

UCH-FC
MAG-F
R#21

**INTERACCIONES DE LARGO ALCANCE
Y ESTRUCTURAS MAGNETICAS**

Tesis

entregada a la

Facultad de Ciencias

Universidad de Chile

en cumplimiento parcial de los requisitos

para optar al Grado de

Magister en Ciencias Físicas

por

JOSE ANTONIO ROGAN CASTILLO



Profesor Patrocinante: Dr. Miguel Kiwi T.

Facultad de Ciencias

Universidad de Chile

INFORME DE APROBACION

TESIS DE MAGISTER

Se informa a la Escuela de Postgrado de la Facultad de Ciencias que la Tesis de Magister presentada por el Candidato:

José Antonio Rogan Castillo

ha sido aprobada por la Comisión Informante de la Tesis como requisito de Tesis para optar al grado de Magister en Ciencias Físicas

Patrocinante de Tesis:

Dr. Miguel Kiwi T.

Comisión Informante de Tesis:

Dr. David Gottlieb B.

Dr. Miguel Lagos I.

Dn. Jaime Rössler B.





*A mis Padres, por su preocupación
y aliento.*

*A María Paz, por su comprensión
y apoyo.*

*A la memoria de Hugo Cerón, por
su Amistad.*

Agradezco a todos los que se interesaron y me ayudaron en este trabajo. En particular a los Profesores Jaime Rössler y Miguel Lagos por sus valiosos comentarios y sugerencias. Y en forma muy especial, a mi tutor, Profesor Miguel Kiwi, por su valioso apoyo tanto académico como humano durante el desarrollo de este trabajo.



INDICE

| | pág. |
|--|------|
| RESUMEN | 1 |
| I. INTRODUCCION | 3 |
| II. SOLUCION DE TRIAS E YNDURAIN | 12 |
| III. SOLUCION CON ORDEN MAGNETICO HELICOIDAL | 30 |
| IV. APLICACION A SISTEMAS HELICOIDALES | 42 |
| V. APLICACION A SISTEMAS CON INTERACCIONES DE MEDIANO ALCANCE | 65 |
| VI. APLICACION A SISTEMAS CON INTERACCIONES DE LARGO ALCANCE | 110 |
| VII. CONCLUSIONES | 157 |
| APENDICE 1 | 170 |
| APENDICE 2 | 172 |
| APENDICE 3 | 176 |
| APENDICE 4 | 179 |
| APENDICE 5 | 182 |
| REFERENCIAS | 184 |



RESUMEN

Las tierras raras metálicas presentan un comportamiento magnético complejo e interesante. El Hamiltoniano efectivo que describe estos sistemas es el de Heisenberg con una interacción oscilatoria de largo alcance conocida como RKKY. Lo anterior motiva el estudio del estado fundamental y del espectro de excitaciones del Hamiltoniano de Heisenberg con interacciones competitivas de largo alcance. Sin embargo, la complejidad del problema no permite soluciones analíticas para sistemas tridimensionales, haciéndose necesario trabajar con sistemas más simples que preserven los aspectos físicos fundamentales del problema.

En este trabajo obtenemos el ordenamiento magnético semiclásico del estado fundamental y el espectro de excitaciones del Hamiltoniano de Heisenberg con interacciones de alcance arbitrario, sobre la topología de una red de Bethe con coordinación arbitraria. El problema lo resolvemos usando el formalismo de funciones de Green, a temperatura nula, el cual nos entrega la relación de dispersión de los magnones y la densidad local de estados.

Para el estado fundamental consideramos una configuración helicoidal, la cual incluye como casos particulares la ferromagnética y la antiferromagnética. Para esta configuración evaluamos el ángulo entre dos espines contiguos, el cual caracteriza completamente nuestro estado fundamental. Determinado éste, evaluamos la energía por sitio y la relación de dispersión, como función de los diferentes parámetros relevantes para cada sistema.

Investigamos varias formas de la interacción. El caso particular de interacción sólo a primeros vecinos permite reobtener resultados conocidos. Estudiamos un sistema con interacción a primeros y enésimos vecinos, en el caso de coordinación dos, el cual reproduce la topología de una cadena helicoidal, sistema que ha adquirido importancia como modelo de macromoléculas. Otros sistemas estudiados son aquellos con interacciones entre los tres vecinos más cercanos, los cuales son analizados para diferentes coordinaciones. Finalmente, investigamos la interacción RKKY, que por ser una interacción de largo alcance presenta problemas difíciles de superar con los métodos usuales de cálculo. Consideramos, en este último caso, diferentes coordinaciones con un interés especial en coordinaciones altas, correspondientes a redes cúbicas. Proponemos una manera de contar los vecinos en redes cúbicas que nos permita reemplazar el número original de enésimos vecinos de la red de Bethe, superando de este modo el defecto que tiene esta red de sobreestimar dicho número.

