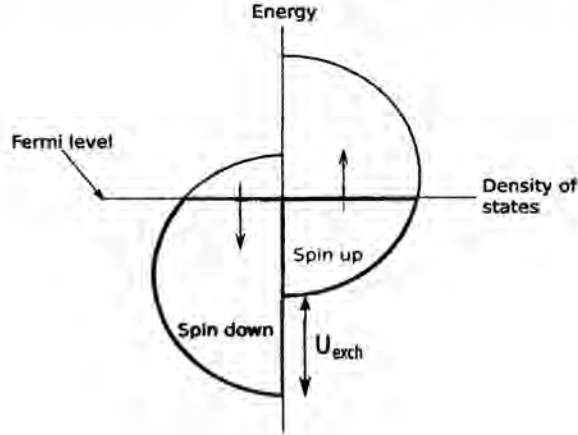


Figura 2.1: Densidad de estados de espín hacia arriba y espín hacia abajo son aproximados por un semicírculo.

Cada banda tiene su propia relación de dispersión de electrones  $\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k})$  y  $\epsilon_{\downarrow}(\mathbf{k})$ , ya que estas dos bandas se dividen por un valor llamado intercambio de división ( $U_{exch}$ ). En este sentido, se puede hacer una construcción equivalente al volver a normalizar los niveles de un electrón debido a las interacciones de los electrones con el mismo espín. Para la nueva normalización de las energías de electrones hacemos el siguiente ansatz [23]:

$$\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) + U \cdot \left( \frac{n_{\uparrow}}{N} \right), \quad (2.11)$$

$$\epsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) + U \cdot \left( \frac{n_{\downarrow}}{N} \right), \quad (2.12)$$

con  $\epsilon(\mathbf{k})$  que es la energía de un electrón dado por la ec. (2.8),  $n_{\uparrow}$  y  $n_{\downarrow}$  son los números de electrones con espín hacia arriba y hacia abajo, y  $N$  es el número de átomos. Teniendo en cuenta el valor de la división de intercambio  $U_{exch}$  como la diferencia entre las energías de dispersión para los electrones con espín sólo arriba y sólo abajo, se produce la siguiente fórmula para el lado derecho de ec. (2.6):

$$\begin{aligned} g(U_i) &= \epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) - \epsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}) \\ &= U \cdot (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) \end{aligned} \quad (2.13)$$

con  $n_{\uparrow} = n^{\uparrow}/N$  y  $n_{\downarrow} = n^{\downarrow}/N$  que representa el número total de ocupación por átomo y principalmente por electrones con espín hacia arriba y abajo, respectivamente, y  $U$  es el parámetro de Hubbard.

Ec. (2.13) da la primera relación entre la diferencia de los estados ocupados por dos bandas, y contiene las cantidades características del material ( $U$  y  $t$  a través de ec. 2.8).

### 2.3. Sistema de muchas partículas

Queremos tratar el caso de varias partículas. Para un sistema de  $N$  partículas se sabe que vamos a tener un espacio de Hilbert, que es:

$$H_N = \bigotimes_{i=1}^N H_i \quad (2.14)$$

con  $H_i$  que es el espacio de Hilbert de una sola partícula y una base completa  $|\alpha_i\rangle$  y donde el símbolo  $\otimes$  es la suma. La base completa de ec. (2.14) está dada por

$$\{|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle\} = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \cdots |\alpha_N\rangle, \quad (2.15)$$

donde el símbolo  $\otimes$  ahora se entiende el producto tensorial directa de los estados de partícula simple  $|\alpha_j\rangle$ . Desde aquí tenemos que resolver la ecuación de Schrödinger que corresponde a  $N$  partículas, es decir,  $\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N)$ . Sin embargo, la función de onda debe indicarse correctamente como antisimétrica o simétrica, así como ser normalizado, haciendo de este tratamiento muy complicado. Para ilustrar esto vamos a analizar el sistema de dos partículas:

$$|\alpha, \beta\rangle = (|\alpha(1)\rangle |\beta(2)\rangle \pm |\alpha(2)\rangle |\beta(1)\rangle) \quad (2.16)$$

donde el signo  $\pm$  se elige de acuerdo al sistema simétrico (bosones) o antisimétrico (fermiones) y el ket  $|\alpha, \beta\rangle$  representa la primera partícula en el estado  $\alpha$  y la segunda en  $\beta$ , y ambos están normalizados.

Si tratamos a un mayor número de partículas, la expresión de la función de onda se vuelve bastante grande, ya que el número de términos de la función de onda aumenta a medida de  $N!$  debido a las diferentes permutaciones que aparecerán, el tiempo para hacer frente a las funciones de onda que contiene  $10^{23}!$  términos es bastante problemático.

Por otro lado, si tenemos en cuenta el hecho de que las partículas son indistinguibles, el único requisito para conocer completamente el estado del sistema reside en la idea de cuántas partículas están en un estado cuántico dado. Por esta razón,

se define un espacio en el que puede existir un número arbitrario de partículas. Teniendo en cuenta el espacio de Hilbert  $H_N$  de la ecuación (2.14), podemos definir:

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{+\infty} H_N \quad (2.17)$$

donde  $\mathcal{F}$  se llama espacio de Fock y describe la suma de todos los espacios de N-partículas de Hilbert con diferente número de partículas. Así, podemos caracterizar la función de onda del sistema por parte del set de números  $n_1, n_2, \dots$ , donde el número total de partículas en el sistema es  $N = n_1 + n_2 + \dots$ :

$$|\Psi_N\rangle = \sum_{\{n_j\}} \langle n_1, n_2, \dots, n_\gamma | \Psi_N \rangle |n_1, n_2, \dots, n_\gamma\rangle \quad (2.18)$$

donde las funciones de base  $|n_1, n_2, \dots\rangle$  son ortogonales y normalizadas de acuerdo a:

$$\langle n_1, n_2, \dots, n_\gamma | n'_1, n'_2, \dots, n'_\gamma \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_\gamma n'_\gamma} \quad (2.19)$$

Con el fin de generar elementos en esta base tenemos que utilizar los operadores que incrementen y / o reduzcan el número de partículas en nuestro sistema.

### 2.3.1. Operador de creación y aniquilación

Estos operadores nos permitirán cambiar el número de partículas que se describen en nuestro sistema. Dependiendo de las partículas la definición de estos operadores será diferente.

#### Bosones

Definamos el operador de creación  $\hat{b}_i^\dagger$  y el de aniquilación  $\hat{b}_i$  operadores para bosones por su acción sobre los estados de forma completa en el espacio de Fock:

$$\hat{b}_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_\gamma\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_\gamma\rangle. \quad (2.20)$$

$$\hat{b}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_\gamma\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_\gamma\rangle. \quad (2.21)$$

Se puede demostrar a partir de las ecuaciones (2.20) y (2.21) que tanto los operadores  $\hat{b}_i^\dagger$  y  $\hat{b}_i$  son conjugados hermíticos. Otra propiedad importante es que la acción del operador de aniquilación  $\hat{b}_i$  en un estado vacío es cero

$$\hat{b}_i |n_1, n_2, \dots, n_i = 0, \dots, n_\gamma\rangle = 0, \quad (2.22)$$

asegurando así que los estados no físicos no se generan. A partir de las ecuaciones (2.20) y (2.21) también se puede establecer ciertas relaciones de conmutación mediante la aplicación de los operadores de dos veces la misma base pero en dos estados diferentes:

$$\begin{aligned} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, n_j, \dots, n_\gamma\rangle &= \hat{b}_i^\dagger \sqrt{n_j + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i, n_j + 1, \dots, n_\gamma\rangle, \\ &= \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, n_j + 1, \dots, n_\gamma\rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Se puede demostrar también que  $\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i^\dagger$  da exactamente el mismo resultado de la ec. (2.23). Que conduce a la siguiente relación:

$$[\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i^\dagger = 0. \quad (2.24)$$

Siguiendo el mismo mecanismo se puede demostrar las siguientes relaciones:

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = \delta_{ij}, \quad (2.25)$$

$$[\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0, \quad (2.26)$$

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = 0. \quad (2.27)$$

## Fermiones

Definamos los operadores de creación  $\hat{C}_i^\dagger$  y de aniquilación  $\hat{C}_i$  de fermiones de una manera similar, pero como en el caso de los fermiones las dos únicas ocupaciones disponibles son  $n_i = 0$  o  $n_i = 1$ , las relaciones entre los operadores son:

$$[\hat{C}_i, \hat{C}_j^\dagger]_+ = \hat{C}_i \hat{C}_j^\dagger + \hat{C}_j^\dagger \hat{C}_i = \delta_{ij}, \quad (2.28)$$

$$[\hat{C}_i^\dagger, \hat{C}_j^\dagger]_+ = 0, \quad (2.29)$$

$$[\hat{C}_i, \hat{C}_j]_+ = 0. \quad (2.30)$$

## 2.4. Formulación del Hamiltoniano

En sec. 2.1.1 se discutió que hay una transferencia de momento angular desde el sistema de espín electrónico a la red. El Hamiltoniano en segunda cuantización [24], utilizando el hecho de que estamos modelando un sólido, utilizará los índices  $\mathbf{k}$  (onda-vector) y  $j$  (banda), en lugar de los utilizados en sec. 2.3. Para la dispersión de los electrones en los fonones, estas consideraciones resultan en:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{\text{ph}} + \hat{H}_{e-\text{ph}}$$

$$\hat{H}_e = \sum_{j,\mathbf{k}} \epsilon_{j,\mathbf{k}} \hat{C}_{j,\mathbf{k}}^\dagger \hat{C}_{j,\mathbf{k}} \quad (2.31)$$

$$\hat{H}_{\text{ph}} = \sum_{\mathbf{q},\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda} \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e-\text{ph}} = & \sum_{j,j',\mathbf{k},\mathbf{q},\lambda} g_\lambda(\mathbf{q}) [(1 - asf) \delta_{j,j'} + asf] \hat{C}_{j',\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{C}_{j,\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda} + \\ & \sum_{j,j',\mathbf{k},\mathbf{q},\lambda} g_\lambda^*(\mathbf{q}) [(1 - asf) \delta_{j,j'} + asf] \hat{C}_{j',\mathbf{k}}^\dagger \hat{C}_{j,\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda}^\dagger \end{aligned} \quad (2.33)$$

donde  $\hat{H}_e$  y  $\hat{H}_{\text{ph}}$  son los Hamiltonianos de los electrones y fonones libres,  $\epsilon_{j,\mathbf{k}}$  son las energías de los electrones en los estados de un sólo electrón  $|j, \mathbf{k}\rangle$ ,  $\hat{C}_{j,\mathbf{k}}^\dagger$  y  $\hat{C}_{j,\mathbf{k}}$  son los operadores de creación y de aniquilación de electrones,  $\omega_{\mathbf{q},\lambda}$  son las frecuencias de fonones con vector de onda  $\mathbf{q}$  y el vector de polarización  $e_{\mathbf{q},\lambda}$ , además  $\hat{b}_{\mathbf{q},\lambda}^\dagger$  y  $\hat{b}_{\mathbf{q},\lambda}$  son los operadores de creación y aniquilación de fonones, y  $\hat{H}_{e-\text{ph}}$  es el Hamiltoniano para la dispersión de electrones y fonones con  $j, j' = 1, 2$ , que describe los procesos de dispersión de  $|j, \mathbf{k}\rangle$  a  $|j', \mathbf{k} + \mathbf{q}\rangle$  por la absorción de un fonón y desde  $|j, \mathbf{k} + \mathbf{q}\rangle$  a  $|j', \mathbf{k}\rangle$  por la emisión de un fonón.

