

Magnetismo II

Prof. Alberto Camjayi

Introducción

Orden magnético

En la clase anterior de magnetismo supusimos que las fuentes de momento magnético, las capas parcialmente completas de los iones o los electrones en metales simples, no interactúan entre sí.

Más allá de pequeñas correcciones a los cálculos anteriores, existen fenómenos magnéticos mucho más espectaculares, como los ordenes de largo alcance (ferromagnetismo, antiferromagnetismo, etc.) y la magnetización espontánea, donde es imposible obviar la existencia de interacciones.

La pregunta es ¿cómo interactúan los momentos magnéticos entre sí?

Introducción

Interacción dipolar magnética

La idea más simple es suponer que los momentos magnéticos dentro del sólido se ordenan por la interacción dipolo-dipolo. Dados dos momentos dipolares \mathbf{m}_1 y \mathbf{m}_2 , separados a una distancia \mathbf{r} , la energía de interacción es:

$$E_d = \frac{1}{r^3} [\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2 - 3(\mathbf{m}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}})(\mathbf{m}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}})]$$

Los momentos dipolares atómicos $m_1 \approx m_2 \approx g\mu_B \approx e\hbar/mc$. Por lo tanto, podemos estimar (a_0 es el radio de Bohr):

$$E_d \approx \frac{(g\mu_B)^2}{r^3} \approx \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{a_0}{r}\right)^3 \frac{e^2}{a_0} \approx \frac{1}{137^2} \left(\frac{a_0}{r}\right)^3 \text{ Ry.}$$

Introducción

Interacción dipolar magnética

En un sólido magnético, la distancia típica entre momentos magnéticos es de unos 2 \AA , lo que da para el potencial dipolar $E_d \sim 10^{-4} \text{ eV}$, un valor despreciable comparado con las diferencias de energía entre los niveles atómicos ($\sim \text{eV}$).

De hecho, las temperaturas críticas de los metales ferromagnéticos como el hierro, cobalto o níquel, son de varios cientos de grados Kelvin. Si los espines se alineasen por la interacción dipolar, esperaríamos temperaturas críticas mucho más bajas ($1 \text{ K} \sim 10^{-4} \text{ eV}$).

Introducción

Interacción Coulombiana

Si la interacción no es de origen magnetostático, ¿de donde proviene?

¿Cómo puede ser que la interacción de Coulomb **que no depende del espín** genere orden magnético?

¿Por qué la interacción efectiva depende del espín?

Introducción

Interacción Coulombiana

Si la interacción no es de origen magnetostático, ¿de donde proviene?

¿Cómo puede ser que la interacción de Coulomb **que no depende del espín** genere orden magnético?

¿Por qué la interacción efectiva depende del espín?

