Tema 14b
Hamiltonià en presència de camp magnètic: La papallona de Hofstadter (cont.)

Josep Planelles
Departament de Química Física i Analítica, Universitat Jaume I,
Apartat 224, E-12080 Castelló, Spain

1 La papallona de Hofstadter

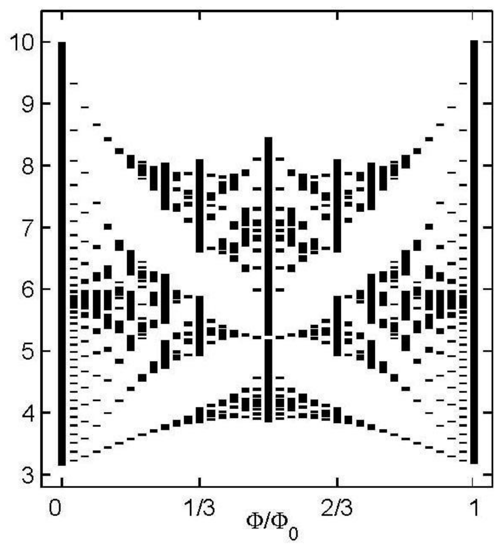

Figure 1: La papallona de Hofstadter

En la figura mostrem l'espectre energètic d'una xarxa bidimensional quadrada travessada per un camp magnètic axial vs. el valor del flux que la travessa, en un intèrval de fluxos entre zero i un fluxó ϕ_0 ($\phi \in [0, 2\pi]$).
Com podem veure, per a $\phi = \phi_0/2$ la banda inicial contínua obri un gap generant dues bandes. Per a $\phi = \phi_0/3$ la banda dóna lloc a tres bandes. Per a $\phi = \phi_0/32$, la banda original s'obri en multitud de minibandes. Per a $\phi = \phi_0$ tornem a tenir una única banda, perque les cel·les espacial i magnètica coincideixen. Per a $\phi = (2/3)\,\phi_0$ tornem a trobar tres bandes com a $\phi = \phi_0/3$, etc. El fet que la forma de l'espectre vs. el flux ϕ semble una papallona fa que aquest s'anomene *papallona de Hofstadter*, en honor a D. R. Hofstadter que fou el primer en publicar aquesta autoreplicació a partir de càlculs model tipus tight binding (D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B 14(1976) 2239).

1.1 Càlcul Tight Binding

En el càlcul TB introduïm el camp magnètic mitjançant la substitució de Peierls: $\Phi(\mathbf{r}) \to \exp\left[-I\int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(r')d\mathbf{r}'\right]\Phi(\mathbf{r})$, amb $I = \sqrt{-1}$. Usarem el gauge de Coulomb, $\mathbf{A} = \mathbf{B}\,(0, x, 0)$, perquè no introdueix fases en una de les direccions, com veurem tot seguit. Considerem una xarxa quadrada de constant de cel·la a. La fase que el camp introdueix en anar del node (i,j) al node $(i,j+1)$ deriva de la integral:

$$\int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(r')d\mathbf{r}' = \int_{(i,j)}^{(i,j+1)} \mathbf{B}(0,x,0)(0,dy,0) = \mathbf{B}(i-1)a\int_{(j-1)a}^{ja} dy = \mathbf{B}(i-1)a^2 = -2\pi(i-1)\alpha \tag{1}$$

on α és el flux magnètic canviat de signe ($-Ba^2$) en unitat atòmiques de flux (2π). Per tant, la fase que introdueix el camp magnètic és $\exp\left[I\,2\pi(i-1)\alpha\right]$. La fase per anar des de (i,j) al node $(i,j-1)$ serà doncs $\exp\left[-I\,2\pi(i-1)\alpha\right]$.

La fase que el camp introdueix en anar del node (i,j) al node $(i+1,j)$ deriva de la integral:

$$\int_{(i,j)}^{(i+1,j)} \mathbf{B}(0,x,0)(dx,0,0) = 0 \tag{2}$$

Per tant, en la direcció x el camp magnètic no introdueix cap fase.

En la xarxa considerada sols hi ha enllaç entre nodes veïns. Per tant, els elements de matriu $m[(i,j),(k,l)] = \langle (i,j)|\hat{H}|(k,l)\rangle$ són zero, excepte si el node (i,j) és veí del node (k,l). En tal cas, la integral val t. És a dir, els elements no nuls són: $m[(i,j),(i+1,j)] = m[(i,j),(i-1,j)] = m[(i,j),(i,j+1)] = m[(i,j),(i,j-1)] = t$. En presència de camp magnètic, en canviar del node (i,j) al node $(i \pm 1, j)$ la funció d'ona no afegeix cap fase, però en anar del node (i,j) al node $(i, j \pm 1)$ apareix una fase $\exp[\pm I\, 2\pi(i-1)\alpha]$, cosa que fa que els elements de matriu $m[(i,j),(i,j\pm 1)]$ passen a valer $t \exp[\pm I\, 2\pi(i-1)\alpha]$. Aquest resultat ve esquematitzat en l'esquema inferior central de la figura 2.

