

## LECTURE 9

### Teoría de Ondas de Espín II

#### 10.1. Teoría de ondas de espín Antiferromagnéticas

En la clase anterior vimos la teoría de ondas de espín para el caso de un ferromagneto de Heisenberg. En esta clase veremos qué ocurre en el caso de un antiferromagneto, es decir, para un sistema descrito por el Hamiltoniano isotrópico:

$$(10.1) \quad \mathcal{H} = |J| \sum_{\langle \mathbf{r}\mathbf{r}' \rangle} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}'}$$

Vamos a suponer que la red sobre la que se define  $\mathcal{H}$  es una red de Bravais bipartita, es decir, que se puede descomponer en dos subredes,  $\mathcal{A}$  y  $\mathcal{B}$ , y los primeros vecinos de un sitio dado están todos en la otra subred. Como ya explicamos en otras clases, las redes hipercúbicas son ejemplos de redes bipartitas. En este caso, el estado semiclásico (o estado producto) que minimiza la energía es el llamado estado de Neel. El estado de Neel se obtiene aplicando una rotación al estado totalmente polarizado en la que todos los espines de una de las dos subredes giran en un ángulo  $\pi$  alrededor de cualquier eje perpendicular al eje de polarización de los espines. En particular, nuevamente elijiremos el estado fundamental semiclásico en que todos los espines están alineados a lo largo del eje  $z$ . De este modo arrivamos a un estado de la forma:

$$(10.2) \quad |\Psi_0\rangle = \otimes_{\mathbf{r} \in \mathcal{A}} |\uparrow\rangle_{\mathbf{r}} \otimes_{\mathbf{r} \in \mathcal{B}} |\downarrow\rangle_{\mathbf{r}}$$

Naturalmente, cualquier rotación de global de  $|\Psi_0\rangle$  tiene la misma energía debido a que  $\mathcal{H}$  es isotrópico. Notemos que, a diferencia del estado ferromagnético, el estado antiferromagnético rompe la simetría de translación como ya habíamos visto para el caso de la onda de densidad de espín del modelo de Hubbard a banda semillena.

Es importante notar que el estado variacional  $|\Psi_0\rangle$  es un “estado producto”, es decir que es un producto directo de estados de cada uno de los espines y por lo tanto se lo puede pensar como estado variacional de una aproximación de campo medio. Es decir que  $|\Psi_0\rangle$  es el estado producto directo que minimiza el valor medio de la energía:

$$(10.3) \quad \langle \Psi_0 | \mathcal{H} | \Psi_0 \rangle = |J| \sum_{\langle \mathbf{r}\mathbf{r}' \rangle} \langle \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \rangle \cdot \langle \mathbf{S}_{\mathbf{r}'} \rangle = -S^2 J N \frac{z}{2}.$$

*Minimizar el valor medio de la energía sobre el espacio variacional de estados producto es un primer paso necesario en toda aproximación de ondas de espín.* Si uno no parte del estado producto que minimiza la energía se encontrará con autovalores negativos de energía al diagonalizar el Hamiltoniano de ondas de espín. Esto indica que el orden supuesto como punto de partida no es estable. Dada la estructura bipartita de la red considerada, es claro que el estado  $|\Psi_0\rangle$  es un mínimo de  $\langle \Psi_0 | \mathcal{H} | \Psi_0 \rangle$  sobre todos los estado producto también llamados estados semiclásicos.

