

LECTURE 7

Modelo de Ising Cuántico

8.1. Modelo de Ising en Campo Transverso

Uno de los modelos más estudiados en el contexto de magnetismo es el modelo de Ising. Este modelo describe un sistema de espines con una interacción de intercambio (ferro o antiferromagnética) para una única componente de los espines. A diferencia del modelo XY en que la anisotropía uniaxial de la interacción de intercambio favorece cualquier orientación de los momentos dentro del plano XY , la interacción de Ising favorece las dos orientaciones posibles a lo largo de un eje dado. Por este motivo, a dicho eje se lo suele llamar “eje-fácil” (easy-axis). En particular, si elegimos tal eje como la componente z de nuestros espines, nos encontramos con que la interacción de Ising entre dos espines en los sitios j y l es de la forma $S_j^z S_l^z$. A continuación consideraremos el caso de un sistema de espines $1/2$ con una interacción de Ising a primeros vecinos y en presencia de un campo magnético uniforme en una dirección transversal al eje fácil:

$$(8.1) \quad \mathcal{H}_I = -Jg \sum_j \sigma_j^x - J \sum_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z.$$

\mathcal{H}_I está definido sobre una cadena lineal de N sitios y supondremos siempre que $N \rightarrow \infty$ para independizarnos de las condiciones de contorno y mantener simetría de translación. Por conveniencia de notación hemos usado las matrices de Pauli σ_j^ν para escribir \mathcal{H}_I . Notemos que la interacción de intercambio J difiere en un factor 4 de la que aparece cuando usamos los operadores de espín en lugar de las matrices de Pauli. Por otro lado hemos escrito el acoplamiento Zeeman como el producto de una cantidad adimensional g y la constante de intercambio J . La cantidad $1/g$ es una medida

de cuan fuertemente acoplados están nuestros espines respecto de su interacción con el campo externo. En particular diremos que los espines están débilmente acoplados para $g \gg 1$ y fuertemente acoplados para $g \ll 1$. El modelo descrito por el Hamiltoniano \mathcal{H}_I suele llamarse *modelo de Ising en un campo transverso* o *modelo de Ising cuántico*.

Antes de comenzar a diagonalizar \mathcal{H}_I es conveniente desarrollar un poco de intuición física acerca del resultado que esperamos obtener. Para ello introduciremos los autoestados de σ_j^z , $\sigma_j^z |\uparrow\rangle_j = |\uparrow\rangle_j$ y $\sigma_j^z |\downarrow\rangle_j = -|\downarrow\rangle_j$, que naturalmente proveen la base natural para describir los autoestados de \mathcal{H}_I en el límite de acoplamiento fuerte $g = 0$. En otras palabras, \mathcal{H}_I se reduce al modelo de Ising clásico y es diagonal en la base de estados $\{|\uparrow\rangle_j, |\downarrow\rangle_j\}$. En particular hay dos estados fundamentales que son los estados totalmente polarizados:

$$(8.2) \quad \begin{aligned} |\Psi_0^\uparrow(g=0)\rangle &= \otimes_j |\uparrow\rangle_j \\ |\Psi_0^\downarrow(g=0)\rangle &= \otimes_j |\downarrow\rangle_j \end{aligned}$$

donde sin pérdida de generalidad hemos supuesto que $J > 0$. Los estados excitados de más baja energía aparecen a energía $2J$ y corresponden a solitones o antisolitones que se pueden crear alrededor de cualquier bond $l, l+1$:

$$(8.3) \quad \begin{aligned} \Psi_s^l(g=0)\rangle &= \otimes_{j \leq l} |\uparrow\rangle_j \otimes_{j > l} |\downarrow\rangle_j \\ \Psi_{as}^l(g=0)\rangle &= \otimes_{j \leq l} |\downarrow\rangle_j \otimes_{j > l} |\uparrow\rangle_j \end{aligned}$$

