

LECTURE 5

Magnetismo Cuántico en una Dimensión

6.1. Red Diente de Sierra

En la clase anterior vimos que, a bajas energías, un modelo de Hubbard a banda semillena se reduce a un modelo de Heisenberg para $U/|t|$ lo suficientemente grande. Veamos ahora el ejemplo concreto del modelo de Hubbard definido sobre una red “Diente de Sierra” como se muestra en la figura 1:

$$\mathcal{H}_{\text{Hubb}} = t_{AA} \sum_{js} (c_{2js}^\dagger c_{2j+2s} + c_{2j+2s}^\dagger c_{2js}) + t_{AB} \sum_{ls} (c_{ls}^\dagger c_{l+1s} + c_{l+1s}^\dagger c_{ls}) + U \sum_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow}.$$

El Hamiltoniano efectivo se obtiene aplicando la transformación canónica

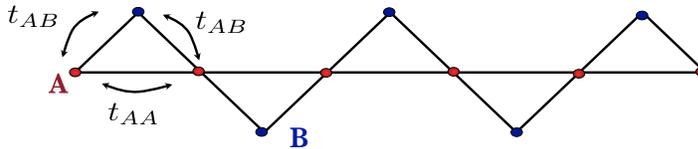


Figure 1. Hamiltoniano de Hubbard definido sobre una red Diente de Sierra.

que introdujimos en la clase anterior:

$$(6.1) \quad \tilde{\mathcal{H}} = J_{AA} \sum_j \mathbf{S}_{2j} \cdot \mathbf{S}_{2j+2} + J_{AB} \sum_l \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1},$$

con $J_{AA} = 4t_{AA}^2/U$ y $J_{AB} = 4t_{AB}^2/U$. El Hamiltoniano efectivo $\tilde{\mathcal{H}}$ está ilustrado en la figura 2.

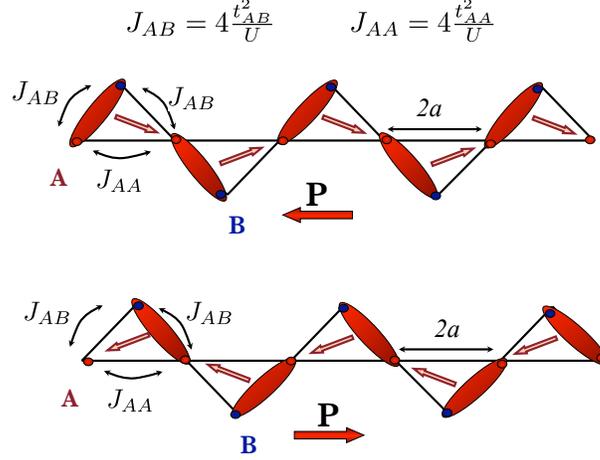


Figure 2. Hamiltoniano de Heisenberg definido sobre una red Diente de Sierra que se obtiene en el límite de acoplamiento fuerte del modelo de Hubbard ilustrado en la figura 1. Cada óvalo representa un estado singlete entre los sitios correspondientes.

Para encontrar los estados fundamentales de (6.1) reescribiremos $\tilde{\mathcal{H}}$ como una suma de Hamiltonianos sobre las unidades o plaquetas triangulares que conforman la red Diente de Sierra:

$$(6.2) \quad \tilde{\mathcal{H}} = \sum_j \tilde{\mathcal{H}}_j$$

donde

$$(6.3) \quad \tilde{\mathcal{H}}_j = J_{AB} \mathbf{S}_{2j+1} \cdot (\mathbf{S}_{2j} + \mathbf{S}_{2j+2}) + J_{AA} \mathbf{S}_{2j} \cdot \mathbf{S}_{2j+2}.$$

En particular $\tilde{\mathcal{H}}_j$ se puede reescribir de la siguiente manera:

$$(6.4) \quad \tilde{\mathcal{H}}_j = \frac{J_{AB}}{2} (\mathbf{S}_{2j+1} + \mathbf{S}_{2j} + \mathbf{S}_{2j+2})^2 + (J_{AA} - J_{AB}) \mathbf{S}_{2j} \cdot \mathbf{S}_{2j+2} - \frac{9J_{AB}}{8}.$$

Supongamos ahora que $J_{AA} = J_{AB}$. En este caso el Hamiltoniano $\tilde{\mathcal{H}}_j$ se reduce a:

$$(6.5) \quad \tilde{\mathcal{H}}_j = \frac{J_{AB}}{2} (\mathbf{S}_{2j+1} + \mathbf{S}_{2j} + \mathbf{S}_{2j+2})^2 - \frac{9J_{AB}}{8}.$$