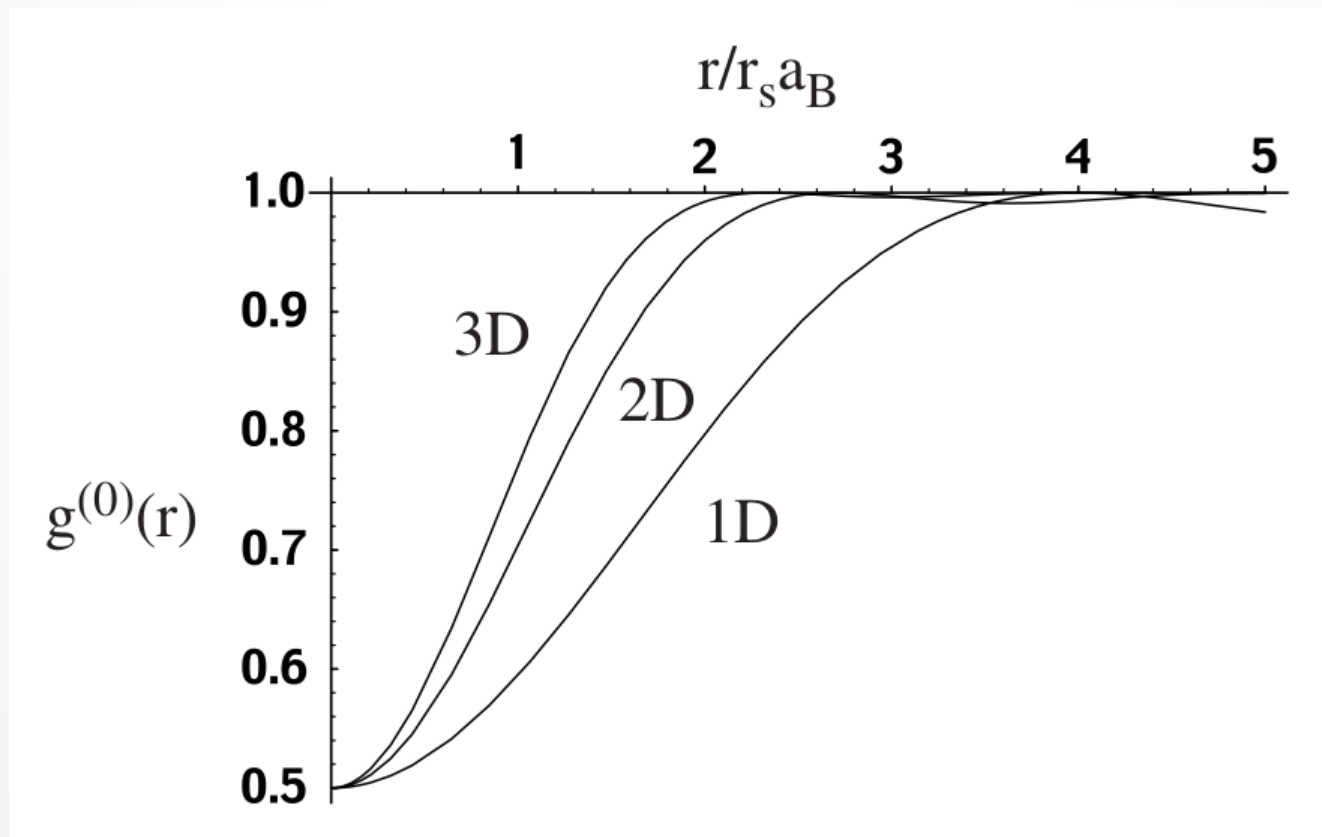
La respuesta está en el principio de exclusión de Pauli.

Es la conjunción de interacción Coulombiana más el principio de exclusión lo que, en última instancia, genera el acoplamiento entre los grados de libertad de espín.

Introducción

Agujero de intercambio

Incluso en el caso del gas de electrones **sin interacciones**, si calculamos la *función de correlación de pares*, vemos el efecto conocido como agujero de intercambio.



Energía de intercambio

Coulomb más estadística fermiónica

La interacción entre momentos magnéticos existe por la conexión entre las simetrías de espín y espaciales de la función de onda de los electrones.

Una dada configuración de espín restringe el rango de posibles configuraciones espaciales y, como diferentes configuraciones espaciales pueden tener energías muy distintas, hay grandes diferencias de energías entre distintas configuraciones de espín.

Energía de intercambio

Coulomb más estadística fermiónica

De manera general, sin entrar en detalles, podemos catalogar las interacciones magnéticas en dos categorías:

Intercambio directo (potencial). Aquí manda la minimización de energía potencial, a través de la reducción del solapamiento de la función de onda. El solapamiento se reduce introduciendo nodos en la función de onda, i.e. creando configuraciones espaciales antisimétricas y *favoreciendo las configuraciones simétricas de espín*, o sea **interacciones efectivas ferromagnéticas**.

Energía de intercambio

Coulomb más estadística fermiónica

De manera general, sin entrar en detalles, podemos catalogar las interacciones magnéticas en dos categorías:

Intercambio cinético. Aquí manda la minimización de energía cinética, a través de la reducción de los gradientes de la función de onda, favoreciendo la *deslocalización* de los electrones. Esto se logra creando configuraciones espaciales simétricas y *favoreciendo las configuraciones antisimétricas de espín*, o sea **interacciones efectivas antiferromagnéticas.**

Ambos efectos compiten entre sí.

