

ICH-FC
DOC-F
1645

Estudio Variacional y Numérico del Antiferromagneto de Heisenberg para Dimensión y Spin Arbitrarios

Profesores Patrocinantes : Dr. David Gottlieb B.
Dr. Miguel Lagos I.
Candidato a Doctor : Arturo Cristian Millán Fuentes

Tesis entregada a la Universidad de Chile en cumplimiento parcial de los requisitos para optar al grado de Doctor en Ciencias con mención en Física.



Informe de Aprobación Tesis de Doctorado

Se informa al Comité del Programa de Doctorado en Ciencias con mención en Física que la Tesis presentada por el candidato

Arturo Cristian Millán Fuentes

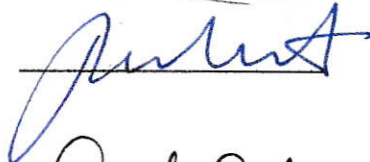
ha sido aprobada por la Comisión Informante de Tesis como requisito para la obtención del grado de Doctor en Ciencias con mención en Física.

Director de Tesis

Dr. David Gottlieb

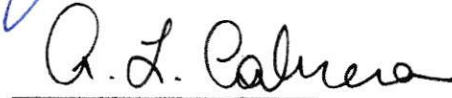


Dr. Miguel Lagos



Comisión Informante de Tesis

Dr. Alejandro Cabrera



Dr. Patricio Cordero



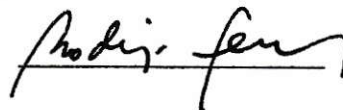
Dr. Patricio Fuentealba



Dr. Patricio Vargas



Dr. Rodrigo Ferrer (Presidente)



Contenidos

Introducción	1
1 Excitaciones Apareadas	8
1.1 Teoría PNME	9
1.2 Valores Esperados	14
1.3 Validez de la Teoría	17
2 Antiferromagneto de Heisenberg: Estudio Variacional	22
2.1 El Modelo	24
2.2 Estudio Variacional	27
2.3 Cálculo de los Elementos de Matriz	30
2.4 Resultados	34
2.4.1 Análisis de fases sin anisotropía uniaxial	37
2.4.2 Análisis de fases con anisotropía uniaxial	39
2.5 Conclusiones	40
Bibliografía	52
A Valores Esperados	56
B Tratamiento Hartree-Fock	59

C	Método Numérico	63
C.1	Método de Lanczös Modificado	64
C.2	Técnica de <i>hashing</i>	66
C.3	Un Ejemplo Práctico	69
C.4	Comentarios	72

Lista de Figuras

1.1	Energía del Estado Fundamental para una Cadena Lineal	20
1.2	Energía del Estado Fundamental para una Red Cuadrada	21
2.1	Energía del Estado Fundamental para cadena lineal y $S = 1, D = 0$. . .	41
2.2	Energía del Estado Fundamental para Cadena Lineal y $S = 3/2, D = 0$	42
2.3	Magnetización del Estado Fundamental para cadena lineal y $S = 1, D = 0$	43
2.4	Ángulos variacionales para Cadena Lineal y $S = 3/2, D = 0$	44
2.5	Energía del Estado Fundamental para red cuadrada y $S = 1/2, D = 0$.	45
2.6	Magnetización del Estado Fundamental para red cuadrada y $S = 1/2,$ $D = 0$	46
2.7	Energía del Estado Fundamental para red cuadrada y $S = 1, D = 0$. . .	47
2.8	Magnetización del Estado Fundamental para red cuadrada y $S = 1, D = 0$	48
2.9	Mapas de fases del Estado Fundamental para Cadena Lineal, con $\alpha = 0.5$	49
2.10	Energía del Estado Fundamental para cadena lineal y $S = 1$	50
2.11	Energía del Estado Fundamental para Cadena Lineal y $S = 3/2$	51

Lista de Tablas

1.1	Promedios para Cadena lineal de spin $1/2$	15
1.2	Promedios en función de S y z	16
B.1	Comparación entre tratamiento PNME y Hartree-Fock	62
C.1	Método de Lanczös: valores relevantes en una primera iteración	71
C.2	Método de Lanczös: Convergencia del estado de prueba y su energía . .	72

Resumen

El propósito de esta Tesis es la descripción de las propiedades de los estados fundamentales para sistemas físicos cuya conducta magnética obedece al modelo antiferromagnético de Heisenberg anisótropo para cualquier dimensión y spin. Para este efecto se desarrolla un tratamiento variacional en base a la teoría conocida como *Excitaciones No Magnéticas Apareadas* (PNME por sus iniciales en inglés), y a la introducción de rotaciones locales de spin. La potencia del ansatz variacional desarrollado permite la descripción de estados fundamentales aún con la introducción de anisotropías cristalinas, correcciones dipolares, y campos magnéticos externos. Se logra una descripción clara de las distintas fases ferro y antiferromagnéticas que ocurren para diferentes valores de la anisotropía, el campo magnético, y el coeficiente de anisotropía uniaxial, mostrando aquellos valores “críticos” de esos parámetros, para los que ocurren las transiciones de fase, en configuraciones unidimensionales, bidimensionales o tridimensionales, para cualquier valor del spin total por sitio. Dada la ausencia de resultados numéricos confiables con qué comparar, también se desarrollaron soluciones numéricas para spin $S = 1/2, 1, 3/2$ en cadenas de 20, 12, 10 spines respectivamente, en base a un algoritmo computacional conocido como “Método de Lanczös Modificado”. Los valores obtenidos por los tratamientos variacional y numérico muestran un excelente acuerdo en un amplio rango de los parámetros físicos involucrados.

Introducción

Con el fin de entender una gran variedad de fenómenos físicos cooperativos, que describen propiedades tales como superconductividad y magnetismo en diversos materiales, se necesita a menudo recurrir a diversos modelos clásicos o cuánticos que se espera capturen ciertos fenómenos de importancia de los materiales en donde aquellos ocurren. Aunque tales modelos describan sólo algunas propiedades de los materiales, y aún pensando en que la mayor parte de la complejidad de los diversos componentes del sistema físico no ha sido tomada en cuenta, aún así se necesita inventar métodos para encontrar soluciones confiables a ellos: exactas o aproximadas.

La presente Tesis trata precisamente del desarrollo y aplicación de un método variacional de solución aproximada al modelo antiferromagnético de Heisenberg, caracterizada por su sencillez matemática, la claridad con que representa las diferentes configuraciones magnéticas de la red analizada, la precisión con que entrega valores de cantidades físicas, y la generalidad que alcanza su formulación, en el sentido de que se aplica en redes de spin y dimensionalidad arbitraria. También se desarrolla en este trabajo la implementación de algoritmos computacionales para tratamiento numérico del problema.

Uno de los más interesantes hallazgos desde el descubrimiento de la superconductividad de alta temperatura crítica [1-4], es la observación de alineamiento antiferromagnético de spines en los planos de cobre-oxígeno de las nuevas cerámicas superconductoras. Este hecho, unido a la incapacidad de la teoría BCS tradicional para explicar transiciones superconductoras de alta temperatura crítica, ha despertado gran interés

por tratar de encontrar nuevos mecanismos magnéticos para la generación de un estado superconductor. La dinámica de los spines ordenados antiferromagnéticamente, y el modelo de Heisenberg antiferromagnético, ha estado en el centro de la atención. La estructura de capas de estos materiales sugiere que ellos presentan una realización física del modelo de Heisenberg bidimensional.

Aisladores tales como La_2CuO_4 , que son los precursores no dopados de los nuevos superconductores, tienen un electrón de valencia no apareado por sitio en los planos de CuO_2 (“banda semillena”). Estos materiales no son metálicos debido a que la energía de repulsión coulombiana intra-sitio U eleva los niveles incompletos a energías relativamente altas frente al monto de energía cinética que se pierde en la ocupación de tales niveles. Un sistema como el descrito se conoce como un aislador de Mott-Hubbard. Lo anterior ha estimulado un intenso interés en el ordenamiento de spines que presentan los modelos de Heisenberg y Hubbard, debido a que se cree que estos modelos describen a los superconductores bajo ciertos límites. El modelo de Hubbard, que es uno de los modelos más simples que introduce una interacción entre electrones, se basa sobre la hipótesis de que la parte dominante de la interacción electrón-electrón es la interacción intra-atómica (dentro de cada átomo). Anderson propone que el modelo de Hubbard bidimensional de una banda en el límite de alta repulsión intrasitio, sería apropiado para describir la conducta de estos nuevos sistemas superconductores, y que las fluctuaciones cuánticas tendrían un rol importante en la generación del estado superconductor. Puede mostrarse, usando la teoría de perturbaciones, que para el caso de banda semi-llena un tal sistema puede ser descrito por el hamiltoniano conocido como “Modelo t-J” [7]:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_J, \quad (i)$$

$$\mathcal{H}_t = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{H.C.}), \quad (ii)$$

$$\mathcal{H}_J = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (iii)$$

donde $\langle i, j \rangle$ restringe la suma sólo a primeros vecinos, t es el factor de *hopping* (transferencia), $J = 4t^2/U$, y U es la repulsión electrónica intrasitio ($U \gg t$). El primer

término, \mathcal{H}_t , da cuenta de la transferencia de huecos entre sitios vecinos, restringido a la ocupación simple. El segundo término, \mathcal{H}_J , es el Hamiltoniano de Heisenberg isótropo para spin 1/2 sobre una red cuadrada [8]. El signo positivo de J hace energéticamente favorables a configuraciones de spines opuestos, por lo que este hamiltoniano tiene un carácter antiferromagnético. En palabras, el principio de exclusión de Pauli mantiene aparte a los electrones de spin paralelo y así reduce su energía de repulsión coulombiana. La diferencia de energía entre las configuraciones paralela y antiparalela da origen al término de intercambio J . El Hamiltoniano de Heisenberg ha sido obtenido también por otras vías [9], teniendo en común el que el factor de intercambio J debe principalmente su origen a la interacción electrostática, más que a interacciones dipolares directas, que son en general de tamaño mucho menor.

La conducta magnética de los planos CuO_2 en óxidos de cobre no dopados como La_2CuO_4 , YBa_2CuO_6 y otros, puede ser descrita por el hamiltoniano de Heisenberg (iii). Cabe notar que el acoplamiento magnético, cuya magnitud es proporcional al coeficiente J mencionado en el párrafo anterior, entre planos vecinos es muy pequeño en comparación al acoplamiento dentro de un plano –alrededor de cien mil veces¹ menor para el La_2CuO_4 –, por lo que en lo que respecta a las propiedades magnéticas, estos materiales pueden ser entendidos esencialmente como bidimensionales, por lo que es lógico concluir que uno de los énfasis principales en el estudio del hamiltoniano de Heisenberg ha sido el caso de spin 1/2 en dos dimensiones. Al respecto se han hecho estudios variacionales [46, 22], empleo de Grupo de Renormalización [25], diagonalizaciones exactas de sistemas de pocos cuerpos (*small clusters*) [23, 24], simulaciones Monte-Carlo [49], etc. Diversos cálculos parecen concluir que existe en este caso un orden antiferromagnético de largo alcance, y que la magnetización de subred a temperatura $T = 0$ está reducida a un 60% de su valor máximo debido a las fluctuaciones cuánticas en el caso isótropo [18].

El Hamiltoniano de Heisenberg está entre los modelos cuánticos que introducen interacciones en forma sencilla, y pese a su sencillez, dicho modelo puede mostrar corre-

¹De las referencias [13, 14], $J \simeq 1540K$ en un plano de CuO_2 a $T \simeq 4K$, y $J^{\text{entre-planos}}/J \simeq 10^{-5}$

laciones de corto y largo alcance. Lamentablemente, sólo se conoce la solución exacta para el caso de cadenas unidimensionales de spin $1/2$, gracias al ansatz de Bethe [13–15]. No obstante, debido a la complejidad envuelta en estas soluciones, no se ha podido lograr un completo entendimiento de este modelo ya que, al tratar en un mismo pie las interacciones de distintos órdenes, oculta sus principales mecanismos, además del hecho que su extensión a dimensiones mayores se hace extremadamente complicada. La situación no mejora si se consideran sistemas con spin $S \neq 1/2$, acoplamiento con otros grados de libertad, presencia de campos externos etc, y a que no se cuenta en estos casos con ninguna solución al modelo de Heisenberg. Así, se hace necesario recurrir a tratamientos aproximados.

Entre los tratamientos analíticos, la llamada “Teoría de Ondas de Spin” [15] entrega un marco aproximado para entender la fenomenología de los materiales magnéticos reales. Este tratamiento trabaja bastante bien para casos en el que la importancia de las tres componentes de spin en el hamiltoniano es similar (*límite isótropo*), pero cuando el sistema es anisótropo, esto es, si la interacción a lo largo de alguna dirección preferencial tiene un peso mucho mayor que las demás (se está cerca del *límite Ising*), entonces la simetría de polarización circular de las ondas de spin ya no es adecuada para describir el sistema. Además, las ondas de spin fueron pensadas para la descripción de sistemas en que las fluctuaciones cuánticas juegan un papel de poca importancia. Sin embargo, se sabe que la contribución a la energía proveniente de las fluctuaciones cuánticas en el caso isótropo unidimensional es de cerca del 50% [10].

El tratamiento del modelo de Heisenberg considerado en el presente trabajo, fué introducido en fecha reciente por el profesor Miguel Lagos², G. G. Cabrera, D. Gottlieb, M. Kiwi y otros [27–40], para estudiar inicialmente sistemas antiferromagnéticos cercanos al límite Ising. Este tratamiento introduce excitaciones magnéticas apareadas de manera que no cambien la componente z del spin total del sistema, por lo que se les llamó “excitaciones *no magnéticas* apareadas” –PNME por sus iniciales en inglés–,

²A quien se le debe el crédito por la idea original

pero que no tienen asociado un valor definido de \vec{S}_{Total}^2 . A diferencia de ellas, las ondas de spin fueron pensadas para el límite isótropo.

El poder de este formalismo radica en su flexibilidad, precisión y simplicidad matemática. Pese a que el formalismo PNME presupone la existencia de un ordenamiento antiferromagnético, ha mostrado una gran precisión incluso más allá del régimen donde esa hipótesis se satisface. Es así que para el caso unidimensional, el valor de la energía del sistema que entrega PNME concuerda notablemente con la solución exacta para anisotropías cercanas al límite Ising, decayendo en la medida en que los parámetros del sistema se aproximen al modelo isótropo de Heisenberg. Sin embargo, al aumentar la dimensión o el spin, el rango de validez de la teoría se ha extendido aún más allá del límite isótropo, mostrando una gran precisión, incluso para valores de la anisotropía que tienden al modelo XY (en el que la interacción se reduce a considerar sólo dos de las tres componentes del producto interno entre spines), aventajando en esto y en la precisión de los resultados a la teoría de ondas de spin. Sin embargo, las ondas de spin y las excitaciones apareadas generan estados ortogonales entre sí, en otras palabras, exploran distintos subespacios del espacio de Hilbert total asociado al antiferromagneto, por lo que para poseer una visión más completa del sistema cuántico, se debiera poder contar con un conjunto de excitaciones que reúna las características de ambas familias. En el caso unidimensional, debiera considerarse también la presencia de excitaciones no lineales (*solitones*) para tener una descripción más completa del sistema. Esto no es así en los casos de dos o tres dimensiones espaciales, pues la energía de un solitón es directamente proporcional a la extensión del frente de onda.

La flexibilidad de la teoría PNME ha sido confirmada por la gran cantidad de aplicaciones diferentes que ha tenido en los últimos años. Entre las distintas generalizaciones y aplicaciones, puede mencionarse las siguientes:

- (i) “*Generalización a dimensión y spin arbitrario*”. El formalismo PNME fue pensado inicialmente para cadenas de spin 1/2, lo cual tiene varios puntos en contra: existe solución exacta para una dimensión, no hay orden de largo al-

cance, y por último, PNME es superada por un tratamiento Hartree-Fock, al que se iguala asintóticamente en el límite Ising. La teoría ha sido extendida para describir sistemas de spin y/o dimensión superior que no frustren el orden antiferromagnético [31, 55, 57]

- (ii) “*Deformaciones en redes*”. Experimentos recientes revelaron que las interacciones de spines dentro de la red juegan un rol preponderante en la estabilidad estructural de la perovskitas laminadas [43, 44, 45]. Este efecto fue modelado para un sistema unidimensional a través de un acoplamiento lineal entre los spines y las deformaciones de la red [32].
- (iii) “*Fuerzas de enlace de origen magnético*”. Usando un Hamiltoniano donde un hueco se mueve en una subred, Lagos concluyó la existencia de un mecanismo de intercambio entre spines y huecos tipo BCS [34]. El acoplamiento entre spin y hueco nace al variar la energía de intercambio entre 2 spines vecinos, debido a la presencia de un hueco entre ellos.
- (iv) “*Introducción de interacción con segundos vecinos*”. Al considerar interacción de spines con segundos vecinos, se obtuvo una solución que coincidía muy bien con resultados numéricos cuando la interacción a segundos vecinos era ferromagnética, tanto en el caso unidimensional como para dimensión 2; sin embargo, cuando la interacción a segundos vecinos tendía a frustrar el orden antiferromagnético, la precisión decaía. [35, 36, 40]
- (v) “*Generalización a red triangular*”. Se generalizó la teoría PNME para describir una red que presenta frustración, a saber, una red antiferromagnética triangular (no-bipartita), para spin arbitrario [41].
- (vi) “*Aplicación al modelo t-J*”. Se analizó el modelo t-J para bajas concentraciones de huecos dentro de la versión variacional de PNME, donde se obtuvo una descripción de la transición metal-aislador presente en los superconductores de alta

temperatura mediada por las propiedades magnéticas del sistema [42].