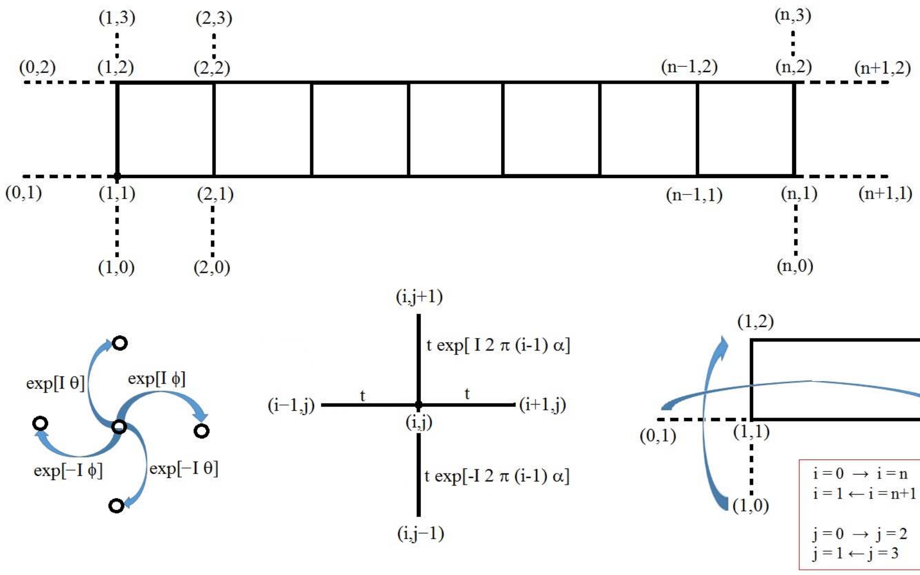

Figure 2: La papallona de Hofstadter

Volem fer un càlcul periòdic. Aplicarem doncs les condicions frontera periòdiques: com la densitat en posicions equivalents x i $x + a$ ha de ser la mateixa, $|\Phi(x+a)|^2 = |\Phi(x)|^2$, les funcions d'ona seran iguals, excepte una fase: $\Phi(x+a) = \Phi(x)\exp[I\theta]$, $\theta \in [0, \pi]$. Aquest resultat ve esquematitzat en la part inferior esquerra de la figura 2.

Únicament quan el flux magnètic que travessa una cel·la és unitat (o enter), es manté la periodicitat de la xarxa. Si nosaltres volem aplicar un camp magnètic inferior a la unitat, e.g. $1/n$, on $n \in Z$, haurem de considerar una cel·la unitat n vegades major. En la part superior de la figura 2 representem la cel·la unitat que usarem per a calcular en presència d'un flux magnètic $1/n$. Si el flux fos $2/n$ hi hauria prou en considerar una cel·la unitat la meitat de gran. Ara be, podem usar la mateixa, en el qual cas es produeix el fenomen del *doblat* de la banda: com la cel·la unitat de la xarxa directa és el doble, la de la xarxa recíproca és la meitat, i per tant, per a cada valor de l'exponent θ de la fase $\exp[I\theta]$ obtenim dos autovalors, de manera que en recórrer la cel·la de la xarxa recíproca trobem tots els autovalors.

Finalment, en l'esquema inferior dret de la figura s'indica els nodes de fora de la cel·la unitat que requereix la construcció de la matriu TB i com són substituïts per nodes equivalents dins de la cel·la unitat.

Tenint en compte tot açò ja podem construir la matriu TB. A manera d'exemple detallem com calculem els elements de matriu que impliquen un node situat en la primera fila ($j = 1$) que no estiga al cantó ($2 \le i \le n-1$). Si anomenem al node de partida $(i,1)$, aquest presenta integrals no zero amb els nodes $(i,2), (i+1,1), (i,0), (i-1,1)$. Ara be, el node $(i,0)$ no pertany a la cel·la unitat i ha de ser canviat pel node $(i,2)$ afegint una fase $\exp[I\theta]$. Tanmateix, el camp introdueix una fase $\exp[\pm I\, 2\pi(i-1)\alpha]$ entre nodes verticalment alineats (vegeu esquemes en la figura 2). Finalment, definim una etiqueta $(j-1) * n + i$ per a representar el node (i,j). Per tant, $|i,1\rangle = |i\rangle, |i,2\rangle = |n+i\rangle, |i+1,1\rangle = |i+1\rangle, |i-1,1\rangle = |i-1\rangle$. Amb tot açò, les integrals a considerar són:

$$
\begin{array}{llll}
\langle (i,1)|\hat{H}|(i,2)\rangle & = t\exp[I\, 2\pi(i-1)\alpha] & = \langle i|\hat{H}|n+i\rangle & = m(i,n+i) \\
\langle (i,1)|\hat{H}|(i+1,1)\rangle & = t & = \langle i|\hat{H}|i+1\rangle & = m(i,i+1) \\
\langle (i,1)|\hat{H}|(i,0)\rangle & = t\exp[-I\, 2\pi(i-1)\alpha] & = \langle (i,1)|\hat{H}|(i,2)\rangle \exp[I\theta] & = m(i,n+i)\exp[I\theta] \\
\langle (i,1)|\hat{H}|(i-1,1)\rangle & = t & = \langle i|\hat{H}|i-1\rangle & = m(i,i-1)
\end{array}
\tag{3}
$$

Els elements de matriu no nuls són doncs:[1]

$$\begin{aligned} m(i,n+i) &= t(\exp\left[I\,2\pi(i-1)\alpha\right] + \exp[-I\theta]\exp\left[-I\,2\pi(i-1)\alpha\right]) \\ m(i,i+1) &= t \\ m(i,i-1) &= t \end{aligned} \tag{4}$$

Tot seguit incloem un codi Mathematica que permet calcular i representar la papallona de Hofstadter:

```
ClearAll["Global`*"];
n = 150; t = 1;
m = Table[0, {i, 1, 2 * n}, {j, 1, 2 * n}];

i = 1;
j = 1;
m[[1, n + 1]] = t (1 + Exp[-ⅈ θ]);
m[[1, 2]] = t ;
m[[1, n]] = t Exp[-ⅈ ϕ];

j = 1; (* i = 2 ... (n-1)  *)
For[i = 2, i ≤ (n - 1), i++,
  m[[i, n + i]] = t ( Exp[ⅈ 2 Pi (i - 1) α] + Exp[-ⅈ θ] Exp[-ⅈ 2 Pi (i - 1) α]);
  m[[i, i + 1]] = t;
  m[[i, i - 1]] = t ;
 ];

i = n;  j = 1 ;
m[[n, 2 * n]] = t ( Exp[ⅈ 2 Pi (i - 1) α]  + Exp[-ⅈ θ] Exp[-ⅈ 2 Pi (i - 1) α]);
m[[n, 1]] = t Exp[ⅈ ϕ];
m[[n, n - 1]] = t;

i = 1;  j = 2;
m[[n + 1, 1]] = t (1 + Exp[ⅈ θ]);
m[[n + 1, n + 2]] = t;
m[[n + 1, 2 * n]] = t Exp[-ⅈ ϕ];

j = 2; (* i=2 ... n-1; *)
For[i = 2, i ≤ (n - 1), i++,
  m[[n + i, i]] = t (Exp[ⅈ θ] Exp[ⅈ 2 Pi (i - 1) α]  + Exp[-ⅈ 2 Pi (i - 1) α] );
  m[[n + i, n + i + 1]] = t;
  m[[n + i, n + i - 1]] = t;
 ];

i = n;  j = 2 ;
m[[2 * n, n]] = t (Exp[ⅈ θ] Exp[ⅈ 2 Pi (i - 1) α]  + Exp[-ⅈ 2 Pi (i - 1) α] );
m[[2 * n, n + 1]] = t Exp[ⅈ ϕ];
m[[2 * n, 2 * n - 1]] = t ;
(*
m//MatrixForm;
Eigenvalues[m/.{θ->0.17,ϕ->0.13,α→0.11}];
MatrixPlot[m]
*)
llista = {};
For[α = 0, α ≤ 1, α += 1 / n,
  enecolect = {};
  For[θ = 0, θ ≤ Pi, θ += Pi / 5,
   For[ϕ = 0, ϕ ≤ Pi, ϕ += Pi / 5,
         ene = Eigenvalues[m // N] // Chop;
         AppendTo[enecolect, ene];
    ];
  ];
      enecolect = Sort[Flatten[enecolect]];
      For[i = 1, i ≤ Length[enecolect], i++,
           enecolect[[i]] = {α, enecolect[[i]]}
       ];
  AppendTo[llista, enecolect]
 ];
Print[ListPlot[llista, Axes → False]];
```

Figure 3: codi Mathematica

[1]Fixeu-vos que com ja existia el terme $\langle (i,1)|\hat{H}|(i,2)\rangle$, la substitució $(i,0) \to (i,2)$ fa que l'element de matriu $m(i,n+i)$ continga la suma de dos termes (vegeu detalls a l'apèndix).