En la ecuación (2.33)  $g_\lambda(\mathbf{q})$  es el elemento de matriz de dispersión calculada en Ref. [25] para dispersiones sin cambio de espín.

$$g_\lambda(\mathbf{q}) = -ie \sqrt{\frac{4\pi\hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}}{2V(|\mathbf{q}|^2 + k_0^2)}} \quad (2.34)$$

donde  $V$  es el volumen en el espacio recíproco y  $k_0$  es el vector de onda Thomas-Fermi, que representa la proyección del elemento de matriz para la interacción de Coulomb entre dos electrones libres con vectores de onda  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$  con  $\mathbf{q} = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ . Se generaliza en la ec. (2.33) para incluir la dependencia del elemento de matriz sobre los estados de espín de los estados electrónicos inicial y final. Si la dispersión es entre las bandas de espín hacia arriba ( $j = 1$ ) y espín hacia abajo ( $j = 2$ ) en ese caso  $g_\lambda(\mathbf{q})$  se multiplica por  $asf = \sqrt{a_{sf}}$  donde  $a_{sf}$  es la probabilidad de dispersión con cambio de espín. Si la dispersión es en la misma banda ( $j = j'$ ) en ese caso

$g_\lambda(\mathbf{q})$  se multiplica por 1. Usamos  $\sqrt{a_{sf}}$  porque la tasa de dispersión se determina por el cuadrado absoluto de el elemento de matriz. Debido a la hermeticidad de  $\hat{H}_{e-ph}$  los valores cuadrados absolutos de los elementos de matriz  $M(j, \mathbf{k} \rightarrow j', \mathbf{k}')$  y  $M(j', \mathbf{k}' \rightarrow j, \mathbf{k})$  son los mismos y por lo tanto  $a_{sf}$  es el mismo para cambios de espín de abajo-arriba y de arriba-abajo.

Asumiendo el mecanismo discutido en sec. 2.1.2, Koopmans y coautores estimaron los valores de  $a_{sf}$  para Ni y Co mediante cálculos ab-initio, y encontraron que estos valores coincidieron muy bien con los utilizados para describir las curvas de desmagnetización. Se determinó a partir de un ajuste del modelo de tres temperaturas microscópicas de desmagnetización ultra-rápida a los datos experimentales, y los rendimientos de esta [2] son  $a_{sf} = 0.19 \pm 0.03$  para FCC Ni.

## 2.5. Teoría cinética Cuántica

En esta sección se muestran los métodos matemáticos necesarios para simular la dinámica fuera del equilibrio para la desmagnetización ultra-rápida de níquel. En primer lugar, es necesario derivar las ecuaciones de movimiento para las densidades de las partículas y alcanzar toda la información del sistema en el tiempo. Esto es posible utilizando el formalismo matriz de densidad, ya que los elementos de la matriz de densidad contienen toda la información del sistema. Si tomamos la primera derivada con respecto al tiempo y aplicamos la ecuación de movimiento de Heisenberg, tendremos entonces las ecuaciones que se conocen como ecuaciones cinéticas cuánticas de movimiento. Nuestro sistema, descrito por un Hamiltoniano con un acoplamiento de electrones de fonones, conduce a un número infinito de estas ecuaciones de movimiento, que son finalmente truncadas a través de un procedimiento de desacoplamiento. Finalmente, la solución a estas ecuaciones se puede aproximar mediante la aplicación de una aproximación de Markov, resultando en una expresión más general para los elementos de nuestra matriz de densidad

### 2.5.1. El formalismo de la matriz de densidad y la representación de Heisenberg

Toda la información sobre un sistema mecánico cuántico se codifica en el formalismo de la matriz densidad. Es importante entender que uno puede hacer una descripción idealizada de los estados, llamados estados "puros", con los vectores de estado simple, y no describe mezclas estadísticas, que a menudo se producen en los experimentos, éstos, en particular, están llamados estados "mixtos".



## Estados Puros

Consideremos un sistema representado por el estado arbitrario  $|\Psi\rangle$ , el cual está dado por una superposición de eigenestados:

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle, \quad (2.35)$$

donde los vectores base  $\phi_n$  son ortonormales y completos:

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (2.36)$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1. \quad (2.37)$$

El estado arbitrario  $|\Psi\rangle$  se normaliza de acuerdo a:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_n |a_n|^2 = 1, \quad (2.38)$$

donde  $|a_n|^2$  es la probabilidad de que el sistema esté en el eigenestado  $|\phi_n\rangle$ . El operador matriz de densidad  $\hat{\rho}$  para el estado puro  $|\Psi\rangle$  viene dado por:

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{m,n} a_n a_m^* |\phi_n\rangle \langle \phi_m|. \quad (2.39)$$

La matriz de densidad se obtiene entonces por  $\rho_{nm} = a_n a_m^*$ . Por definición, la traza de un operador es  $Tr(\hat{A}) = \sum_n \langle \phi_n | \hat{A} | \phi_n \rangle$ . Se puede demostrar que la matriz densidad, usando las ecuaciones (2.37) y (2.36), tiene la siguiente propiedad:

$$Tr(\hat{\rho}\hat{A}) = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \quad (2.40)$$

Esto significa que el valor esperado de un operador  $\hat{A}$  puede ser calculado si tenemos el operador densidad  $\hat{\rho}$  a través de  $\langle \hat{A} \rangle = Tr(\hat{\rho}\hat{A})$ .

## Estados mixtos

Es más realista asumir que el sistema tiene ciertas probabilidades,  $P_1, P_2, \dots$  de estar en los estados puros  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots$ , respectivamente. Teniendo en cuenta un conjunto de partículas en estado puro

$$|\Psi_i\rangle = \sum_{n'} a_{n'}^{(i)} |\phi_{n'}\rangle \quad (2.41)$$

el operador densidad que describe la mezcla se define como:

$$\hat{\rho} = \sum_i P_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|. \quad (2.42)$$

El uso de la ec. (2.41) se puede expresar la matriz densidad como:

$$\rho_{nm} = \sum_i P_i a_n^{(i)} a_m^{(i)*}. \quad (2.43)$$

Hablemos ahora de las propiedades de la matriz densidad. En primer lugar, a partir de la ecuación (2.43) uno infiere que  $\hat{\rho}$  es hermitiana y satisface la condición:

$$\langle \phi_n | \hat{\rho} | \phi_m \rangle = \langle \hat{\rho} \phi_n | \phi_m \rangle. \quad (2.44)$$

En segundo lugar, la probabilidad de encontrar el sistema en el estado  $|\phi_n\rangle$  está dada por los términos diagonales de la ec. (2.43):

$$\rho_{nn} = \sum_i P_i |a_n^{(i)}|^2, \quad (2.45)$$

lo que da una interpretación física de los términos diagonales de la matriz densidad. En cuanto a los términos no diagonales,  $n \neq m$ ,

$$\rho_{nm} = \sum_i P_i a_n^{(i)} a_m^{(i)*}, \quad (2.46)$$

estos son considerados como términos de correlación. Una explicación más detallada se puede encontrar en la Ref. [26].

### 2.5.1.1. La ecuación de movimiento de Heisenberg

La solución de la ecuación de Schrödinger se puede encontrar ya sea tomando la representación de Schrödinger o la representación de Heisenberg. El primero mantiene los operadores constantes y los estados (funciones de onda) evolucionan en función del tiempo, mientras que el segundo consiste por lo contrario en tomar los operadores dependientes del tiempo. Es en este sentido que las ecuaciones de movimiento se pueden formular de la siguiente forma bajo la formulación de Heisenberg:

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)] + \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \quad (2.47)$$

donde  $\hat{H}$  representa el Hamiltoniano del sistema,  $[\hat{H}, \hat{A}] = \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}$  el conmutador correspondiente y  $\hat{A}$  es un operador dependiente del tiempo.

## 2.5.2. Conjunto de ecuaciones Cinético-cuánticas

Se ha discutido ya el uso de un segundo formalismo de cuantificación (véase sec. 2.3) y la teoría de la matriz densidad (discutido en sec. 2.5.1). De ellos se obtiene la expresión para una sola partícula en el estado  $|\Psi_i\rangle$  de un conjunto de partículas en un cristal, donde los estados propios son dados por  $(j, \mathbf{k})$  con el índice de banda  $j$  y el vector de onda  $\mathbf{k}$ :

$$\rho_{j\mathbf{k},j'\mathbf{k}}^i = \langle \Psi_i | \hat{C}_{j\mathbf{k}}^\dagger \hat{C}_{j'\mathbf{k}} | \Psi_i \rangle, \quad (2.48)$$

y para el conjunto:

$$\rho_{j\mathbf{k},j'\mathbf{k}} = \sum_i \langle \Psi_i | \hat{C}_{j\mathbf{k}}^\dagger \hat{C}_{j'\mathbf{k}} | \Psi_i \rangle \quad (2.49)$$

Como se explica en sec. 2.5.1, los términos diagonales  $(j, \mathbf{k} = j', \mathbf{k})$  de la ec. (2.48) representan la función de distribución de la partícula en el estado propio  $(j, \mathbf{k})$ , mientras que los términos no diagonales  $(j, \mathbf{k} \neq j', \mathbf{k})$  representan a la correlación entre las bandas.

Se puede demostrar [9] que para un sistema con una densidad de electrones periódica los elementos de matriz densidad no diagonales que corresponden a diferentes vectores de onda  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$  son cero. La forma general de la matriz de densidad por lo tanto, para un modelo de Stoner-Wohlfarth con dos bandas,  $j = 1, 2$ , es:

$$\rho_{j\mathbf{k},j'\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \langle \hat{C}_{\mathbf{k},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle & \langle \hat{C}_{\mathbf{k},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},2} \rangle \\ \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle & \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},2} \rangle \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

donde  $j = 1$  (en lugar de  $\uparrow$ ) denota la banda con electrones cuyo espín es principalmente hacia arriba y  $j = 2$  (en lugar de  $\downarrow$ ) la banda de electrones con espín principalmente hacia abajo.

Los elementos de esta matriz en la ec. (2.50) son la densidad de probabilidad de un estado ocupado, con recíproco vector  $\mathbf{k}$ , para electrones principalmente con espín hacia arriba ( $\rho_{11}^{\mathbf{k}}$ ), principalmente con espín hacia abajo ( $\rho_{22}^{\mathbf{k}}$ ), y las correlaciones ( $\rho_{1\mathbf{k},2\mathbf{k}}$ ,  $\rho_{2\mathbf{k},1\mathbf{k}}$ ).

La evolución en el tiempo del sistema se puede modelar mediante la diferenciación de los elementos de matriz densidad en la ec. (2.49) con respecto al tiempo:

$$\frac{d\rho_{j\mathbf{k},j'\mathbf{k}}}{dt} = \frac{d\langle C_{j\mathbf{k}}^\dagger C_{j'\mathbf{k}} \rangle}{dt} = \left\{ \left\langle \frac{dC_{j\mathbf{k}}^\dagger}{dt} C_{j'\mathbf{k}} \right\rangle + \left\langle C_{j\mathbf{k}}^\dagger \frac{dC_{j'\mathbf{k}}}{dt} \right\rangle \right\} \quad (2.51)$$

donde la derivada temporal de los operadores de aniquilación y de creación están dadas por (2.47):

$$\frac{d\hat{C}_{j,k}^\dagger}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{C}_{j,k}^\dagger], \quad \frac{d\hat{C}_{j,k}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{C}_{j,k}] \quad (2.52)$$

siendo  $\hat{H}$  el Hamiltoniano del sistema y expresado como  $\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{e-ph}$  y las expresiones son dadas por las ecuaciones (2.31), (2.32) y (2.33), respectivamente. Una vez que este Hamiltoniano se inserta en la ec. (2.52) esto traerá valores esperados adicionales de dos y tres operadores en la ecuación, cuyas ecuaciones de movimiento debe ser encontradas.