En este trabajo se estudiará el modelo antiferromagnético de Heisenberg XXZ para spin general S , dimensión arbitraria d , en presencia de un campo magnético externo uniforme, y de un término de anisotropía uniaxial. En el primer capítulo se muestra una visión básica de la teoría de “Excitaciones No Magnéticas Apareadas”, y una visión sobre su rango de aplicación y limitaciones. En el segundo capítulo se generaliza la solución propuesta para el estado fundamental por el formalismo de PNME, obteniendo a partir de ésta una solución variacional, la que permite una descripción clara de las distintas fases ferro y antiferromagnéticas que ocurren para diferentes valores de la anisotropía, el campo magnético y el coeficiente de anisotropía uniaxial. Se determinan los valores “críticos” de esos parámetros, para los que ocurren las transiciones de fase, en configuraciones unidimensionales, bidimensionales o tridimensionales, para cualquier valor del spin por sitio. Como puede apreciarse, dada la generalidad de aplicación del tratamiento que se presentará, éste no está restringido a la descripción de la conducta magnética de un material en particular, aunque en esta Introducción y en el capítulo 2 se describa algunas realizaciones del modelo. Dada la ausencia de resultados numéricos confiables con qué comparar, también se desarrollaron soluciones numéricas para spin $S = 1/2, 1, 3/2$ en cadenas de 20, 12, 10 spines, respectivamente, usando un potente algoritmo computacional conocido como “Método de Lanczös Modificado” [52, 53], que se explica en el Apéndice “C”. Los valores obtenidos por los tratamientos variacional y numérico muestran un excelente acuerdo en un amplio rango de los parámetros físicos involucrados.

Capítulo 1

Excitaciones Apareadas

En este capítulo se presentará la teoría conocida como *Excitaciones No-Magnéticas Apareadas* [27–40], que entrega soluciones aproximadas para el estado fundamental y parte del espectro de excitaciones en diferentes sistemas magnéticos. Esta teoría, en adelante PNME (por sus iniciales en inglés, *Paired Non Magnetic Excitations*), considera excitaciones elementales que no alteran la componente z del spin total del sistema sobre el que operan, y no tienen asociado un spin definido¹.

Las excitaciones de PNME permiten la introducción de fluctuaciones cuánticas en un estado fuertemente correlacionado, sin destruir el orden antiferromagnético subyacente. Esta característica permite que la teoría pueda trabajar bastante bien en sistemas que presenten orden antiferromagnético de largo alcance, y que no tenga tanto éxito en sistemas unidimensionales, que no presenten correlaciones de largo alcance. Inicialmente pensado para operar sobre sistemas que muestran estados con un fuerte ordenamiento antiferromagnético, la flexibilidad que ha mostrado el tratamiento PNME ha permitido obtener resultados para la energía del estado fundamental, aceptables aún más allá de los límites donde esta condición se satisface.

Para ilustrar esta situación, considérese un sistema de spines $1/2$ en dimensión 1 y

¹Este comentario cobra relevancia al notar que a las excitaciones contempladas en la Teoría PNME se las denominó inicialmente como *singlet excitations* [31], es decir, excitaciones de spin cero.

temperatura nula. Cuando la importancia de la interacción entre las componentes de spin (entre sitios vecinos) a lo largo de alguna dirección supera largamente al resto de la interacciones (*Límite Ising*), los spines adquieren orientaciones bien definidas con respecto a la dirección preferencial (*eje de anisotropía*), ... $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ En este escenario, la teoría PNME entrega muy buenos resultados para el valor de la energía del estado fundamental. Cuando las interacciones dejan de realizarse a lo largo de una dirección preferencial (se habla de *Límite isótropo*), las correlaciones de largo alcance desaparecen (el sistema se desordena) y la teoría PNME comienza a fallar [31, 28]. Sin embargo en el caso de dos dimensiones, donde las correlaciones antiferromagnéticas son predominantes desde el límite Ising hasta el isótropo, PNME aproxima notablemente bien los valores de la energía, aún mejor que teoría de ondas de spin, para todos los valores de anisotropía en ese intervalo.

A continuación se estudiará cómo la teoría PNME permite obtener una expresión aproximada del estado fundamental de un sistema antiferromagnético, pudiendo ser extendida a una función de onda variacional.

1.1 Teoría PNME

Se estudiará a continuación un sistema antiferromagnético de spines fijos en una red cristalina, red que puede ser dividida en dos subredes, una asociada a vectores \vec{R} y la otra a vectores $(\vec{R} + \vec{\delta})$, donde $\vec{\delta}$ conecta vecinos más próximos, uno en cada subred. Se describirá tal sistema por el Hamiltoniano de Heisenberg anisótropo:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_I + \mathcal{H}_{XY}, \quad (1.1)$$

$$\mathcal{H}_I = \sum_{\{\vec{R}\}, \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} S_z(\vec{R}) S_z(\vec{R} + \vec{\delta}), \quad (1.2)$$

$$\mathcal{H}_{XY} = \frac{\alpha}{2} \sum_{\{\vec{R}\}, \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} [S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R})] \quad (1.3)$$

donde \mathcal{H}_I corresponde a la parte Ising del hamiltoniano, \mathcal{H}_{XY} a la parte XY , $\vec{S}(\vec{R})$ es el operador de spin en el sitio \vec{R} , α es un parámetro de anisotropía que conecta continuamente el límite Ising ($\alpha = 0$) con el límite XY ($\alpha = \infty$), pasando por el modelo isótropo ($\alpha = 1$), y $J_{\vec{\delta}}$ es el coeficiente de intercambio. El hecho de que el coeficiente de intercambio sea positivo indica que se favorecen energéticamente las configuraciones con spines vecinos orientados en direcciones opuestas, lo que indica que el sistema es antiferromagnético.

En las vecindades del límite Ising ($\alpha \ll 1$), un estado energéticamente favorable puede ser el estado de Néel,

$$|\mathcal{N}\rangle = |\dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle, \quad (1.4)$$

que asigna spines *Up* ($S_z(\vec{R}) = S$) a una subred y spines *Down* ($S_z(\vec{R} + \vec{\delta}) = -S$) a la otra. Este estado es sólo autovector del término Ising del Hamiltoniano. El otro término, al actuar sobre el estado de Néel, lo relaciona con aquellos estados que difieren de él por el transporte de una unidad de S_z desde un sitio hasta uno de sus vecinos más próximos. En el límite de baja anisotropía, ($\alpha \ll 1$), el término XY tiene poco peso en comparación al término Ising del hamiltoniano, por lo que en esta situación resulta razonable suponer que en el estado fundamental de (1.2), el estado de Néel² tendrá un peso mucho mayor que otras configuraciones, que diferirán de éste en la presencia de pares de spines no alineados antiferromagnéticamente. Luego, si se pudiera generar una combinación lineal de estados con las características mencionadas, tales combinaciones podrían ser buenas aproximaciones del estado fundamental verdadero. Lo anterior induce a considerar los siguientes operadores de la forma

$$S^+(\vec{R} + \vec{\delta})S^-(\vec{R}) \quad (1.5)$$

o, más en general, excitaciones del tipo

²Y su simétrico, que se obtiene trasladando toda la red en un sitio. La teoría PNME rompe la degenerancia entre estas configuraciones fijando *a priori* una de ellas por sobre la otra

$$\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) = \mathcal{A} \sum_{\{\vec{R}\}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} S^{+}(\vec{R} + \vec{\delta}) S^{-}(\vec{R}) + Q_{\vec{\delta}}(\vec{k}) \quad (1.6)$$

con los coeficientes \mathcal{A} y $Q_{\vec{\delta}}(\vec{k})$ por ahora indeterminados. El vector \vec{k} es un vector que recorre a la primera zona de Brillouin de una de las dos subredes.

¿Por qué $Q_{\vec{\delta}}(\vec{k})$? Con el fin de guiar la intuición del lector, es recomendable pensar en el oscilador armónico desplazado. El que se introduzca un término constante tiene por objeto facilitar la expresión del Hamiltoniano como una forma cuadrática en las excitaciones que se están definiendo aquí. Esto quedará claro más adelante.

El álgebra de las excitaciones ϕ^{\dagger} es de bastante difícil interpretación, pero al considerar el límite de alta anisotropía, se simplifica notablemente. En efecto, los conmutadores son

$$\begin{aligned} [\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}^{\dagger}(\vec{k}')] &= \mathcal{A}^2 \sum_{\{\vec{R}\}} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}} \left(S^{+}(\vec{R} + \vec{\delta}) S^{-}(\vec{R} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') S_z(\vec{R}) \right. \\ &\quad \left. - e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{\delta} - \vec{\delta}')} S^{+}(\vec{R}) S^{-}(\vec{R} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') S_z(\vec{R} + \vec{\delta}) \right), \end{aligned} \quad (1.7)$$

$$[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}(\vec{k}')] = 0, \quad (1.8)$$

pero cuando $\alpha \ll 1$, una configuración con spines muy localizados se hace energéticamente favorable, y entonces, los conmutadores se convierten en

$$[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}^{\dagger}(\vec{k}')] \simeq 2S^2 N \mathcal{A}^2 \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\vec{\delta}\vec{\delta}'} \quad , \quad [\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}(\vec{k}')] = 0. \quad (1.9)$$

Las expresiones anteriores sugieren fuertemente una álgebra bosónica, para lo cual se fija el valor del parámetro \mathcal{A} en

$$\mathcal{A} = \frac{1}{\sqrt{2S^2 N}}.$$

Análogamente a la situación anterior, los conmutadores de los operadores ϕ y la parte Ising del Hamiltoniano son también complicados a primera vista,

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_I, \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k})] &= \frac{1}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\{\vec{R}\}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) \\
&\quad \times \sum_{\vec{\delta}'} J_{\vec{\delta}'} \left(S_z(\vec{R} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') - S_z(\vec{R} + \vec{\delta}') - \delta_{\vec{\delta}, \vec{\delta}'} \right), \quad (1.10)
\end{aligned}$$

pero nuevamente, al considerar alto orden antiferromagnético, la relación anterior se convierte en la siguiente expresión aproximada:

$$[\mathcal{H}_I, \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k})] \cong (2S \sum_{\vec{\delta}'} J_{\vec{\delta}'} - J_{\vec{\delta}}) (\phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) - Q_{\vec{\delta}}(\vec{k})). \quad (1.11)$$

La parte \mathcal{H}_{XY} del Hamiltoniano se puede escribir directamente en función de los operadores ϕ

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha}{2} \sum_{\{\vec{R}\}, \vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \left(S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) \right) = \\
\frac{\alpha}{2} \sqrt{2S^2N} \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} (\phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{0}) + \phi_{\vec{\delta}}(\vec{0}) - 2Q_{\vec{\delta}}(0)). \quad (1.12)
\end{aligned}$$

De este modo, combinando las ecuaciones anteriores, puede conocerse el conmutador de las excitaciones ϕ con el hamiltoniano completo, en el régimen de alto orden antiferromagnético,

$$[\mathcal{H}, \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k})] = (2S \sum_{\vec{\delta}'} J_{\vec{\delta}'} - J_{\vec{\delta}}) (\phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) - Q_{\vec{\delta}}(\vec{k})) \quad (1.13)$$

$$+ \frac{\alpha}{2} \sqrt{2S^2N} J_{\vec{\delta}} \delta_{\vec{k}, 0}. \quad (1.14)$$

Para diagonalizar el hamiltoniano, conviene elegir $Q_{\vec{\delta}}(\vec{k})$ de modo de cancelar los términos inhomogéneos. Así,

$$Q_{\vec{\delta}}(\vec{k}) \equiv Q_{\vec{\delta}} \delta_{\vec{k}, 0} = \sqrt{\frac{N}{2}} \frac{\alpha S J_{\vec{\delta}}}{2S \sum_{\vec{\delta}'} J_{\vec{\delta}'} - J_{\vec{\delta}}}.$$

y el Hamiltoniano ha quedado diagonalizado, pudiéndose expresar en términos de las excitaciones ϕ como

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{\delta}, \vec{k}} \left(2S \sum_{\vec{\delta}'} J_{\vec{\delta}'} - J_{\vec{\delta}} \right) \phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) \phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}) + E_g. \quad (1.15)$$

Sólo falta determinar la constante aditiva E_g , que corresponde a la energía del estado fundamental; ella se puede obtener encontrando el estado fundamental $|g\rangle$ y luego promediando el Hamiltoniano. Sin embargo, una forma más directa de obtenerla es considerando la propiedad

$$\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})|\mathcal{N}\rangle = Q_{\vec{\delta}}\delta_{\vec{k}\vec{0}}|\mathcal{N}\rangle. \quad (1.16)$$

Esta propiedad es exacta e indica que el estado de Néel es un autoestado de las excitaciones ϕ . Al promediar ambos lados de (1.15) sobre el estado de Néel, al lado izquierdo se obtiene su energía, mientras que del lado derecho puede despejarse y obtener la energía del estado fundamental

$$\frac{E_g}{N} = -\frac{S^2}{2} \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} \left(1 + \frac{J_{\vec{\delta}}\alpha^2}{2S \sum_{\vec{\delta}'} J_{\vec{\delta}'} - J_{\vec{\delta}}} \right). \quad (1.17)$$

El estado fundamental del sistema corresponde al vacío de excitaciones

$$\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})|g\rangle = 0, \quad (1.18)$$

estado que se puede obtener directamente a través de la propiedad (1.16). En efecto, si se considera la relación

$$[\phi, f(\phi^{\dagger})] = f'(\phi^{\dagger})$$

de un operador bosónico ϕ y alguna función analítica $f(\phi^{\dagger})$, no es difícil concluir que el estado

$$|g\rangle = \exp \left[- \sum_{\vec{\delta}} Q_{\vec{\delta}} (\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(0) - \phi_{\vec{\delta}}(0)) \right] |\mathcal{N}\rangle \quad (1.19)$$

satisface (1.18).

En este punto, conviene hacer un comentario sobre la forma del espectro de energías que se ha encontrado: es análogo al de un oscilador armónico en d dimensiones. Por tratarse de un espectro plano, éste no corresponde a la realidad, pero debe considerarse que se está trabajando bajo suposiciones restrictivas, y no se ha pensado obtener una solución general al problema. Además, tampoco se han considerado todos los grados de libertad del sistema, restringiéndose la naturaleza de las excitaciones a sólo trasladar una unidad de S_z sobre la red magnética.

Otra cosa que debe ser mencionada guarda relación con la magnitud de las fluctuaciones introducidas por las excitaciones cuasi-bosónicas ϕ^\dagger sobre el estado de Néel: éstas excitaciones producen transporte de unidades de S_z sobre toda la red, incluyendo el transporte entre sitios que no son próximos vecinos como un proceso indirecto, donde cada salto entre próximos vecinos va acompañado por una suerte de “constante de acoplamiento”, directamente proporcional al valor de la anisotropía α . Ésto se visualiza fácilmente al expresar estado fundamental (1.19) en función de los operadores espino-riales:

$$\begin{aligned}
|g\rangle &= \exp \left[- \sum_{\vec{\delta}} Q_{\vec{\delta}} (\phi_{\vec{\delta}}^\dagger(0) - \phi_{\vec{\delta}}(0)) \right] |\mathcal{N}\rangle \\
&= \exp \left[-\alpha \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} \frac{J_{\vec{\delta}}}{2(2S \sum_{\vec{\delta}'} J_{\vec{\delta}'} - J_{\vec{\delta}})} (S^+(\vec{R} + \vec{\delta})S^-(\vec{R}) - S^+(\vec{R})S^-(\vec{R} + \vec{\delta})) \right] |\mathcal{N}\rangle \\
&\equiv \mathcal{U}_\alpha |\mathcal{N}\rangle,
\end{aligned} \tag{1.20}$$

y considerar los primeros términos de la expansión del operador unitario \mathcal{U}_α en potencias de α .

1.2 Valores Esperados

Una vez obtenida una función de onda para el estado fundamental y parte del espectro de estados excitados del hamiltoniano (1.2), es necesario averiguar si es posible obtener, con estos estados, valores esperados de cantidades físicas relevantes. A pesar de la forma

Promedio	Valor
$\langle g S_z(l) g\rangle$	$\frac{(-1)^l}{2}J_0(2\alpha)$
$\langle g S^+(l)S^-(l+1) g\rangle$	$-J_1(2\alpha)$
$\langle g S_z(l)S_z(l+1) g\rangle$	$-\frac{1}{4}(J_0^2(2\alpha) + J_1^2(2\alpha))$
$\langle g S^+(l)S^-(l+2) g\rangle$	$J_0(2\alpha)J_2(2\alpha) - J_1^2(2\alpha)$
$\langle g S_z(l)S_z(l+2) g\rangle$	$\frac{1}{4}(J_0^2(2\alpha) - J_2^2(2\alpha))$

Tabla 1.1: Algunos promedios para dimensión 1 y spin 1/2. Las expresiones $J_n(x)$ corresponden a las funciones de Bessel de orden entero.

analítica obtenida para el estado fundamental y los elementos de matriz por la teoría PNME, sólo ha sido posible obtener exactamente los valores esperados de operadores en el caso de $S = 1/2$ y dimensión 1 [29]. En el Apéndice A se presenta un método desarrollado para calcular los valores esperados de operadores para este caso, mientras que un resumen de algunos valores esperados se muestran en la tabla 1.1.

En este trabajo se han obtenido expansiones para los promedios hasta orden (α^4) para diversos elementos de matriz en redes en donde los coeficientes de intercambio $J_{\vec{g}}$ son iguales para todos los próximos vecinos ($J_{\vec{g}} \equiv J$), en el caso general de spin y dimensión arbitrarias. En la tabla 1.2 se presentan las expresiones aproximadas para algunos valores esperados³.