I. INTRODUCCION

Existe una gran cantidad de evidencia experimental de que muchos materiales presentan ordenamientos magnéticos bajo una cierta temperatura, en ausencia de un campo magnético externo. Los principales elementos que dan origen a esta propiedad son unos pocos metales de transición (Cr, Mn, Fe, Co y Ni) y casi la totalidad de las tierras raras (elementos de la serie del Lantano). Estos elementos puros (Cr, Fe, Co, Ni) o formando compuestos (MnO, MnS, NiO, FeO, CrTe, por nombrar algunos), presentan principalmente ordenamientos convencionales, es decir, ferromagnetismo o antiferromagnetismo. Por su parte, los compuestos de tierras raras presentan ordenamientos en general más complejos, incluyendo, por ejemplo, magnetismo con orden helicoidal, además de ferromagnetismo (Gd, Dy y EuO).

La importancia científica y tecnológica de estos materiales es incuestionable en la actualidad; sin embargo, la comprensión de los mecanismos involucrados no ha resultado una tarea fácil. Sólo hacia principios de 1930, con el nacimiento de la Mecánica Cuántica, comenzó a entenderse el mecanismo físico a nivel microscópico que da origen a las propiedades magnéticas de estos materiales. Desde esos tiempos hasta nuestros días han sido innumerables los trabajos realizados sobre el tema, lográndose grandes avances en la comprensión de este fenómeno. Sin embargo, a pesar de estos avances, nos enfrentamos a un problema extremadamente complejo, el cual, a modo de ilustración, permite sólo una solución exacta en una dimensión. Lo anterior significa que una explicación microscópica completa del magnetismo es,

sin duda, un problema aún abierto en física del sólido.

Usualmente, las descripciones cuánticas del magnetismo se dan en términos de dos clases de modelos: itinerantes y con momentos magnéticos localizados. En los primeros, usados principalmente para metales y aleaciones, se considera la estructura de bandas del material, ya que los electrones responsables del comportamiento magnético están deslocalizados, es decir, la función de onda asociada a ellos se extiende a través de todo el sólido. En el caso de modelos localizados, usados principalmente para aisladores, los momentos magnéticos están asociados a cada átomo y se acoplan a los momentos magnéticos vecinos a través de la interacción de intercambio. Sin embargo, estos modelos deben ser considerados sólo como casos límites. De hecho, los modelos localizados representan situaciones para las cuales las interacciones electrón-electrón intraatómicas (medidas aproximadamente por un promedio de la interacción "Coulombiana" intraatómica, U) son mucho mayores que las interacciones interatómicas (medidas por los traslapes atómicos o por el ancho de banda, W); los modelos itinerantes corresponden al límite opuesto, es decir, $U/W \ll 1$.

Lo anterior deja en claro la necesidad de disponer de una teoría unificada del magnetismo, la cual sea capaz de interpolar entre ambos límites. Sin embargo, a pesar de que no disponemos de esta teoría unificada, el acuerdo, en la gran mayoría de los casos, entre la información experimental y los resultados obtenidos, ya sea por los modelos itinerantes o por los modelos localizados, justifican ampliamente su uso. Desde un punto de vista práctico, la determinación del tipo de modelo relevante, en cada caso, es una dificultad *a priori*, la cual involucra consideraciones sobre la importancia de la interacción electrón-electrón y el grado de localización de

las funciones de onda de interés. Este tipo de consideraciones indican, por ejemplo, que para estudiar magnetismo en metales no siempre es necesario utilizar modelos itinerantes. Prueba de lo anterior es el caso de las tierras raras, en las cuales se utiliza un modelo localizado tanto para sus sales paramagnéticas (aisladoras), como para sus compuestos metálicos^{(1),(2)}, esto debido a la pequeña extensión espacial de los orbitales $4f$.