Para hacerlo, hay que conocer la evolución temporal de ellos mediante el uso de la ec. (2.47) una vez más, y el mismo proceso tendrá que ser llevado infinitamente, después aparecerán más términos, para finalmente tener una jerarquía infinita de ecuaciones con valores esperados de los productos de los operadores hasta orden infinito.

$$\frac{d\langle \hat{C}_{j,k}^\dagger \hat{C}_{j',k} \rangle}{dt} \begin{cases} \langle \hat{C}_{j,k}^\dagger \hat{C}_{j',k} \rangle \\ \langle \hat{C}_{j,k+q}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{j',k} \rangle \\ \vdots \end{cases} \begin{cases} \langle \hat{C}_{j,k+q}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{j',k} \rangle \\ \langle \hat{C}_{j,k+q+q'}^\dagger \hat{b}_{q',\lambda'} \hat{C}_{j',k} \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \\ \vdots \end{cases} \begin{cases} \vdots \\ \dots \\ \vdots \end{cases} \quad (2.53)$$

Esta ecuación diferencial entonces contendrá muchos valores esperados que con el tiempo será imposible de resolver, ya que seguirán apareciendo. Por esta razón se necesita un truncamiento hasta cierto orden de valor esperado, en nuestro caso, esto se hace hasta el cuarto orden.

## Procedimiento general de desacoplamiento

Aquí, comenzamos expresando un valor esperado de cuatro operadores en términos de varios valores esperados de los productos de orden inferior:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} \rangle &= \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B}\hat{C}\hat{D} \rangle + \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{A}\hat{C}\hat{D} \rangle + \langle \hat{C} \rangle \langle \hat{A}\hat{B}\hat{D} \rangle \\
&+ \langle \hat{D} \rangle \langle \hat{A}\hat{B}\hat{C} \rangle + \langle \hat{A}\hat{B} \rangle \langle \hat{C}\hat{D} \rangle + \langle \hat{A}\hat{C} \rangle \langle \hat{B}\hat{D} \rangle \\
&+ \langle \hat{A}\hat{D} \rangle \langle \hat{B}\hat{C} \rangle + \langle \hat{A}\hat{B} \rangle \langle \hat{C} \rangle \langle \hat{D} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{C}\hat{D} \rangle \\
&+ \langle \hat{A}\hat{C} \rangle \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{D} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{C} \rangle \langle \hat{B}\hat{D} \rangle + \langle \hat{A}\hat{D} \rangle \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{C} \rangle \\
&+ \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{D} \rangle \langle \hat{B}\hat{C} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{C} \rangle \langle \hat{D} \rangle + \underline{K} \quad (2.54)
\end{aligned}$$

con  $\underline{K}$  como un término restante debido a la desviación del  $\langle \hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} \rangle$  de la suma de todos sus productos de menor orden. Éste término se descuida, si no hay un procedimiento de desacoplamiento entonces podría definirse como tal. Estamos tomando el valor de cuatro operadores como el último eslabón de nuestra truncamiento, de tal manera que nos encontramos con una expresión que dependerá sólo en términos que tienen valores esperados de uno, dos y tres operadores.

Para nuestro caso (electrones y fonones), otras simplificaciones se puede hacer. Por ejemplo, el valor esperado del operador de cuatro fermiones para los estados de electrones tiene un número fijo de electrones  $N$  (A través del grupo de estados  $\{n_j\}$  tenemos que  $\sum_j n_j = N$ ). Debido a este hecho podemos calcular el valor esperado de  $\hat{C}_l$ :

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_e | \hat{C}_l | \Psi_e \rangle &= \sum_{\{n_i\}\{n_j\}} \langle n_1, n_2, \dots, n_i, \dots | \Psi_e \rangle \\
&\langle n_1, n_2, \dots, n_j, \dots | \Psi_e \rangle^* \left\langle \prod_{j=1}^{\infty} (\hat{C}_j^\dagger)^{n_j} 0 \left| \hat{C}_l \right| \prod_{i=1}^{\infty} (\hat{C}_i^\dagger)^{n_i} 0 \right\rangle \quad (2.55)
\end{aligned}$$

y ver que la acción del operador de aniquilación  $\hat{C}_l$  sobre la base de vectores nos da 1 estado desocupado contra  $N - 1$  estados ocupados, lo que será ortogonal al vector de estado  $\prod_{i=1}^{\infty} (\hat{C}_i^\dagger)^{n_i} |0\rangle$  en la ec. (2.55), es decir,  $\langle \hat{C}_l \rangle = 0$ . Los mismos principios también se puede utilizar para probar que  $\langle \hat{C}_l^\dagger \rangle = 0$  y  $\langle \hat{C}_l^\dagger \hat{C}_l \rangle = 0$ . Para los dos valores esperados de operadores fermiónicos y los dos de operadores bosónicos, donde el número de fonones no se conserva como en el sistema fermiónico, podemos hacer una suposición sobre la aparición de estados de Glauber (oscilación de los átomos debido al pulso láser  $\rightarrow \langle \hat{b}_l \rangle \neq 0$ ). Despreciando la aparición de tales estados está de acuerdo con el hecho de que el acoplamiento de electrones y fonones permanece constante en el tiempo; tenemos finalmente  $\langle \hat{b}_l \rangle = \langle \hat{b}_l^\dagger \rangle = \langle \hat{C}_i^\dagger \hat{b}_l \rangle = \langle \hat{C}_i \hat{b}_l^\dagger \rangle = 0$ . Estas consideraciones dan expresiones de la forma siguiente.:

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}_{j,k}^\dagger \hat{C}_{j',k'}^\dagger \hat{C}_{j'',k'+q} \hat{C}_{j''',k-q} \rangle = \\ \langle \hat{C}_{j,k}^\dagger \hat{C}_{j''',k-q} \rangle \langle \hat{C}_{j',k'}^\dagger \hat{C}_{j'',k'+q} \rangle \delta_{q,0} - \langle \hat{C}_{j,k}^\dagger \hat{C}_{j'',k'+q} \rangle \langle \hat{C}_{j',k'}^\dagger \hat{C}_{j''',k-q} \rangle \delta_{k',k-q}, \end{aligned} \quad (2.56)$$

$$\langle \hat{C}_{j,k+q-q'}^\dagger \hat{C}_{j',k} \hat{b}_{q',\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle = \langle \hat{C}_{j,k+q-q'}^\dagger \hat{C}_{j',k} \rangle \langle \hat{b}_{q',\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \delta_{q,q'}, \quad (2.57)$$

donde se calcula el valor esperado de cuatro operadores de un sólido con  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{q}$  que representa vectores de onda para electrones y fonones respectivamente,  $j, j', j'',$  y  $j'''$  que representa a las bandas  $\lambda$  y  $\lambda'$  que son índices que definen los vectores de polarización. Una derivación más detallada de estas ecuaciones se puede encontrar en la Ref. [27].

### 2.5.2.1. Ecuaciones de movimiento después del procedimiento de desacoplamiento

En las secciones anteriores los estados electrónicos se designan con los índices  $j$  (índice de banda) y  $\mathbf{k}$  (vector de onda), y la sucesión  $j, \mathbf{k}$  se utilizó de los índices. En la siguiente notación se utiliza una que se encuentra en la mayoría de los papeles de la cinética cuántica. De este modo, el índice  $i$  se sustituye por  $n$ , y la sucesión de índices es  $(\mathbf{k}, n)$ .

Una vez que tenemos un número finito de ecuaciones después de aplicar el procedimiento de disociación (se explica en sec. 2.5.2), el siguiente paso es encontrar una solución analítica para ellos. Después de tomar la primera derivada de los elementos de la ec. (2.50), como se hizo con la ec. (2.51), y haciendo uso de la ec. (2.47), se puede demostrar (como en la Ref. [9]) que tienen las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} \frac{d \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} = \left( \frac{i}{\hbar} \right) \left\{ \sum_{q,\lambda} g_\lambda(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \\ + \sum_{q,\lambda} g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle + \sum_{q,\lambda} g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \\ \left. + \sum_{q,\lambda} g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} + h.c. \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right) \left\{ \sum_{q,\lambda} g_\lambda(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&+ \sum_{q,\lambda} g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle + \sum_{q,\lambda} g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&\left. + \sum_{q,\lambda} g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} + h.c.' \quad (2.59)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right) \left\{ (\epsilon_{k,1} - \epsilon_{k,2}) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + \sum_{q,\lambda} g_\lambda(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&+ \sum_{q,\lambda} g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle + \sum_{q,\lambda} g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&+ \sum_{q,\lambda} g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \left[ \sum_{q,\lambda} g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \\
&+ \sum_{q,\lambda} g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle + \sum_{q,\lambda} g_\lambda(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k-q,2} \rangle \\
&\left. \left. + \sum_{q,\lambda} g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right] \right\}. \quad (2.60)
\end{aligned}$$

Donde el término h.c. representa la conjugada hermítica (por sus siglas en inglés) de los términos que le anteceden. Utilizando el mismo análisis para la matriz de densidad de fonones:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda'} \rangle}{dt} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right) \left\{ (\hbar\omega_{q,\lambda} - \hbar\omega_{q,\lambda'}) \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda'} \rangle \right. \\
&+ \sum_k g_\lambda(\mathbf{q}) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda'} \hat{C}_{k,1} \rangle + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda'} \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&+ (asf) \left( \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda'} \hat{C}_{k,2} \rangle + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda'} \hat{C}_{k,1} \rangle \right) \left. \right] \\
&- \sum_k g_{\lambda'}^*(\mathbf{q}) \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle + \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \\
&\left. \left. + (asf) \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle + \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right) \right] \right\}, \quad (2.61)
\end{aligned}$$

con vector de onda  $\mathbf{q}$  y de polarización  $\lambda, \lambda'$ . Las expresiones para los valores esperados de tres operadores se encuentran después de aplicar el procedimiento

de disociación. Aquí por simplicidad se muestran dos de ellos (Ver Apéndice 7 para las demás), y sus ecuaciones son:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right) (\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle \\
&+ \left(\frac{i}{\hbar}\right) \left\{ \sum_{\lambda'} g_{\lambda'}^*(\mathbf{q}) \langle \hat{b}_{q,\lambda'}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \right. \\
&- \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle + asf \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right) \left. \right] \\
&+ g_\lambda^*(\mathbf{q}) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - 1 \right) \right. \\
&\left. \left. + \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - asf \right) \right] \right\}. \quad (2.62)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right) (\epsilon_{k-q,2} - \epsilon_{k,1} + \hbar\omega_{q,\lambda}) \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle \\
&+ \left(\frac{i}{\hbar}\right) \left\{ \sum_{\lambda'} g_{\lambda'}(\mathbf{q}) \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda'} \rangle \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right. \right. \\
&+ asf \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) \left. \right] + g_\lambda(\mathbf{q}) \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \\
&\left( 1 - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right) + \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \\
&\left. \left. \left( asf - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) \right] \right\}. \quad (2.63)
\end{aligned}$$

Después de realizar el procedimiento de desacoplamiento, las ecuaciones restantes del movimiento de los valores esperados de los productos de los tres operadores, por ejemplo, la ec. (2.62) y (2.63), tienen la forma general de una ecuación diferencial lineal no homogénea de primer orden con una inhomogeneidad  $F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t)$

$$\frac{dy(t)}{dt} - i\Omega y(t) = F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t), \quad (2.64)$$

con los vectores de onda para los electrones y fonones  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{q}$  respectivamente,  $j$  y  $j'$  representan las bandas y  $\lambda$  es el índice de la definición de vector de polarización. Uno puede encontrar una solución analítica si se aplica una aproximación de Markov.