Energía de intercambio

Interacción de Coulomb

Como vimos en la clase anterior, el potencial Coulombiano se puede escribir como

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{R}_1 m_1 \\ \mathbf{R}_2 m_2}} \sum_{\substack{\mathbf{R}_3 m_3 \\ \mathbf{R}_4 m_4}} \langle 12 | \frac{e_0^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | 43 \rangle \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \hat{c}_{\mathbf{R}_1 \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{R}_2 \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{R}_3 \sigma_2} \hat{c}_{\mathbf{R}_4 \sigma_1}$$

donde la base consiste en orbitales localizados en los iones (orbitales de Wannier, por ej.) y los índices m recorren los grados de libertad internos (orbitales) de cada sitio.

Energía de intercambio

Intercambio directo

Comencemos con el caso de un único ion (todos los \mathbf{R} iguales) y calculemos el potencial de Coulomb del sitio (términos locales). De todos los elementos de matriz, los más importantes serán aquellos de mayor solapamiento de las funciones de onda. Por lo tanto, si los orbitales son localizados, tenemos que considerar los siguientes términos:

- Término directo (densidad-densidad)

$$\begin{aligned} K_{m_1 m_2} &= \langle m_1 m_2 | V | m_1 m_2 \rangle = \\ &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\psi_{m_1}(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e_0^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\psi_{m_2}(\mathbf{r}_2)|^2 > 0 \end{aligned}$$

Energía de intercambio

Intercambio directo

Comencemos con el caso de un único ion (todos los \mathbf{R} iguales) y calculemos el potencial de Coulomb del sitio (términos locales). De todos los elementos de matriz, los más importantes serán aquellos de mayor solapamiento de las funciones de onda. Por lo tanto, si los orbitales son localizados, tenemos que considerar los siguientes términos:

- Término de intercambio (cambiar 1 con 2 en el ket)

$$J_{m_1 m_2} = \langle m_1 m_2 | V | m_2 m_1 \rangle =$$

$$= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_{m_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{m_2}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e_0^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_{m_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{m_2}(\mathbf{r}_1)$$

Energía de intercambio

Intercambio directo

El potencial entonces es

$$V \approx \sum_{m_1 m_2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \left[K_{m_1 m_2} \hat{c}_{m_1 \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{m_2 \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{m_2 \sigma_2} \hat{c}_{m_1 \sigma_1} + \right. \\ \left. + J_{m_1 m_2} \hat{c}_{m_1 \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{m_2 \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{m_1 \sigma_2} \hat{c}_{m_2 \sigma_1} \right] =$$

$$\sum_{m_1 m_2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \left[K_{m_1 m_2} \hat{n}_{m_1 \sigma_1} \hat{n}_{m_2 \sigma_2} - \right. \\ \left. - J_{m_1 m_2} \hat{c}_{m_1 \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{m_1 \sigma_2} \hat{c}_{m_2 \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{m_2 \sigma_1} \right]$$

+ (términos irrelevantes para el potencial)

Energía de intercambio

Intercambio directo

Un poco de álgebra. Definamos

$$\hat{n}_m = \sum_{\sigma} \hat{n}_{m\sigma} = \sum_{\sigma} \hat{c}_{m\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{m\sigma} \quad s_m^{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{m\sigma}^{\dagger} \sigma_{\sigma\sigma'}^{\alpha} \hat{c}_{m\sigma'}$$

donde σ^{α} , $\alpha = x, y, z$ son las matrices de Pauli.

Con paciencia, se puede mostrar que

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \hat{c}_{m_1\sigma_1}^{\dagger} \hat{c}_{m_1\sigma_2} \hat{c}_{m_2\sigma_2}^{\dagger} \hat{c}_{m_2\sigma_1} &= \\ &= \frac{1}{2} \hat{n}_{m_1} \hat{n}_{m_2} + 2s_{m_1}^z s_{m_2}^z + s_{m_1}^+ s_{m_2}^- + s_{m_1}^- s_{m_2}^+ \\ &\equiv \frac{1}{2} \hat{n}_{m_1} \hat{n}_{m_2} + 2\mathbf{s}_{m_1} \cdot \mathbf{s}_{m_2} \end{aligned}$$

Energía de intercambio

Intercambio directo

Finalmente, obtenemos

$$V = \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} \left[\left(K_{m_1 m_2} - \frac{1}{2} J_{m_1 m_2} \right) \hat{n}_{m_1} \hat{n}_{m_2} - 2 J_{m_1 m_2} \mathbf{s}_{m_1} \cdot \mathbf{s}_{m_2} \right]$$

El primer término es la interacción de Coulomb en el sitio (igual al resultado clásico, densidad-densidad). Se puede ver que

$$K_{m_1 m_2} > J_{m_1 m_2} \geq 0$$

por lo tanto este término, si bien reducido, sigue siendo repulsivo (no cambia su signo).