Notemos que $\mathbf{S}_{2j+1} + \mathbf{S}_{2j} + \mathbf{S}_{2j+2}$ es el espín total en el triángulo j , es decir que $\tilde{\mathcal{H}}_j$ se diagonaliza en la base de estados de espín total definido en el triángulo j . Dado que se trata de tres espines 1/2, los estados de espín total definido son dos dobletes de espín 1/2 con energía $-3J_{AB}/4$ y un cuarteto

de espín $3/2$ con energía $3J_{AB}/4$. En particular, esto implica que cualquier estado que contenga un singlete en cada triángulo de la red Diente de Sierra es un estado fundamental de cada $\tilde{\mathcal{H}}_j$ y, por lo tanto, es también un estado fundamental de $\tilde{\mathcal{H}}$. De acuerdo con esta observación, los dos estados

$$(6.6) \quad |\Psi_g^\pm\rangle = \frac{1}{2^{N/2}} \prod_j (\tilde{c}_{2j\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{2j\pm 1\downarrow}^\dagger - \tilde{c}_{2j\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{2j\pm 1\uparrow}^\dagger) |0\rangle.$$

que se muestran en la figura 2 son estados fundamentales de $\tilde{\mathcal{H}}$. Veamos ahora cómo es la redistribución de carga electrónica en $|\Psi_g^\pm\rangle$. Para ello necesitamos evaluar el valor medio del operador efectivo de densidad de carga, $\tilde{\rho}_l$, que según vimos en la clase anterior está dado por:

$$(6.7) \quad \begin{aligned} \tilde{\rho}_{2j+1} &= e + e \frac{8t_{AB}^2 t_{AA}}{U^3} [\mathbf{S}_{2j+1} \cdot (\mathbf{S}_{2j} + \mathbf{S}_{2j+2}) - 2\mathbf{S}_{2j} \cdot \mathbf{S}_{2j+2}] \\ \tilde{\rho}_{2j} &= e + e \frac{8t_{AB}^2 t_{AA}}{U^3} [\mathbf{S}_{2j} \cdot (\mathbf{S}_{2j+1} + \mathbf{S}_{2j+2}) - 2\mathbf{S}_{2j+1} \cdot \mathbf{S}_{2j+2} \\ &+ \mathbf{S}_{2j} \cdot (\mathbf{S}_{2j-1} + \mathbf{S}_{2j-2}) - 2\mathbf{S}_{2j-1} \cdot \mathbf{S}_{2j-2}] \end{aligned}$$

Antes de evaluar los valores medios de estos operadores en los estados fundamentales $|\Psi_g^\pm\rangle$, es conveniente notar que $\langle \tilde{\rho}_l \rangle = e \forall l$ en el límite de altas temperaturas $T \gg J_{AB}$, ya que $\langle \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_k \rangle \rightarrow 0 \forall l$ y k . Veamos ahora qué ocurre cuando el sistema rompe la simetría a temperatura zero ($T = 0$) eligiendo uno de los estados fundamentales $|\Psi_g^\pm\rangle$:

$$(6.8) \quad \begin{aligned} \langle \Psi_g^\pm | \tilde{\rho}_{2j+1} | \Psi_g^\pm \rangle &= e \left[1 - 6 \frac{t_{AB}^2 t_{AA}}{U^3} \right] \\ \langle \Psi_g^- | \tilde{\rho}_{2j+1} | \Psi_g^- \rangle &= e \left[1 + 12 \frac{t_{AB}^2 t_{AA}}{U^3} - 6 \frac{t_{AB}^2 t_{AA}}{U^3} \right] \\ \langle \Psi_g^+ | \tilde{\rho}_{2j+1} | \Psi_g^+ \rangle &= e \left[1 - 6 \frac{t_{AB}^2 t_{AA}}{U^3} + 12 \frac{t_{AB}^2 t_{AA}}{U^3} \right] \end{aligned}$$