³En esta tabla,

$$\Gamma = \begin{cases} 6 & , \quad d = 1 \\ 24 & , \quad d = 2 \\ 90 & , \quad d = 3. \end{cases}$$

y

$$\beta = \frac{\alpha}{2(2zS - 1)}.$$

Promedio	Expansión
$\langle g S_z(\vec{R}) g\rangle$	$S \left(1 - \frac{8S_z\beta^2}{2!} + \frac{64S\beta^4}{4!} \{ 2S [2z^2 - S\Gamma] - z \} \right)$
$\langle g S^+(\vec{R})S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) g\rangle$	$-8S^2\beta \left(1 - \left\{ 2S[2z - \frac{S}{z}\Gamma] - 1 \right\} \frac{4\beta^2}{3} \right)$
$\langle g S_z(\vec{R})S_z(\vec{R} + \vec{\delta}) g\rangle$	$-S^2 \left(1 - \frac{8(2S_z - 1)\beta^2}{2!} + \left\{ (S_z - 2) \left(4S_z - 1 - \frac{2S^2\Gamma}{z} \right) + 3S^2z^2 \right\} \times \frac{128\beta^4}{4!} \right)$
$\langle g S^+(\vec{R})S^-(\vec{R} + \vec{\delta} + \vec{\delta}') g\rangle$	$4\beta^2$
$\langle g S_z(\vec{R})S_z(\vec{R} + \vec{\delta} + \vec{\delta}') g\rangle$	$S^2 (1 - 8zS^2\beta^2)$

Tabla 1.2: Expansión de algunos promedios para dimensión y spin arbitrarios.

1.3 Validez de la Teoría

En la figura 1.1 se grafica la expresión (1.17) para una cadena lineal y spin $1/2$, comparándola con la solución exacta [13–15] y el resultado de la teoría de ondas de spin. En ella se observa que a medida que el sistema se aleja del límite Ising ($\alpha = 0$), la discrepancia va aumentando, llegando a su valor máximo para el límite isótropo. Sin embargo, para valores de α comprendidos en $0 \leq \alpha \leq 0.5$, la teoría PNME presenta un error menor que el 0.5%, superando a la teoría de ondas de spin. El valor máximo del error se obtiene en $\alpha = 1$, llegando al 4%. Esto último corresponde a las condiciones más exigentes para la teoría, pues junto al hecho de tenerse el menor spin ($S = 1/2$) y el menor número de vecinos, en una dimensión existen excitaciones elementales no lineales que la teoría PNME no considera. De este modo es natural este máximo error para $\alpha = 1$. Cabe notar aquí que en el caso unidimensional de spin $1/2$, la transformación de Wigner-Jordan expresa la solución para el estado fundamental obtenida por la Teoría PNME como una función de estado que es producto antisimetrizado de funciones de estado de una partícula. Además puede mostrarse que en el límite Ising, la solución PNME coincide con la función de estado que entregaría un tratamiento Hartree-Fock, salvo por un factor de fase, entregando ambas los mismos elementos de matriz. Al distanciarse del límite Ising, la solución unidimensional que entrega el tratamiento Hartree-Fock supera con mucho a la solución PNME “desnuda” (ver Apéndice B). Esto no es así en el caso de que el spin o la dimensión varíen, pues en esos casos los estados PNME son esencialmente colectivos.

En dimensión 2 y spin $1/2$, el orden antiferromagnético de largo alcance prevalece en todo el rango entre los límites Ising e isótropo. De la figura 1.2 puede observarse que la teoría ajusta notablemente los valores numéricos [49] en todo el rango del intervalo $0 \leq \alpha \leq 1$, llegando el error sólo a un 0.5% en el caso más desfavorable, nuevamente para $\alpha = 1$.

Como se desprende de los resultados anteriores, la teoría PNME es asintóticamente exacta en el límite $\alpha \rightarrow 0$. Por lo tanto es necesario determinar hasta qué orden en α la teoría entrega resultados confiables ⁴, y, en lo posible, determinar numéricamente el error cometido para un cierto valor de α en función del spin S y el número de coordinación z . Esta no es una tarea fácil, pues, en primer lugar, no existe en general una solución analítica con qué comparar. Además, la exactitud de una teoría debe medirse en la fidelidad con que reproduce la conducta del sistema físico bajo estudio, y no sólo en la exactitud con que ésta entrega un valor de algún elemento de matriz importante. Sin embargo, puede inferirse que parte de la incapacidad de la teoría para reproducir las características físicas del sistema magnético se deban a que no incluye interacciones directas entre vecinos más alejados que una constante de red ⁵. En este sentido entonces, la teoría sería exacta sólo hasta $\mathcal{O}(\alpha^2)$. Esta idea es respaldada por el hecho de que al considerar la expansión en potencias de α de

$$E = \langle g | \mathcal{H} | g \rangle$$

con $|g\rangle$ dado por (1.20), sólo los términos de orden inferior a tres (en potencias de α) bastan para reproducir el valor de la energía del estado fundamental obtenida con la teoría PNME dado por (1.17).

Para ilustrar esta situación, puede recurrirse a la inspección del valor esperado de la energía, pues es un observable físico, pero no se cuenta con una expresión analítica exacta con qué comparar. Así, conviene considerar otra expresión, que ya no es directamente medible, pero que da una luz al respecto:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial \alpha} - \langle g | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha} | g \rangle \right) = \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \langle g | \right) \mathcal{H} | g \rangle + \langle g | \mathcal{H} \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} | g \rangle \right). \quad (1.21)$$

En el caso de que $|g\rangle$ fuera el estado fundamental exacto, la variación de éste le debe ser ortogonal, y por lo tanto el lado derecho de la expresión (1.21) se debería anular

⁴Para una teoría perturbativa, uno podría esperar que a mayor orden en α se tuviera resultados numéricamente más cercanos a la realidad, pero la teoría PNME no es perturbativa.

⁵Se sabe que el ansatz de Bethe considera las interacciones entre vecinos alejados en el mismo pie que las interacciones entre vecinos cercanos. Lo mismo hace la solución RVB postulada por Anderson [16].

idénticamente. Luego, el valor de la diferencia entre ambas expresiones del lado izquierdo daría cuenta del error presente en esta teoría. Así, si se define

$$\Delta(\alpha) = \frac{\frac{\partial E}{\partial \alpha} - \langle g | \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \alpha} | g \rangle}{E} \quad (1.22)$$

y se expande esta expresión en función de α , al retener el orden más bajo en α se obtendrá una expresión que refleja el error relativo cometido. Reemplazando las expansiones de la tabla 1.2, se tiene:

$$\Delta(\alpha) = \left\{ \frac{-20 S^2 z^3 + 16 S^3 z \Gamma + 2 z + 4 S^2 \Gamma}{3 z (16 S^4 z^4 - 32 S^3 z^3 + 24 S^2 z^2 - 8 S z + 1)} \alpha^3 - O(\alpha^5) \right\} \quad (1.23)$$

confirmando el razonamiento anterior de que la teoría es exacta hasta α^2 . Además se observa claramente que el error relativo disminuye en la medida que aumente el spin o la dimensión.

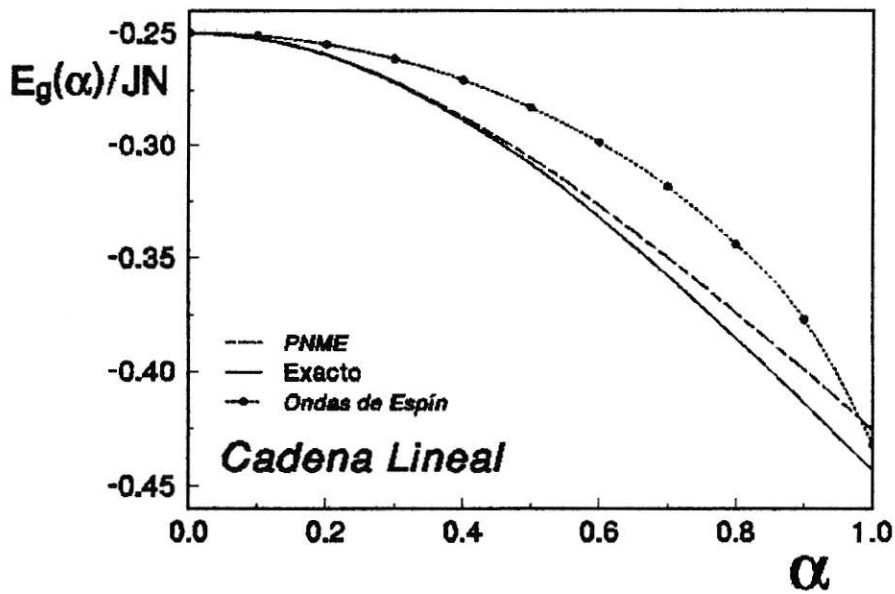


Figura 1.1: Energía del estado fundamental en función del parámetro de anisotropía α , correspondiendo $\alpha = 0$ al límite Ising y $\alpha = 1$ al límite isótropo. La curva que va por sobre las demás corresponde al tratamiento usando teoría de ondas de spin; la curva que va por debajo de todas corresponde a la solución exacta de Orbach [11], y la curva restante corresponde al tratamiento PNME mostrado en este capítulo

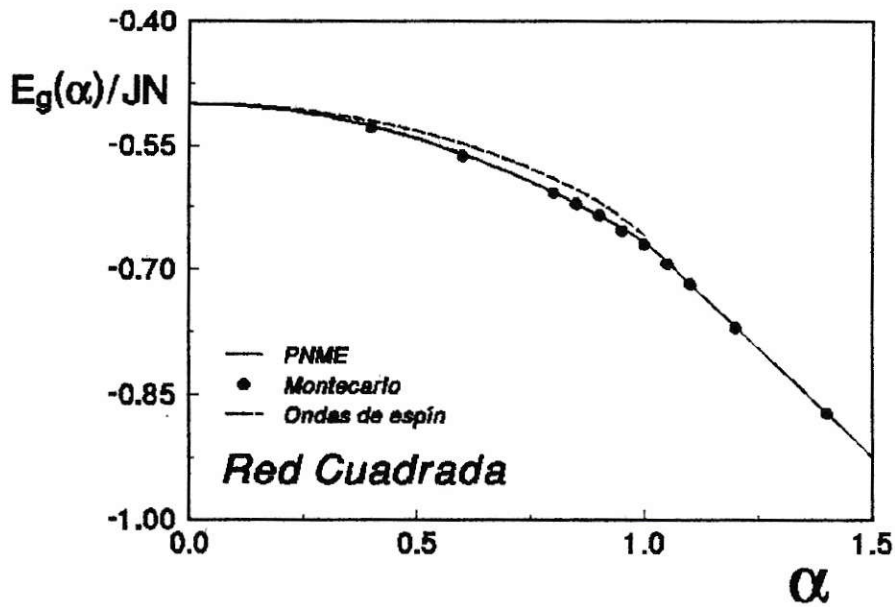


Figura 1.2: Energía del estado fundamental en función del parámetro de anisotropía α , correspondiendo $\alpha = 0$ al límite Ising y $\alpha = 1$ al límite isótropo. La curva que va por sobre las demás corresponde al tratamiento usando teoría de ondas de espín; la curva que va por debajo de todas corresponde al resultado numérico de Barnes [49], que usa el método Montecarlo. La curva restante corresponde al tratamiento PNME mostrado en este capítulo

Capítulo 2

Antiferromagneto de Heisenberg: Estudio Variacional

Una vez que se ha establecido la base teórica en el capítulo anterior, se está en condiciones de presentar el problema principal y su solución. En este capítulo se planteará el problema, y se le dará solución analítica y numérica. Posteriormente se presentará los resultados y su discusión.

En el capítulo anterior se mostró cómo la teoría PNME es capaz de entregar buenas aproximaciones para sistemas magnéticos en casos donde existe un alto orden antiferromagnético, en particular en el caso del modelo de Heisenberg antiferromagnético con alta anisotropía ($\alpha \ll 1$). En general, cualquier interacción que destruya el orden antiferromagnético, ya sea magnetizando el sistema — como podría hacerlo un campo magnético externo—, o bien aumentando las fluctuaciones cuánticas, puede provocar que la teoría PNME no sea capaz de describir tal sistema. Así, se hace interesante conocer modos de generalización de PNME que permitan salvar los obstáculos antes mencionados.

Existen diversos compuestos que pueden ser descritos por un modelo de Heisenberg anisótropo de spin S , con un término de anisotropía uniaxial, entre los que se

encuentra el $(\text{CD}_3)_4\text{NMnCl}_3$ [51] (TMMC), que es un compuesto antiferromagnético cuasi-unidimensional, cuya red magnética presenta spin $S = 5/2$ por sitio, y su conducta magnética es descrita por el hamiltoniano de Heisenberg anisótropo, debiéndose la anisotropía a un término dipolar de interacción entre próximos vecinos de una misma cadena, de tamaño excepcionalmente grande, a saber, sus valores típicos son $JS^2 = 42.5 \pm 1.5K$, y la interacción dipolar del orden de $1K$, datos válidos a $T \simeq 5K$. Además CsNiCl_3 , es otro material que forma cadenas cuasi unidimensionales de spin 1, debiéndose la integral de intercambio principalmente al mecanismo bautizado como *superexchange* (propuesto por Kramers en 1934 [47]), donde un átomo no magnético sirve de puente para la interacción entre dos átomos magnéticos, en este caso la interacción es $\text{Ni}^{2+} - \text{Cl}^- - \text{Ni}^{2+}$, con $J \simeq 33K^1$, con una interacción de *superexchange* entre cadenas vecinas, que forman una red triangular, del orden de $0.018J$. El campo cristalino da origen a un término de anisotropía uniaxial estimado del orden de $10^{-1}K$ [48].

En este trabajo, se considera el modelo de Heisenberg antiferromagnético para spin S e intercambio anisótropo, con un término de anisotropía uniaxial, en presencia de un campo magnético externo longitudinal. Se probará una solución variacional al problema, que usa como función de prueba una versión de la expresión analítica para el estado fundamental de la teoría PNME, generalizada para considerar el efecto del campo magnético externo. Los cálculos siguientes están hechos para dimensiones arbitrarias (espaciales o de spin). En la siguiente sección se presenta el problema y su solución variacional, el modo cómo fueron calculados los elementos de matriz como serie de potencias en el parámetro de anisotropía α' hasta el cuarto orden, y por último se mostrará cómo la solución variacional permite una descripción clara de las distintas fases ferro y antiferromagnéticas que ocurren para diferentes valores de la anisotropía y el campo magnético, mostrando aquellos valores “críticos” de esos parámetros, para los que ocurren las transiciones de fase.

¹Es interesante comparar este valor con el acoplamiento entre los átomos de Cu en un plano de CuO_2 de La_2CuO_4 , mencionado en la página 3.

2.1 El Modelo

Se estudiará ahora un sistema magnético que puede ser dividido en dos subredes, una asociada a vectores \vec{R} y la otra a vectores $(\vec{R} + \vec{\delta})$, donde $\vec{\delta}$ conecta vecinos más próximos, uno en cada subred. Se someterá el sistema a la acción de un campo magnético uniforme $\vec{H} = H\hat{z}$. Así, se tiene el siguiente Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_I + \mathcal{H}_{XY} + \mathcal{H}_A - \mu_b g H \sum_{\vec{R}} [S_z(\vec{R}) + S_z(\vec{R} + \vec{\delta}_o)] , \quad (2.1)$$

donde

$$\mathcal{H}_I = J \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} S_z(\vec{R}) S_z(\vec{R} + \vec{\delta}) \quad (2.2)$$

es el término de Ising,

$$\mathcal{H}_{XY} = J \frac{\alpha}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} [S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R})] \quad (2.3)$$

es el término XY , y

$$\mathcal{H}_A = D \sum_{\vec{R}} [S_z^2(\vec{R}) + S_z^2(\vec{R} + \vec{\delta}_o)] \quad (2.4)$$

es el término de anisotropía uniaxial. En estas ecuaciones, $\vec{S}(\vec{R})$ es el spin en el sitio \vec{R} , J es el coeficiente de intercambio, el coeficiente D mide el grado de anisotropía uniaxial, y H es un campo magnético externo uniforme aplicado en dirección z . Se puede observar que en el término de anisotropía uniaxial puede entregar mayor importancia a configuraciones en donde el valor de S_z por sitio sea máximo ($D < 0$), disminuyendo las fluctuaciones asociadas al término \mathcal{H}_{XY} o actuar en contrario ($D > 0$), aumentando las fluctuaciones cuánticas de spin, y por lo tanto, conspirando contra la validez de la aproximación PNME. Además es claro que la aplicación de una teoría PNME “desnuda” falla si se aplica un campo magnético, pues se crearía una magnetización neta que está más allá de sus capacidades, y ésto es porque las excitaciones de PNME, por construcción, no pueden magnetizar el sistema en la dirección del campo. Así es que, por ahora se considerará la situación con campo magnético cero.