## Aproximación de Markov y la solución de la ecuación diferencial no homogénea

La solución general para la ecuación diferencial lineal de primer orden no homogénea (2.64) viene dada por:

$$y(t) = y_c(t) + y_p(t) . \quad (2.65)$$

$y_c(t)$  es la solución general de la ecuación diferencial de primer orden homogénea

$$\frac{dy_c(t)}{dt} - i\Omega y_c(t) = 0 , \quad (2.66)$$

que tiene la solución  $y_c(t) = y_c(t_0)e^{i\Omega(t-t_0)}$ . El ansatz para obtener la solución particular  $y_p(t)$  es:

$$y_p(t) = u(t)y_c(t) . \quad (2.67)$$

Sustituyendo (2.67) en (2.64), se obtiene:

$$\frac{du(t)}{dt} y_c(t) + u(t) \frac{dy_c(t)}{dt} - i\Omega u(t) y_c(t) = F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t) . \quad (2.68)$$

Puesto que  $y_c(t)$  es una solución de ec. (2.66), obtenemos

$$\frac{du(t)}{dt} y_c(t) = F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t) , \quad (2.69)$$

que tiene la solución:

$$u(t) = u(t_0) + \frac{1}{y_c(t_0)} \int_{t_0}^t e^{i\Omega(t-t')} F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t') dt' , \quad (2.70)$$

Debido a que  $u(t)$ , sólo tiene que satisfacer ec. (2.69), podemos elegir  $u(t_0) = 0$ . Usando las ecuaciones (2.70), (2.67), (2.65) se obtiene:

$$y(t) = y_c(t_0)e^{i\Omega(t-t_0)} + \int_{t_0}^t e^{i\Omega(t-t')} F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t') dt' . \quad (2.71)$$

Ahora usamos una aproximación de Markov [4] para la integral de la ecuación (2.71). Para ello se supone que  $F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t)$  cambia lentamente con el tiempo, de manera que podamos sacarlo de la integral:

$$\int_{t_0}^t e^{i\Omega(t-t')} F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t') dt' \approx F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t) \int_{t_0}^t e^{i\Omega(t-t')} dt' . \quad (2.72)$$

Obviamente, en esta aproximación la solución  $y(t)$  en el tiempo  $t$  no depende de los valores de  $F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t')$  en los tiempos antiguos. Al mirar un intervalo de tiempo grande ( $t - t_0$ ) en la que  $F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t)$  todavía no cambia considerablemente, entonces la integral ya parece  $\delta$ -distribución de Dirac. Por lo tanto, podemos ir formalmente en la integral hasta el limite  $t - t_0 = \infty$ , obteniéndose:

$$y(t) \approx y_c(t_0)e^{i\Omega(t-t_0)} + F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t) \int_0^\infty e^{i\Omega\tau} d\tau. \quad (2.73)$$

Ahora usamos la representación integral de la distribución  $\delta$  de Dirac.

$$\delta(\Omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{i\Omega\tau} d\tau, \quad (2.74)$$

obteniendo

$$y(t) \approx y_c(t_0)e^{i\Omega(t-t_0)} + \pi F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t)\delta(\Omega). \quad (2.75)$$

Utilizamos  $y(t)$  en expresiones donde se realiza un resumen sobre los puntos  $\mathbf{q}$  en una retícula discreta, por lo tanto, la distribución  $\delta$  tiene que ser reemplazado por un delta de Kronecker, es decir, se obtiene:

$$y(t) \approx \pi \delta_{K\tau}(\Omega) F(\mathbf{q}, \lambda, \mathbf{k}, j, j', t). \quad (2.76)$$

### 2.5.2.2. Ecuaciones de movimiento después de la intervención de desacoplamiento y bajo la aproximación de Markov

La solución de estas ecuaciones diferenciales no homogéneas (IDE) (Ecs. (2.62), (2.63) y aquellas en Apéndice B) después de usar una aproximación de Markov son de la forma de la ecuación (2.76). Esto implica, en particular, para las ecuaciones (2.62) y (2.63) son:

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda} \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle &= (\pi i) \delta(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},1} - \epsilon_{\mathbf{k},1} - \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}) \left\{ \sum_{\lambda'} g_{\lambda'}^*(\mathbf{q}) \langle \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda} \rangle \right. \\ &\quad \left[ \langle \hat{C}_{\mathbf{k},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle - \langle \hat{C}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},1} \rangle + a s f \left( \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \langle \hat{C}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},2} \rangle \right) \right] + g_\lambda^*(\mathbf{q}) \left[ \langle \hat{C}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},1} \rangle \right. \\ &\quad \left. \left( \langle \hat{C}_{\mathbf{k},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle + a s f \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle - 1 \right) + \langle \hat{C}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},2} \rangle \right. \\ &\quad \left. \left. \left( \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle + a s f \langle \hat{C}_{\mathbf{k},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle - a s f \right) \right] \right\}. \quad (2.77) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle &= (\pi i) \delta(\epsilon_{k-q,2} - \epsilon_{k,1} + \hbar \omega_{q,\lambda}) \left\{ \sum_{\lambda'} g_{\lambda'}(\mathbf{q}) \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda'} \rangle \right. \\
&\quad \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle + asf \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) \right] + g_\lambda(\mathbf{q}) \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \\
&\quad \left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right) + \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \\
&\quad \left. \left. \left( asf - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) \right] \right\}. \quad (2.78)
\end{aligned}$$

Hasta este punto, es evidente que después de insertar las Ecs. (2.77), (2.78), y aquellas en Apéndice C, en las Ecs. (2.58), (2.59), (2.61) y (2.60) podemos obtener el conjunto definido de ecuaciones de movimiento.

## Capítulo 3

# VARIABLES E HIPÓTESIS

### 3.1. Variable de la investigación

$\langle \hat{C}_{k,j}^\dagger \hat{C}_{k,j'} \rangle$ ; donde  $\underline{k}$  es el vector de onda en el espacio recíproco y  $j, j'$  representan las bandas para los estados del espín.

### 3.2. Operacionalización de variables

Variable	Definición conceptual	Definición operacional	Dimensiones	Indicadores
$\langle \hat{C}_{k,j}^\dagger \hat{C}_{k,j'} \rangle$	Elementos de la matriz de densidad en segunda cuantización, los cuales contienen toda la información del sistema.	Fórmula de autosuficiencia; la cual, tras aplicar la teoría cinética, requiere de la expansión de Taylor para su evolución temporal.	- Analizar el sistema de ecuaciones.	- Inspeccionar las ecuaciones por posibles errores. - Encontrar una formulación general para ser analizada.
			-Ejecutar simulaciones.	- Inspeccionar el código por errores de consistencia. - Determinar su influencia sobre el sistema.

### 3.3. Hipótesis general e hipótesis específicas

#### Hipótesis general

Teniendo en cuenta que el sistema de ecuaciones obtenidos debido al uso de la teoría cinética cuántica contienen no sólo términos relacionados con los números de ocupación (elementos diagonales de la matriz de densidad); sino también los términos de estados correlacionados (elementos no-diagonales de la matriz de densidad); es válido suponer, que en su evolución temporal, estos afectan la función de distribución de los electrones y puedan resultar en las fluctuaciones observadas.

#### Hipótesis específicas

Para validar la hipótesis es necesario encontrar una ecuación general para los elementos de la matriz de densidad, de tal manera que esta ecuación pueda ser analizada y así interpretar su comportamiento en diferentes escenarios. Las simulaciones serán realizadas a través del código C++ y un análisis detallado podría dar con la verdadera naturaleza de las fluctuaciones.

# Capítulo 4

## METODOLOGÍA

### 4.1. Tipo de investigación

Esta investigación de tesis es de carácter teórico-aplicativo. El correcto desarrollo del mismo implicaría no solo resolver la gran interrogante con la aparición de las fluctuaciones en la función de distribución de los electrones, sino también por el aporte importante a la comunidad científica. Esto debido a que nos acercaría más a una correcta descripción del fenómeno de desmagnetización en la escala de los femtosegundos debido a un pulso láser y, de ser satisfactoria, ser un punto de quiebre para realizar correcciones a través de nuevas simulaciones usando la teoría cinética.

### 4.2. Diseño de la investigación

Durante el desarrollo del proyecto utilizaremos el método hipotético-deductivo; es decir, primero nos enfocaremos en los principios y datos empíricos desarrollados para la teoría cinética cuántica, indagando profundamente en posibles indicios que puedan brindar una visión *mas general del tipo de ecuaciones halladas*. De esta manera, consecuencias aún desconocidas puedan aparecer y brindar las conclusiones adecuadas que podrían comprobarse después a través de una correcta simulación.

Para lograr nuestro objetivo en la primera parte se presentará la teoría básica relacionada con la teoría cinética cuántica en el marco de la teoría de la matriz de densidad. Tomando en cuenta la interacción electrón-fonón, las ecuaciones relacionadas a los elementos de esta matriz serán desarrollados al detalle. El siguiente paso consistirá en modelar correctamente nuestro material ferromagnético, siendo Nickel el material elegido, ya que ciertos parámetros deben ser tomados en cuenta para obtener un sistema estable. Una vez el sistema este bien definido y las ecuaciones analizadas al detalle, es necesario realizar simulaciones tal que

muestren alguna anomalía que de indicios de una expresión general que pueda ser analizada.

### **4.3. Población y muestra**

Este trabajo teórico usa como población aquellos materiales ferromagnéticos que son usados en los experimentos de ultra-rápida desmagnetización, como son Hierro (Fe), Cobalto (Co) y Niquel (Ni). La muestra, de entre estos elementos, será el elemento Niquel (Ni).

### **4.4. Técnicas e instrumentos de recolección de datos**

Para poder desarrollar esta investigación de tesis se revisará bibliografía especializada, así como también información de publicaciones científicas, grupos de investigación y tesis relacionadas.

### **4.5. Plan de análisis estadísticos de datos**

Por la naturaleza del trabajo, no se realiza ningún análisis estadístico.

# Chapter 5

## RESULTADOS

### 5.1. Ecuación de tasa de transición general con los términos de correlación

Basta simplemente con usar este conjunto de ecuaciones con el fin de ejecutar un programa y obtener resultados; Sin embargo, las simulaciones representan una muy grande cantidad de datos a procesar. De hecho, la variable que es bastante problemático es la incorporación de los términos de dos bandas de correlación complejos, lo que lleva a los cálculos que podrían tomar unos 5 minutos por cada iteración (el modelo fue pensado para realizar 10000 iteraciones).

Es mejor reordenar las expresiones de los términos de correlación de dos bandas complejas como dos términos reales. Vamos a reescribir la expresión de la correlación de dos bandas y su correspondiente interacción de la siguiente manera:

$$\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle = \text{Re} \{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \} + i \cdot \text{Im} \{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \}, \quad (5.1)$$

$$\langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle = \text{Re} \{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \} + i \cdot \text{Im} \{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \}. \quad (5.2)$$

Teniendo en cuenta que los valores esperados están en números complejos generales, y que no es una suma entre un número complejo y su conjugado complejo (h.c) en las ecuaciones (2.58), (2.59) y (2.60) se pueden reescribir de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{d \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} = & \left( -\frac{2}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} \text{Re} \{ g_\lambda(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle + g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \\ & \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle + g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \\ & + g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \}. \end{aligned} \quad (5.3)$$



$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} &= \left(-\frac{2}{\hbar}\right) \sum_{q,\lambda} \text{Re} \left\{ g_\lambda(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\quad + g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle + g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&\quad \left. + g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\}. \quad (5.4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Re} \left\{ \frac{d\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} \right\} &= \left(-\frac{1}{\hbar}\right) \left\{ (\epsilon_{k,1} - \epsilon_{k,2}) \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} + \sum_{q,\lambda} \text{Re} \left\{ g_\lambda(\mathbf{q}) \right. \right. \\
&\quad \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle + g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&\quad + g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&\quad + g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle + g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \\
&\quad \left. \left. + g_\lambda(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k-q,2} \rangle + g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right\}. \quad (5.5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Im} \left\{ \frac{d\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} \right\} &= \left(\frac{1}{\hbar}\right) \left\{ (\epsilon_{k,1} - \epsilon_{k,2}) \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} - \sum_{q,\lambda} \text{Im} \left\{ g_\lambda(\mathbf{q}) \right. \right. \\
&\quad \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle + g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&\quad + g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&\quad - g_\lambda^*(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle - g_\lambda^*(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \\
&\quad \left. \left. - g_\lambda(\mathbf{q}) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k-q,2} \rangle - g_\lambda(\mathbf{q})(asf) \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right\}. \quad (5.6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle}{dt} &= -\frac{2}{\hbar} \times \text{Imag} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} g_\lambda(\mathbf{q}) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \right. \\
&\quad + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle + (asf) \\
&\quad \left. \left. \left( \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,2} \rangle + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \hat{C}_{k,1} \rangle \right) \right] \right\}. \quad (5.7)
\end{aligned}$$