Por otro lado, los operadores σ_j^x son no diagonales en esta base y por lo tanto inducen “tunelling” cuántico entre diferentes autoestados de $\mathcal{H}_I(g=0)$. Es interesante estudiar el efecto de este “tunelling” inducido por el término de Zeeman en función de g . En principio hay dos límites, $g \gg 1$ y $g \ll 1$ en que el análisis se simplifica significativamente. Comencemos con el límite de acoplamiento fuerte $g \ll 1$. En este límite sabemos que el estado fundamental [ver ec.(8.4)] está doblemente degenerado debido a la ruptura espontánea de la simetría global de rotación en un ángulo π alrededor del eje x . Estos estados fundamentales se pueden corregir a primer orden en g para obtener:

$$(8.4) \quad \begin{aligned} |\Psi_0^\uparrow(g)\rangle &\simeq |\Psi_0^\uparrow(g=0)\rangle + \frac{g}{2} \sum_j S_j^- |\Psi_0^\uparrow(g=0)\rangle + \mathcal{O}(g^2), \\ |\Psi_0^\downarrow(g)\rangle &\simeq |\Psi_0^\downarrow(g=0)\rangle + \frac{g}{2} \sum_j S_j^+ |\Psi_0^\downarrow(g=0)\rangle + \mathcal{O}(g^2). \end{aligned}$$

Los nuevos estados fundamentales difieren levemente (en sólo un espín dado vuelta) de los estados no perturbados (8.4). La situación es un poco

distinta para los solitones y antisolitones (8.5) que encontramos como excitaciones de más baja energía. Estos estados están altamente degenerados (hay N solitones y N antisolitones con la misma energía) y la perturbación conecta pares de estos estados a primer orden en g . La teoría de perturbaciones degeneradas nos dice que tenemos que diagonalizar la proyección de \mathcal{H}_I sobre el subespacio generado por los estados solitónicos (8.5). Al realizar tal proyección nos encontramos con un modelo efectivo para la dinámica de los solitones y antisolitones. Este hamiltoniano consiste simplemente en un término de hopping a primeros vecinos con amplitud $-g$. Por lo tanto, los nuevos autoestados a primer orden en g son solitones y antisolitones con momento k definido:

$$(8.5) \quad \begin{aligned} |\Phi_s^k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{ikl} |\Psi_s^l\rangle, \\ |\Phi_{as}^k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{ikl} |\Psi_{as}^l\rangle, \end{aligned}$$

y relación de dispersión correspondiente es

$$(8.6) \quad \omega_k(g \ll 1) = 2J - 2gJ \cos k + \mathcal{O}(g^2).$$

Una vez que hemos caracterizado el estado fundamental y las excitaciones elementales de \mathcal{H}_I en el régimen de acoplamiento fuerte $g \ll 1$, veamos ahora qué ocurre en el régimen de acoplamiento débil $g \gg 1$. En este caso debemos usar $1/g$ como parámetro perturbativo. Claramente, el estado fundamental en el límite $g \rightarrow \infty$ corresponde al estado totalmente polarizado en la dirección $+\hat{x}$:

$$(8.7) \quad |\Psi_g(g \rightarrow \infty)\rangle = \otimes_j |\rightarrow\rangle_j,$$

con

$$(8.8) \quad \begin{aligned} |\rightarrow\rangle_l &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_l + |\downarrow\rangle_l), \\ |\leftarrow\rangle_l &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_l - |\downarrow\rangle_l). \end{aligned}$$

Las excitaciones de más baja energía corresponden a dar vuelta un espín:

$$(8.9) \quad |\Psi_e^l(g \rightarrow \infty)\rangle = \otimes_{j \neq l} |\rightarrow\rangle_j \otimes |\leftarrow\rangle_l,$$

y la energía de excitación correspondiente es $2gJ$. Es decir que, al igual que en el régimen de acoplamiento fuerte, el espectro de bajas energías tiene un gap. La inclusión del término de interacción a primer orden nuevamente remueve la degeneración de los estados excitados $|\Psi_e^l(g \rightarrow \infty)\rangle$. Al proyectar la perturbación sobre el subespacio generado por los estados $|\Psi_e^l(g \rightarrow \infty)\rangle$

nos encontramos nuevamente con que los únicos elementos de matriz que no se anulan son los que conectan l con $l \pm 1$:

$$(8.10) \quad -J \sum_j \langle \Psi_e^l(g \rightarrow \infty) | \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z | \Psi_e^{l+1}(g \rightarrow \infty) \rangle = -J,$$

para todo l . Es decir que nuevamente la inclusión de la perturbación a primer orden da lugar a un hopping a primeros vecinos del espín que esta dado vuelta. Los autoestados vuelven a ser excitaciones con momento k definido:

$$(8.11) \quad |\Phi_e^k(g \gg 1)\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} |\Psi_e^l(g \rightarrow \infty)\rangle,$$

y relación de dispersión

$$(8.12) \quad \omega_k(g \gg 1) = 2gJ - 2J \cos k + \mathcal{O}(J/g).$$

8.2. Solución Exacta

El primer paso para diagonalizar \mathcal{H}_I es pasar a un nuevo sistema de referencia que se obtiene a partir rotación global de $\pi/2$ alrededor del eje y . Tal rotación transforma la componentes de cada espín del siguiente modo:

$$(8.13) \quad \sigma_j^x \rightarrow -\sigma_j^z, \quad \sigma_j^z \rightarrow \sigma_j^x, \quad \sigma_j^y \rightarrow \sigma_j^y.$$