El procedimiento para resolver este modelo dentro de la teoría PNME es prácticamente idéntico al mostrado en el capítulo anterior, salvo por la inclusión del término de anisotropía uniaxial. Al tomarlo en cuenta, los operadores cuasi-bosónicos se redefinen como

$$\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) + Q\delta_{\vec{k},\vec{\delta}} \quad (2.5)$$

con

$$Q = \left(\frac{N}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\alpha JS}{(2zS - 1)J - 2(2S - 1)D}. \quad (2.6)$$

Del mismo modo como se hizo en el capítulo anterior, al aproximar las relaciones de conmutación por sus proyecciones sobre el estado de Néel, se obtiene que

$$[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}(\vec{k}')] = 0 \quad (2.7)$$

$$[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}^{\dagger}(\vec{k}')] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\vec{\delta},\vec{\delta}'} \quad (2.8)$$

mientras que la parte \mathcal{H}_{xy} puede expresarse en forma exacta mediante las excitaciones ϕ ,

$$\mathcal{H}_{XY} = J\alpha S \left(\frac{N}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\vec{\delta}} (\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(0) + \phi_{\vec{\delta}}(0) - 2Q\delta_{\vec{\delta},\vec{\delta}}), \quad (2.9)$$

por lo cual su conmutador con los operadores ϕ^{\dagger} se obtiene en forma inmediata,

$$[\mathcal{H}_{XY}, \phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k})] = \frac{J\alpha S}{2} \left(\frac{N}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \delta_{\vec{\delta},\vec{\delta}}. \quad (2.10)$$

El conmutador de las excitaciones con el resto del hamiltoniano, luego de algo de álgebra, es

$$[\mathcal{H}_I + \mathcal{H}_A, \phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k})] = ((2zS - 1)J - 2(2S - 1)D) (\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) - Q\delta_{\vec{\delta},\vec{\delta}}), \quad (2.11)$$

de manera que, la relación de conmutación con el hamiltoniano total queda de la siguiente forma:

$$[\mathcal{H}, \phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k})] = ((2zS - 1)J - 2(2S - 1)D) \phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) \equiv \varepsilon \phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}). \quad (2.12)$$

Por lo tanto, la expresión para el Hamiltoniano diagonalizado en el subespacio de $S_z^{total} = 0$ es

$$\mathcal{H} = \varepsilon \sum_{k, \delta} \phi_{\delta}^{\dagger}(\vec{k}) \phi_{\delta}(\vec{k}) + E_g, \quad (2.13)$$

donde E_g corresponde a la energía del estado fundamental. Recurriendo, como ya es conocido, a la propiedad de las excitaciones de tener como autoestado al estado de Néel,

$$\phi_{\delta}(\vec{k})|\mathcal{N}\rangle = Q\delta_{k,0}|\mathcal{N}\rangle, \quad (2.14)$$

se tiene que al promediar en el estado de Néel ambos lados de 2.13 puede despejarse el valor de la energía del estado fundamental:

$$E_g = -\frac{N}{2}JzS^2 \left(1 + \frac{J\alpha^2}{(2zS-1)J - 2(2S-1)D} \right) - NDS^2. \quad (2.15)$$

Asimismo, el estado fundamental se obtiene en forma totalmente análoga a como se obtuvo la expresión (1.19):

$$|g\rangle = \exp \left[-Q \sum_{\delta} (\phi_{\delta}^{\dagger}(0) - \phi_{\delta}(0)) \right] |\mathcal{N}\rangle, \quad (2.16)$$

el que, en términos de los operadores de spin, se expresa como:

$$|g\rangle = \exp \left[\frac{\alpha J}{2((2S-1)J - 2D(2S-1))} \sum_{\delta} (S^+(\vec{R})S^-(\vec{R} + \delta) - S^+(\vec{R} + \delta)S^-(\vec{R})) \right] |\mathcal{N}\rangle \quad (2.17)$$

De la expresión del espectro de energías, el estado fundamental y su energía se comprueba que, para el caso especial de spin $S = 1/2$, la presencia del término de anisotropía uniaxial sólo desplaza el espectro en un monto constante, no teniendo ninguna otra influencia sobre el sistema. Para el caso general de spin $S \neq 1/2$, un valor alto de la anisotropía uniaxial D provoca que los spines de las dos subredes tiendan a poseer

proyecciones $+S$ y $-S$ sobre el eje z , respectivamente [37]. Además, un valor positivo de D aumenta las fluctuaciones cuánticas en forma tal que, aparece un valor crítico

$$D_c = \frac{(2Sz - 1)J}{2(2S - 1)}$$

para el que todos los estados excitados poseen la misma energía, pudiéndose en principio hablar de un estado desordenado en ese punto. Esto queda claro examinando la expresión para la energía de las excitaciones, dada en (2.12). Además, debe notarse que para $D > D_c$, la presencia de una excitación *baja la energía* del sistema, lo que indica que se ha rebasado el ámbito de validez de la teoría PNME.

Cuando el campo magnético no es nulo el sistema puede magnetizarse. Como se indicó anteriormente, esta circunstancia representa una dificultad en principio insalvable para la teoría PNME en su versión original. La solución a esta dificultad consiste en restringirse al estudio del estado de menor energía y aprovechar el estado fundamental obtenido para el caso de campo magnético nulo para construir una función de estado variacional, empleando operadores adicionales que tengan la capacidad de rotar los spines de cada sitio para, si es necesario, magnetizar el sistema.

2.2 Estudio Variacional

Considérese un estado variacional

$$|g(\theta_1, \theta_2, \alpha')\rangle = R_y(\theta_1, \theta_2)|g(\alpha')\rangle, \quad (2.18)$$

donde $|g(\alpha')\rangle$ corresponde a la solución PNME para el estado fundamental en ausencia de campo magnético, (2.17); $|\mathcal{N}\rangle$ es el estado de Néel (spines *up* en la subred \vec{R} y *down* en la subred $\vec{R} + \vec{\delta}$), α' es un parámetro variacional que mide el grado de desorden a partir del estado de Néel, y z es el número de próximos vecinos. Finalmente el operador unitario

$$R_y(\theta_1, \theta_2) = \prod_{\vec{R}} \exp \left[\frac{i}{2} \left(\theta_1 S_y(\vec{R} + \vec{\delta}) + \theta_2 S_y(\vec{R}) \right) \right], \quad (2.19)$$

es simplemente una rotación en θ_1 (subred \vec{R}) y θ_2 (subred $\vec{R} + \vec{\delta}$) en torno al eje y (los ángulos están medidos a partir del estado de Néel en dirección z).

En los cálculos sólo se consideran dos ángulos variacionales, cada uno asociado a una dirección promedio de spin por subred. Esto impone un límite a las posibles estructuras magnéticas que puede obtenerse, por ejemplo, una fase helicoidal con paso arbitrario queda descartada. Sin embargo, se puede obtener fases antiferromagnéticas, ferromagnéticas y “spin-flop” como mínimos del funcional de energía. El parámetro variacional α' controla la magnitud del momento magnético de subred, de modo que, en principio podría obtenerse una fase paramagnética.

El funcional de energía es

$$F(\theta_1, \theta_2, \alpha') = \langle g(\alpha') | R_y^\dagger(\theta_1, \theta_2) \mathcal{H} R_y(\theta_1, \theta_2) | g(\alpha') \rangle. \quad (2.20)$$

Gracias al carácter unitario de los operadores $R(\theta)$, la ecuación (2.20) puede interpretarse como el valor de expectación del operador transformado $R^\dagger \mathcal{H} R$ con respecto al estado $|g(\alpha')\rangle$. Para efectuar la transformación sólo basta sustituir los operadores de spin en la ecuación (2.1) por los correspondientes operadores rotados:

$$S^x \longrightarrow S^x \cos \theta - S^z \sin \theta \quad (2.21)$$

$$S^y \longrightarrow S^y \quad (2.22)$$

$$S^z \longrightarrow S^x \sin \theta + S^z \cos \theta \quad (2.23)$$

en donde $\theta = \theta_1$ para la subred de spines *Up*, y $\theta = \theta_2$ para la subred de spines *Down*. Luego, se reemplaza la expresión resultante en lugar de $R^\dagger \mathcal{H} R$, en la ecuación (2.20). Recordando que $S^x = (S^+ + S^-)/2$ y $S^y = (S^+ - S^-)/(2i)$, puede llegarse rápidamente

a

$$\begin{aligned}
\frac{F(\theta_1, \theta_2, \alpha')}{N} &= \frac{J_z}{2} \left\{ H_I (\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \alpha \sin \theta_1 \sin \theta_2) + \right. \\
&\quad \left. \frac{1}{2} H_{XY} (\sin \theta_1 \sin \theta_2 + \alpha \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \alpha) \right\} - \frac{h S M_z}{2} (\cos \theta_1 - \cos \theta_2) \\
&\quad + \frac{D}{2} \left[H_A (\cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2) + \frac{1}{2} (S(S+1) - H_A) (\sin^2 \theta_1 + \sin^2 \theta_2) \right] \quad (2.24)
\end{aligned}$$

donde $h = g\mu_b H$ es el campo magnético longitudinal reducido. Los coeficientes

$$H_I = \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned}
H_{xy} &= \langle g(\alpha') | S^x(\vec{R} + \vec{\delta}) S^x(\vec{R}) + \\
&\quad S^y(\vec{R} + \vec{\delta}) S^y(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \quad (2.26)
\end{aligned}$$

$$M_z = \frac{1}{S} \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \quad (2.27)$$

$$H_A = \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R}) S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \quad (2.28)$$

no dependen de los ángulos θ_i , sino sólo de α' . Los valores medios presentados en las ecuaciones (2.25)-(2.27) son conocidos exactamente sólo en una dimensión [31] y para $S = 1/2$:

$$H_I = -\frac{1}{4} [J_0^2(2\alpha') + J_1^2(2\alpha')] \quad (2.29)$$

$$H_{xy} = -\frac{1}{2} J_1(2\alpha') \quad (2.30)$$

$$M_z = J_0(2\alpha') \quad (2.31)$$

$$H_A = \frac{1}{4} \quad (2.32)$$

donde $J_n(x)$ son las funciones de Bessel de orden entero. Para dimensiones arbitrarias d y valores de spin arbitrarios S , los elementos de matriz no se conocen en forma analítica cerrada. Es necesario entonces determinar expresiones que aproximen estos elementos de matriz, lo que se hará en la siguiente sección.

2.3 Cálculo de los Elementos de Matriz

Los elementos de matriz para dimensión arbitraria d y spin general S , no se conocen salvo en el caso sencillo de $S = 1/2$ y $d = 1$, en donde se hace uso de la transformación de Wigner-Jordan [21] para simplificar los cálculos. En situaciones con spin $S \neq 1/2$ ya no se puede aplicar la transformación mencionada, y en situaciones con $d \neq 1$, aunque existen generalizaciones a la transformación de Wigner-Jordan [46], éstas introducen interacciones colectivas en el término H_{xy} , que imposibilitan un tratamiento analítico. En esta sección se muestra cómo calcular los elementos de matriz en términos de una serie de potencias en el parámetro variacional α' .

Las cantidades a calcular son las expresiones (2.25, 2.26, 2.27, 2.28). Ellas tienen la forma:

$$\langle \hat{f} \rangle = \langle \mathcal{N} | \exp(-\beta \hat{B}) \hat{f} \exp(\beta \hat{B}) | \mathcal{N} \rangle, \quad (2.33)$$

$$\beta = \frac{J\alpha'}{2J(2zS - 1) - 4D(2S - 1)} \quad (2.34)$$

Exceptuando el caso de (2.26), \hat{f} es un operador hermitiano que conserva S_z localmente, es decir, \hat{f} conmuta con cada uno de los operadores de spin locales $S^z(\vec{r})$. \hat{B} es el operador que genera el estado fundamental a partir del estado de Néel en el formalismo PNME:

$$\hat{B} = \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} \left(S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) - S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) \right),$$

y $|\mathcal{N}\rangle$ es el estado de Néel.

Al observar la identidad

$$e^{-\hat{g}} \hat{f} e^{\hat{g}} = \hat{f} + [\hat{f}, \hat{g}] + \frac{1}{2!} [[\hat{f}, \hat{g}], \hat{g}] + \frac{1}{3!} [[[\hat{f}, \hat{g}], \hat{g}], \hat{g}] + \dots \quad (2.35)$$

resulta claro que si se necesita una expansión en serie hasta la n -ésima potencia de α , entonces se debiera calcular el n -ésimo conmutador "anidado" entre \hat{f} and \hat{B} , lo que constituye una tarea de gran envergadura.

La línea de ataque al problema considera otro punto de vista inicial, que toma ventaja de las características de los operadores involucrados. Primero, el cálculo se restringe a determinar una expresión polinomial de los elementos de matriz de cuarto grado en α , debido a que este constituye el primer polinomio con más de un extremo, y se está precisamente buscando una expresión para la energía de un sistema que admita un tratamiento variacional, es decir, que tenga mínimos en los parámetros variacionales. Puede mostrarse, tras algo de álgebra, que:

$$\langle [\hat{f}, \hat{B}] \rangle = 0, \quad (2.36)$$

$$\langle [[\hat{f}, \hat{B}], \hat{B}] \rangle = 2\langle \hat{B}^2 \hat{f} - \hat{B} \hat{f} \hat{B} \rangle, \quad (2.37)$$

$$\langle [[[\hat{f}, \hat{B}], \hat{B}], \hat{B}] \rangle = 0, \quad (2.38)$$

$$\langle [[[[\hat{f}, \hat{B}], \hat{B}], \hat{B}], \hat{B}] \rangle = -2\langle 4\hat{B}^3 \hat{f} \hat{B} - 3\hat{B}^2 \hat{f} \hat{B}^2 - \hat{B}^4 \hat{f} \rangle, \quad (2.39)$$

donde estos valores esperados han sido tomados sobre el estado de Néel. En general cuando hay un número impar de conmutadores anidados, en el caso de un operador \hat{f} que conserva localmente el spin, el valor esperado de tal combinación es nulo, pues al actuar sobre un estado como $|\mathcal{N}\rangle$, que posee valores bien definidos de spin en cada sitio, no es capaz de restaurar el estado original en ningún caso.

La determinación del efecto de \hat{f} sobre el estado de Néel es casi inmediata, pues dado que \hat{f} conmuta con los operadores de S_z en cada sitio de la red y el estado de Néel es un producto de autoestados de los $S_z(\vec{r})$, el resultado se reduce a multiplicar el estado de Néel por una constante. Una vez hecho esto, el trabajo que resta es calcular valores esperados de cantidades del tipo

$$\langle \hat{B} \hat{f} \hat{B} \rangle, \quad \langle \hat{B}^2 \hat{f} \hat{B} \rangle, \quad \langle \hat{B}^2 \hat{f} \hat{B}^2 \rangle, \quad \langle \hat{B}^2 \rangle, \quad \text{y} \quad \langle \hat{B}^4 \rangle, \quad (2.40)$$

lo que implica calcular dos conmutadores:

$$[\hat{f}, \hat{B}], \quad [\hat{f}, \hat{B}^2]. \quad (2.41)$$

Después de un trabajo algebraico bastante largo, pueden derivarse las expresiones

$$H_I = -S^2 \left[1 - \frac{8(2Sz - 1)\beta^2}{2!} + \frac{128\beta^4}{4!} \right. \\ \left. \times \left\{ (Sz - 2) \left(4Sz - 1 - \frac{2S^2\Gamma}{z} \right) + 3S^2z^2 \right\} \right], \quad (2.42)$$

$$M_z = 1 - \frac{8S_z\beta^2}{2!} + \frac{64S\beta^4}{4!} \left\{ 2S [2z^2 - S\Gamma] - z \right\} \quad (2.43)$$

$$H_A = S^2 \left[1 - \frac{8z(2S - 1)\beta^2}{2!} - \frac{128(2S - 1)[\Gamma S^2 + 2z - 5S_z^2]\beta^4}{4!} \right], \quad (2.44)$$

donde

$$\Gamma = \sum_{\vec{\delta}_a, \vec{\delta}_b, \vec{\delta}_c, \vec{\delta}_d} \delta(\vec{\delta}_a + \vec{\delta}_b + \vec{\delta}_c + \vec{\delta}_d),$$

es el número de lazos cerrados que pueden formarse con cuatro saltos entre sitios vecinos de la red. Es claro que esta cantidad va a depender de la dimensionalidad espacial del sistema sobre el que se trabaja. Así se tiene que

$$\Gamma = \begin{cases} 6 & , \quad d = 1 \\ 24 & , \quad d = 2 \\ 90 & , \quad d = 3. \end{cases} \quad (2.45)$$

La aparición de cantidades de este tipo se debe al hecho de que se están calculando promedios que involucran productos de operadores \hat{B} , que trasladan una unidad de S_z entre sitios vecinos. Como en este caso se trabaja con una expansión hasta cuarto orden, apareció una suma sobre lazos que se componen de cuatro saltos entre sitios vecinos.

El caso del cálculo de cantidades que no conservan localmente a S_z presenta características diferentes que podrían convertirlo en un obstáculo casi insalvable, pero aquí

también las características de los operadores involucrados simplifican dramáticamente el trabajo. Basta notar que

$$[S^z(\vec{R}), \hat{B}] = - \sum_{\vec{\delta}} (S^+(\vec{R} + \vec{\delta})S^-(\vec{R}) + S^+(\vec{R})S^-(\vec{R} + \vec{\delta})) \quad (2.46)$$

Utilizando esta relación, se puede llegar fácilmente a calcular el valor esperado de la parte H_{xy} del Hamiltoniano, solamente con derivar el valor esperado de la magnetización, que ya fue determinado:

$$2 [(2S_z - 1) - 2D(2S - 1)] \frac{\partial}{\partial \alpha'} \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle = z \cdot \langle g(\alpha') | S^x(\vec{R} + \vec{\delta}) S^x(\vec{R}) + S^y(\vec{R} + \vec{\delta}) S^y(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \quad (2.47)$$

Por lo tanto, se tiene para H_{xy} la siguiente expresión:

$$H_{xy} = -8S^2\beta \left[1 - \left\{ 2S \left[2z - \frac{S}{z} \Gamma \right] - 1 \right\} \frac{4\beta^2}{3} \right], \quad (2.48)$$

donde β está dada por (2.34).