Insertando las ecuaciones (5.1) y (5.2) en las ecuaciones (2.77), (2.78) y en los de Apéndice C, teniendo en cuenta vectores de polarización iguales, tenemos la siguiente expresión para cc. (5.7):



$$\begin{aligned}
\frac{d \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle}{dt} &= -\frac{2}{\hbar} \times \text{Imag} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 (\pi i) \left[ \delta(\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \right. \right. \\
&\left. \left[ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - 1 \right) + \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right. \\
&\left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right) \right] + \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,2} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \\
&\left. \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - 1 \right) + \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right. \\
&\left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right) \right] + asf^2 \times \delta(\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,2} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \\
&\left[ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - 1 \right) + \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \left( 1 - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right) \right] + asf^2 \times \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \\
&\left[ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - 1 \right) + \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \\
&\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \left( 1 - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right) \right] + \sum_{\mathbf{k}} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 (\pi i) \\
&\left[ \delta(\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ asf \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \left( \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right. \right. \right. \\
&+ \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \left. \left. \right) + \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \right. \\
&\left. \left. - asf \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \right) \right] \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,2} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ asf \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\left. \left( \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle + \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right) + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right. \\
&\left. \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - asf \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \right) \right] \\
&+ asf \times \delta(\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,2} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \left( asf \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \right. \\
&\left. \left. + \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right) + \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + asf \times \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \\
& \left. (asf \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle + \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle) + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right. \\
& \left. (\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - (\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1)) \right].
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle}{dt} & = \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{k}} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right. \\
& \left. (\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1) (1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle) - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right. \\
& \left. (1 - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle) \right] + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{k}} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,2} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \\
& \left[ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle (\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1) (1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle) \right. \\
& \left. - \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle (1 - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle) \right] + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) asf^2 \\
& \sum_{\mathbf{k}} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,2} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle (\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1) \right. \\
& \left. (1 - \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle) - \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle (1 - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle) \right] \\
& + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) asf^2 \sum_{\mathbf{k}} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \\
& \left. (\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1) (1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle) - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right. \\
& \left. (1 - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle) \right] - \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \times \text{Imag} [\text{Correlation}_{phonon}]
\end{aligned}$$

(5.8)

El mismo tratamiento para las ecuaciones (2.58) y (2.59):

$$\begin{aligned}
\frac{d \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} &= \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left\{ \left( \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right. \right. \\
&+ a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right\} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right) \\
&- a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) - \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right) \\
&+ a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right) \\
&\left. - a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right\} \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right\} \\
&+ \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) (a s f)^2 \left\{ \left( \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \right. \\
&+ a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right\} \left[ 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right] \\
&- a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) - \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right) \\
&+ a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \left[ 1 - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right] \\
&\left. - a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right\} \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right\} \\
&+ \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k-q,1} - \epsilon_{k,1} + \hbar\omega_{q,\lambda}) \left\{ \left( \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right. \right. \\
&+ a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right\} \left[ 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right] \\
&- a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle - \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right) \\
&+ a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \left[ 1 - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right] \\
&\left. - a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right\} \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \right\} \\
&+ \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k-q,2} - \epsilon_{k,1} + \hbar\omega_{q,\lambda}) (a s f)^2 \left\{ \left( \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right. \right. \\
&+ a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right\} \left[ 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right] \\
&- a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle - \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right) \\
&+ a s f \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \left[ 1 - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -asf \cdot \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \right\rangle \right\} \left( \left\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \right\rangle + 1 \right) \Bigg\} \\
& + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ \mathbf{Im} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \right\rangle \right\} \right. \\
& \mathbf{Im} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \right\rangle \right\} \pm (asf^2 - 1) \cdot \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \right\rangle \right\} \\
& \left. \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \right\rangle \right\} \right] \\
& + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) (asf)^2 \left[ \mathbf{Im} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \right\rangle \right\} \right. \\
& \mathbf{Im} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \right\rangle \right\} \pm (1 - asf^2) \cdot \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \right\rangle \right\} \\
& \left. \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \right\rangle \right\} \right] \\
& + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) (asf^2 - 1) (\pm asf) \\
& \left[ \left( \left\langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \right\rangle + asf \cdot \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \right\rangle \right\} \right) \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \right\rangle \right\} \right. \\
& + \left( \left\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \right\rangle + asf \cdot \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \right\rangle \right\} \right) \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \right\rangle \right\} \\
& \mp \left( \left\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \right\rangle + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \right\rangle \right\} \\
& \left. \pm \left( \left\langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \right\rangle + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \mathbf{Re} \left\{ \left\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \right\rangle \right\} \right]. \tag{5.9}
\end{aligned}$$

Aquí hacemos un cambio de variable para todas las interacciones presentes en la ecuación de tasa de transición:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle + asf \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} &= \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}}, \\
\langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle + asf \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \right\} &= \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle_{\text{Prime}}, \\
\langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle + asf \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} &= \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle_{\text{Prime}}, \\
\langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle + asf \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} &= \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle_{\text{Prime}}.
\end{aligned} \tag{5.10}$$

que se puede ver como alguna contribución a los valores esperados. Esto implica que la ecuación (5.9) se convierte en:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} &= \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) \left\{ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle_{\text{Prime}} \right. \\
&\quad \left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}} \right. \\
&\quad \left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle_{\text{Prime}} \right) \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right\} \\
&+ \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,1} - \hbar\omega_{q,\lambda}) (asf)^2 \left\{ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle_{\text{Prime}} \right. \\
&\quad \left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}} \right. \\
&\quad \left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle_{\text{Prime}} \right) \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle \right\} \\
&+ \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k-q,1} - \epsilon_{k,1} + \hbar\omega_{q,\lambda}) \left\{ \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle_{\text{Prime}} \right. \\
&\quad \left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}} \right) \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}} \right. \\
&\quad \left. \left( \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle_{\text{Prime}} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \right\} \\
&+ \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k-q,2} - \epsilon_{k,1} + \hbar\omega_{q,\lambda}) (asf)^2 \left\{ \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle_{\text{Prime}} \right. \\
&\quad \left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}} \right) \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}} \right. \\
&\quad \left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle_{\text{Prime}} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + 1 \right) \right\}
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},1} - \epsilon_{\mathbf{k},1} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}) \left[ \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle \right\} \right. \\
& \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2} \rangle \right\} \pm (asf^2 - 1) \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle \right\} \\
& \left. \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2} \rangle \right\} \right] \\
& + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2} - \epsilon_{\mathbf{k},1} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}) (asf)^2 \left[ \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle \right\} \right. \\
& \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},1} \rangle \right\} \pm (1 - asf^2) \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle \right\} \\
& \left. \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},1} \rangle \right\} \right] \\
& + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2} - \epsilon_{\mathbf{k},1} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}) (asf^2 - 1) (\pm asf) \\
& \left[ \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2} \rangle_{\text{Prime}} \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle \right\} + \langle \hat{C}_{\mathbf{k},1}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle_{\text{Prime}} \right. \\
& \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},1} \rangle \right\} \mp \left( \langle \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda} \rangle + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},1} \rangle \right\} \\
& \left. \pm \left( \langle \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{q},\lambda} \rangle + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{\mathbf{k},2}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k},1} \rangle \right\} \right]. \quad (5.11)
\end{aligned}$$

En un sentido estricto, la ecuación de velocidad de Boltzmann, utilizando regla de oro de Fermi para colisiones electrón-fonón, sin cambio de espín, se puede expresar como:

$$\begin{aligned}
\frac{df_\uparrow(\mathbf{k})}{dt} &= \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{(\mathbf{k}\pm\mathbf{q})} - \epsilon_{\mathbf{k}} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}) \times \\
& \left[ f_\uparrow(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) (1 - f_\uparrow(\mathbf{k})) \left( h_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) - f_\uparrow(\mathbf{k}) \right. \\
& \left. (1 - f_\uparrow(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})) \left( h_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \right], \quad (5.12)
\end{aligned}$$

donde  $\pm$  denota la dispersión de absorción y emisión de fonons y ambos eventos tienen que ser resumidos (en este caso se presentó de forma abreviada),  $f_\uparrow(\mathbf{k})$  representa principalmente la distribución para electrones (en equilibrio térmico es

la función de distribución Fermi-Dirac  $f_{FD}$  y  $h_\lambda(\mathbf{q})$  representa la distribución de fonons (en equilibrio térmico esta es la distribución Bose-Einstein  $f_{BE}$ ). Podemos reescribir la ec. (5.11) en términos de la ecuación (5.12):

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} &= \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},1} - \epsilon_{\mathbf{k},1} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}) \left\{ f_\uparrow^{prime}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \right. \\
&\quad \left( 1 - f_\uparrow^{prime}(\mathbf{k}) \right) \left( h_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) - f_\uparrow^{prime}(\mathbf{k}) \left( 1 - f_\uparrow^{prime}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \right) \\
&\quad \left( h_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) + \text{Im} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) \} \cdot \text{Im} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} \\
&\quad \mp (1 - asf^2) \cdot \text{Re} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) \} \cdot \text{Re} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} \left. \right\} \\
&\quad + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2} - \epsilon_{\mathbf{k},1} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}) asf^2 \left\{ f_\downarrow^{prime}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \right. \\
&\quad \left( 1 - f_\uparrow^{prime}(\mathbf{k}) \right) \left( h_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) - f_\uparrow^{prime}(\mathbf{k}) \left( 1 - f_\downarrow^{prime}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \right) \\
&\quad \left( h_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) + \text{Im} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) \} \cdot \text{Im} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} \\
&\quad \pm (1 - asf^2) \cdot \text{Re} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) \} \cdot \text{Re} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} + (1 - asf^2) \\
&\quad \left[ \left( \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \mp f_\uparrow^{prime}(\mathbf{k}) \right) \cdot \text{Re} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} - \left( \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \pm f_\downarrow^{prime}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \right) \right. \\
&\quad \left. \left. \text{Re} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) \} + h_\lambda(\mathbf{q}) (\text{Re} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} - \text{Re} \{ f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) \}) \right] \right\}. \quad (5.13)
\end{aligned}$$

Donde:

- $f_\uparrow^{prime}(\mathbf{k}) = \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{\text{Prime}}$ ,
- $f_\uparrow^{prime}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) = \langle \hat{C}_{k\pm\mathbf{q},1}^\dagger \hat{C}_{k\pm\mathbf{q},1} \rangle_{\text{Prime}}$ ,
- $f_\downarrow^{prime}(\mathbf{k}) = \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle_{\text{Prime}}$ ,
- $f_\downarrow^{prime}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) = \langle \hat{C}_{k\pm\mathbf{q},2}^\dagger \hat{C}_{k\pm\mathbf{q},2} \rangle_{\text{Prime}}$ ,
- $h_\lambda(\mathbf{q}) = \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle$ ,
- $f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) = \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle$ ,
- $f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) = \langle \hat{C}_{k\pm\mathbf{q},2}^\dagger \hat{C}_{k\pm\mathbf{q},1} \rangle$ .