Claramente la densidad de carga es ahora distinta en las subredes A y B , o equivalentemente, en los sitios pares y los impares. Por otro lado está claro que la distribución de carga es la misma para los dos estados fundamentales, $|\Psi_g^\pm\rangle$, de modo que el parámetro de orden que distingue entre estos dos estados no es una onda de densidad de carga. La diferencia entre los dos estados fundamentales aparece cuando analizamos el mecanismo de redistribución de la densidad de carga. La interpretación de la ecuación (6.8) es muy simple. En cada triángulo de la red Diente de Sierra, cada uno de los dos sitios que están conectados entre sí por un singlete entregan una carga $6et_{AB}^2 t_{AA}/U^3$ al tercer sitio del triángulo. La carga entregada por los sitios de la subred B se desplaza una distancia a a lo largo del eje x , mientras que la carga entregada por los sitios de la subred A se desplaza una

distancia $2a$ en la misma dirección. En particular, la carga electrónica de desplaza a la derecha en el estado $|\Psi_g^+\rangle$ y a la izquierda en el estado $|\Psi_g^-\rangle$. Esto significa que la polarización por celda unidad es:

$$(6.9) \quad \langle \Psi_g^\pm | \mathbf{P} | \Psi_g^\pm \rangle = \pm 18eat_{AB}^2 t_{AA} \hat{x} / U^3,$$

como se muestra en la figura (2).

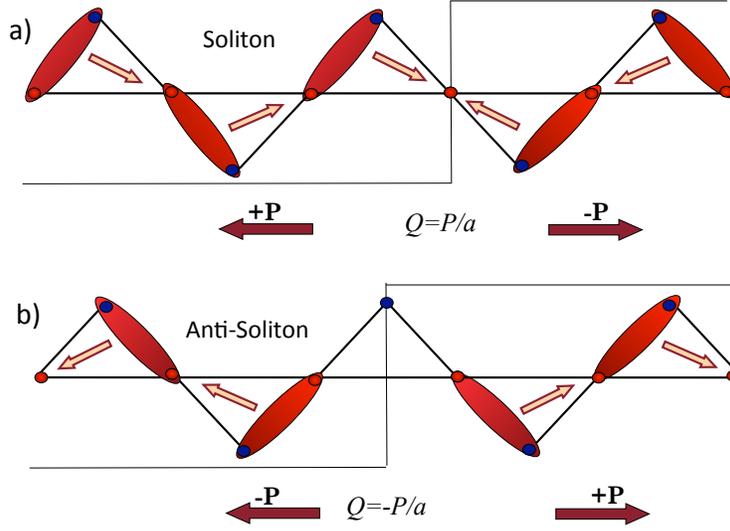


Figure 3. Solitón que también es un estado fundamental de $\tilde{\mathcal{H}}$.

Veamos ahora qué ocurre si creamos el solitón que se muestra en la figura 3a), es decir, una transición abrupta del estado $|\Psi_g^+\rangle$ al estado $|\Psi_g^-\rangle$ alrededor de un sitio dado $2k$.

$$(6.10) \quad |\Psi_g^{ks}\rangle = \frac{1}{2^{N/2}} \prod_{j < k} (\bar{c}_{2j\uparrow}^\dagger \bar{c}_{2j+1\downarrow}^\dagger - \bar{c}_{2j\downarrow}^\dagger \bar{c}_{2j+1\uparrow}^\dagger) \bar{c}_{2ks}^\dagger \prod_{j > k} (\bar{c}_{2j\uparrow}^\dagger \bar{c}_{2j-1\downarrow}^\dagger - \bar{c}_{2j\downarrow}^\dagger \bar{c}_{2j-1\uparrow}^\dagger) |0\rangle.$$

A estos solitones se los suele llamar también espinones porque portan espín $1/2$. Está claro que este estado solitónico es también un estado fundamental porque satisface la condición de tener un singlete por triángulo. Si ahora calculamos el valor medio de la densidad de carga en el sitio $2k$ obtenemos

$$(6.11) \quad \langle \Psi_g^{ks} | \tilde{\rho}_{2k} | \Psi_g^{ks} \rangle = e \left[1 + 24 \frac{t_{AA} t_{AB}^2}{U^3} \right],$$

mientras que la densidad de carga en los demás sitios es la misma que la que obtuvimos para los estados $|\Psi_g^\pm\rangle$. En otras palabras, el solitón que hemos

creado posee una carga eléctrica

(6.12)

$$Q = \langle \Psi_g^{ks} | \tilde{\rho}_{2k} | \Psi_g^{ks} \rangle - \langle \Psi_g^+ | \tilde{\rho}_{2k} | \Psi_g^+ \rangle = \langle \Psi_g^+ | \mathbf{P} \cdot \hat{\mathbf{x}} | \Psi_g^+ \rangle / a = 18e \frac{t_{AA} t_{AB}^2}{U^3}.$$

Algo notable de este resultado es que los solitones portan una carga eléctrica que es una fracción arbitraria de e .