La estructura de los resultados merece algunos comentarios: la potencia n -ésima de α' en la expansión en serie del operador exponencial de PNME lleva asociada la acción de n trasposos de una unidad de spin- z (S_z) sobre la red en que se trabaja. Como el estado de Néel tiene bien definido el valor de S_z en cada sitio, para que la proyección sea no nula, la unidad de spin que fue retirada de un sitio debe volver a él al cabo de n saltos, más los saltos adicionales introducidos por el operador cuyo valor de expectación se está calculando. Esto explica por qué están presentes sólo potencias pares de α' en la expansión de términos que conservan S_z localmente, y sólo potencias impares de α' en la expansión del término H_{xy} .

2.4 Resultados

Nuestro problema está ahora reducido a minimizar el funcional de energía con respecto a los ángulos variacionales θ_i , y α' . Las ecuaciones de extremos son:

$$[-4(A + C \cos 2\xi) \sin \eta + P \sin \xi] \cos \eta = 0, \quad (2.49)$$

$$[-4(B + C \cos 2\eta) \sin \xi + P \sin \eta] \cos \xi = 0, \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha'} F(\theta_1, \theta_2, \alpha') = 0, \quad (2.51)$$

donde se ha definido las cantidades

$$A = \frac{Jz}{4}(1 - \alpha)[H_I - \frac{1}{2}H_{XY}] \quad (2.52)$$

$$B = \frac{Jz}{4}(1 + \alpha)[H_I + \frac{1}{2}H_{XY}] \quad (2.53)$$

$$C = \frac{D}{4}[3H_A - S(S + 1)] \quad (2.54)$$

$$P = h M_z S \quad (2.55)$$

y las nuevas variables η y ξ como

$$\eta = \frac{1}{2}[\theta_1 + \theta_2] \quad (2.56)$$

$$\xi = \frac{1}{2}[\theta_1 - \theta_2] \quad (2.57)$$

El primer par de ecuaciones de minimización posee el siguiente conjunto de soluciones:

$$(i) \begin{cases} \cos \eta = 0 \\ \cos \xi = 0 \end{cases} \quad (2.58)$$

Esta solución representa dos posibles configuraciones:

a) Las magnetizaciones de subred apuntan a lo largo de la misma dirección, en contra del campo magnético, lo que representa claramente un máximo de energía. En efecto, los ángulos de rotación son $\theta_1 = \pi$, $\theta_2 = 0$.

b) Las dos magnetizaciones de subred apuntan a lo largo de la dirección del campo, y se está en presencia de un estado ferromagnético. Los ángulos de rotación son $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \pi$.

$$(ii) \begin{cases} \eta = \frac{\pi}{2} \\ \sin \xi = \frac{\mu_b g S H M_z}{J_z (1 + \alpha) (1/2 H_{xy} + H_I) - D (3H_A - S(S + 1))} \end{cases} \quad (2.59)$$

Esta solución representa una configuración de spin-flop, en la cual las magnetizaciones de subred apuntan a lo largo de direcciones simétricas con respecto al eje z . Aquí los ángulos de rotación están dados por

$$\theta_1 = \frac{\pi}{2} + \arcsin \left(\frac{\mu_b g S H M_z}{J_z (1 + \alpha) (1/2 H_{xy} + H_I) - D (3H_A - S(S + 1))} \right) \quad (2.60)$$

$$\theta_2 = \frac{\pi}{2} - \arcsin \left(\frac{\mu_b g S H M_z}{J_z (1 + \alpha) (1/2 H_{xy} + H_I) - D (3H_A - S(S + 1))} \right) \quad (2.61)$$

Para campos magnéticos pequeños, las dos subredes están orientadas antiferromagnéticamente en la dirección x .

$$(iii) \begin{cases} \sin \eta = \frac{\mu_b g S H M_z}{J_z (1 - \alpha) (-1/2 H_{xy} + H_I) - D (3H_A - S(S + 1))} \\ \xi = \frac{\pi}{2} \end{cases} \quad (2.62)$$

En esta solución, las magnetizaciones de subred apuntan a lo largo de la misma dirección, siendo los ángulos de rotación

$$\theta_1 = \frac{\pi}{2} + \arcsin \left(\frac{\mu_b g S H M_z}{J_z (1 - \alpha) (-1/2 H_{xy} + H_I) - D (3H_A - S(S + 1))} \right) \quad (2.63)$$

$$\theta_2 = -\frac{\pi}{2} + \arcsin \left(\frac{\mu_b g S H M_z}{J_z (1 - \alpha) (-1/2 H_{xy} + H_I) - D (3H_A - S(S + 1))} \right), \quad (2.64)$$

representando un máximo de energía. Para campos magnéticos pequeños las magnetizaciones de subred están orientadas ferromagnéticamente a lo largo del eje x .

$$(iv) \begin{cases} \sin \eta = \sqrt{\frac{4(B+C) + P\sqrt{\frac{B+C}{A+C}}}{8C}} \\ \sin \xi = -\sqrt{\frac{A+C}{B+C}} \sin \eta \end{cases} \quad (2.65)$$

donde los coeficientes $\{A, B, C, P\}$ fueron definidos en (2.52, 2.53, 2.54, 2.55). Esta solución adicional aparece sujeta a la existencia del término de anisotropía uniaxial D , y no representa un caso de interés físico, pues siempre es superada energéticamente por las otras soluciones.

Por último,

$$(v) \quad \xi = \eta = 0 \quad (2.66)$$

En este caso, las subredes permanecen orientadas antiferromagnéticamente a lo largo del eje z y la energía toma un valor mínimo. En este caso, la energía del estado fundamental, las magnetizaciones de subred y funciones de correlación son las mismas que en el caso donde no hay campo magnético y la susceptibilidad es cero.

La ecuación de minimización para α' tiene solución analítica cerrada sólo para el caso especial de $d = 1$, $S = 1/2$. Para spin general S y dimensión d , a consecuencia de la ausencia de expresiones cerradas para los elementos de matriz, y que éstos se conocen como polinomios hasta de cuarto orden en α' , es necesario resolver numéricamente la ecuación polinomial resultante. También se espera que, a medida que α vaya de cero a uno, la expansión en serie sea cada vez menos exacta.

Se resolvieron numéricamente las ecuaciones de mínimo (2.51) para diferentes valores del campo magnético reducido h , y spin S . También se desarrollaron soluciones numéricas para spin $S = 1$ y $S = 3/2$ en cadenas de 12 y 10 spines respectivamente, usando el Método de Lanczös modificado [52, 53]. En el Apéndice C se explica este algoritmo de solución numérica y su ámbito de aplicabilidad a diversos problemas físicos.

2.4.1 Análisis de fases sin anisotropía uniaxial

Las figuras 2.1 y 2.2 muestran curvas de energía en una dimensión, asociadas con diferentes valores de la anisotropía α para spin 1 y $3/2$ (Para una cadena de spin $S = 1/2$ puede verse la Ref [39]). El acuerdo es excelente especialmente cerca del límite Ising.

La figura 2.3 muestra la magnetización en función del campo magnético, para dos valores del parámetro de anisotropía α , para una cadena con spin $S = 1$. El cálculo variacional está dado por las líneas continuas, y la simulación numérica está dada por los círculos negros. El cálculo computacional consideró una cadena de 12 sitios, lo que explica el aspecto escalonado de los resultados numéricos. Aparte de este aspecto técnico, ambos tratamientos muestran una concordancia muy buena.

El carácter de las diversas fases por las que atraviesa el modelo a temperatura $T = 0$, a medida que varía la intensidad del campo magnético, puede ser visualizado a partir de los valores que toman los ángulos variacionales θ_1 y θ_2 . Estos son los ángulos medios en que los spines de cada subred se desvían del estado de Néel en dirección z . Así, por ejemplo, $\theta_1 - \theta_2 = 0$ y $\theta_1 - \theta_2 = \pi$ corresponden a configuraciones antiferromagnética y ferromagnética, respectivamente.

La figura 2.4 muestra θ_1 y θ_2 en función de la intensidad de campo magnético, para $S = 3/2$ en una cadena lineal (Para el caso de una cadena lineal de spin $S = 1/2$, vea Ref. [39]). La conducta del sistema para anisotropías cercanas al límite Ising ($\alpha = 0.5$) e isótropo ($\alpha = 1.0$), exhiben interesantes diferencias. Por ejemplo, en el caso $S = 3/2$, $\alpha = 0.5$, el sistema tiene tres fases y dos transiciones. Para campos paralelos bajos, los spines permanecen en una configuración antiferromagnética orientada a lo largo del eje z . Cuando el campo magnético crece hasta cerca del valor $h_z = 2.6$, los spines saltan abruptamente a una nueva configuración, que pueda ser interpretada como un alineamiento antiferromagnético de las componentes de spin en el plano $x - y$, junto a un ordenamiento ferromagnético de las componentes z . La magnetización en dirección z crece con h_z y el sistema permanece en este régimen hasta que el campo magnético reducido alcanza el punto $h_z = 4.5$, donde la componente antiferromagnética $x - y$ des-

aparece, y el sistema pasa a una fase ferromagnética, orientada en dirección z . Mientras que la primera transición de fase mencionada es abrupta, la segunda es continua. Para $\alpha = 1.0$, esto es, para un sistema isótropo, la conducta es muy distinta. De acuerdo con resultados previos[40], cuando $h_z = 0$ el sistema posee una fase antiferromagnética en el plano $x - y$. A medida que h_z crece, el campo genera una magnetización en el eje z . Cerca de $h_z = 6.0$, el sistema entra en una nueva fase, en la cual los spines fluctúan alrededor de un orden ferromagnético perfecto.

En el caso un sistema bidimensional isótropo con campo magnético nulo y $S = 1/2$, un tratamiento Montecarlo hecho por Barnes et al.[49] entrega, para la energía el valor -0.669 , que concuerda con el valor obtenido en el presente trabajo (-0.667) con una diferencia del 0.3%. Para los casos bidimensional y tridimensional, los resultados del presente trabajo son esencialmente nuevos, y, para campo magnético no nulo, no se posee a la fecha algún resultado previo confiable para establecer alguna comparación. la figura 2.5 muestra la energía para el caso $S = 1/2$, $d = 2$, para $\alpha = 0.5$ y para el caso isótropo $\alpha = 1.0$. La figura 2.6 muestra la magnetización en la dirección del campo magnético en el mismo caso.

La figura 2.7 muestra la energía para el caso $S = 1$, $d = 2$, para dos valores representativos de α . La figura 2.8 muestra la magnetización en dirección del campo magnético en el mismo caso. El valor de la energía para campo magnético cero y $\alpha = 1$ estimado por un tratamiento de Grupo de Renormalización en Espacio Real (RSRG) hecho por Mattis *et al.*[20] es de -1.907 , y el presente trabajo arroja el resultado de -2.32 , más bajo que el anteriormente mencionado. Aunque el tratamiento de esta Tesis es variacional, y que por tanto siempre debiera esperarse cotas superiores a la energía del estado fundamental, la truncación de la expansión en serie para los elementos de matriz introduce un error adicional que crece con α .

2.4.2 Análisis de fases con anisotropía uniaxial

Anteriormente se supuso que la introducción de un término de anisotropía uniaxial $D < 0$ disminuiría la presencia de fluctuaciones cuánticas presentes en el sistema. Esta idea ha sido corroborada por los resultados obtenidos. Para ilustrar este hecho, en las figuras 2.9(a) y 2.9(b) se muestran mapas de fase asociados a cadenas de spines $S = 1$ y $S = 3/2$ respectivamente.

Para pequeños valores de D , pueden observarse tres fases y dos transiciones, a medida que el campo magnético crece. La primera transición es discontinua, con una aparición brusca de magnetización en el sistema, la cual crece hasta llegar continuamente a un estado con los spines totalmente alineados en la dirección del campo magnético. Como se puede apreciar, a medida que D se hace más negativo, la fase intermedia de spin-flop va perdiendo importancia hasta llegar a un punto en el que coexisten las tres fases, pasado el cual dicha fase desaparece, y a medida que varía H hay sólo una transición presente, que es un paso brusco desde un estado en el que los spines oscilan en torno al estado de Néel, hacia un estado totalmente magnetizado por el campo externo, en el que están ausentes las fluctuaciones cuánticas. Este hecho se ve apoyado por el buen acuerdo que hay entre las gráficas de energía provenientes del cálculo variacional y de la simulación numérica basada en el algoritmo de Lanczös, como se muestra en las figuras 2.10 y 2.11.

Hay algunas cosas interesantes que comentar respecto a los diagramas de fase (2.9). El punto de transición entre la fase spin-flop y la fase ferromagnética es continuo en los valores de los diferentes parámetros variacionales, lo que permite despejar una relación entre H y D para esta interfase:

$$H_{\text{transición}} = \frac{Jz(1 + \alpha)}{\mu g} + D \cdot \frac{(2S - 1)}{\mu g}$$

A diferencia de la anterior, la transición entre la fase "Néel" y la fase magnetizada "Ferro", es brusca. Si no hubiera fluctuaciones cuánticas, es fácil mostrar que la relación

entre H y D para tal transición "clásica" sería

$$H \text{ "clásico"} = JSz,$$

que es independiente² de D , pero de los resultados (ver la Figura (2.9) que muestra los mapas de fase) se desprende que para magnetizar el sistema es necesario un campo magnético algo mayor. Este efecto de las fluctuaciones cuánticas va desapareciendo a medida que D se hace más y más negativo.

2.5 Conclusiones

El principal objetivo de este trabajo fue desarrollar un método que constituye una valiosa herramienta en el estudio de las propiedades del estado fundamental del modelo de Heisenberg antiferromagnético con campo magnético en una o más dimensiones, para un valor cualquiera de spin. Además de su precisión y sencillez matemática, el método tiene la ventaja de entregar valores de energía numéricamente competitivos con aquellos obtenidos mediante otros tratamientos aproximados presentes en la literatura científica existente, mostrando las diferentes fases que presenta el sistema a $T = 0$ y aquellos valores de los parámetros del sistema (anisotropías, campo externo) para los que van ocurriendo las transiciones de una fase a otra, todo esto con una única función de prueba, expresada mediante una compacta expresión matemática. Los resultados obtenidos han sido comparados con aquellos presentes en la literatura existente, y en ausencia de resultados numéricos previos, se desarrolló soluciones numéricas originales, mostrando gran concordancia. Lo anterior llevó al desarrollo de programas computacionales para resolver el hamiltoniano de Heisenberg anisótropo en una dimensión en presencia de campo magnético y anisotropía uniaxial, para los casos de spin $S = 1$ y $S = 3/2$.

²Basta hacer $\alpha' \equiv 0$ en todas las ecuaciones, y comparar las energías del estado de Néel y el estado totalmente magnetizado en dirección del campo magnético externo

Energía v/s Campo Magnético
D=0, cadena lineal

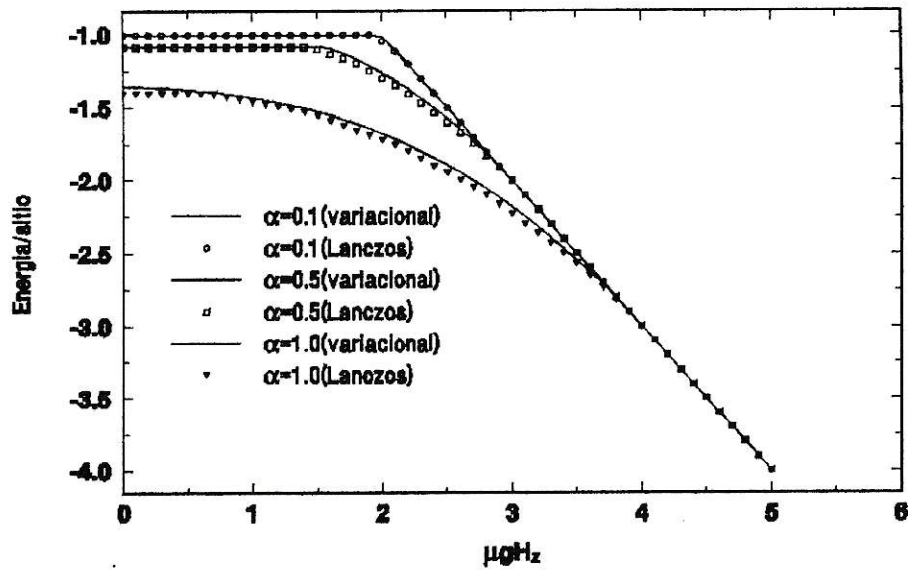


Figura 2.1: Curvas de energía en una dimensión, asociadas con valores de la anisotropía $\alpha = 0.1, 0.5, \text{ y } 1.0$ para spin $S = 1$.

Figuras

Energía v/s Campo Magnético
 $D=0$, cadena lineal

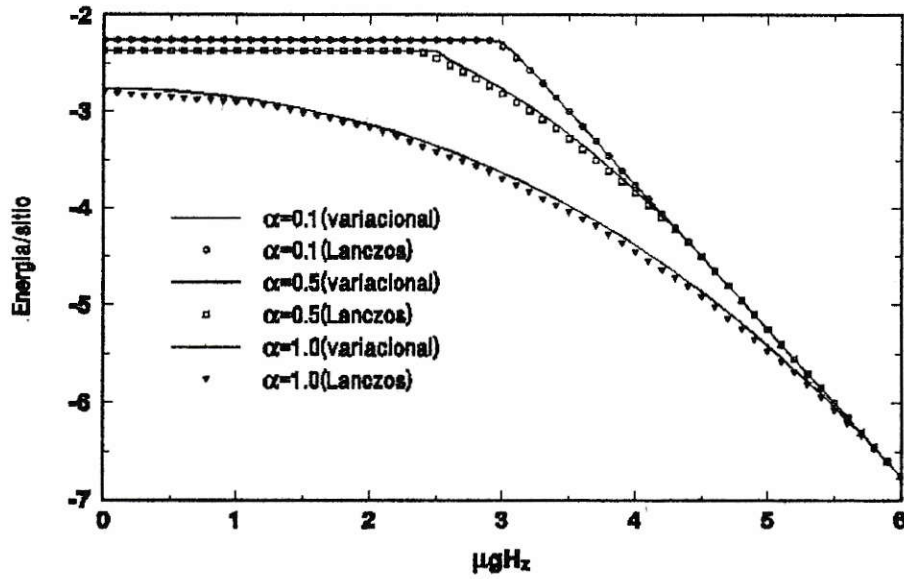


Figura 2.2: Curvas de energía en una dimensión, asociadas con valores de la anisotropía $\alpha = 0.1, 0.5, 1.0$ para spin $S = 3/2$. La línea sólida representa resultados del método variacional, y los puntos representan resultados de la simulación numérica Lanczos.