Nuestro interés se centra en los modelos de momentos magnéticos localizados, en los cuales se emplea un Hamiltoniano de espines para describir el sistema. Sin duda, uno de los Hamiltonianos de espines más utilizado es el de Heisenberg, el cual es uno de los más simple, pues sólo considera interacciones isotrópicas bilineales entre pares de espines. El Hamiltoniano de Heisenberg fue introducido hacia 1930 en los trabajos de Dirac^{(3),(4)}, Heisenberg^{(5),(6)}, y particularmente en el libro de Van Vleck⁽⁷⁾. A pesar de la innumerable cantidad de trabajos que con posterioridad han sido publicados sobre el tema, en los cuales se ha aplicado este Hamiltoniano a los más diversos sistemas, los resultados analíticos exactos son escasos. Por ejemplo, en el caso de Heisenberg ferromagnético, es decir, cuando las interacciones tienden a alinear paralelamente los espines, se conoce el espectro completo sólo en una dimensión; en dos y tres dimensiones los resultados analíticos se reducen al estado fundamental y el espectro de uno y dos magnones⁽⁸⁾. (Nos referimos a magnones como las excitaciones elementales, cuantizadas, de un sistema magnético ordenado). En la aproximación semiclásica estas excitaciones magnéticas se conocen como ondas de espín y fueron introducidas inicialmente en los trabajos de Bloch⁽⁹⁾ y Slater⁽¹⁰⁾. Siguiendo con la revisión de los resultados analíticos exactos nos cercioramos que los progresos en resolver el Hamiltoniano de Heisenberg en el caso antiferromagnético,

es decir, cuando las interacciones tienden a alinear antiparalelamente los espines, han sido lentos. Para el caso de una dimensión, Bethe⁽¹¹⁾ encontró las funciones de onda en 1931, la energía del estado fundamental no fue obtenida hasta 1938 por Hulthén⁽¹²⁾. Con posterioridad Orbach⁽¹³⁾ generalizó los resultados al caso anisotrópico, y Walker⁽¹⁴⁾ estudió las propiedades analíticas de las soluciones de Orbach. Finalmente, 32 años después del progreso inicial, Des Cloizeaux y Pearson⁽¹⁵⁾ calcularon el espectro de un magnón y Griffiths la susceptibilidad magnética⁽¹⁶⁾. No existen a la fecha resultados exactos en más de una dimensión.

Por otra parte, los resultados tanto aproximados como numéricos sobre este Hamiltoniano abundan en la literatura. Estos han sido muy importantes en el proceso de explicar las propiedades magnéticas de gran número de materiales. Incluso en la actualidad el estudio de este Hamiltoniano ha recobrado vigencia al ser aplicado a los nuevos superconductores de alta temperatura crítica. De hecho, este tipo de materiales presentan ordenamientos magnéticos predominantemente bidimensionales, los cuales podrían entenderse en base al modelo de Heisenberg. Este renovado interés está centrado principalmente en dos problemas: el primero, son las inusuales correlaciones magnéticas del compuesto superconductor $\text{La}_2\text{CuO}_{4-x}$ las cuales presentan algunos aspectos semejantes al comportamiento esperado en un modelo de Heisenberg unidimensional⁽¹⁷⁾ para espín 1/2. El segundo, mucho más conflictivo, es que no existe aún consenso sobre el estado fundamental del modelo de Heisenberg antiferromagnético en dos dimensiones, para diferentes valores del espín.

Es importante mencionar que todos los resultados analíticos exactos y la gran mayoría de los resultados aproximados y numéricos consideran sólo interacciones entre primeros vecinos. Consecuentemente con esto, los resultados para sistemas

con interacciones de largo alcance son escasos en la literatura. Esto se debe, por una parte, a que para muchos de los sistemas estudiados (los aisladores, por ejemplo) las interacciones entre segundos vecinos son, para todo efecto práctico, despreciables; por lo tanto, considerar sólo interacciones a primeros vecinos da buena cuenta de los resultados físicos de interés. Por otra parte, las dificultades que conlleva, tanto desde un punto de vista analítico como numérico, incluir interacciones de largo alcance en cualquier cálculo sobre un sistema magnético desalientan la mayor parte de los intentos. Sin embargo, el Hamiltoniano de Heisenberg con interacciones más allá de los primeros vecinos no es sólo un problema atractivo desde el punto de vista académico, sino que, los sistemas reales que son descritos por él presentan los ordenamientos magnéticos más interesantes y complejos.