La expresión de \mathcal{H}_I en el nuevo sistema de referencia es:

$$(8.14) \quad \mathcal{H}_I = Jg \sum_j \sigma_j^z - J \sum_j \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x.$$

Aplicando la transformación de Jordan-Wigner (6.14) obtenemos una nueva expresión de \mathcal{H}_I en función de operadores de creación y destrucción fermiónicos:

$$(8.15) \quad \mathcal{H}_I = -J \sum_j (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_{j+1} c_j - 2gc_j^\dagger c_j - g).$$

Los términos anómalos de la forma $c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger$ violan la conservación del número de partículas tal como se espera para un Hamiltoniano que no conserva ninguna componente de la magnetización total. Esto implica que los autoestados de \mathcal{H} no tienen un número bien definido de partículas. Sin embargo, es importante notar que \mathcal{H}_I es cuadrático en los operadores fermiónicos y por lo tanto se puede diagonalizar por medio de una simple transformación unitaria. El primer paso para aplicar dicha transformación es pasar al espacio de momento,

$$(8.16) \quad a_k = \frac{1}{N} \sum_j c_j e^{-ikj},$$

para obtener

$$(8.17) \quad \mathcal{H}_I = J \sum_k (2[g - \cos k] a_k^\dagger a_k - i \sin k [a_{-k}^\dagger a_k^\dagger + a_k a_{-k}] - g).$$

El siguiente paso es aplicar una transformación de Bogoliubov que mapee los operadores a_k^\dagger y a_k en operadores de creación y destrucción de fermiones cuyo número es conservado por \mathcal{H}_I . Tal transformación corresponde a la siguiente ecuación:

$$(8.18) \quad \gamma_k = u_k a_k - i v_k a_{-k}^\dagger,$$

donde u_k y v_k son números reales que satisfacen las siguientes ecuaciones

$$(8.19) \quad u_k^2 + v_k^2 = 1, \quad u_{-k} = u_k, \quad v_k = -v_{-k}.$$

Es simple verificar que la transformación de Bogoliubov es canónica, es decir, que los nuevos operadores fermiónicos satisfacen las mismas reglas de anticonmutación que los operadores originales:

$$(8.20) \quad \{\gamma_k, \gamma_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'}, \quad \{\gamma_k^\dagger, \gamma_{k'}^\dagger\} = \{\gamma_k, \gamma_{k'}\} = 0.$$

La transformación inversa está dada por la siguiente ecuación:

$$(8.21) \quad a_k = u_k \gamma_k + i v_k \gamma_{-k}^\dagger.$$

Insertando esta ecuación en (8.17) y requiriendo la cancelación de los términos anómalos obtenemos la siguiente expresión para los coeficientes u_k y v_k :

$$(8.22) \quad u_k = \cos \theta_k, \quad v_k = \sin \theta_k,$$

con

$$(8.23) \quad \tan \theta_k = \frac{\sin k}{\cos k - g}.$$

La forma final de \mathcal{H}_I es

$$(8.24) \quad \mathcal{H}_I = \sum_k \omega_k (\gamma_k^\dagger \gamma_k - \frac{1}{2}),$$

donde

$$(8.25) \quad \omega_k = 2J \sqrt{1 + g^2 - 2g \cos k}$$

es la energía de una excitación elemental con momento k . Dado que $\omega_k > 0$, el estado fundamental, $|0\rangle$, de \mathcal{H}_I es el vacío de fermiones γ y por lo tanto satisface $\gamma_k |0\rangle = 0$ para todo k . Los estados excitados son determinantes de Slater de los estados de una partícula $\gamma_k^\dagger |0\rangle$, es decir que tienen la forma general

$$(8.26) \quad \prod_{j=1, N_\gamma} \gamma_{k_j}^\dagger |0\rangle,$$

donde N_γ es un número arbitrario de fermiones entre 1 y N .