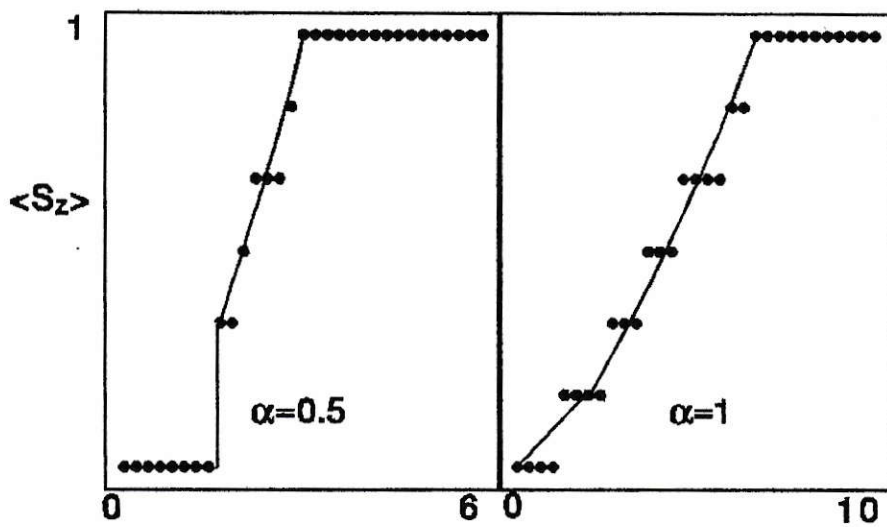


Figura 2.3: Curvas de magnetización en una dimensión, asociadas con valores de la anisotropía $\alpha = 0.5, 1.0$ para spin $S = 1$. Los círculos sólidos representan la simulación numérica con una cadena de 12 sitios. El método variacional está dado por la línea sólida.

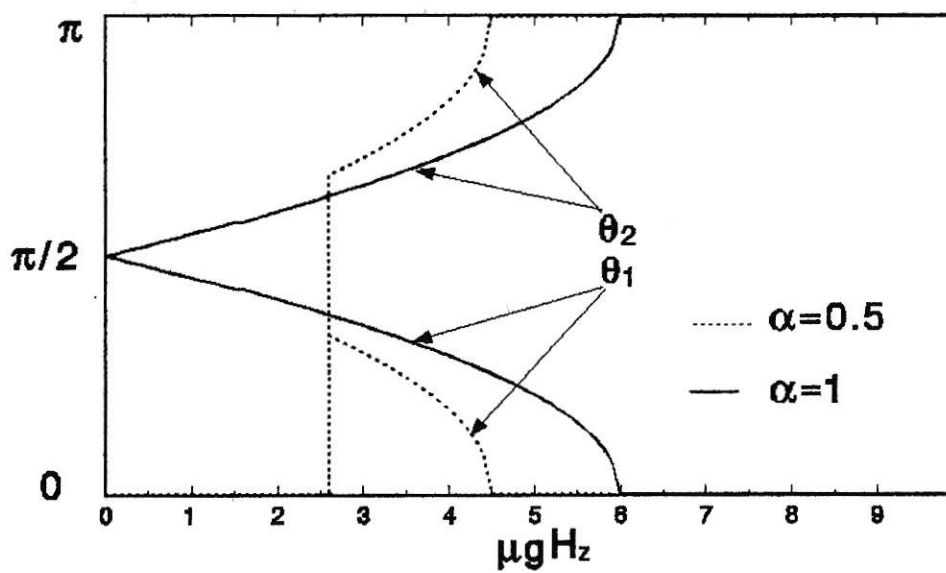


Figura 2.4: Ángulos variacionales θ_1 y θ_2 en función de la intensidad de campo magnético para $S = 3/2$ en una cadena lineal, para dos valores representativos de la anisotropía α .

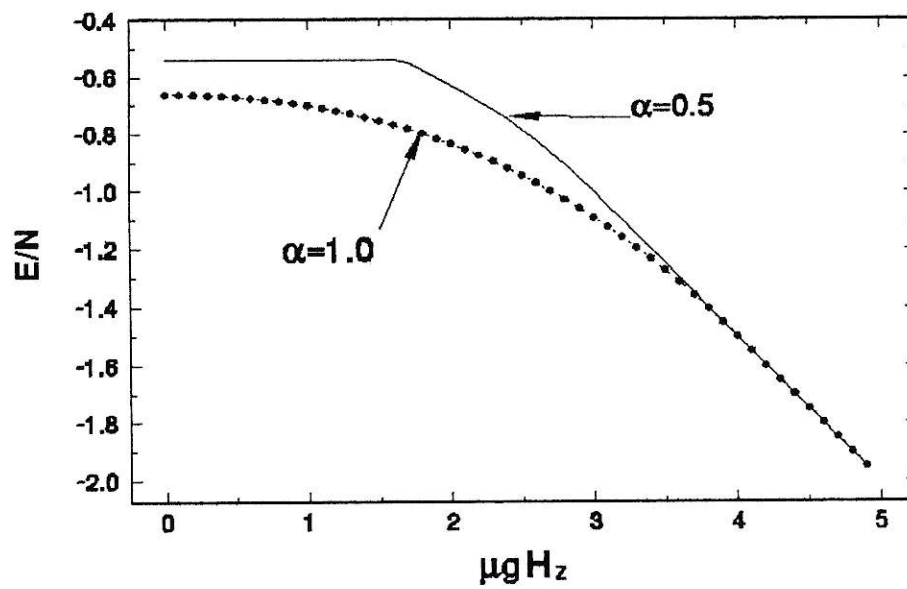


Figura 2.5: Energía por enlace en función de la intensidad de campo magnético, para el caso $S = 1/2$, $d = 2$, para $\alpha = 0.5, 1.0$.

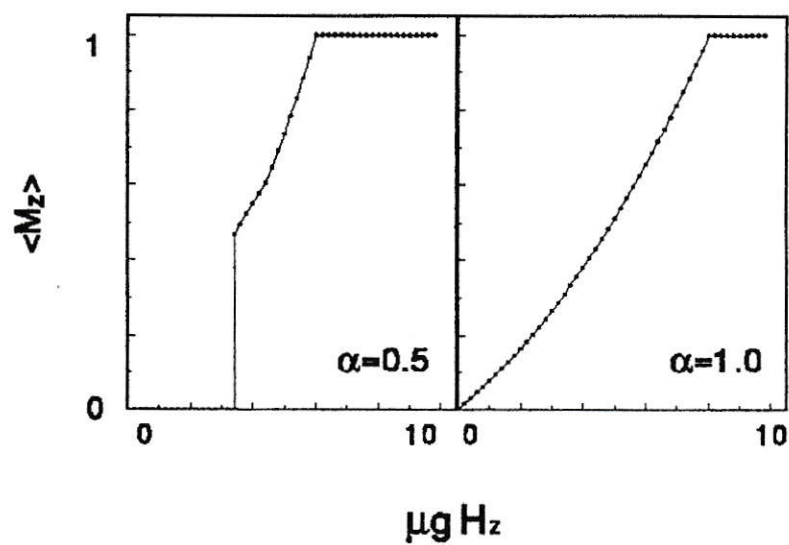


Figura 2.6: Magnetización en la dirección del eje z en función de la intensidad de campo magnético para el caso $S = 1/2$, $d = 2$, para $\alpha = 0.5, 1.0$.

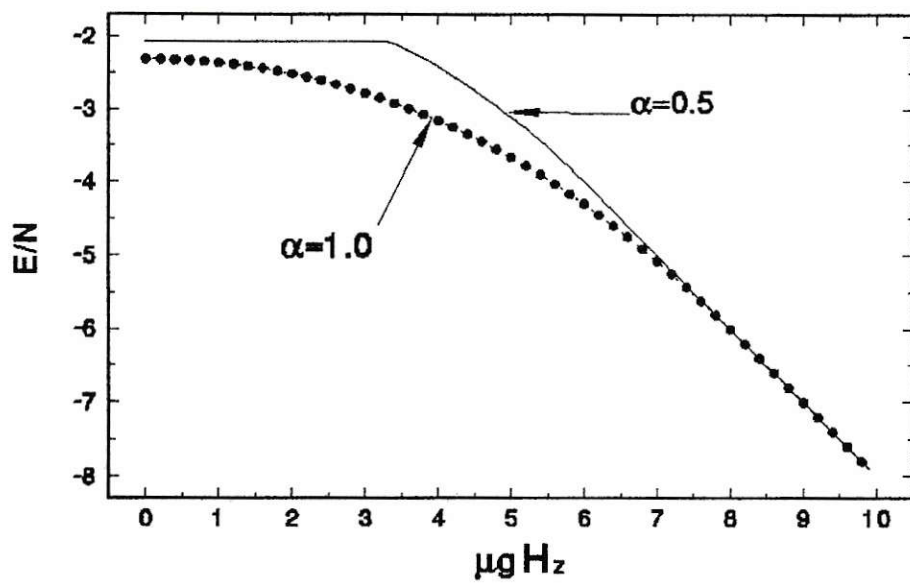


Figura 2.7: Energía por enlace en función de la intensidad de campo magnético, para el caso $S = 1$, $d = 2$, para $\alpha = 0.5, 1.0$.

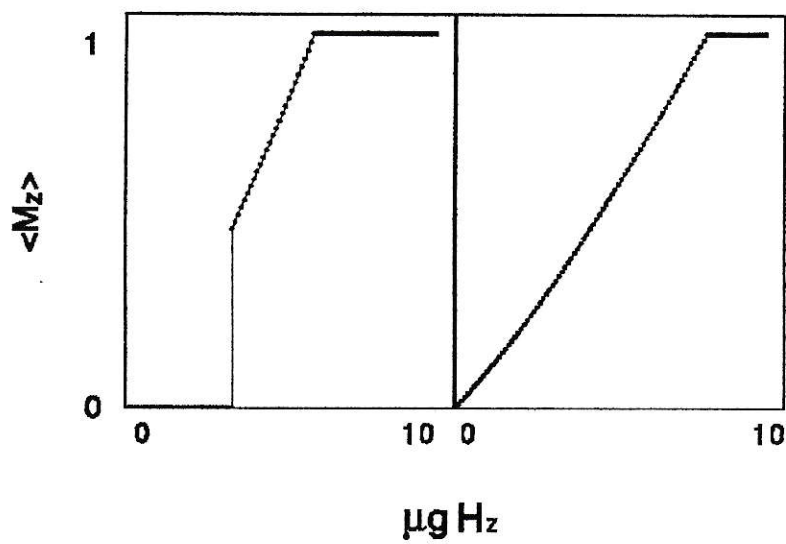


Figura 2.8: Magnetización en la dirección del eje z en función de la intensidad de campo magnético para el caso $S = 1$, $d = 2$, para $\alpha = 0.5, 1.0$.

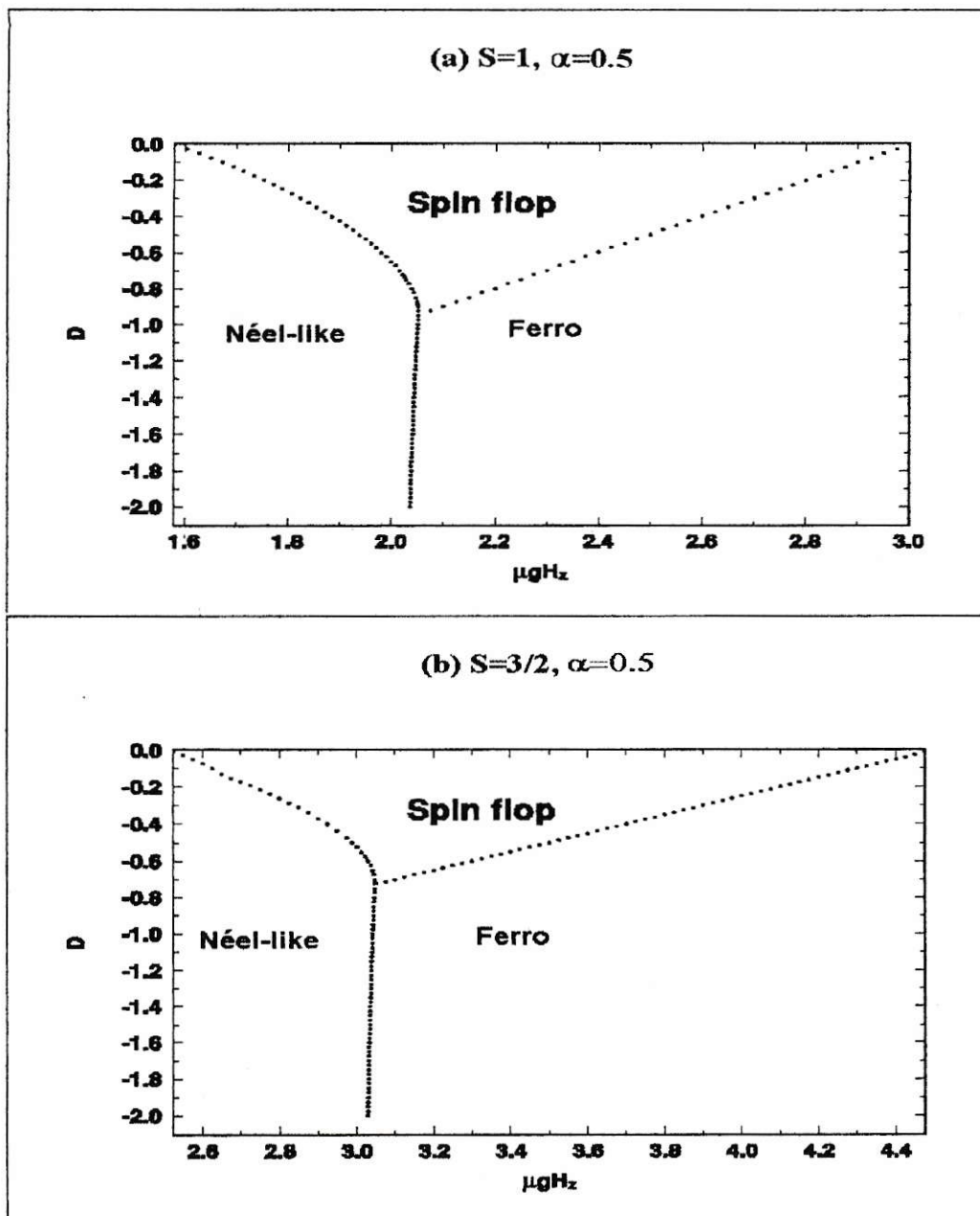


Figura 2.9: Mapas de las fases por las que pasa una cadena de spines $S = 1$ (a) y $S = 3/2$ (b), para $\alpha = 0.5$, y a medida que aumenta el campo magnético longitudinal. Se observa la presencia de tres fases. La transición entre la fase "Néel" y las otras fases es discontinua, no así la transición entre la fase "spin-flop" y la fase "ferro".

Energía v/s Campo Magnético
 $D = -1, S = 1, \text{cadena lineal}$

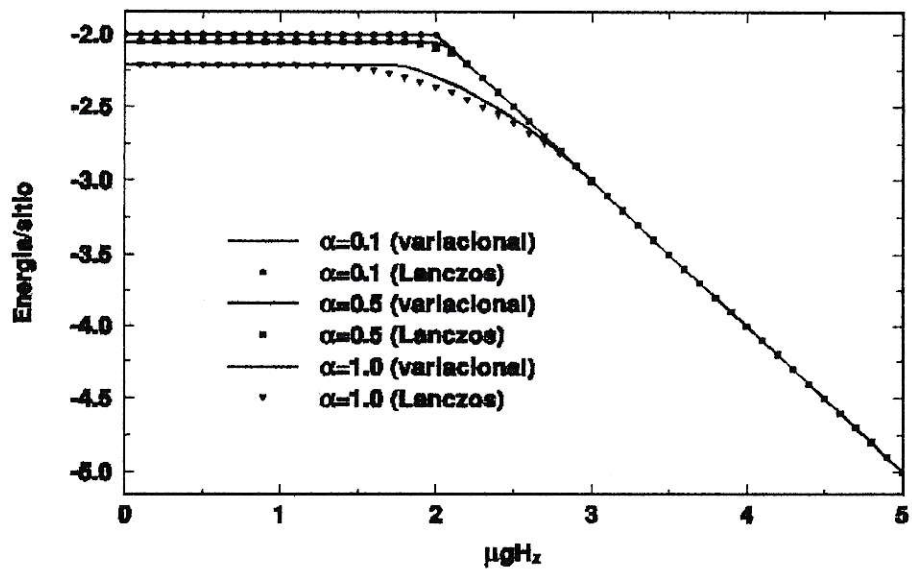


Figura 2.10: Curvas de energía versus intensidad de campo magnético longitudinal, para una cadena lineal de spines, asociadas con valores de la anisotropía $\alpha = 0.1, 0.5, 1.0$ para espín $S = 1$ y $D = -1$.