Podemos mencionar entre estos sistemas los elementos metálicos de tierras raras pesadas y sus aleaciones, los cuales están descritos por un Hamiltoniano efectivo de Heisenberg con una interacción oscilatoria en signo y de largo alcance, conocida como Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY). El mecanismo de esta interacción fue propuesto inicialmente por Ruderman y Kittel⁽¹⁸⁾, en el contexto de la física nuclear, y extendido posteriormente a la física del sólido por Kasuya⁽¹⁹⁾ y Yosida⁽²⁰⁾. Este mecanismo de interacción es conocido como intercambio indirecto, y se basa en que la interacción entre momentos magnéticos atómicos es mediada por los electrones de la banda de conducción. Esto se explica debido a que los momentos magnéticos atómicos polarizan magnéticamente los electrones de conducción, los cuales a su vez interactúan con otros momentos magnéticos atómicos dando lugar a una interacción efectiva de largo alcance, la cual varía de signo con la distancia. Este tipo de interacciones de largo alcance que tienen diferente signo de acuerdo a la distancia, son

usualmente conocidas como interacciones competitivas y son las responsables de establecer ordenamientos complejos, distintos de los convencionales ferromagnetismo y antiferromagnetismo. Los ordenamientos a los cuales nos referimos son principalmente de tipo helicoidal, de tal manera que las interacciones entre los distintos vecinos no se satisfacen del todo, pero tampoco están completamente frustradas. Como antecedentes históricos de este problema podemos mencionar que en 1959 Yoshimori⁽²¹⁾ propuso una configuración helicoidal como solución para un sistema magnético con interacciones competitivas a primeros y segundos vecinos; y en forma casi simultánea, este tipo de orden helicoidal es observado, en el compuesto MnAu_2 , por A. Herpin, P. Mériel y Villain⁽²²⁾. Como explicación de los resultados obtenidos para este compuesto Villain⁽²³⁾ y Kaplan⁽²⁴⁾ también proponen, en forma independiente, una configuración helicoidal. En la actualidad, el problema de interacciones competitivas de largo alcance es usualmente tratado usando modelo conocido como ANNNI⁽²⁵⁾⁻⁽³²⁾ (Anisotropic-next-nearest-neighbor Ising). Este modelo consiste en un Hamiltoniano de Ising con interacciones a primeros vecinos, al cual se le incorporan interacciones transversales competitivas con los próximos vecinos más cercanos (segundos vecinos). A pesar de que se trabaja con un modelo más simple que el de Heisenberg con interacciones de largo alcance, los resultados obtenidos para los ordenamientos y sobre todo para la termodinámica son de gran complejidad^{(33),(34),(35)}. Debemos mencionar que alguno de estos trabajos se realizan sobre la topología de una red de Bethe^{(31),(34),(35)}.

Nuestra revisión anterior deja en claro que obtener resultados analíticos para el espectro de excitaciones magnéticas de un arreglo periódico descrito por el Hamiltoniano de Heisenberg, con interacciones de alcance arbitrario, es un asunto de

indudable interés en el área de magnetismo. Sin embargo, dada la complejidad del problema para sistemas tridimensionales se hace necesario trabajar con sistemas más simples, que preserven los aspectos físicos fundamentales del problema. Un trabajo con esta motivación es publicado por Trias e Yndurain⁽³⁶⁾ en 1983, en el cual se resuelve el problema mediante la técnica de funciones de Green sobre la topología de una red de Bethe de coordinación arbitraria. Este tratamiento provee una solución analítica para el espectro de excitaciones, en el caso de un estado fundamental ferromagnético. El anterior es un resultado importante, dado que trata en forma analítica una interacción de alcance arbitrario. Por ser el antecedente directo de nuestro trabajo se hace necesario una breve revisión de él.

Podemos mencionar que el empleo de funciones de Green es usual para resolver la parte dinámica de este tipo de problemas. Por otra parte, la topología elegida, es decir, la red de Bethe, es una de las aproximaciones más populares para una red tridimensional con coordinación arbitraria⁽³⁷⁾. En ella, se respeta la coordinación de la red aproximada, pero los posibles recorridos en la red son drásticamente simplificados. Por ejemplo, se eliminan todos los recorridos cerrados no triviales. Esta característica simplificadora asemeja a la red de Bethe a una red unidimensional, en cuanto a la dificultad de tratamiento, aunque mantiene ciertas características de la red tridimensional. El mayor aporte, y sin duda el carácter original que presenta este trabajo⁽³⁶⁾, es el ingenioso y elegante método utilizado para resolver las ecuaciones dinámicas, sobre la red de Bethe, y luego, imponer las condiciones de borde. Sin embargo, la restricción a un estado fundamental ferromagnético es su mayor limitación. Dado que si estamos interesados en interacciones arbitrarias de largo alcance, ellas en general establecen ordenamientos distintos del ferromagnetismo.