La papallona de Hofstadter generada és:

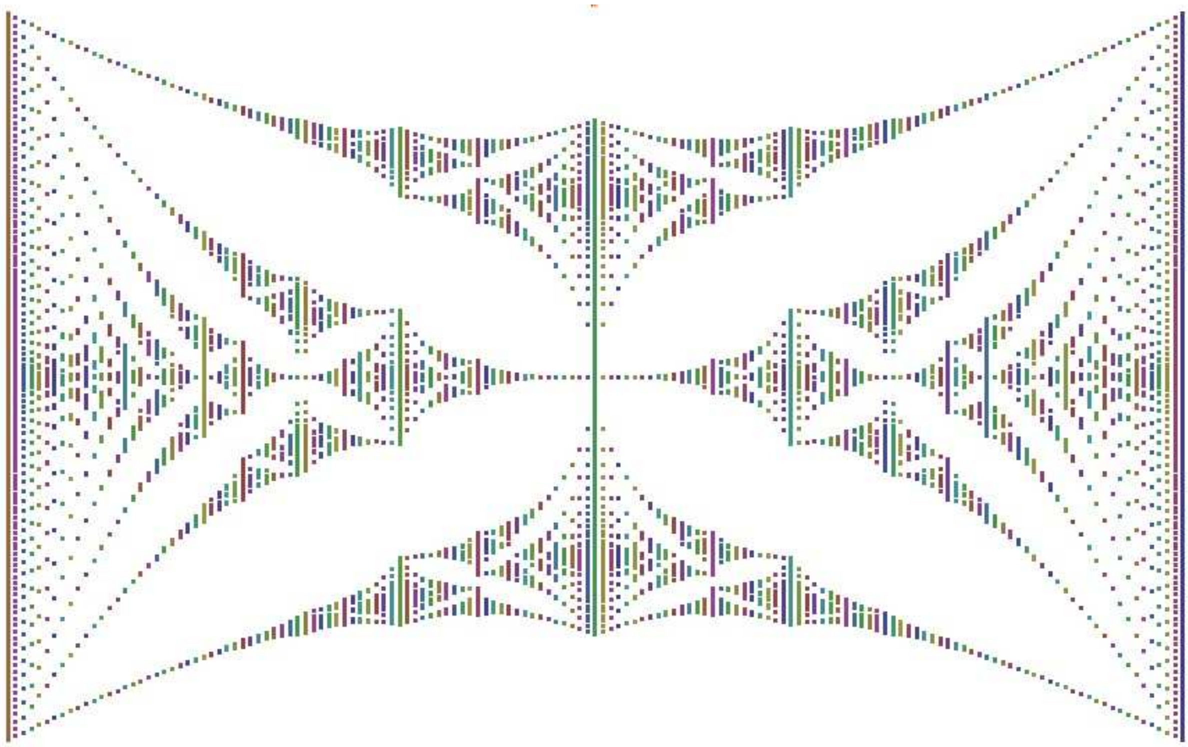

Figure 4: output Mathematica

2 Apèndix: l'element de matriu $m(i, n+i)$ conté la suma de dos termes

Si escrivim que:

$$\hat{H}|(i,j)\rangle = t\, e^{I\,2\pi(i-1)\alpha}\,|(i,j+1)\rangle \,+\, t\,|(i+1,j)\rangle \,+\, t\, e^{-I\,2\pi(i-1)\alpha}\,|(i,j-1)\rangle \,+\, t\,|(i-1,j)\rangle \tag{5}$$

podem escriure també que:

$$\langle(i,j)|\hat{H} = t\,(\langle(i,j+1)|\, e^{-I\,2\pi(i-1)\alpha} + \langle(i+1,j)| \,+\, \langle(i,j-1)|e^{I\,2\pi(i-1)\alpha} + \langle(i-1,j)|) \tag{6}$$

I, en particular, que:

$$\langle(i,1)\hat{H} = t\,(e^{-I\,2\pi(i-1)\alpha}\,\langle(i,2)| \,+\, \langle(i+1,1)| \,+\, e^{I\,2\pi(i-1)\alpha}\,\langle(i,0)| \,+\, \langle(i-1,1)|) \tag{7}$$

Com que $|(i,0)\rangle = e^{I\theta}\,|(i,2)\rangle$ i, per tant, $\langle(i,0)| = e^{-I\theta}\,\langle(i,2)|$, tenim que:

$$\langle(i,1)\hat{H} = t(e^{-I\,2\pi(i-1)\alpha}\,\langle(i,2)| \,+\, \langle(i+1,1)| \,+\, e^{I\,2\pi(i-1)\alpha}\,e^{-I\theta}\,\langle(i,2)| \,+\, \langle(i-1,1)|) \tag{8}$$

Finalment,

$$\langle(i,1)\hat{H}|(i,2)\rangle = m[(i,1),((i,2))] = m(i,n+i) = t(e^{-I\,2\pi(i-1)\alpha} \,+\, e^{I\,2\pi(i-1)\alpha}\,e^{-I\theta}). \tag{9}$$