Energía de intercambio

Intercambio directo

Finalmente, obtenemos

$$V = \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} \left[\left(K_{m_1 m_2} - \frac{1}{2} J_{m_1 m_2} \right) \hat{n}_{m_1} \hat{n}_{m_2} - 2J_{m_1 m_2} \mathbf{s}_{m_1} \cdot \mathbf{s}_{m_2} \right]$$

El segundo término es puramente cuántico, ¡es una interacción entre espines! Como

$$J_{m_1 m_2} \geq 0$$

la misma es **ferromagnética**, los espines se alinean entre sí. Es la primera regla de Hund.

Energía de intercambio

Intercambio directo

El mismo resultado se obtiene si consideramos sitios distintos (\mathbf{R} todos diferentes). Para simplificar tomemos un solo orbital por sitio. Si los orbitales están bien localizados habrá poco o nulo solapamiento entre sitios distintos. Por lo tanto los términos dominantes en el potencial serán nuevamente del tipo

$$K_{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2} = \langle \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 | V | \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \rangle$$

$$J_{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2} = \langle \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 | V | \mathbf{R}_2 \mathbf{R}_1 \rangle$$

El cálculo es idéntico al anterior sobre orbitales locales.

Energía de intercambio

Intercambio directo

El mismo resultado se obtiene si consideramos sitios distintos (\mathbf{R} todos diferentes).

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2} \left[\left(K_{12} - \frac{1}{2} J_{12} \right) \hat{n}_1 \hat{n}_2 - 2J_{12} \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \right]$$

Por lo tanto, la repulsión Coulombiana entre electrones en orbitales ortogonales lleva a una interacción ferromagnética efectiva.

En este caso electrones con espines paralelos no pueden ocupar el mismo orbital y por lo tanto evitan la fuerte repulsión Coulombiana local.

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Para estudiar este fenómeno debemos incorporar nuevamente las fluctuaciones de carga. En los casos anteriores solo estudiamos el efecto del potencial, sin incorporar la energía cinética.

Las fluctuaciones de carga se dan por la hibridización entre orbitales que permiten a los electrones “saltar” de uno a otro. Es el típico término “ t ” en la energía cinética de los modelos de enlaces fuertes.

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Para estudiar este fenómeno debemos incorporar nuevamente las fluctuaciones de carga.

Para ello consideraremos sólo un orbital por sitio, conservaremos el término “directo” de Coulomb y ignoraremos el de intercambio que lleva a la interacción ferromagnética.

Por último incorporaremos la energía cinética al hamiltoniano. Estas aproximaciones llevan a uno de los hamiltonianos modelo más celebrado de la Materia Condensada: el modelo de Hubbard.

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Modelo de Hubbard, un orbital por sitio.

$$\mathcal{H} = - \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'\sigma} t(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \hat{c}_{\mathbf{R}'\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{R}\sigma} + U \sum_{\mathbf{R}} \hat{c}_{\mathbf{R}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{R}\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{R}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{R}\downarrow}$$

Incluso en el caso más sencillo, con el hopping restringido solo a primeros vecinos, la solución exacta general del modelo es desconocida.

Para entender como surge la interacción de intercambio en este caso, resolvamos un modelo de juguete.