Uno puede observar que la primera parte de la ec. (5.13) se puede expresarse en la misma forma que ec. (5.12). Simbolizando la expresión para la regla de oro de Fermi como la ecuación  $FGR_{eq}$ , se conduce a la siguiente expresión para la ec. (5.13):

$$\frac{d\langle\hat{C}_{k,1}^\dagger\hat{C}_{k,1}\rangle}{dt} = FGR_{eq}\left(\langle\hat{C}_{k,1}^\dagger\hat{C}_{k,1}\rangle_{prime}\right) + \alpha_{\uparrow(asf,k,t)}, \quad (5.14)$$

y el excedente:

$$\begin{aligned} \alpha_{\uparrow(asf,k,t)} = & \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) \left\{ \text{Im}\{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k})\} \cdot \right. \\ & \left. \text{Im}\{f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}\pm\mathbf{q})\} \mp (1 - asf^2) \cdot \text{Re}\{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k})\} \cdot \text{Re}\{f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}\pm\mathbf{q})\} \right\} \\ & + \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) asf^2 \left\{ \text{Im}\{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k})\} \cdot \right. \\ & \left. \text{Im}\{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}\pm\mathbf{q})\} \pm (1 - asf^2) \cdot \text{Re}\{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k})\} \cdot \text{Re}\{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}\pm\mathbf{q})\} \right\} \\ & + \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) asf^2(1 - asf^2) \times \\ & \left\{ \left[ \left(\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \mp f_{\uparrow}^{prime}(\mathbf{k})\right) \cdot \text{Re}\{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}\pm\mathbf{q})\} - \left(\frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \pm f_{\downarrow}^{prime}(\mathbf{k}\pm\mathbf{q})\right) \right. \right. \\ & \left. \left. \text{Re}\{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k})\} + h_\lambda(\mathbf{q}) (\text{Re}\{f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}\pm\mathbf{q})\} - \text{Re}\{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k})\}) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Similar a la ecuación (5.14), podemos escribir

$$\frac{d \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} = FGR_{eq} \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle_{prime} \right) + \alpha_{\downarrow}(asf, k, t), \quad (5.15)$$

con:

$$\begin{aligned} \alpha_{\downarrow}(asf, k, t) = & \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,2} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) \left\{ \mathbf{Im} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \} \cdot \right. \\ & \left. \mathbf{Im} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} \mp (1 - asf^2) \cdot \mathbf{Re} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \} \cdot \mathbf{Re} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} \right\} \\ & + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,2} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) asf^2 \left\{ \mathbf{Im} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \} \cdot \right. \\ & \left. \mathbf{Im} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} \pm (1 - asf^2) \cdot \mathbf{Re} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \} \cdot \mathbf{Re} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} \right\} \\ & + \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,2} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) asf^2 (1 - asf^2) \times \\ & \left\{ \left[ \left( \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \mp f_{\downarrow}^{prime}(\mathbf{k}) \right) \cdot \mathbf{Re} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} - \left( \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \pm f_{\uparrow}^{prime}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \right) \right. \right. \\ & \left. \left. \mathbf{Re} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \} + h_\lambda(\mathbf{q}) (\mathbf{Re} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \} - \mathbf{Re} \{ f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \}) \right] \right\}. \end{aligned}$$

En cuanto a la parte de correlación, tratamos de encontrar una expresión similar a las ecuaciones (5.14) y (5.15). Partimos de la ec. (2.60) e insertamos la solución para el valor esperado tercer operador de ecuaciones (2.77), (2.78) y de Apéndice C, utilizando la misma idea para tener una parte real e imaginaria de la correlación, esto produce:

$$\begin{aligned}
\text{Re} \left\{ \frac{d \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} \right\} &= -\frac{1}{\hbar} (\epsilon_{k,1} - \epsilon_{k,2}) \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} \\
&+ \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,i}) (asf) \\
&\left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \right. \\
&- \left. \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \right\} \\
&+ \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,i}) (asf) \\
&\left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \right. \\
&\left. - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \right\} \\
&+ \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,i}) (asf) \\
&\left[ \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \cdot \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \right\} \right. \\
&\left. \pm (asf^2 - 1) \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \right\} \right] \\
&+ \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,i}) (asf) \\
&\left[ \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \cdot \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} \right. \\
&\left. \pm (1 - asf^2) \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} \right] \\
&+ \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,i}) (1 - asf^2) \\
&\left\{ \left( \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \mp \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{prime} \right) \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} \right. \\
&\left. - \left( \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \pm \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle_{prime} \right) \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle \cdot \left( \mathbf{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} - \mathbf{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \right) \Big\} \\
& + \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,2} \mp \hbar\omega_{q,i}) (asf) \\
& \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \right. \\
& \left. - \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \right\} \\
& + \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,2} \mp \hbar\omega_{q,i}) (asf) \\
& \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \right. \\
& \left. - \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \right\} \\
& + \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,2} \mp \hbar\omega_{q,i}) (asf) \\
& \left[ \mathbf{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} \cdot \mathbf{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} \right. \\
& \left. \pm (asf^2 - 1) \cdot \mathbf{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} \mathbf{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} \right] \\
& + \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,2} \mp \hbar\omega_{q,i}) (asf) \\
& \left[ \mathbf{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} \cdot \mathbf{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \right\} \right. \\
& \left. \pm (1 - asf^2) \cdot \mathbf{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} \mathbf{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \right\} \right] \\
& + \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \sum_{q,i} |g_i(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,2} \mp \hbar\omega_{q,i}) (1 - asf^2) \\
& \left\{ \left( \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \mp \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle_{prime} \right) \mathbf{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \right\} \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \left( \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \pm \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle_{prime} \right) \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} \\
& + \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle \cdot \left( \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \right\} - \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} \right) \Big\}. \tag{5.16}
\end{aligned}$$

Al observar las ecuaciones (5.14) y (5.15), se puede reformular la ec. (5.16) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
(ASF) \text{Re} \left\{ \frac{d \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} \right\} &= \frac{1}{2} \frac{d \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} + \frac{1}{2} \frac{d \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} \\
& - (1 - asf^2) \left( \frac{\pi}{\hbar} \right) \left\{ \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,1} - \epsilon_{k,1} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) \right. \\
& \left[ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{prime} \right) \right. \\
& \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) - \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{prime} \\
& \left( 1 - \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \\
& \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \cdot \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \right\} \\
& \left. \pm (asf^2 - 1) \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right\} \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,1}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle \right\} \right] \\
& + \sum_{q,\lambda} |g_\lambda(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{k\pm q,2} - \epsilon_{k,2} \mp \hbar\omega_{q,\lambda}) \left[ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle_{prime} \right. \\
& \left( 1 - \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle_{prime} \right) \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \\
& - \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle_{prime} \left( 1 - \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,2} \rangle_{prime} \right) \\
& \left. \left( \langle \hat{b}_{q,\lambda}^\dagger \hat{b}_{q,\lambda} \rangle + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \right] + \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} \times \\
& \text{Im} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} \pm (asf^2 - 1) \cdot \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right\} \\
& \left. \text{Re} \left\{ \langle \hat{C}_{k\pm q,2}^\dagger \hat{C}_{k\pm q,1} \rangle \right\} \right\}. \tag{5.17}
\end{aligned}$$

# Capítulo 6

## DISCUSIÓN DE RESULTADOS

El siguiente capítulo se presenta el análisis del uso de las ecuaciones cinéticas cuánticas de movimiento para modelar la desmagnetización ultra-rápida de níquel después de ser irradiado con un pulso láser en fs. Poniendo énfasis en las diferentes implicaciones que acarrea tener un término como ec. (5.17).

### 6.1. Máxima probabilidad de cambio de espín ( $asf = 1$ )

La probabilidad en el cambio de espín ( $asf$ ) después del proceso de dispersión puede ser interpretado como la rapidez con que la población de los estados ocupados va a cambiar en el tiempo durante la relajación térmica. Este caso es interesante, ya que el comportamiento observado será el mismo para diferentes valores de  $asf$ , pero con menor tiempo de cálculo gastado.

Para este caso especial  $asf = 1$ , el valor de  $\alpha_{\uparrow}(asf, \mathbf{k}, t)$  en la ecuación (5.14) se convierte en:

$$\begin{aligned} \alpha_{\uparrow}(1, \mathbf{k}, t) &= \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |g_{\lambda}(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},1} - \epsilon_{\mathbf{k},1} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}) \left\{ \mathbf{Im} \{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k})\} \cdot \mathbf{Im} \{f_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})\} \right\} \\ &+ \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |g_{\lambda}(\mathbf{q})|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},2} - \epsilon_{\mathbf{k},1} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q},\lambda}) \left\{ \mathbf{Im} \{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k})\} \cdot \mathbf{Im} \{f_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})\} \right\}. \end{aligned}$$

De acuerdo con los resultados obtenidos (véase Fig. 6.1(b)), La parte imaginaria se puede aproximar a cero, lo que lleva a que  $\alpha_{\uparrow}(1, \mathbf{k}, t) = 0$ . Esto implica que ec. (5.14) se puede escribir como:



$$\frac{d\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} = FGR_{eq} \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{prime} \right) \quad (6.1)$$

y dar la primera idea intuitiva de por qué cuando se añade la distribución cinética cuántica y las correlaciones se puede obtener una expresión que se asemeja a la distribución de Fermi-Dirac.

## 6.2. Obviando términos de correlación

De las ecuaciones (5.14) y (5.15) se puede inferir que la única diferencia entre las ecuaciones cinético cuánticas del movimiento, bajo la aproximación de Markov y la regla de oro de Fermi, es la aparición de términos de correlación de dos bandas. Esto se puede demostrar analíticamente si ponemos los términos de correlación a cero en la ecuación (5.14), lo que lleva a  $\alpha_\uparrow(af, \mathbf{k}, t) = 0$ , ya que depende exclusivamente de la parte real e imaginaria de las dos bandas correlación y  $\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle_{prime} = \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle$ . Cuando se ignoran las correlaciones esto produce la expresión:

$$\frac{d\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} = FGR \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right). \quad (6.2)$$

Lo mismo se puede encontrar por la ec. (5.15):

$$\frac{d\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} = FGR \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right). \quad (6.3)$$

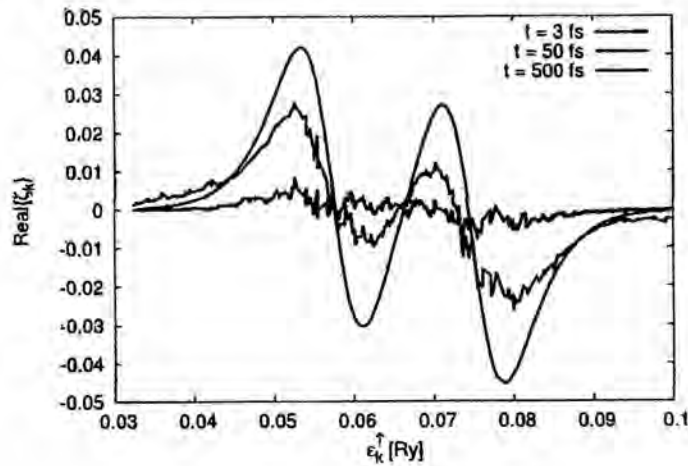
Se desprende de las ecuaciones (6.2) y (6.3) que la única diferencia con los dos tipos de cálculos es la parte de correlación y que las ecuaciones cinéticos cuánticos son una representación más general que la regla de oro de Fermi.

## 6.3. Análisis de las distribuciones para diferentes probabilidades de cambio de espín

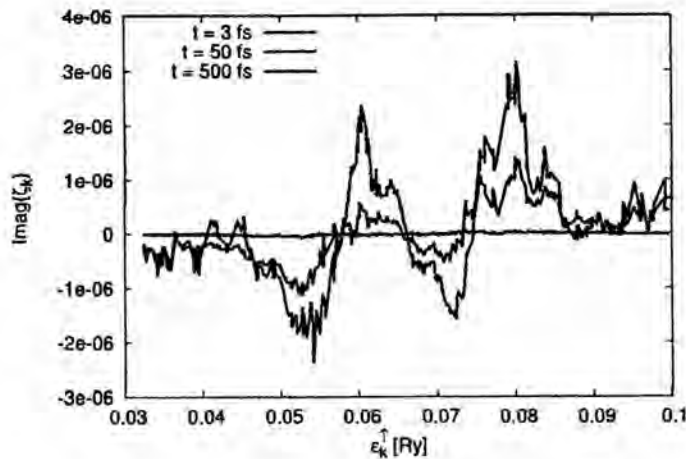
En lo que sigue se presentan dos casos. El primero es para  $af = 1$ , el límite superior hipotético, y el otro es el valor real de  $af$  para fcc níquel,  $af = \sqrt{0.19}$  (ver sec. 2.4).