La expresión (8.25) confirma los comportamientos aintóticos (8.6) y (8.12) que obtuvimos para $g \ll 1$ y $g \gg 1$ respectivamente. El análisis que realizamos en la sección anterior permite identificar las excitaciones de un fermión con solitones para el caso $g \ll 1$ y con espines invertidos en el caso $g \gg 1$.

8.3. Punto Crítico Cuántico

El espectro de excitaciones de elementales, ω_k , es no nulo y positivo para todo k si $g \neq 1$. El gap de energía, o mínimo del espectro de excitaciones, ocurre siempre para $k = 0$ y es entonces igual a $2J|1 - g|$. El gap se anula para $g = 1$ y, como veremos más abajo, este punto marca la transición entre las fases ordenada y desordenada que encontramos para $g \ll 1$ y $g \gg 1$ respectivamente. Para $g = 1$ los fermiones con bajo momento tienen una energía de excitación arbitrariamente chica y por lo tanto dominan las propiedades a temperaturas bajas. Estas propiedades sugieren que el estado fundamental para $g = 1$ es crítico y hay una teoría de campos continuos universal que describe las propiedades físicas en un entorno del punto crítico $g = 1$ y $T = 0$. La teoría universal corresponde a un gas de fermiones libres con una relación de dispersión relativista:

$$(8.27) \quad \omega_k = \sqrt{\Delta^2 + c^2 k^2}$$

que se obtiene al expandir (8.25) para $k \ll 1$. Notemos entonces que $|\Delta| = 2J|1 - g|$ y $c = 2J$. Esta teoría es invariante conforme para $\Delta = 0$, es decir, $g = g_c = 1$. Si bien aquí no discutiremos la teoría de campos continuos, veremos que hay una longitud de correlación ξ que diverge cuando para $T \rightarrow 0$ y $g \rightarrow 1$. La divergencia de una longitud característica del sistema es una de las propiedades que caracteriza a un punto crítico. En particular, dado que $\xi \rightarrow \infty$ a $T = 0$ cuando $g \rightarrow 1$, a este tipo de punto se lo denomina *punto crítico cuántico* ya que la divergencia de ξ esta controlada por fluctuaciones cuánticas y termodinámicas en lugar de únicamente fluctuaciones termodinámicas como es el caso del los puntos críticos clásicos.

La longitud de correlación ξ se obtiene de la dependencia del correlador $\langle \sigma_j^z \sigma_{j+x}^z \rangle$ para $|x| \rightarrow \infty$ (donde σ_j^z es la componente z del espín j antes de haber rotado el sistema de referencia en $\pi/2$ alrededor del eje y). Esta dependencia asintótica se obtiene de la solución exacta que presentamos en la sección anterior. Sin embargo, dicho cálculo requiere del uso de técnicas matemáticas sofisticadas para resolver un determinante de Toeplitz. Por tal motivo aquí obviaremos una derivación detallada del comportamiento

asintótico de $\langle \sigma_j^z \sigma_{j+x}^z \rangle$ y simplemente analizaremos el resultado:

$$(8.28) \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} \langle \sigma_j^z \sigma_{j+x}^z \rangle = ZT^{1/4} G_I(\Delta/T) e^{-\frac{T|x|}{c} F_I(\Delta/T)},$$

donde $Z = J^{1/4}$ es una constante no universal y $\Delta = J(g_c - g)$ con $g_c = 1$. $F_I(\Delta/T)$ y $G_I(\Delta/T)$ son funciones universales definidas por las siguientes expresiones:

$$(8.29) \quad \begin{aligned} F_I(s) &= |s| \theta(-s) + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dy \ln \coth \frac{\sqrt{y^2 + s^2}}{2}, \\ \ln G_I(s) &= \int_s^1 \frac{dy}{y} \left[\left(\frac{dF(y)}{dy} \right)^2 - \frac{1}{4} \right] + \int_1^\infty \frac{dy}{y} \left(\frac{dF(y)}{dy} \right)^2 \end{aligned}$$

El lector interesado en la derivación de (8.28) puede remitirse al libro “*The Two Dimensional Ising Model*”, B. M. McCoy and T. T. Wu (1973) (Harvard University Press, Cambridge MA). El dominio $s > 0$ de F_I describe la región magnéticamente ordenada, mientras que el dominio $s < 0$ describe la región paramagnética. A pesar de sus apariencias, las funciones $F_I(s)$ y $G_I(s)$ son analíticas para $s = 0$.