La última consideración sobre este trabajo es que la red de Bethe tiene el problema de sobreestimar el número de enésimos vecinos; de hecho, este número crece exponencialmente. En la práctica, esta desventaja se traduce en que cualquier cálculo con interacciones de largo alcance es muy inestable numéricamente. Por lo tanto, esperamos que una generalización de este trabajo debe considerar, por un lado un estado fundamental menos restrictivo que el ferromagnético, y por otro, proponer algún mecanismo eficiente para superar los problemas de cálculo que se derivan del hecho de la sobreestimación del número de enésimos vecinos en la red de Bethe.

Nuestro objetivo en este trabajo es desarrollar un formalismo que permita obtener el espectro de excitaciones magnéticas de un sistema descrito por el Hamiltoniano de Heisenberg con interacciones de alcance arbitrario. Lo anterior, sobre la topología de una red de Bethe con coordinación arbitraria, considerando para el estado fundamental una configuración helicoidal. Esta configuración nos permite reproducir, en forma semiclásica, ordenamientos con diferentes periodicidades, y además, como casos particulares, el ordenamiento ferromagnético y el antiferromagnético (estado de Néel). El cálculo lo realizamos usando funciones de Green a temperatura nula. Es decir, nuestro trabajo consiste en lograr una generalización del formalismo presentado por Trias e Yndurain, considerando un ordenamiento para el estado fundamental más general que el ferromagnético, lo cual constituye la mayor limitación del trabajo original. Además, estamos interesados en presentar algún tipo de criterio físico que nos permita enfrentar el problema de la sobreestimación del número de enésimos vecinos que presenta la red de Bethe. Logrado un criterio, que pruebe ser razonable, estaríamos realmente en condiciones de efectuar cálculos en el caso de interacciones de largo alcance. Este formalismo lo aplicamos a

diferentes sistemas que permiten visualizar las posibilidades y limitaciones de nuestros resultados.

Este trabajo lo estructuramos de la siguiente manera: en el capítulo II, mostramos el cálculo realizado por Trias e Yndurain, ilustrando aspectos tales como el formalismo usado, la topología de la red de Bethe y la solución propiamente tal del problema; analizamos esta solución, discutimos sus limitaciones y la necesidad de una generalización. En el capítulo III, realizamos la generalización propuesta y comparamos con los resultados conocidos. En los tres capítulos siguientes aplicamos el nuevo formalismo desarrollado a diferentes sistemas. El capítulo IV es una aplicación a sistemas helicoidales y en el capítulo V estudiamos sistemas con interacciones de mediano alcance. Finalmente, en el capítulo VI, estudiamos la interacción RKKY para sistemas de alta coordinación. Por último, el capítulo VII resume los resultados y conclusiones más relevantes de este trabajo, sugiriendo además, posibles extensiones del mismo.

II. SOLUCION DE TRIAS E YNDURAIN

La obtención del espectro de excitaciones magnéticas de un arreglo periódico descrito por el Hamiltoniano de Heisenberg con interacciones de alcance arbitrario, es un problema de indudable interés en magnetismo y para el cual no se conoce solución analítica. El enfoque propuesto por Trias e Yndurain⁽³⁶⁾, consistente en resolver el problema sobre la topología de una red de Bethe, provee una solución analítica para el caso de un estado fundamental ferromagnético. En este capítulo mostramos detalles del cálculo realizado por Trias e Yndurain, a fin de ilustrar aspectos tales como el formalismo usado, la topología de la red de Bethe y la solución propiamente tal del problema. También nos proponemos analizar esta primera solución, discutir sus limitaciones y la necesidad de una generalización que permita extender el campo de aplicación mediante una solución más completa del problema. La generalización propuesta la presentamos en el capítulo siguiente.