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Modelo de Hubbard de un dímero (solo dos sitios).

$$\mathcal{H} = - \sum_{\sigma} t \left(\hat{c}_{1\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{2\sigma} + \hat{c}_{2\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{1\sigma} \right) + U \sum_{i=1,2} \hat{c}_{i\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{i\uparrow} \hat{c}_{i\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{i\downarrow}$$

Elijamos la base natural $|n_{1\uparrow}n_{1\downarrow}; n_{2\uparrow}n_{2\downarrow}\rangle$

El hamiltoniano conserva el número de partículas, pero debido al término de hopping

$$[\mathcal{H}, \hat{n}_{i\sigma}] \neq 0$$

pero si vale que $[\mathcal{H}, \hat{n}_{\sigma}] \equiv [\mathcal{H}, \hat{n}_{1\sigma} + \hat{n}_{2\sigma}] = 0$.

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Esta simetría nos permite resolver el hamiltoniano “por bloques” con la proyección total de espín bien definida.

El caso que nos interesa se da en el sector de dos partículas, que incluye tres bloques

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (2, 0) : \{|\uparrow, \uparrow\rangle\}$$

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (0, 2) : \{|\downarrow, \downarrow\rangle\}$$

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (1, 1) : \{ |0, \uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle, |\uparrow, \downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow, 0\rangle \}$$

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Las energías son muy simples en los bloques 1D.

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (2, 0) : \{|\uparrow, \uparrow\rangle\}$$

En este estado no hay hopping (por exclusión), ni energía de Coulomb (están en sitios distintos). Por lo tanto, su energía es 0.

Lo mismo pasa con

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (0, 2) : \{|\downarrow, \downarrow\rangle\}$$

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Para hallar las energías en el último bloque, necesitamos construir la matriz y diagonalizarla.

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (1, 1) : \{ |0, \uparrow\downarrow\rangle, | \downarrow, \uparrow\rangle, | \uparrow, \downarrow\rangle, | \uparrow\downarrow, 0\rangle \}$$

$$\mathcal{H}_{(1,1)} = \begin{pmatrix} U & t & -t & 0 \\ t & 0 & 0 & t \\ -t & 0 & 0 & -t \\ 0 & t & -t & U \end{pmatrix}$$

Las fases en los hoppings se originan en la definición del estado.

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Para hallar las energías en el último bloque, necesitamos construir la matriz y diagonalizarla.

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (1, 1) : \{ |0, \uparrow\downarrow\rangle, | \downarrow, \uparrow\rangle, | \uparrow, \downarrow\rangle, | \uparrow\downarrow, 0\rangle \}$$

$$\mathcal{H}_{(1,1)} = \begin{pmatrix} U & t & -t & 0 \\ t & 0 & 0 & t \\ -t & 0 & 0 & -t \\ 0 & t & -t & U \end{pmatrix}$$

Por ejemplo $| \uparrow\downarrow, 0\rangle = \hat{c}_{1\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{1\downarrow}^{\dagger} |0, 0\rangle$, con esta elección (podríamos haber elegido al revés, eso nos daría una fase negativa respecto a nuestra elección actual).

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Para hallar las energías en el último bloque, necesitamos construir la matriz y diagonalizarla.

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (1, 1) : \{ |0, \uparrow\downarrow\rangle, | \downarrow, \uparrow\rangle, | \uparrow, \downarrow\rangle, | \uparrow\downarrow, 0\rangle \}$$

$$\mathcal{H}_{(1,1)} = \begin{pmatrix} U & t & -t & 0 \\ t & 0 & 0 & t \\ -t & 0 & 0 & -t \\ 0 & t & -t & U \end{pmatrix}$$

$$\langle \uparrow, \downarrow | \mathcal{H} | 0, \uparrow\downarrow \rangle = -t \langle \uparrow, \downarrow | \hat{c}_{1\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\uparrow} | 0, \uparrow\downarrow \rangle = -t \langle \uparrow, \downarrow | \hat{c}_{1\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\uparrow} \hat{c}_{2\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\downarrow}^{\dagger} | 0, 0 \rangle$$

$$= -t \langle \uparrow, \downarrow | \hat{c}_{1\uparrow}^{\dagger} (1 - \hat{c}_{2\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\uparrow}) \hat{c}_{2\downarrow}^{\dagger} | 0, 0 \rangle = -t \langle \uparrow, \downarrow | \hat{c}_{1\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\downarrow}^{\dagger} | 0, 0 \rangle = -t$$

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Para hallar las energías en el último bloque, necesitamos construir la matriz y diagonalizarla.