Por último es interesante notar que el antisolitón porta una carga eléctrica de signo opuesto, es decir que la carga topológica es proporcional a la carga eléctrica. La figura 3b) ilustra el estado correspondiente a un antisolitón. Sin embargo es importante tener en cuenta que tal estado no es un autoestado de \mathcal{H} ya que el triángulo donde se centra el defecto no contiene ningún singlete. La determinación de los autoestados exactos que corresponden a la creación de un antisolitón respecto de uno de los estados fundamentales $|\Psi_g^\pm\rangle$ está más allá del objetivo de este curso. Simplemente diremos que estas excitaciones elementales tienen una relación de dispersión cuadrática, $\omega = k^2/2m^*$, en el límite de longitud de onda larga $k \ll 1$. La masa efectiva m^* es proporcional a $1/J$.

6.2. Transformación de Jordan-Wigner

En esta sección introduciremos una transformación muy útil ya que revela muchas de las propiedades fundamentales de Hamiltonianos unidimensionales de espines interactuantes. Supongamos que c_j^\dagger y c_j son operadores de creación y destrucción de fermiones sin espín:

$$(6.13) \quad \{c_j^\dagger, c_k\} = \delta_{jk} \quad \{c_j, c_k\} = \{c_j^\dagger, c_k^\dagger\} = 0.$$

Es simple verificar que los operadores de espín $1/2$ S_j^+ , S_j^- y S_j^z se pueden expresar enteramente en función de los operadores fermiónicos:

$$(6.14) \quad \begin{aligned} S_j^+ &= c_j^\dagger e^{i\pi \sum_{r<j} n_r}, \\ S_j^- &= e^{i\pi \sum_{r<j} n_r} c_j, \\ S_j^z &= n_j - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Para confirmar que esta transformación es válida simplemente tenemos que verificar que los operadores de espín satisfacen las relaciones de conmutación apropiadas:

$$(6.15) \quad [S_j^\mu, S_k^\nu] = i\epsilon^{\mu\nu\eta} S_j^\eta \delta_{jk}.$$

Las identidades (6.14) se conocen como transformación de Jordan-Wigner. La relaciones de anticonmutación de los operadores c_j^\dagger y c_j en el mismo

sitio son las mismas que las satisfechas por las matrices de Pauli (los factores exponenciales se cancelan en este caso). Por otro lado, los factores exponenciales transmutan las relaciones de anticonmutación en relaciones de conmutación para operadores fermiónicos que crean o destruyen partículas en sitios diferentes. Claramente la transformación de Jordan-Wigner no es unitaria ya que no conserva las relaciones de conmutación.

Para verificar que los operadores no locales $e^{i\pi \sum_{r<j} n_r}$ transmutan la estadística entre fermiones y bosones calcularemos el conmutador $[S_j^+, S_l^+]$ usando las expresiones fermiónicas para S_j^+ y S_l^+ . Sin pérdida de generalidad supondremos que $j \leq l$:

$$\begin{aligned}
S_j^+ S_l^+ &= c_j^\dagger e^{i\pi \sum_{r<j} n_r} e^{i\pi \sum_{p<l} n_p} c_l^\dagger \\
&= c_j^\dagger e^{i\pi \sum_{r<j} n_r} e^{i\pi \sum_{p<l} n_p} c_l^\dagger \\
&= c_j^\dagger e^{i\pi \sum_{j \leq p < l} n_p} c_l^\dagger \\
&= -c_l^\dagger c_j^\dagger e^{i\pi \sum_{j \leq p < l} n_p} \\
&= c_l^\dagger e^{i\pi \sum_{j \leq p < l} n_p} c_j^\dagger \\
(6.16) \quad &= c_l^\dagger e^{i\pi \sum_{p<l} n_p} e^{i\pi \sum_{r<j} n_r} c_j^\dagger = S_l^+ S_j^+
\end{aligned}$$

Es útil escribir también la expresión de los operadores fermiónicos en función de los operadores de espín:

$$\begin{aligned}
c_j^\dagger &= S_j^+ e^{i\pi \sum_{r<j} (S_r^z + 1/2)}, \\
c_j &= e^{i\pi \sum_{r<j} (S_r^z + 1/2)} S_j^-, \\
(6.17) \quad n_j &= S_j^z + \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

A menos de una fase global, los transmutadores de la estadística, $e^{i\pi \sum_{r<j} (S_r^z + 1/2)}$, corresponden a una rotación de todos los espines r a la izquierda del considerado ($r < j$) en un ángulo π alrededor del eje z . En otras palabras, el operador c_j^\dagger crea un solitón centrado en el sitio j mientras que el operador c_j lo destruye.

Es simple verificar que:

$$\begin{aligned}
S_j^+ S_{j+1}^+ &= c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger, \\
(6.18) \quad S_j^+ S_{j+1}^- &= c_j^\dagger c_{j+1}.
\end{aligned}$$

Como veremos en la secciones siguientes, estas relaciones son muy útiles para resolver ciertos modelos de espines interactuantes.