Energía v/s Campo Magnético
 $D = -1, S = 3/2$, cadena lineal

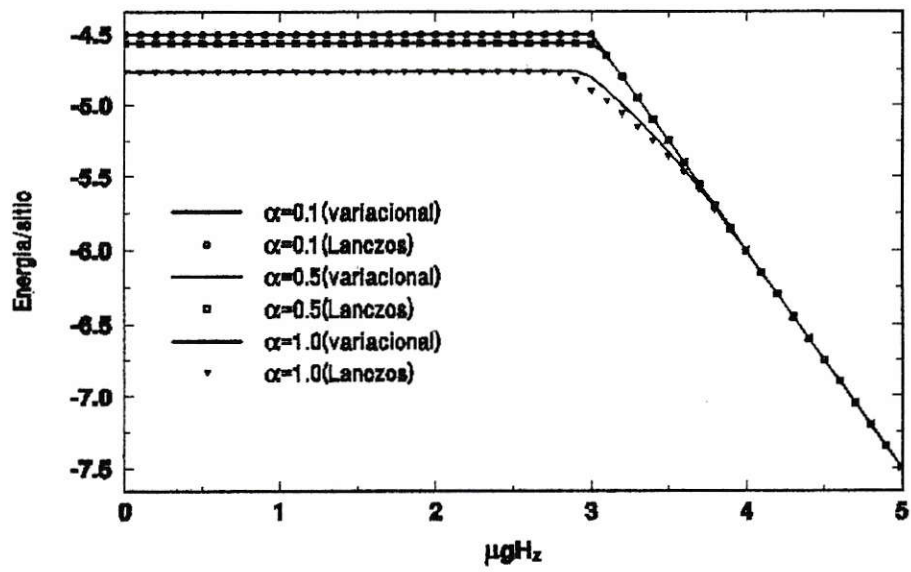


Figura 2.11: Curvas de energía versus intensidad de campo magnético para una cadena lineal de spines, asociadas con valores de la anisotropía $\alpha = 0.1, 0.5, 1.0$ para spín $S = 3/2$ y $D = -1$.

Bibliografía

- [1] J.G. Bednorz y K.A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 188 (1986).
- [2] C.W. Chu, P.H. Hor, R.L. Meng, L. Gao, Z.J. Huang y Y.Q. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 405 (1987).
- [3] H. Maeda, Y. Tanaka, M. Fukutomi y T. Asano, *Jpn. J. Appl. Phys.* **27**, 574 (1988).
- [4] Z.Z. Sheng y A.M. Herman, *Nature (London)* **332**, 138 (1988).
- [5] J. Bardeen, L. Cooper y J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [6] P.W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [7] A. B. Harris y R. V. Lange, *Phys. Rev.* **157**, 295 (1967); W. F. Brinkman y T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **2**, 1324 (1970); C. Gros, R. Joint y T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **36**, 381 (1987).
- [8] J. Spalek, A. Olés y K. Chao, *Physica Stat. Sol. B* **108**, 329 (1981).
- [9] D.C. Mattis *The Theory of Magnetism*, Vol. 1, Springer Verlag, 1981.
- [10] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931)
- [11] R. Orbach, *Phys. Rev.* **112**, 309 (1958)
- [12] J. des Cloiseaux y M. Gaudin, *J. Math. Phys.* **7**, 1384, (1966)

- [13] G.S. Aeppli *et all.*, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2052 (1989).
- [14] S. Chakravarty, B.I. Halperin, y D. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1057 (1988).
S. Chakravarty, B.I. Halperin, y D. Nelson, *Phys. Rev. B* **39**, 2344 (1989)
- [15] P.W. Anderson, *Phys. Rev. B* **86**, 694 (1952); R.Kubo, *ibid.* **87**, 568 (1952)
- [16] P.W. Anderson, *Mat. Res. Bull.* **8**, 153 (1973)
- [17] H.Yokoyama y H.Shiba, *J. Phys. Soc. Jap.* **56**, 1940 (1987).
- [18] E. Manousakis *Phys. Rev. B* **40**, 4904 (1988)
- [19] A. Auerbach y D.P. Arobas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 617 (1988).
- [20] D.C. Mattis y C.Y. Pan, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 463 (1988).
- [21] P. Jordan y E. Wigner, *Z. Physik* **47**, 631 (1928).
- [22] M.J. de Oliveira, *Phys. Rev. B* **43**, 6181 (1991)
- [23] H-Q Ding, *J. Phys. C* **2**, 7979 (1990)
- [24] E.Manousakis y R.Salvador, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 840 (1988); *Phys. Rev. B* **39**, 575 (1989)
- [25] Marie-Bernardete Lepetit y E.Manousakis , *Phys. Rev. B* **48**, 1028 (1993)
- [26] T. Pang, *Phys. Rev. B* **40**, 3362 (1991)
- [27] G. Gómez-Santos; *Phys. Rev. B* **41**, 6788 (1990)
- [28] M. Lagos y G.G. Cabrera; *Solid State Comm.* **67**, 221 (1988).
- [29] M. Lagos, M. Kiwi, E.R. Gagliano y G.G. Cabrera; *Solid State Comm.* **67**, 225 (1988).

- [30] M. Lagos y G.G. Cabrera; *Phys. Rev. B* **38**, 659 (1988).
- [31] D. Gottlieb y M. Lagos, *Solid State Commun.* **79**, 551 (1991)
- [32] D. Gottlieb y M.Lagos, *Phys. Rev. B* **39**, 2960 (1989).
- [33] G.G.Cabrera, M.Lagos, y M.Kiwi, *Solid State Comm.* **68**, 225 (1988).
- [34] M.Lagos, *Solid Sate Comm.* **77**, 597 (1991).
- [35] D. Gottlieb, M. Lagos, K. Hallberg y C. Balseiro *Phys. Rev. B* **43**, 13668 (1991).
- [36] D.Gottlieb, y V.Diaz, *Phys. Rev. B* **44**, (1991).
- [37] M.Montenegro, y D.Gottlieb, *J. Phys. C* **3**, 8641 (1991).
- [38] D.Gottlieb, M.Lagos, y M.Montenegro, *Solid State Comm.* **81**, 729 (1992).
- [39] D.Gottlieb, M.Montenegro, M.Lagos y K.Hallberg, *Phys. Rev. B* **46**, 3427 (1992).
- [40] D.Gottlieb, M.Montenegro, C.Millán, V. Díaz y K.Hallberg, *Solid Sate Comm.* **84**, 585 (1992).
- [41] M. Montenegro and D. Gottlieb. *Solid State Comm.* **86**, 553 (1992)
- [42] "Interplay of Holon and Spinon Dynamics in Doped Anisotropic Heisenberg Chains". G. Cabrera, M.Montenegro, C. Millán and D. Gottlieb, *Solid State Communications* **88**, 33 (1993).
- [43] T. Freltof *et al.*, *Phys. Rev. B* **36**, 826 (1987).
- [44] G.H. Lander *et al.*, *Phys. Rev. B* **43**, 448 (1991).
- [45] T.M. Brill *et al.*, *Phys. Rev. B* **43**, 10548 (1991).
- [46] R. Wang, *Phys. Rev. B* **40**, 3786 (1991)

- [47] H.A. Kramers, *Physica* **1**, 182 (1934).
- [48] I. Affleck, *J. Phys. Condens. Matter* **1**, 347-372 (1989).
- [49] T. Barnes, D. Kotchan, y E.S. Swanson, *Phys. Rev. B* **39**, 4357 (1989).
- [50] M. Steiner, J. Villain, C.G. Windsor, *Adv. in Phys.* **25**, N2,87 (1976)
- [51] L. P. Regnault, J. P. Boucher, J. Rossat-Mignon y J. P. Renard, *J. Phys. C* **15**, 1261 (1982).
- [52] E. Dagotto. y A. Moreo, *Phys. Rev. D.* **31**, 865 (1985).
- [53] E. Gagliano, E. Dagotto, A. Moreo y F. Alcaraz, *Phys. Rev. B* **34**, 1677 (1986).
- [54] K. Hallberg, E.R. Gagliano, y C. Balseiro, *Phys. Rev. B* **41**, 9474 (1990).
- [55] *Anisotropic Heisenberg Antiferromagnet in The Presence of a Magnetic Field for Arbitrary Dimension and Spin*, C. Millán y D. Gottlieb, *Phys. Rev. B* **50**, 242-247, (1994).
- [56] D. Knuth, *The Art of Computer Programming* (Addison-Wesley, Reading, Mass.,1973), Vol. 3, Sección 6.4(1985).
- [57] C. Millán y D. Gottlieb, enviada a *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1994.

Apéndice A

Valores Esperados

Este apéndice tiene por finalidad mostrar un camino para calcular valores medios de cantidades físicas de interés, para el caso de un hamiltoniano de spin $S = 1/2$, y dimensión $d = 1$, dentro del formalismo de PNME. Para realizar esta tarea, conviene transformar los operadores de spin a operadores fermiónicos utilizando la transformación de Wigner-Jordan:

$$c_l = \exp\{i\pi \sum_{m<l} S_m^+ S_m^-\} S_l^- \quad (\text{A.1})$$

El cálculo se puede llevar a cabo en el espacio de la red directa, pero es bastante más breve en la red recíproca, en donde la función de estado fundamental $|g\rangle$ está dada por

$$|g\rangle = \mathcal{U}_{\alpha'} |\mathcal{N}\rangle \quad (\text{A.2})$$

donde $\mathcal{U}_{\alpha'}$ es el operador de las excitaciones de PNME (1.20), cuya expresión en términos de operadores de fermión en la representación de momentum adquiere una forma muy sencilla y fácil de tratar:

$$\mathcal{U}_{\alpha'} = \exp\left\{\sum_k \frac{\alpha'}{2} \gamma_k (c_k^\dagger c_k - c_k^\dagger c_{\bar{k}})\right\} \quad (\text{A.3})$$

donde k pertenece a la primera zona de Brillouin de la red recíproca,

$$c_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iql} c_q^\dagger \quad (\text{A.4})$$

$$\gamma_k = 2 \cos k \quad (\text{A.5})$$

$$|\mathcal{N}\rangle = \prod_k \frac{(c_k^\dagger - c_{\bar{k}}^\dagger)}{\sqrt{2}} |0\rangle \quad (\text{A.6})$$

y por último,

$$\bar{k} = \begin{cases} k + \pi & , \quad k < 0 \\ k - \pi & , \quad k > 0 \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

En las expresiones utilizadas en este apéndice, la variable q recorre toda la red recíproca, mientras que la variable k toma valores sólo dentro de la primera zona de Brillouin. Las relaciones de transformación de las variables fermiónicas en la representación de momentum son muy simples:

$$\mathcal{U}_{\alpha'} c_q \mathcal{U}_{\alpha'}^\dagger = c_q \cos(\alpha' \cos q) - c_{\bar{q}} \sin(\alpha' \cos q) \quad (\text{A.8})$$

Puede comprobarse que el estado de Néel (A.6) difiere de la expresión usual (1.4) en un factor de fase constante, irrelevante al momento de calcular promedios. La expresión para la transformación de los operadores fermiónicos c_k^\dagger es muy simple:

En la red recíproca, las cantidades que se van a calcular son

$$\langle g | S_l^z | g \rangle = \langle g | (c_l^\dagger c_l - \frac{1}{2}) | g \rangle, \quad (\text{A.9})$$

$$\langle g | S_l^z S_{l+n}^z | g \rangle = \langle g | (c_l^\dagger c_l - \frac{1}{2}) (c_{l+n}^\dagger c_{l+n} - \frac{1}{2}) | g \rangle, \quad (\text{A.10})$$

$$\langle g | S_l^x S_{l+n}^x | g \rangle = \frac{1}{2} \langle g | c_l^\dagger \left\{ \prod_{0 < m < n} (2c_{l+m}^\dagger c_{l+m} - 1) \right\} c_{l+n} | g \rangle, \quad (\text{A.11})$$

Después de un breve trabajo, las expresiones para estas cantidades son sumas en la red recíproca, fácilmente identificables en términos de funciones de Bessel de orden entero:

$$\langle g | S_l^z | g \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk \cos(2\alpha \cos k) = \frac{1}{2} J_0(2\alpha), \quad (\text{A.12})$$

$$\langle g|S_i^z S_{i+n}^z|g\rangle = \frac{1}{4} \left[\delta_{n,0} + (-1)^n J_0^2(2\alpha) - J_n^2(2\alpha) \right], \quad (\text{A.13})$$

$$\langle g|S_i^+ S_{i+1}^-|g\rangle = -\frac{1}{2} J_1(2\alpha) \quad (\text{A.14})$$

$$\langle g|S_i^+ S_{i+2}^-|g\rangle = \frac{1}{2} \left(J_1^2(2\alpha) - J_0(2\alpha) J_2(2\alpha) \right), \quad (\text{A.15})$$

Apéndice B

Tratamiento Hartree-Fock

Este apéndice tiene por finalidad mostrar un tratamiento Hartree-Fock del antiferromagneto de Heisenberg, comparando los valores medios de cantidades físicas relevantes con los resultados de la teoría PNME en para cadenas lineales de spin $S = 1/2$. Para realizar esta tarea, conviene transformar los operadores de spin a operadores fermiónicos utilizando la transformación de Wigner-Jordan:

$$c_l = \exp\{i\pi \sum_{m<l} S_m^+ S_m^-\} S_l^- \quad (\text{B.1})$$

En esta representación, el Hamiltoniano de Heisenberg está dado por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_I + \mathcal{H}_{XY}, \quad (\text{B.2})$$

$$\mathcal{H}_I = \sum_l J((c_l^\dagger c_l - 1/2)(c_{l+1}^\dagger c_{l+1} - 1/2)), \quad (\text{B.3})$$

$$\mathcal{H}_{XY} = \frac{\alpha}{2} \sum_l J [c_l^\dagger c_{l+1} + c_{l+1}^\dagger c_l] \quad (\text{B.4})$$

Como se indicó en el Apéndice A, La función de estado fundamental propuesta por la teoría PNME, puede ser expresada mediante los operadores fermiónicos en el espacio recíproco:

$$|g\rangle = \mathcal{U}_\alpha |\mathcal{N}\rangle \quad (\text{B.5})$$

$$\mathcal{U}_\alpha = \exp\left\{\sum_k \alpha \cos k (c_k^\dagger c_k - c_{\bar{k}}^\dagger c_{\bar{k}})\right\} \quad (\text{B.6})$$

donde k pertenece a la primera zona de Brillouin de la red recíproca,

$$c_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqi} c_q^\dagger \quad (\text{B.7})$$

$$|\mathcal{N}\rangle = \prod_k \frac{(c_k^\dagger - c_{\bar{k}}^\dagger)}{\sqrt{2}} |0\rangle \quad (\text{B.8})$$

con

$$\bar{k} = \begin{cases} k + \pi & , k < 0 \\ k - \pi & , k > 0 \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

En las expresiones utilizadas en este apéndice, la variable q recorre toda la red recíproca, mientras que la variable k toma valores slo dentro de la primera zona de Brillouin. Lo anterior indica que el estado fundamental propuesto por el formalismo PNME puede expresarse como un producto de funciones de onda "de una partícula",

$$|g\rangle = \prod_k (\cos \psi_k c_k^\dagger + \sin \psi_k c_{\bar{k}}^\dagger) |0\rangle \quad (\text{B.10})$$

$$(\text{B.11})$$

con

$$\psi_k^{PNME} = -\alpha \cos k - \pi/4.$$

Es lógico preguntarse si este estado es el que produce la menor energía, o si existe otro que optimice esta cantidad. Para averiguarlo, se deja a ψ_k indefinida, se calcula una expresión analítica para el valor de expectación del Hamiltoniano en términos del campo ψ_k , y se busca el mínimo de la energía. En términos de ψ_k , el funcional de energía

está dado por

$$F[\psi] = - \left(\frac{1}{N} \sum_k \sin 2\psi_k \right)^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_k \cos k \cos 2\psi_k \right)^2 + \frac{\alpha}{N} \sum_k \cos k \cos 2\psi_k \quad (\text{B.12})$$

Minimizando este funcional respecto al campo ψ , se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$- \left(\frac{1}{N} \sum_k \sin 2\psi_k \right) \cos 2\psi_q + \left\{ \left(\frac{1}{N} \sum_k \cos k \cos 2\psi_k \right) - \alpha/2 \right\} \cos q \sin 2\psi_q = 0 \quad (\text{B.13})$$

Resolviendo, la solución debe satisfacer:

$$\tan 2\psi_q = \frac{\Delta}{\cos q} \quad (\text{B.14})$$

$$\Delta = \frac{\frac{1}{N} \sum_k \sin 2\psi_k}{-\alpha/2 + \frac{1}{N} \sum_k \cos k \cos 2\psi_k} \quad (\text{B.15})$$

esto es, en el límite $N \rightarrow \infty$, debe satisfacerse la siguiente ecuación integral para la cantidad Δ :

$$\alpha = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} dk \frac{\sin^2 k}{\sqrt{\Delta^2 + \cos^2 k}} \quad (\text{B.16})$$

Una vez resuelta esta ecuación, el campo ψ queda completamente definido, y con él, el estado fundamental del sistema y su energía. Así, la expresión para la energía por sitio es, en términos de Δ ,

$$F[\Delta] = - \left(\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{dk \Delta}{\sqrt{\cos^2 k + \Delta^2}} \right)^2 - \left(\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{dk \cos^2 k}{\sqrt{\cos^2 k + \Delta^2}} \right)^2 - \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^2 k dk}{\sqrt{\cos^2 k + \Delta^2}} \quad (\text{B.17})$$

Si en la ecuación (B.16) se considera $\alpha \ll 1$, el lado derecho se puede aproximar suponiendo $\Delta \gg 1$, obteniéndose que

$$\Delta \approx \frac{1}{2\alpha}$$

α	Lanczös N=20	Bethe ansatz	PNME	Hartree-Fock
0.5	-0.309080	-0.30861103	-0.30485651	-0.306173
1.0	-0.445218	-0.4431471	-0.38470501	-0.432289
1.5	-0.597435	-0.5946902	-0.29994122	-0.582130

Tabla B.1: Energías para algunos valores de anisotropía α .

con lo que el campo ψ es aproximado por

$$\cot 2\psi_k \approx 2\alpha \cos k,$$

esto es,

$$\psi \approx -\pi/4 - \alpha \cos k,$$

que es el valor correspondiente al formalismo PNME. La solución para ψ es

$$\psi_k = -\pi/4 - \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\cos k}{\Delta}\right). \quad (\text{B.18})$$

Para mostrar la precisión numérica de esta aproximación al problema, algunos valores de energía se indican en la tabla B.1

Apéndice C

Método Numérico

Este apéndice tiene por finalidad entregar los elementos teóricos necesarios para que el lector interesado pueda implementar el algoritmo de Lanczös en la búsqueda de propiedades de estados fundamentales de sistemas cuánticos, particularmente redes magnéticas de pocos sitios.