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (1, 1) : \{ |0, \uparrow\downarrow\rangle, | \downarrow, \uparrow\rangle, | \uparrow, \downarrow\rangle, | \uparrow\downarrow, 0\rangle \}$$

$$\mathcal{H}_{(1,1)} = \begin{pmatrix} U & t & -t & 0 \\ t & 0 & 0 & t \\ -t & 0 & 0 & -t \\ 0 & t & -t & U \end{pmatrix}$$

$$\langle \downarrow, \uparrow | \mathcal{H} | 0, \uparrow\downarrow \rangle = -t \langle \downarrow, \uparrow | \hat{c}_{1\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\downarrow} | 0, \uparrow\downarrow \rangle = -t \langle \downarrow, \uparrow | \hat{c}_{1\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\downarrow} \hat{c}_{2\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\downarrow}^{\dagger} | 0, 0 \rangle$$

$$= t \langle \downarrow, \uparrow | \hat{c}_{1\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\downarrow} \hat{c}_{2\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\uparrow}^{\dagger} | 0, 0 \rangle =$$

$$= t \langle \downarrow, \uparrow | \hat{c}_{1\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\uparrow}^{\dagger} (1 - \hat{c}_{2\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\downarrow}) | 0, 0 \rangle = t \langle \downarrow, \uparrow | \hat{c}_{1\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{2\uparrow}^{\dagger} | 0, 0 \rangle = t$$

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

Para hallar las energías en el último bloque, necesitamos construir la matriz y diagonalizarla.

$$(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = (1, 1) : \{ |0, \uparrow\downarrow\rangle, | \downarrow, \uparrow\rangle, | \uparrow, \downarrow\rangle, | \uparrow\downarrow, 0\rangle \}$$

$$\mathcal{H}_{(1,1)} = \begin{pmatrix} U & t & -t & 0 \\ t & 0 & 0 & t \\ -t & 0 & 0 & -t \\ 0 & t & -t & U \end{pmatrix}$$

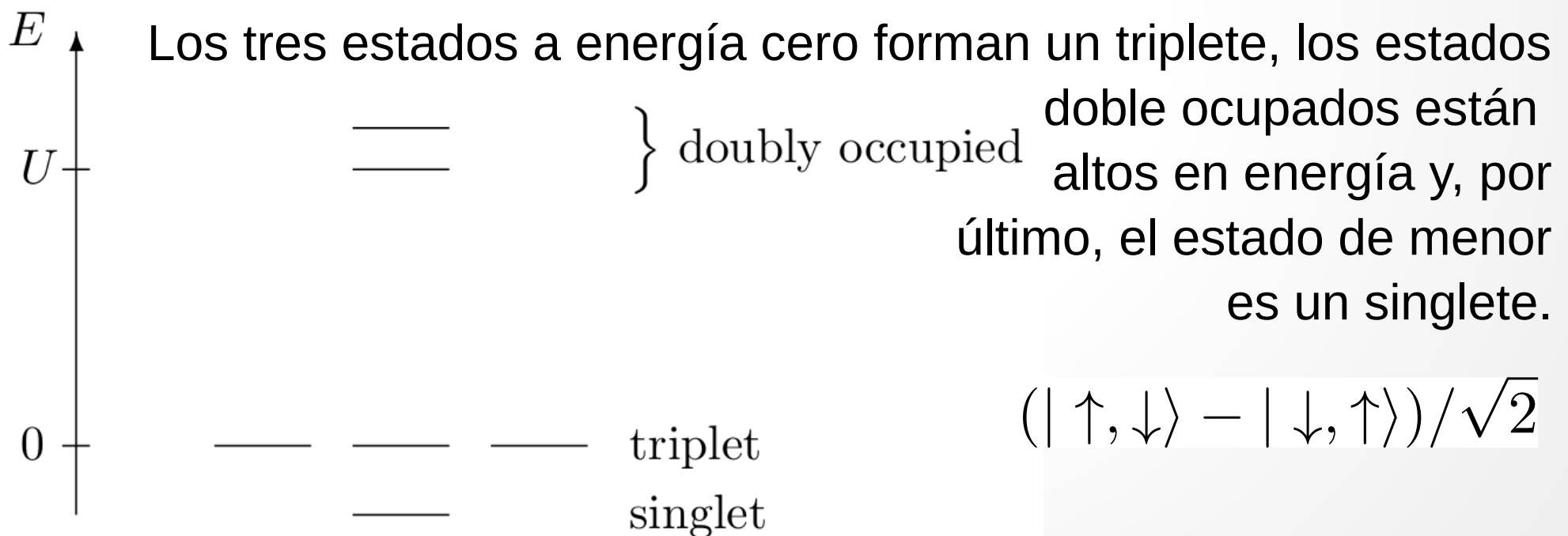
Las autoenergías son $E_{(1,1)} = 0, U, \frac{1}{2} \left(U \pm \sqrt{16t^2 + U^2} \right)$.