Por último es importante notar que la transformación de Jordan-Wigner para espín $1/2$ se puede generalizar a cualquier espín. En particular, discutiremos el caso de $S = 1$ para ilustrar la idea. En este caso introduciremos operadores de creación y destrucción de fermiones constreñidos de espín

$s = 1/2$ como los que usamos para derivar el modelo $t - J$ a partir del modelo de Hubbard [Ec.(5.9)]:

$$(6.19) \quad \begin{aligned} \bar{c}_{js}^\dagger &= \bar{c}_{j\bar{s}}^\dagger (1 - n_{j\bar{s}}), \\ \bar{c}_{js} &= (1 - n_{j\bar{s}}) \bar{c}_{j\bar{s}}. \end{aligned}$$

Si S_j^ν son ahora componentes de espines $S = 1$ localizados en sitios j de una cadena lineal, la transformación de Jordan-Wigner generalizada es:

$$(6.20) \quad \begin{aligned} S_j^+ &= \sqrt{2}(\bar{c}_{j\uparrow}^\dagger e^{i\pi \sum_{k<j} \bar{n}_k} + e^{-i\pi \sum_{k<j} \bar{n}_k} \bar{c}_{j\downarrow}) \\ S_j^- &= \sqrt{2}(\bar{c}_{j\downarrow}^\dagger e^{i\pi \sum_{k<j} \bar{n}_k} + e^{-i\pi \sum_{k<j} \bar{n}_k} \bar{c}_{j\uparrow}) \\ S_j^z &= \bar{n}_{j\uparrow} - \bar{n}_{j\downarrow}. \end{aligned}$$

La inversa de la transformación (6.20) está dada por las siguientes relaciones:

$$(6.21) \quad \begin{aligned} f_j^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\pi \sum_{k<j} (\bar{S}_k^z)^2} S_j^+, \\ f_j &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\pi \sum_{k<j} (\bar{S}_k^z)^2} S_j^-, \end{aligned}$$

$$(6.22) \quad \begin{aligned} \bar{c}_{j\uparrow}^\dagger &= S_j^z f_j^\dagger, & \bar{c}_{j\uparrow} &= f_j S_j^z, \\ \bar{c}_{j\downarrow}^\dagger &= -S_j^z f_j, & \bar{c}_{j\downarrow} &= -f_j^\dagger S_j^z, \end{aligned}$$

Esta transformación permite mapear modelos $t - J$ unidimensionales (y sus extensiones) en modelos de espines ($S = 1$) interactuantes.

Exercise 19. Para un modelo de Heisenberg definido sobre un triángulo equilátero (tres sitios conectados por una interacción de intercambio J) construya un estado fundamental que tiene un valor medio no nulo del operador densidad de corriente en cada “bond”.

Exercise 20. Verifique que los operadores de espín obtenidos a partir de una transformación de Jordan-Wigner de los operadores fermiónicos c_j^\dagger y c_j satisfacen las relaciones de conmutación (6.15).

Exercise 21. Derive las identidades (6.18) a partir de (6.14). Demuestre la siguiente generalización de (6.18):

$$(6.23) \quad \begin{aligned} S_j^+ S_{j+p}^+ &= c_j^\dagger c_{j+p}^\dagger e^{i\pi \sum_{j \leq r < j+p} n_r}, \\ S_j^+ S_{j+p}^- &= c_j^\dagger c_{j+p} e^{i\pi \sum_{j \leq r < j+p} n_r}. \end{aligned}$$

Exercise 22. Usando la transformación the Jordan-Wigner generalizada (6.20) demuestre que el siguiente Hamiltoniano de espines $S = 1$:

$$(6.24) \quad H = J \sum_j [\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} + (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1})^2],$$

se mapea en el modelo $t - J$ generalizado

$$(6.25) \quad H = -J \sum_{js} (\bar{c}_{js}^\dagger \bar{c}_{j+1s} + \bar{c}_{j+1s}^\dagger \bar{c}_{js}) + 2J \sum_j \mathbf{s}_j \cdot \mathbf{s}_{j+1} + 2J \sum_j (1 - \bar{n}_j + \frac{3}{4} \bar{n}_j \bar{n}_{j+1}).$$

Exercise 23. Demuestre que los operadores f_j^\dagger y f_j tienen la siguiente propiedad:

$$(6.26) \quad \{f_j^\dagger, f_j\} = \{S_j^+, S_j^-\}$$

donde S_j^+ y S_j^- son componentes de un espín $S = 1$.