Como explicamos en la clase anterior, la idea de la aproximación de Holstein-Primakoff consiste en elegir el eje  $z$  del sitio  $\mathbf{r}$  en la dirección en la que apunta el espín  $\mathbf{r}$  del estado semiclásico  $|\Psi_0\rangle$ . Esto nos obligaría a usar una transformación de Holstein-Primakoff diferente en cada una de las subredes. Para evitar este inconveniente aplicaremos la transformación unitaria,

$$(10.4) \quad \mathcal{U} = e^{i\pi \sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{B}} S_{\mathbf{r}}^x},$$

que rota todos los espines de la subred  $\mathcal{B}$  en un ángulo  $\pi$  alrededor del eje  $z$ . De este modo tenemos que:

$$(10.5) \quad \begin{aligned} \tilde{S}_{\mathbf{r}}^x &= \mathcal{U} S_{\mathbf{r}}^x \mathcal{U}^\dagger = S_{\mathbf{r}}^x, \\ \tilde{S}_{\mathbf{r}}^y &= \mathcal{U} S_{\mathbf{r}}^y \mathcal{U}^\dagger = -S_{\mathbf{r}}^y, \\ \tilde{S}_{\mathbf{r}}^z &= \mathcal{U} S_{\mathbf{r}}^z \mathcal{U}^\dagger = -S_{\mathbf{r}}^z. \end{aligned}$$

La expresión del operador  $\mathcal{H}$  en la nueva base es

$$(10.6) \quad \mathcal{H} = -|J| \sum_{\langle \mathbf{r}\mathbf{r}' \rangle} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}'} = -|J| \sum_{\langle \mathbf{r}\mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}}^z \tilde{S}_{\mathbf{r}'}^z + \frac{|J|}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}\mathbf{r}' \rangle} (S_{\mathbf{r}}^+ \tilde{S}_{\mathbf{r}'}^+ + S_{\mathbf{r}}^- \tilde{S}_{\mathbf{r}'}^-),$$

donde  $\mathbf{r} \in \mathcal{A}$  y  $\mathbf{r}' \in \mathcal{B}$ . Usando la representación de Holstein-Primakoff (9.2) para  $\mathbf{S}_{\mathbf{r}}$  en la subred  $\mathcal{A}$  y  $\tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}'}$  en la subred  $\mathcal{B}$  obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -S^2 J N \frac{z}{2} + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{O}(1/S), \\ \mathcal{H}_1 &= JSz \sum_{\mathbf{k}} [a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}})], \\ (10.7) \quad \mathcal{H}_2 &= -\frac{J}{4} \sum_{\langle \mathbf{r}\mathbf{r}' \rangle} [b_{\mathbf{r}}^\dagger (b_{\mathbf{r}'}^\dagger + b_{\mathbf{r}})^2 b_{\mathbf{r}'} + b_{\mathbf{r}'}^\dagger (b_{\mathbf{r}}^\dagger + b_{\mathbf{r}'})^2 b_{\mathbf{r}}], \end{aligned}$$

donde  $a_{\mathbf{k}}$  y  $\gamma_{\mathbf{k}}$  fueron ya introducidos en las ecs.(9.8) y (9.9),

$$(10.8) \quad \gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\boldsymbol{\eta}} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\eta}}.$$

$\mathcal{H}_1$  es un Hamiltoniano cuadrático que incluye términos anómalos, es decir, que no conservan el número de partículas. Estos términos aparecen porque, a diferencia del estado semiclásico ferromagnético, el estado semiclásico antiferromagnético no es un estado fundamental exacto de  $\mathcal{H}$ . Los términos anómalos incorporan parte de las fluctuaciones cuánticas que están ausentes en  $|\Psi_0\rangle$ .  $\mathcal{H}_1$  se diagonaliza por medio de una transformación de Bogoliubov. Para ello introducimos el siguiente operador de aniquilación de ondas de espín con momento  $\mathbf{k}$ :

$$(10.9) \quad \begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}} &= \cosh \theta_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} - \sinh \theta_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger, \\ a_{\mathbf{k}} &= \cosh \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + \sinh \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger. \end{aligned}$$

Los parámetros  $\theta_{\mathbf{k}}$  son reales y pares en  $\mathbf{k}$ :  $\theta_{\mathbf{k}} = \theta_{-\mathbf{k}}$ . La transformación (10.9) es canónica dado que:

$$(10.10) \quad [\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}] = [\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0, \quad [\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}.$$