1. El Hamiltoniano.

Consideremos un sistema constituido por átomos dispuestos sobre una red de Bethe, cuya topología precisa será expuesta en detalle más adelante. A cada átomo asignamos un único grado de libertad espinorial y no restringimos el alcance de las interacciones. El Hamiltoniano de nuestro sistema es el de Heisenberg,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j , \quad (2-1)$$

donde el índice i etiqueta los diferentes sitios de la red, \vec{S}_i representa el operador

de espín en el sitio i y J_{ij} es la interacción entre espines en el sitio i y el sitio j . La suma en (2-1) es sobre todos los pares de sitios de la red y el factor un medio compensa el doble conteo de cada par (i, j) .

Podemos escribir el Hamiltoniano (2-1) en función de las componentes de \vec{S}_i de la siguiente forma

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^-) \right), \quad (2-2)$$

donde S_j^+ y S_j^- viene dados en términos de las componentes cartesianas por:

$$S_j^+ = S_j^x + iS_j^y, \quad (2-3a)$$

$$S_j^- = S_j^x - iS_j^y, \quad (2-3b)$$

$$\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_j \rangle = S_j(S_j + 1), \quad (2-3c)$$

donde $\langle \dots \rangle$ indica el valor esperado de los operadores en el estado fundamental. Las reglas de conmutación de estos operadores son:

$$\begin{aligned} [S_i^+, S_j^+] &= 0 \quad \text{para todo } i, j, \\ [S_i^-, S_j^-] &= 0 \quad \text{para todo } i, j, \\ [S_i^+, S_j^-] &= 2\delta_{ij} S_j^z, \\ [S_i^z, S_j^\pm] &= \pm \delta_{ij} S_j^\pm. \end{aligned} \quad (2-4)$$

En las relaciones anteriores, al igual que en todos los desarrollos posteriores, se utiliza un sistema de unidades en que $\hbar = 1$.

2. Funciones de Green.

Para resolver el problema dinámico usamos la técnica de funciones de Green de tipo Zubarev⁽³⁸⁾. Las definiciones y notación usada la mostramos en el Apéndice 1.

Para nuestro problema específico definimos las siguientes funciones de Green:

$$G(i, j; t - t') = \frac{1}{2(S_i S_j)^{1/2}} \langle \langle S_i^+(t), S_j^-(t') \rangle \rangle, \quad (2-5)$$

$$G(k, i, j; t - t') = \frac{1}{2(S_i S_j)^{1/2}} \langle \langle S_k^z S_i^+(t), S_j^-(t') \rangle \rangle, \quad (2-6)$$

a temperatura nula, donde S_i y S_j son definidos a través de la ecuación (2-3c). La ecuación para nuestra función (2-5) es

$$\begin{aligned} i \frac{dG(i, j; t - t')}{dt} = & \delta(t - t') \delta_{ij} \frac{1}{2(S_i S_j)^{1/2}} \langle S_i^z \rangle \\ & + \sum_k J_{ki} (G(k, i, j; t - t') - G(i, k, j; t - t')) . \end{aligned} \quad (2-7)$$

A continuación deberíamos escribir la ecuación para la función (2-6), la cual depende de funciones que involucran cuatro operadores, es decir, de cuatro índices. La ecuación para estas funciones depende de funciones de cinco operadores y así sucesivamente. Esta cadena de ecuaciones para funciones de orden cada vez mayor se suele cortar con una aproximación, factorizando una función de Green en el promedio de un operador por una función de orden menor, de manera tal que el sistema de ecuaciones se cierre. Usamos una aproximación en el espíritu de campo medio,

$$\langle \langle S_k^z S_i^+(t), S_j^-(t') \rangle \rangle \approx \langle S_k^z \rangle \langle \langle S_i^+(t), S_j^-(t') \rangle \rangle, \quad (2-8)$$

ya que $\langle S^z \rangle$ es esencialmente un operador de número, como veremos en el capítulo siguiente. Expresamos la aproximación (2-8) en términos de las funciones de Green definidas en (2-5) y (2-6) tenemos que

$$G(k, i, j; t - t') \approx \langle S_k^z \rangle G(i, j; t - t'). \quad (2-9)$$

Limitandonos a un estado fundamental ferromagnético, $\langle S_k^z \rangle = S_k$, bajo el supuesto de elegir el eje de cuantización en la dirección de la magnetización. Si

imponemos además que el espín total sea el mismo en cada sitio tenemos que

$$\langle S_k^z \rangle = S_k = S \quad , \text{ para todo } k . \quad (2-10)$$

Utilizando las relaciones (2-9) y (2-10) en la ecuación (2-7) obtenemos

$$i \frac{dG(i, j; t - t')}{dt} = \delta(t - t') \delta_{ij} + S \sum_k J_{ki} (G(i, j; t - t') - G(k, j; t - t')) . \quad (2-11)$$