La longitud de correlación ξ se obtiene del decaimiento exponencial en x que aparece en la ec.(8.28):

$$(8.30) \quad \xi^{-1} = \frac{T}{c} F_I \left(\frac{\Delta}{T} \right).$$

A partir de la ec.(8.29) para $F_I(s)$ se obtienen los siguientes comportamientos para las tres regiones cualitativamente distintas del digrama de fases de \mathcal{H}_I :

$$(8.31) \quad \xi = \begin{cases} c \sqrt{\frac{\pi}{2\Delta T}} e^{\Delta/T} & \text{para } J(g_c - g) \gg T \\ \frac{4c}{\pi T} & \text{para } J|g_c - g| \ll T \\ \frac{c}{|\Delta|} & \text{para } J(g - g_c) \gg T \end{cases}$$

Notemos entonces que ξ diverge exponencialmente para $g < g_c$ y $T \rightarrow 0$. Esta es una característica de sistemas que están ordenados únicamente a $T = 0$. Por otro lado la longitud de correlación diverge como $1/T$ para $g = g_c = 1$. Finalmente, para $g > g_c$, la longitud de correlación satura a un valor finito para $T \rightarrow 0$ indicando la presencia de un estado cuántico (fundamental) paramagnético. Estos diferentes comportamientos cualitativos dan lugar al digrama de fases que se muestra en la figura 1.

En particular es importante recalcar que hay dos regímenes de baja T con $T \ll \Delta$. Entre ambos aparece el régimen de “alta temperatura”, $T \gg \Delta$, descrito por una teoría univesal de campos continuos. En otras palabras, la física de este régimen está controlada principalmente por el

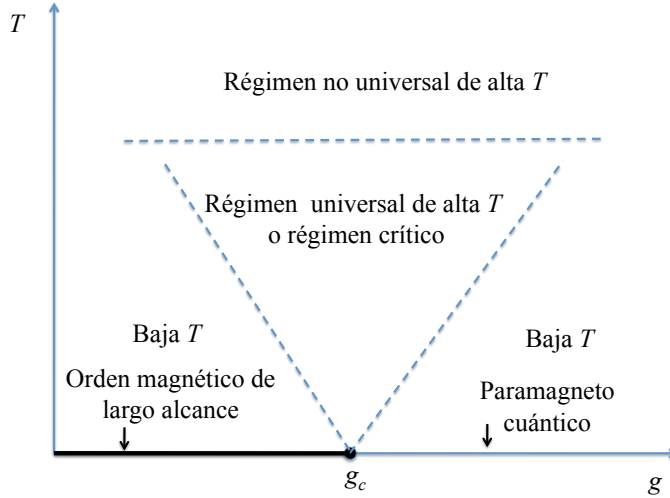


Figure 1. Diagrama de fases del modelo de Ising cuántico.

punto crítico cuántico que existe a $\Delta = T = 0$. Es importante mencionar que en este régimen la temperatura no es lo suficientemente alta como para que el mapeo a una teoría universal en el continuo deje de ser válido. Esto implica que $T \ll J$. Hay por lo tanto un segundo régimen no universal de temperaturas altas que se obtiene del modelo en la red en el límite $T/J \gg 1$.

Por último notemos que la dependencia del parámetro de orden o magnetización local, $m = \langle \sigma_j^z \rangle$, en función del gap se puede extraer también de (8.28). Suponiendo que es válido intercambiar los límites $T \rightarrow 0$ y $|x| \rightarrow \infty$, y usando que $F_I(s \rightarrow \infty) = 0$, $G_I(s \rightarrow \infty) = s^{1/4}$, obtenemos

$$(8.32) \quad m^2 \equiv \lim_{|x| \rightarrow \infty} \langle \sigma_j^z \sigma_{j+x}^z \rangle = Z \Delta^{1/4}$$

para $T = 0$ y $\Delta > 0$. De este modo verificamos que el estado fundamental está ordenado para $g < 1$ con un parámetro de orden $m = \sqrt{Z} \Delta^{1/8}$. El exponente anómalo $1/8$ es el mismo que aparece para el parámetro de orden en función de $T - T_c$ en el modelo de Ising clásico en dos dimensiones. Esta coincidencia se debe a que ambos puntos críticos están descritos por la misma teoría universal de campos continuos.

Exercise 27. Calcular explícitamente el elemento de matriz (8.10).

Exercise 28. Demostrar que los nuevos operadores fermiónicos γ satisfacen relaciones de conmutación canónicas.

Exercise 29. Demostrar que la transformación de Bogoliubov definida por las ecs. (8.21) y (8.23) da lugar a la forma diagonal de \mathcal{H}_I (8.24).