La condición para obtener el valor de  $\theta_{\mathbf{k}}$  es que  $\mathcal{H}_1$  no contenga términos anómalos en los operadores  $\alpha$ . Al reemplazar la expresión (10.9) en (10.7) obtenemos

$$(10.11) \quad \begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= |J|sz \sum_{\mathbf{k}} [(\cosh 2\theta_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} \sinh 2\theta_{\mathbf{k}}) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \\ &+ \frac{1}{2} (\sinh 2\theta_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} \cosh 2\theta_{\mathbf{k}}) (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}) \\ &+ \sinh^2 \theta_{\mathbf{k}} + \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2} \sinh 2\theta_{\mathbf{k}}]. \end{aligned}$$

De la cancelación de los términos anómalos obtenemos

$$(10.12) \quad \tanh 2\theta_{\mathbf{k}} = -\gamma_{\mathbf{k}},$$

que finalmente da lugar a la expresión final del Hamiltoniano de ondas de espín

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left( \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) - \frac{JSzN}{2}, \\ (10.13) \quad \omega_{\mathbf{k}} &= |J|Sz\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}. \end{aligned}$$

Como ya hemos visto para el caso ferromagnético, la aproximación de ondas de espín lineales consiste en despreciar  $\mathcal{H}_2$  y los términos de orden superior en  $1/S$ . Dado que  $\omega_{\mathbf{k}} \geq 0$ , el estado fundamental,  $|\Psi_0^1\rangle$ , es tal que  $\alpha_{\mathbf{k}}|\Psi_0^1\rangle = 0$  para todo  $\mathbf{k}$ . Usando esta propiedad es simple verificar que

$$(10.14) \quad |\Psi_0^1\rangle = \nu e^{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tanh \theta_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger} |\Psi_0\rangle,$$

donde  $\nu$  es una constante de normalización. La ec.(10.13) muestra que, a diferencia del caso ferromagnético,  $\mathcal{H}_1$  contiene una corrección a la energía del estado fundamental

$$(10.15) \quad \langle \Psi_0^1 | \mathcal{H}_1 | \Psi_0^1 \rangle = E_0^1 - \left( -\frac{z}{2} N |J| S^2 \right) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} |J| Sz (\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} - 1).$$

Notemos que  $\langle \Psi_0^1 | \mathcal{H}_1 | \Psi_0^1 \rangle$  es negativo, es decir que las fluctuaciones cuánticas reducen la energía del antiferromagneto. Este fenómeno se puede entender fácilmente si consideramos el caso sencillo de un sistema de dos sitios. La energía del estado fundamental clásico es  $-JS^2$  mientras que la energía del estado fundamental del sistema cuántico es considerablemente más baja:  $-JS(S+1)$ .

La transformación de Bogoliubov introduce un número arbitrario de bosones por sitio en el estado fundamental. En el lenguaje de espines esto significa que el estado fundamental mezcla configuraciones con número arbitrario de “spin-flips” (cambios de  $S_{\mathbf{r}}^z$  en  $\pm 1$ ) respecto del estado de Neel. Esto reduce la amplitud de la magnetización “staggered” o parámetro de orden a  $T = 0$ . Expandiendo  $\omega_{\mathbf{k}}$  alrededor de  $\mathbf{k} = 0$  y  $\mathbf{k} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots)$  para el caso de redes hipercúbicas,

$$(10.16) \quad \gamma_{\mathbf{k}} = 2 \sum_{\mu=1,d} \cos k_{\mu}$$

con  $\mu = \{x, y, z, \dots\}$ , obtenemos que el espectro de ondas de espín antiferromagnéticas se anula linealmente en  $|\mathbf{k}|$  y en  $|\mathbf{k} - \mathbf{Q}|$ :

$$(10.17) \quad \omega_{\mathbf{k}} \simeq \begin{cases} JS\sqrt{2z}|\mathbf{k}| & \text{para } |\mathbf{k}| \simeq 0, \\ JS\sqrt{2z}|\mathbf{k} - \mathbf{Q}| & \text{para } |\mathbf{k} - \mathbf{Q}| \simeq 0. \end{cases}$$