Como en la presente Tesis se trabaja con valores de spin por sitio arbitrarios, y la literatura existente no cuenta, salvo en contados casos, con resultados confiables para spin $1, 3/2$, etc..., se desarrolló programas computacionales que utilizan el método de Lanczös modificado para su aplicación a modelos de Heisenberg en $d = 1$ con valores de spin $1/2, 1, 3/2$, obteniéndose resultados que permitieron contrastar los resultados variacionales, hallándose ambos en excelente acuerdo.

La utilidad de este algoritmo radica en que a través de su utilización puede obtenerse resultados confiables para la energía y función de estado del Estado fundamental y algunas excitaciones en sistemas de pocos cuerpos (*small clusters*).

C.1 Método de Lanczös Modificado

El “Método de Lanczös Modificado” es un algoritmo variacional iterativo diseñado con la finalidad de obtener soluciones exactas para los autoestados de un hamiltoniano cuántico. Inicialmente desarrollado por E. Dagotto y A. Moreo [52, 53] para el estudio de sistemas en Teoría de Campos, pronto se vió su utilidad computacional en el estudio de sistemas de pocos cuerpos en Física de Sólidos. Basado en el Método de Lanczös estándar, este procedimiento permite, a través de un proceso iterativo, obtener una muy buena aproximación a la función de onda real asociada al estado fundamental o a un estado excitado de un hamiltoniano. Esto permite calcular tanto la energía asociada al estado como también los valores esperados de cualquier cantidad física de interés.

El algoritmo del Método de Lanczös Modificado puede describirse fácilmente: considere un estado de prueba ψ normalizado, con una proyección no nula sobre el estado fundamental Φ_0 del Hamiltoniano. Si al aplicar el operador Hamiltoniano sobre ψ se obtiene un estado linealmente dependiente con el anterior (salvo una tolerancia definida de antemano), entonces el proceso termina, pues se trata de un autoestado, que es lo que se buscaba. Si en cambio, se obtiene un estado linealmente independiente de ψ , entonces se considera un nuevo estado que sea combinación de ψ y el estado recién obtenido, y se busca la combinación que optimice el valor esperado de la energía. Esta combinación óptima es un nuevo estado ψ , con el que se repite el proceso. En este paso, el proceso puede terminar si la energía optimizada difiere de la energía calculada con el estado ψ en una cantidad menor que cierta tolerancia fijada de antemano. El proceso también puede finalizar si la incertidumbre en el valor de la energía se hace suficientemente pequeña, digamos, menor que alguna tolerancia prefijada. Debe notarse que si el estado inicial no tiene proyección sobre el estado fundamental del hamiltoniano, el proceso convergerá a un estado excitado. La elección del estado inicial además afectará la cantidad de tiempo necesaria para la convergencia del proceso.

Ahora se describirá el proceso Lanczös en más detalle: A partir del estado inicial ψ_0 ,

se construye uno ortonormal a él, ψ_1 , aplicando el Hamiltoniano de interés \mathcal{H} sobre ψ_0 :

$$\psi_1 = \frac{\mathcal{H}\psi_0 - \langle \mathcal{H} \rangle \psi_0}{\sqrt{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}}, \quad (\text{C.1})$$

donde $\langle \mathcal{H}^n \rangle = \langle \psi_0 | \mathcal{H}^n | \psi_0 \rangle$. En una representación de 2×2 , el Hamiltoniano es fácilmente diagonalizable. El valor para la energía optimizada es el correspondiente al menor autovalor de esta representación:

$$\tilde{\epsilon} = \langle \mathcal{H} \rangle + b\alpha \quad (\text{C.2})$$

y la nueva función de onda generada está dada por:

$$\tilde{\psi}_0 = \frac{\psi_0 + \alpha\psi_1}{\sqrt{1 + \alpha^2}}, \quad (\text{C.3})$$

donde

$$b = \sqrt{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2} \quad (\text{C.4})$$

$$f = \frac{\langle \mathcal{H}^3 \rangle - 3\langle \mathcal{H} \rangle \langle \mathcal{H}^2 \rangle + 2\langle \mathcal{H} \rangle^3}{2\sqrt{(\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2)^3}} \quad (\text{C.5})$$

y

$$\alpha = f - \sqrt{f^2 + 1} \quad (\text{C.6})$$

Estas expresiones son una mejor aproximación para la energía E_0 y el autoestado Φ_0 que $\langle \mathcal{H} \rangle$ y ψ_0 .

El proceso de iteración consiste en reemplazar la función de prueba inicial ψ_0 por $\tilde{\psi}_0$ y repetir el proceso de (C.1) a (C.6). En cada iteración es suficiente conservar tres vectores, ψ_0 , $\mathcal{H}\psi_0$ y $\mathcal{H}^2\psi_0$ expandidos en alguna base completa conocida del espacio de Hilbert asociado al Hamiltoniano. La velocidad de acceso a cada una de las componentes de estos vectores se puede optimizar utilizando una técnica llamada de *hashing* [53]¹, un algoritmo muy efectivo para propósitos de búsqueda y almacenamiento.

¹cuya traducción al español no es muy iluminadora: picadillo, división en trozos pequeños. Quizás *to hash out: resolver*, sea mejor.

C.2 Técnica de *hashing*

A medida que crece la cantidad de información que es necesario almacenar en la memoria de un computador para especificar el estado cuántico de un sistema, el tiempo tomado por la ejecución de un algoritmo de búsqueda de autoestados puede crecer en forma geométrica con el tamaño del "cluster" a considerar. Baste pensar que, si por ejemplo se trabaja en una cadena de spines con un espacio \mathcal{S} *per sitio*, entonces al duplicar el número de sitios de la cadena, la cantidad de estados localizados accesibles al sistema se eleva al cuadrado.

La discusión siguiente está basada en la descripción de la técnica de hashing dada en *Physical Review B* **34**, página 1681 del año 1986.

Para explicar el funcionamiento del método de hashing, considérese un hamiltoniano de Heisenberg de spin 1/2, con condiciones de frontera periódicas, sobre una cadena finita. Como las condiciones de frontera son periódicas, se puede trabajar con estados que presentan invariancia traslacional. Por ejemplo, un estado de este tipo con cuatro sitios es

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}\{|1100\rangle + |0110\rangle + |0011\rangle + |1001\rangle\}, \quad (\text{C.7})$$

donde el estado localizado $|1100\rangle$ representa $S_1^+ S_2^+ |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$, ordenando los sitios de izquierda a derecha. un estado genérico $|\phi\rangle$ se puede almacenar del modo siguiente: cada estado localizado puede almacenarse como una palabra de máquina en la memoria del computador, con un bit a 1 donde hay un spin \uparrow y un bit a 0 donde hay un spin \downarrow . Así, un estado localizado puede ser almacenado como un número entero, con los bits que lo componen describiendo el estado de cada sitio de la red finita. Para ahorrar espacio, de acuerdo a una convención arbitraria, pero fija, se elige sólo uno de los estados localizados componentes del estado genérico $|\phi\rangle$ como su *representativo*, y sólo éste es guardado en memoria. En caso de necesidad, a partir es éste representativo se puede generar todo el resto aplicando el grupo de simetría de traslación. Los operadores del grupo actuando sobre un estado localizado son en la práctica, operaciones de bits. En el

trabajo con este ejemplo, se simplificará la discusión trabajando sólo con estados dentro de la representación de momentum cero, pero la generalización a otros subespacios es muy rápida y útil para buscar estados excitados. Además, en presencia de otros grupos de simetría del hamiltoniano, permite trabajar en cualquiera de los subespacios asociados al grupo en cuestión, del mismo modo a como se está haciendo con las traslaciones en este ejemplo.

Supóngase que se desea aplicar el operador Hamiltoniano sobre un estado ψ_0 . Sea \mathcal{H}_0 la parte del hamiltoniano que conserva localmente la componente z del spin. Sea $\mathcal{V} = \mathcal{H} - \mathcal{H}_0$. El estado está dado en general por una combinación lineal de representativos, —que se denotarán por $|\bar{n}\rangle$, cada un de los cuales es autoestado de \mathcal{H}_0 —:

$$\psi_0 = \sum_n C_n |\bar{n}\rangle. \quad (\text{C.8})$$

Cuando el potencial \mathcal{V} actúa sobre $|\bar{n}\rangle$, se generarán otros representativos. Considérese uno de ellos, digamos $|\bar{m}\rangle$. Éste podría haber aparecido antes, de modo que se lo debe buscar en el lugar de almacenaje de representativos (que se describe más abajo). Sólo si $|\bar{m}\rangle$ no ha aparecido anteriormente se lo guarda en un lugar desocupado. Estas dos operaciones deben implementarse en forma muy eficiente para ahorrar tiempo y espacio.

Un método para almacenar los representativos podría ser el tener dos vectores de largo M . En uno de ellos, llamado $I(i)$ ($1 \leq i \leq M$), se colocan los enteros $\{K\}$ que denotan a los representativos. En el otro vector, llamado $C(i)$ se almacenan los coeficientes correspondientes. Cuando se genera un representativo, se debe buscar si está o no en la tabla $I(i)$, partiendo por $i = 1$. Si el estado está presente, se altera el coeficiente asociado, y si el estado es nuevo, entonces se lo ubica en el primer espacio vacío y se altera el coeficiente asociado. El problema que presenta este procedimiento es que se trabaja usualmente con un número bastante grande de estados, y el número de comparaciones necesarias para ubicar un representativo crece linealmente con M ; por ejemplo, el número total de representativos es 6166 para una cadena de 12 sitios y spin 1 *per* sitio ($S_{total}^z = 0$), y de 12486 para una cadena de 10 sitios y spin 3/2. De aquí

nace la necesidad de utilizar un método diferente.

La idea principal de la técnica de hashing consiste en que es posible construir una función $i = h(K)$ (*función de hash*), que asigne una correspondencia entre los representativos $\{K\}$ y una ubicación i en los vectores $I(i)$ y $C(i)$. Si la correspondencia es uno-a-uno, el problema de ubicación de representativos está resuelto pues cuando se genera un estado de representativo \overline{K} por aplicación de \mathcal{V} sobre otro, sólo se necesita evaluar $h(K)$ para saber si éste ha sido generado anteriormente o no, y dónde se encuentra dentro de los vectores $I(i)$ y $C(i)$. Sin embargo, parece casi imposible el construir tal función uno a uno (además los números $\{K\}$ no se conocen *a priori*). En general, puede ocurrir que varios números K_1, K_2, K_3, \dots , tengan asociado un mismo índice, esto es, $h(K_1) = h(K_2) = h(K_3) = \dots$. En este caso, se dirá que hay “colisiones”, y que debe diseñarse un algoritmo para trabajar con este problema. Una buena elección de la función de hash debe minimizar el número de colisiones.

La función de hash que se ha elegido para trabajar en este desarrollo [56] está dada por:

$$h(K) = K(\text{ módulo } M) + 1, \quad (\text{C.9})$$

debido a que trabaja muy bien en la práctica. En efecto, ésta es la función que ha sido ocupada en numerosos trabajos numéricos citados en esta Tesis [35, 39, 40, 54, 55]. Para minimizar el número de colisiones, M (que determina el tamaño de los vectores C, I) puede tomarse como un número primo.

Una vez elegida la función de *hash*, se describirá el algoritmo que trata con el problema de las colisiones. Se necesitará un vector $L(i)$ de tamaño M . Por convención, si $L(i) = -1$, se entenderá que la posición i está vacía. También se necesitará una variable R (que inicialmente tendrá el valor $M+1$) para ayudar en la tarea de encontrar sitios vacíos.

Supóngase que se ha generado un representativo K , y se desea almacenarlo. Debe seguirse los siguientes pasos:

- (i) Primero se evalúa la función $i = h(K)$ para conocer el índice de posición i asociado

al representativo K .

- (ii) Si $L(i) = -1$, entonces la posición está vacía y puede almacenarse al representativo en ella, y debe pasarse al paso (vi). si no es así, la posición está ocupada y debe continuarse con el algoritmo.
- (iii) Si $I(i) = K$, entonces el estado de representativo K había sido almacenado en la posición i con anterioridad, y la búsqueda termina con éxito. Si $I(i) \neq K$, se continúa con el algoritmo.
- (iv) Si $L(i) > 0$ haga $i = L(i)$ y vuelva al paso (iii) (esto es, se continúa la búsqueda en la posición señalada por $L(i)$).
- (v) Si $L(i) = 0$, el estado K no ha aparecido previamente, y hay que almacenarlo en un sitio vacío del modo siguiente:

Disminuya R en una unidad. Si $L(R) = -1$, entonces puede almacenarse K en el sitio $i = R$. De otro modo, debe disminuirse R en otra unidad hasta encontrar un sitio vacío. (si se llega a tener $R = 0$, entonces el vector I ya no tiene espacio para almacenar el nuevo representativo, y debe reiniciarse todo el proceso con un tamaño M mayor). Hacer $L(i) = R$. De este modo, la siguiente vez que aparezca el representativo K , será localizado en uno de los pasos (iii) o (iv). Entonces haga $i = R$ y vaya al paso siguiente.

- (vi) Asigne $L(i) = 0, I(i) = K$, con lo que termina el proceso de almacenaje.

C.3 Un Ejemplo Práctico

A continuación se ilustrará cómo trabaja el algoritmo sobre una cadena isotrópica ($\alpha = 1$) de spines:

- La cadena es de seis sitios ($N = 6$). El Hamiltoniano H es

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V} \quad (\text{C.10})$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} S^z(\vec{R}) S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) \quad (\text{C.11})$$

$$\mathcal{V} = \frac{\alpha}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} [S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R})] \quad (\text{C.12})$$

- El proceso terminará si la diferencia en el valor de la energía calculada en dos iteraciones sucesivas tenga un valor absoluto menor que la tolerancia $\epsilon_1 = 0.000001$, o bien, si la incertidumbre en el valor de la energía calculada con la función de onda en una iteración es menor que $\epsilon_2 = 0.000001$ (Estos valores se eligen en forma arbitraria).
- Se trabajará en el subespacio determinado por el valor de la componente z del spin total $S_z^{total} = 0$. El tamaño de los vectores I, C , es $M = 5$. El valor escogido como representativo de un estado cualquiera, se encontrará rotando los bits del número entero asociado, hasta obtener el mayor valor posible —Esto es arbitrario, podría usarse otro criterio—. Así, el representativo del estado $|001011\rangle (= 11)$, es $|\overline{110010}\rangle (= 50)$.
- El estado inicial se elige como combinación de estados de Neél ($|101010\rangle$) y anti-Neél ($|010101\rangle$):

$$|\overline{101010}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |101010\rangle + |010101\rangle \}. \quad (\text{C.13})$$

- A medida que \mathcal{V} vaya operando sobre los estados existentes, llegará el momento en que ya no se generen nuevos representativos. Conviene entonces evitar las operaciones numéricas asociadas, construyendo una tabla con las direcciones de los representativos "destino" producidos al operar \mathcal{V} sobre el representativo "origen". Además, es necesario almacenar las constantes asociadas al efecto de \mathcal{H}_0 sobre cada

i	ψ_0	L	I	C	$\mathcal{H}\psi_0$	L'	I'	C'	$\mathcal{H}^2\psi_0$	L''	I''	C''
1		-1	0	0		0	50	0.35355		0	50	-0.17678
2		-1	0	0		-1	0	0		0	56	0.35355
3		0	42	0.2357		5	42	-0.35355		-5	42	0.88388
4		-1	0	0		-1	0	0		-1	0	0.0
5		-1	0	0		0	52	0.35355		0	52	-0.167767

Tabla C.1: Valores relevantes para una primera iteración del proceso Lanczös.

representativo, de modo que tampoco haya que calcularlas en lo sucesivo. Esto puede significar una tremenda economía de tiempo: un programa que trabajaba con 12 sitios y spin 1, en una estación de trabajo APOLLO DN-10000, demoraba seis horas sin estas mejoras, ¡y menos de 25 minutos con ellas!

- Los valores de las diferentes cantidades mencionadas anteriormente, para la primera iteración, se mencionan en la tabla (C.1).
- Además, para calcular los elementos de matriz, hay que hacer productos internos de los vectores de estado. Con ese fin es necesario conocer la degeneración que presenta cada representativo ante la acción del grupo de simetría de traslaciones. Éstas se consignan en la tabla siguiente. El estado ψ , a medida que avanzan las iteraciones, está dado por la tabla (C.2).

De la observación de los valores de energía, se observa que el proceso convergió en la quinta iteración, pues la diferencia entre energías totales consecutivas se hizo menor que la tolerancia ϵ_2 .