### 6.3.1. Máxima probabilidad de cambio $asf = 1$

La Fig. 6.1 muestra los resultados de la parte real e imaginaria de las correlaciones  $\zeta_k$ . Cuando el tiempo aumenta las correlaciones aumentan cuantitativamente (con una parte real que es considerablemente más grande que la parte imaginaria), estas muestran también perturbaciones con amplitud monótonamente creciente al aumentar el tiempo  $t$ . De esta manera estas perturbaciones en el término de correlación tienen un máximo (mínimo), donde estas perturbaciones de la función de distribución tienen un mínimo (máximo).



(a)



(b)

Figura 6.1: Evolución en el tiempo de los términos de correlación. (a) la parte real de la correlación,  $\text{Re}\{\zeta_k\}$ . (b) la parte imaginaria de la correlación,  $\text{Im}\{\zeta_k\}$ . Las energías están en unidades de Rydberg.

Esta coincidencia de máximos y mínimos motiva a tener en cuenta la cantidad  $f' = f + asf \cdot \text{Re}\{\zeta_k\}$ . Otra motivación se da en sec. 6.1, donde por  $asf = 1$ , se demostró que la ecuación de movimiento para  $f$  reduce a un conjunto de términos que luego de considerar la modificación de las distribuciones de diferentes interacciones para  $\text{Re}\{\zeta_k\}$  conduce a una ecuación de movimiento como en la regla de oro de Fermi.

La Fig. 6.2 muestra la cantidad  $f' = f + asf \cdot \text{Re}\{\zeta_k\}$ . Esta cantidad tiene también perturbaciones para tiempos cortos, pero en un tiempo largo, la situación se desarrolla hasta que  $f'(\epsilon_k^\uparrow)$  parezca una distribución de Fermi-Dirac  $f_{FD}(\epsilon_k^\uparrow)$ . También muestra claramente la influencia de las correlaciones en la función de distribución  $f$  de un sistema de muchos electrones que interactúan.

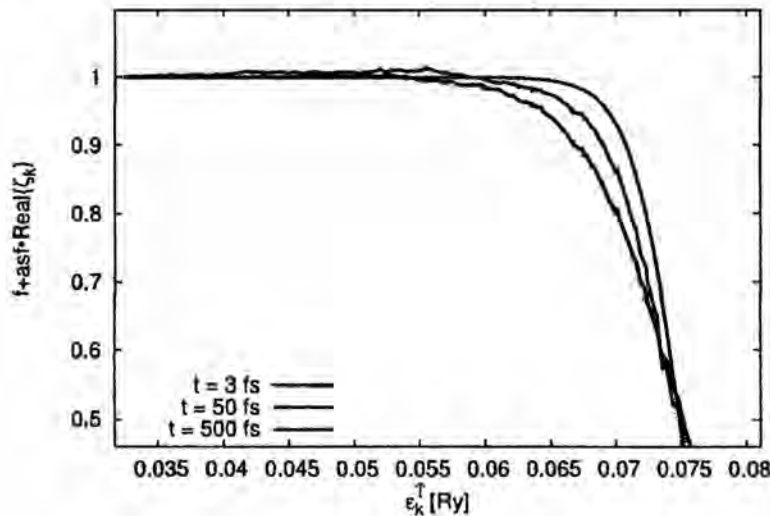


Figura 6.2: Evolución en el tiempo para la distribución cinética cuántica modificada.

### 6.3.2. Resultados para la probabilidad de cambio de espín $asf = \sqrt{0.19}$

Fig. 6.3 muestra los resultados para  $\text{Re}\{\zeta_k\}$ . Una vez más perturbaciones se desarrollan con un tiempo cada vez mayor. La amplitud de las perturbaciones aumenta en los primeros tiempos, pasa por un máximo y disminuye al aumentar aún más el tiempo  $t$ . Para mayores tiempos  $t$ ,  $\zeta_k$  sigue siendo distinto de cero pero exhibe valores insignificamente pequeñas, es decir, las correlaciones mueren eficazmente en un tiempo muy largo.

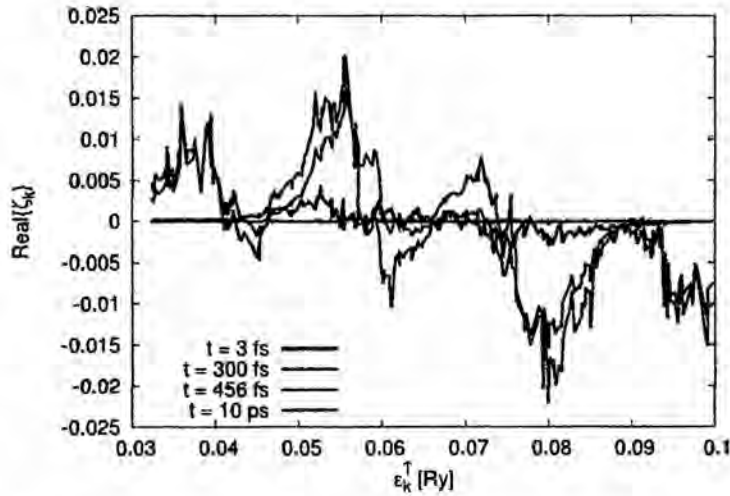


Figura 6.3: Evolución en el tiempo para la parte real de la correlación  $\text{Re}\{\zeta_k\}$ .

La Fig. 6.4 muestra  $f'(\epsilon_k^\dagger, t) = f(\epsilon_k^\dagger, t) + asf \cdot \text{Re}\{\zeta_k\}$ . De nuevo por mucho tiempo una situación se aborda para el que  $f'(\epsilon_k^\dagger)$  se parezca a una distribución de Fermi-Dirac  $f_{FD}(\epsilon_k^\dagger)$ , es decir, que vemos a través de  $f'$  en qué momento la situación de equilibrio se acercó. Cabe señalar que las correlaciones mueren eficazmente sólo para tiempos aún más largos, es decir, afectan a  $f$  incluso a veces para el momento en que el equilibrio ya se acercó. Por lo tanto tenemos que mirar también a  $f'$ , como en el caso anterior, con el fin de ver en qué momento el equilibrio se acercó.

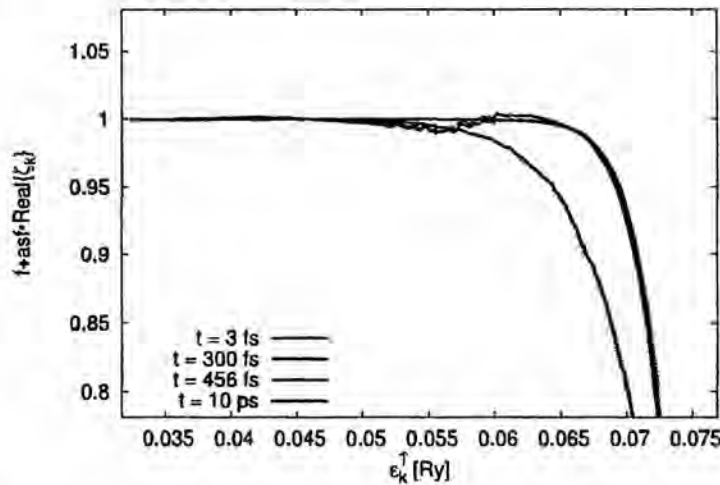


Figura 6.4: Evolución en el tiempo para la distribución cinética cuántica modificada.

Comparando las figuras (Fig. 6.2) y (Fig. 6.3) observamos que las fluctuaciones se disipan de forma más efectiva cuando el parámetro de cambio de espín ( $asf$ ) tiene su máximo valor; esto se puede ver claramente en la ec. (5.17) ya que cuando  $asf = 1$  el valor de las correlaciones cambian de manera simétrica.

## Capítulo 7

# CONCLUSIONES

El alcance de esta tesis es presentar los resultados obtenidos después de analizar analíticamente los resultados obtenidos por la implementación del procedimiento de desacoplamiento en la teoría cinética para el modelamiento de Niquel con un pulso láser de fs, por lo que la estructura de bandas ferromagnéticas fue modelada a través del tight-binding para bandas de Stoner.

Los resultados en el Capítulo 6, en particular los de sec.6.3, muestran que el comportamiento de  $\zeta_k$  para el caso de  $asf = 1$  presenta perturbaciones a diferentes tiempos  $t$ , los cuales se desarrollan en el tiempo para la distribución cinética cuántica  $f$  con valores que pueden ser mayor que 1. Este resultado es consecuencia de las aproximaciones utilizadas en las simulaciones debido a un procedimiento de desacoplamiento. Un hallazgo interesante de esta distribución  $f$  presentando perturbaciones es la posibilidad de escribir una distribución modificada  $f'$  añadiendo la correlación multiplicada por la probabilidad de cambio de espín  $f' = f + asf \cdot \zeta_k$ . Esta distribución modificada podría resultar útil para la interpretación de los resultados obtenidos para la distribución cuántica cinética  $f$ .

Para concluir, hemos demostrado que las correlaciones tienen un fuerte efecto sobre la función de distribución  $f$  y que  $f'$  alcanza la forma de una distribución de Fermi-Dirac, tan pronto como el sistema se ha relajado desde un estado de no equilibrio a un equilibrio térmico.

# Bibliografía

- [1] E. Beaurepaire, J.-C. Merle, A. Daunois, and J.-Y. Bigot, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4250 (1996).
- [2] B. Koopmans, G. Malinowski, F. Dalla Longa, D. Steiauf, M. Fähnle, T. Roth, M. Cinchetti, and M. Aeschlimann, *Nat. Mater.* **9**, 259 (2010).
- [3] M. Fähnle and C. Illg, *Journal of Physics: Condensed Matter* **23**, 493201 (2011).
- [4] C. Illg, M. Haag, and M. Fähnle, *Phys. Rev. B* **88**, 214404 (2013).
- [5] M. Haag, C. Illg, and M. Fähnle, *Phys. Rev. B* **90**, 014417 (2014).
- [6] D. T. Haar, *Reports on Progress in Physics* **24**, 304 (1961).
- [7] T. Kuhn, in *Theory of transport properties of semiconductor nanostructures*, edited by E. Schöll (Chapman and Hall, London) pp. 173–213.
- [8] J. Schilp, T. Kuhn, and G. Mahler, *Phys. Rev. B* **50**, 5435 (1994).
- [9] N. Teeny, in *Master Thesis* (2013).
- [10] A. Vaterlaus, T. Beutler, and F. Meier, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3314 (1991).
- [11] M. G. Münzenberg, *Nat. Mater.* **9**, 184 (2010).
- [12] C. Stamm and et al., *Nat. Mater.* **6**, 740 (2007).
- [13] B. Koopmans, M. van Kampen, J. T. Kohlhepp, and W. J. M. de Jonge, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 844 (2000).
- [14] M. Haag, in *Phd Thesis* (2015).
- [15] J. Walowski, G. Müller, M. Djordjevic, M. Münzenberg, M. Kläui, C. A. F. Vaz, and J. A. C. Bland, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 237401 (2008).
- [16] R. J. Elliott, *Phys. Rev.* **96**, 266 (1954).
- [17] Y. Yafet, in *Solid State Physics: Advances in Research and Applications*, Vol. 14, edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic, New York, 1963) pp. 1–98.