Veamos ahora cuál es la variación de la magnetización “staggered” o parámetro de orden del estado antiferromagnético como función de la temperatura:

$$\begin{aligned}
 \Delta m_0^s &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \langle S_{\mathbf{r}}^z \rangle - S = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \langle b_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}} \rangle \\
 (10.18) \quad &= \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}}.
 \end{aligned}$$

Como en el caso del ferromagneto, el haber truncado la expansión de Holstein-Primakoff sólo está justificado si  $\Delta m_0^s \ll S$ . La singularidad dominante en la suma (10.18) nuevamente proviene del comportamiento de la función de Bose,

$$(10.19) \quad \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\omega_{\mathbf{k}}/k_B T} - 1},$$

para  $\omega_{\mathbf{k}} \simeq 0$ . Usando  $k_0$  como cut-off infrarojo para  $\mathbf{k} \simeq 0$  y  $\mathbf{k} \simeq \mathbf{Q}$  obtenemos

$$\Delta m_0^s \simeq \begin{cases} \frac{-t + ck_0 \ln k_0}{k_0} & \text{para } d = 1 \\ -c_2 + t \ln k_0 & \text{para } d = 2 \\ -c_3 + c'_3 t^2 & \text{para } d = 3 \end{cases}$$

donde

$$\begin{aligned}
 c_d &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}} - 1, \quad \text{para } d = 2, 3 \\
 c'_3 &= 6^{-5/2}/2, \\
 (10.20) \quad t &= \frac{T}{|J|S\sqrt{d}},
 \end{aligned}$$

y  $c$  es una constante de orden uno. En este caso nos encontramos con que la corrección de la magnetización staggered debida únicamente a las *fluctuaciones cuánticas*, es decir a  $T = 0$ , diverge para  $k_0 \rightarrow 0$  en  $d = 1$ . Esto indica que la teoría de ondas de espín falla en una dimensión aún a temperatura zero. La interpretación simple de este resultado es que el estado fundamental de  $\mathcal{H}$  no posee orden antiferromagnético de largo alcance para  $d = 1$ .

Por otro lado, la existencia de orden de largo alcance en  $d = 2, 3$  depende de los valores relativos de  $c'$  y  $S$ .  $d = 3$  es la dimensión más baja en la que puede existir orden antiferromagnético de largo alcance a temperatura finita. Nuevamente, esto es una confirmación del teorema de Mermin-Wagner. Es interesante notar que la corrección a la magnetización staggered en  $d = 3$  es proporcional a  $T^2$  en contraste con el caso ferromagnético para el que encontramos que la corrección a la magnetización

uniforme varía como  $T^{3/2}$ . Esta diferencia se debe a que los magnones anti-ferromagnéticos tienen una dispersión lineal en  $|\mathbf{k}|$  para longitudes de onda largas, mientras que los magnones ferromagnéticos poseen una relación de dispersión cuadrática. En general es simple verificar que si la relación de dispersión de las excitaciones elementales de baja energía es proporcional a  $|\mathbf{k}|^n$ , la variación del parámetro de orden en función de la temperatura es proporcional a  $T^{(d+n-2)/n}$  para  $d \geq 3$ . Asimismo, la contribución dominante al calor específico para  $t \ll 1$  es proporcional a  $T^{(d+n-2)/n}$ .

Por último es importante aclarar que la transformación de Bogoliubov da lugar a un estado fundamental (10.14) que viola la condición de no más de  $2S$  bosones por sitio que impusimos al introducir la transformación de Holstein-Primakoff. Sin embargo, se puede comprobar que estos términos no físicos tienen un peso relativo muy pequeño en la función del onda y por lo tanto no introducen un error relativo importante en los valores medios de los observables.