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

En el sector con 2 partículas (llenado mitad) tenemos entonces tres bloques con energías:

$$(2, 0) : 0; (1, 1) : 0, U, \frac{1}{2} \left(U \pm \sqrt{16t^2 + U^2} \right); (0, 2) : 0$$



Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

En el sector con 2 partículas (llenado mitad) tenemos entonces tres bloques con energías:

$$(2, 0) : 0; (1, 1) : 0, U, \frac{1}{2} \left(U \pm \sqrt{16t^2 + U^2} \right); (0, 2) : 0$$

Los tres estados a energía cero forman un triplete, los estados doble ocupados están

En el límite $U \gg t$, la energía del singlete es

altos en energía y, por último, el estado de menor es un singlete.

$$E_S \approx -\frac{4t^2}{U}$$

$$(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) / \sqrt{2}$$

Energía de intercambio

Intercambio cinético antiferromagnético

En resumen, para el modelo de Hubbard del dímero a llenado mitad, el estado fundamental es un singlete cuya energía cuando la interacción de Coulomb es mucho mayor que la energía cinética es

$$E_S \approx -\frac{4t^2}{U}$$

Hemos encontrado entonces que el estado fundamental es singlete y, entonces, que hay una **interacción efectiva antiferromagnética**.

En el triplete los electrones no pueden saltar por el ppio de exclusión, lo que aumenta su energía.

Energía de intercambio

Conexión con el modelo de Heisenberg

En resumen, para el modelo de Hubbard del dímero a llenado mitad, el estado fundamental es un singlete cuya energía cuando la interacción de Coulomb es mucho mayor que la energía cinética es

$$E_S \approx -\frac{4t^2}{U}$$

El espectro es **idéntico** al espectro del modelo de Heisenberg antiferro del dímero

$$\mathcal{H} = J\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = \frac{J}{2} \left[\left(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 \right)^2 - S_1^2 - S_2^2 \right]$$

Energía de intercambio

Conexión con el modelo de Heisenberg

En efecto, para 2 partículas:

$$\text{espín 0 (singlete): } \left(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 \right)^2 = 0$$

$$\text{espín 1 (triplete): } \left(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 \right)^2 = S_{\text{tot}}(S_{\text{tot}} + 1) = 2$$

El espectro es entonces:

$$\text{singlete: } \frac{J}{2} \left(0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right) = -\frac{3}{4}J$$

$$\text{triplete: } \frac{J}{2} \left(2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right) = \frac{J}{4}J$$

Energía de intercambio

Conexión con el modelo de Heisenberg

El espectro de baja energía del modelo de Hubbard es idéntico si hacemos la identificación

$$J = \frac{4t^2}{U}$$

ya que

$$\Delta E = (E_{\text{trip.}} - E_S) = J = \frac{4t^2}{U}$$

Heisenberg Hubbard

Energía de intercambio

Conexión con el modelo de Heisenberg

Este resultado particular se puede generalizar a la red, llevando a cabo teoría de perturbaciones de muchos cuerpos o, de manera equivalente, a partir de una transformación canónica.

Las física de baja energía del modelo de Hubbard, en el límite de interacción fuerte y llenado mitad, es idéntica a la del modelo de espines de Heisenberg.

$$\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} \xrightarrow{U \gg t} \mathcal{H}_{\text{Heisenberg}}, \quad J = \frac{4t^2}{U}$$

Fin de la clase

¡Muchas gracias!