- [18] J. Fabian and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5624 (1998).
- [19] J. Stöhr and H. Siegmann, *Magnetism* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2006).
- [20] F. J. Arlinghaus and R. A. Reck, *Phys. Rev. B* **11**, 3488 (1975).
- [21] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, 2004).
- [22] G. C. Fletcher, *Proceedings of the Physical Society. Section A* **65**, 192 (1952).
- [23] H. Ibach and H. Lüth, *Solid State Physics*, Springer-Lehrbuch (Springer, 2009).
- [24] G. Mahan, *Many-Particle Physics*, Physics of Solids and Liquids (Springer, 2000).
- [25] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, college ed. (Harcourt College, 1976).
- [26] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications* (Springer, 2012).
- [27] N. Teeny and M. Fähnle, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **46**, 385302 (2013).



# Anexos

# Apéndice A

## Matriz de consistencia

Problema	Objetivos	Hipótesis	Metodología	Población
<p><b>Determinación del problema</b></p> <p>Una de las reglas fundamentales de la mecánica cuántica es el llamado principio de exclusión de Pauli. Este principio establece que no más de un electrón puede ocupar el mismo estado al mismo tiempo. Este principio se aplica solamente para partículas cuya función de onda sea antisimétrica, en otras palabras, fermiones. La probabilidad de que un estado electrónico <math> k\rangle</math> esté ocupado es</p> $p_k = \langle \Psi(t)   c_k^\dagger c_k   \Psi(t) \rangle = \sum_{i,j} d_i^* d_j \langle i   c_k^\dagger c_k   j \rangle.$ <p>Usando la acción de los operadores <math>c_k^\dagger</math>, <math>c_k</math> en los vectores base, se obtiene</p> $p_k = \sum_i  d_i ^2 \langle i   c_k^\dagger c_k   i \rangle \leq \sum_i  d_i ^2 \leq 1.$ <p>Al considerar un sistema interactivo de varios electrones con una perturbación «externa» debido a la interacción electrón-fonón. Por un lado, se puede resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y obtener la expresión para <math>d_i(t)</math>; pero por el otro, en la teoría de la densidad de matriz incoherente mixtura de estados <math> \Psi\rangle</math> es considerada, lo cual es generado debido al acoplamiento con el reservorio o «heat bath». En el primer tipo de teoría se obtiene una probabilidad dependiente del tiempo <math>p_k(t) \leq 1</math>. En el segundo tipo uno obtiene números de ocupación dependientes del tiempo los cuales también tienen que ser más pequeños o igual que 1, porque cada <math> \Psi\rangle</math> de la mixtura incoherente tiene números de ocupación menores o iguales a 1.</p> <p>Esto significa que los valores físicos de la función de distribución para electrones no deberían ser mayores que 1 y mucho menos negativos. Es en este sentido que el presente proyecto está orientado a encontrar el porque las fluctuaciones aparecen y como afectan el estudio del sistema simulado a través de la teoría cinética cuántica.</p> <p><b>Formulación del problema</b></p> <p>Se pretende resolver y analizar los siguientes interrogantes:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) ¿Es la aparición de estas fluctuaciones en la función de distribución para electrones un error numérico, el cual pueda ser corregido?</li> <li>2) ¿Será posible que la aparición de estas fluctuaciones en la función de distribución para electrones afectan la correcta simulación del sistema analizado?</li> </ol>	<p><b>Objetivo general</b></p> <p>Estudiar e interpretar como y porque estas fluctuaciones aparecen en las funciones de distribución y encontrar las posibles limitaciones en el uso de la teoría cinética cuántica en un sistema ferromagnético.</p> <p><b>Objetivos específicos</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Estudiar la dinámica en no-equilibrio de la desmagnetización de un sistema ferromagnético.</li> <li>2) Estudiar la teoría cinética cuántica en el marco de sistemas de varias partículas.</li> <li>3) Estudiar si alguna ecuación general puede ser derivada, tal que describa estas fluctuaciones.</li> <li>4) Estudiar el lenguaje de programación C++ para realizar las simulaciones.</li> </ol>	<p><b>Hipótesis general</b></p> <p>Teniendo en cuenta que el sistema de ecuaciones obtenidos debido al uso de la teoría cinética cuántica contienen no sólo términos relacionados a los números de ocupación (elementos diagonales de la matriz de densidad); sino también los términos de estados correlacionados (elementos no-diagonales de la matriz de densidad); es válido suponer, que en su evolución temporal, estos afectan la función de distribución de los electrones y puedan resultar en las fluctuaciones observadas.</p> <p><b>Hipótesis específicas</b></p> <p>Para corroborar la hipótesis es necesario encontrar una ecuación general para los elementos de la matriz de densidad, de tal manera que esta ecuación pueda ser analizada y así interpretar su comportamiento en diferentes escenarios. Las simulaciones serán realizadas a través del código C++ y un análisis detallado podría dar con la verdadera naturaleza de las fluctuaciones.</p>	<p><b>Tipo de investigación</b></p> <p>Esta investigación de tesis es de carácter teórico-aplicativo.</p> <p><b>Método</b></p> <p>La metodología utilizada es del tipo hipotético-deductivo.</p> <p><b>Diseño</b></p> <p>Primero nos enfocaremos en los principios y datos empíricos desarrollados para la teoría cinética cuántica, indagando profundamente en posibles indicios que puedan brindar una visión más general del tipo de ecuaciones halladas. De esta manera consecuencias aun desconocidas puedan aparecer y brindar las conclusiones adecuadas que podrían comprobarse después a través de una correcta simulación.</p> <p>Para lograr nuestro objetivo en la primera parte se presentara la teoría básica relacionada a la teoría cinética cuántica en el marco de la teoría de la matriz de densidad. El siguiente paso consistirá en modelar correctamente nuestro material ferromagnético. Una vez el sistema este bien definido y las ecuaciones analizadas al detalle, es necesario realizar simulaciones tal que muestren alguna anomalía que de indicios de una expresión general que pueda ser analizada.</p>	<p>Este trabajo teórico usa como población aquellos materiales ferromagnéticos que son usados en los experimentos de ultra-rápida desmagnetización, como son Hierro (Fe), Cobalto (Co) y Nickel (Ni). La muestra, de entre estos elementos, será el elemento Nickel (Ni).</p>

## Apéndice B

### Ecuaciones diferenciales inhomogeneas (IDE) para valores esperados de tres operadores

$$\begin{aligned}
 \frac{d \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} &= \left( \frac{i}{\hbar} \right) (\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,1} - \hbar \omega_{q,i}) \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,1} \rangle \\
 &+ \left( \frac{i}{\hbar} \right) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}^*(q) \langle \hat{b}_{q,i'}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right] \right. \\
 &+ asf \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right) + g_i^*(q) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right. \\
 &\left. \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - 1 \right) + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \\
 &\left. \left. \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - asf \right) \right] \right\}. \tag{B.1}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,1} \rangle}{dt} &= \left( \frac{i}{\hbar} \right) (\epsilon_{k-q,1} - \epsilon_{k,1} + \hbar \omega_{q,i}) \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,1} \rangle \\
 &+ \left( \frac{i}{\hbar} \right) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}(q) \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i'} \rangle \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right] \right. \\
 &+ asf \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) + g_i(q) \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \\
 &\left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) + \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \\
 &\left. \left. \left( asf - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right) \right] \right\}. \tag{B.2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right) (\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,2} - \hbar\omega_{q,i}) \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&+ \left(\frac{i}{\hbar}\right) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}^*(q) \langle \hat{b}_{q,i'}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \right. \\
&+ asf \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right) \left. \right] + g_i^*(q) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \\
&\left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - 1 \right) + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \\
&\left. \left. \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - asf \right) \right] \right\}. \tag{B.3}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right) (\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,2} - \hbar\omega_{q,i}) \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&+ \left(\frac{i}{\hbar}\right) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}^*(q) \langle \hat{b}_{q,i'}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \right. \\
&+ asf \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right) \left. \right] + g_i^*(q) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \\
&\left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - 1 \right) + \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \\
&\left. \left. \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - asf \right) \right] \right\}. \tag{B.4}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right) (\epsilon_{k-q,2} - \epsilon_{k,2} + \hbar\omega_{q,i}) \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&+ \left(\frac{i}{\hbar}\right) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}(q) \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i'} \rangle \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right. \right. \\
&+ asf \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right) \left. \right] + g_i(q) \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\left( 1 - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right) + \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&\left. \left. \left( asf - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) \right] \right\}. \tag{B.5}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle}{dt} &= \left( \frac{i}{\hbar} \right) (\epsilon_{k-q,1} - \epsilon_{k,2} + \hbar\omega_{q,i}) \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&+ \left( \frac{i}{\hbar} \right) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}(q) \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i'} \rangle [\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle] \right. \\
&+ asf (\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle) + g_i(q) \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\left. \left( 1 - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) + \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\left. \left. \left( asf - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right) \right] \right\}. \tag{B.6}
\end{aligned}$$

## Apéndice C

### Solución de las IDE bajo la aproximación de Markov

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,1} \rangle &= (\pi i) \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,1} - \hbar \omega_{q,i}) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}^*(q) \langle \hat{b}_{q,i'}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle \right. \\
 &\quad \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle + asf \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right) \right] + g_i^*(q) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right. \\
 &\quad \left( \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - 1 \right) + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \\
 &\quad \left. \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle + asf \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - asf \right) \right] \left. \right\}. \tag{C.1}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,1} \rangle &= (\pi i) \delta(\epsilon_{k-q,1} - \epsilon_{k,1} + \hbar \omega_{q,i}) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}(q) \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i'} \rangle \right. \\
 &\quad \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle + asf \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) \right] + g_i(q) \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \right. \\
 &\quad \left( 1 - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) + \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,1} \rangle \\
 &\quad \left. \left( asf - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right) \right] \left. \right\}. \tag{C.2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,2} \rangle &= (\pi i) \delta(\epsilon_{k+q,2} - \epsilon_{k,2} - \hbar \omega_{q,i}) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}^*(q) \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle \right. \\
&\quad \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle + a s f (\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\quad \left. - \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle) \right] + g_i^*(q) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \\
&\quad \left. (\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + a s f \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - 1) + \langle \hat{C}_{k+q,2}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right. \\
&\quad \left. (\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + a s f \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - a s f) \right] \left. \right\}. \tag{C.3}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,2} \rangle &= (\pi i) \delta(\epsilon_{k+q,1} - \epsilon_{k,2} - \hbar \omega_{q,i}) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}^*(q) \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle \right. \\
&\quad \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle + a s f (\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\quad \left. - \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle) \right] + g_i^*(q) \left[ \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,2} \rangle \right. \\
&\quad \left. (\langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + a s f \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - 1) + \langle \hat{C}_{k+q,1}^\dagger \hat{C}_{k+q,1} \rangle \right. \\
&\quad \left. (\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle + a s f \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - a s f) \right] \left. \right\}. \tag{C.4}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{b}_{q,i} \hat{C}_{k,2} \rangle &= (\pi i) \delta(\epsilon_{k-q,2} - \epsilon_{k,2} + \hbar \omega_{q,i}) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}(q) \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i} \rangle \right. \\
&\quad \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle + a s f (\langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\quad \left. - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle) \right] + g_i(q) \left[ \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\quad \left. (1 - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle - a s f \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle) + \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\quad \left. (a s f - \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle - a s f \langle \hat{C}_{k-q,2}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle) \right] \left. \right\}. \tag{C.5}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle &= (\pi i) \delta(\epsilon_{k-q,1} - \epsilon_{k,2} + \hbar \omega_{q,i}) \left\{ \sum_{i'} g_{i'}(q) \langle \hat{b}_{q,i}^\dagger \hat{b}_{q,i'} \rangle \right. \\
&\quad \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle + asf \left( \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right) \right] + g_i(q) \left[ \langle \hat{C}_{k,1}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \right. \\
&\quad \left( 1 - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle \right) + \langle \hat{C}_{k,2}^\dagger \hat{C}_{k,2} \rangle \\
&\quad \left. \left. \left( asf - \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,2} \rangle - asf \langle \hat{C}_{k-q,1}^\dagger \hat{C}_{k-q,1} \rangle \right) \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{C.6}$$