Como vemos, después de incluir la aproximación (2-8) obtenemos una ecuación para $G(i, j; t - t')$ que sólo contiene funciones del mismo orden cerrando el sistema, como era nuestra intención. Para resolver (2-11) usamos la transformada de Fourier, que convierte la ecuación diferencial en una ecuación algebraica. Definimos una transformada temporal de Fourier, de la función de Green, de la siguiente forma:

$$G_{ij}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G(i, j; \tau) e^{i\tau\omega} d\tau \quad \text{donde } \tau = t - t' . \quad (2-12)$$

Tomando la transformada de la ecuación (2-11) obtenemos

$$(\omega - \epsilon) G_{ij}(\omega) = \delta_{ij} - \sum_k T_{ik} G_{kj}(\omega) , \quad (2-13)$$

donde usamos las siguientes definiciones:

$$\begin{aligned} \epsilon &= S \sum_j J_{ij} , \quad \text{independiente de } i , \\ T_{ik} &= S J_{ik} . \end{aligned} \quad (2-14)$$

Resolviendo (2-13) obtenemos la función de Green del sistema y con ellos podemos evaluar magnitudes físicas de interés como, por ejemplo,

$$D_i(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{ii}(\omega + i0^+)] , \quad (2-15)$$

donde $D_i(\omega)$ es la densidad local de estados en el sitio i .

3. Red de Bethe.

En física la red de Bethe, o árbol de Cayley, se usa como una aproximación que simplifica la topología de una red periódica de Bravais de la misma coordinación. Cada punto del árbol representa un sitio de la red, en él se sitúa un átomo de interés, y para la longitud de los segmentos que ligan los distintos sitios se usa el parámetro de la red que se quiere aproximar. En la figura 1 vemos una porción de una red de Bravais de coordinación cuatro y la red de Bethe equivalente.

A continuación explicamos la topología de la red de Bethe. Consideremos un conjunto de puntos conectados por segmentos rectilíneos, de manera tal que desde cualquiera de sus puntos pueda siempre encontrarse un camino que lleve hasta cualquier otro. Cuando el grafo anterior carece de circuitos, es decir, de caminos que partiendo de un vértice describen una trayectoria cerrada que retorna a él, se dice que el grafo es un "árbol". Los árboles de la naturaleza o los ríos y sus afluentes son excelentes ejemplos naturales de diagramas de árbol. La cantidad de puntos vecinos con que se conecta un punto en particular se conoce como la conectividad o coordinación de ese punto. Un diagrama con un número infinito de puntos tal que la conectividad sea la misma para todos y todos los segmentos que unen los puntos sean de igual longitud, se conoce como Arbol de Cayley o Red de Bethe. Desde el punto de vista topológico la longitud de los segmentos de conexión no es relevante y es la coordinación o el número de primeros vecinos lo que caracteriza una red de Bethe. Al examinar la coordinación vemos que el mínimo valor posible es dos, y en este caso se tiene una cadena unidimensional infinita de puntos. Para coordinaciones mayores la red de Bethe no se realiza en el espacio tridimensional y debemos entonces entenderla sólo como una construcción abstracta. Estas estructuras no

traslacional, pero todos sus puntos son equivalentes, en contraposición a una red jerárquica.

Para construir una red de Bethe de coordinación c elegimos un punto y lo conectamos con c puntos distintos. Generamos así la capa de los primeros vecinos del punto inicial. A continuación conectamos cada uno de los primeros vecinos con $c - 1$ puntos, y con la conexión al punto inicial completamos la conectividad exigida. Finalizada la capa de segundos vecinos hacemos nuevamente $c - 1$ conexiones para cada uno de estos puntos, generando así la capa siguiente. Este proceso deberíamos continuarlo hasta generar las infinitas capas que constituyen una red de Bethe. La construcción de las primeras capas para coordinación tres se ilustra en la figura 2.

El uso de la red de Bethe nos permite tener una contabilidad correcta de la coordinación en cada sitio, manteniendo la simplicidad matemática del caso unidimensional, especialmente en el caso de interacción a primeros vecinos. Aumentar el número de interacciones enriquece la topología del sistema, permitiendo simular multidimensionalidad; un ejemplo de lo anterior se mostrará en el capítulo IV. Las indudables ventajas de una matemática esencialmente unidimensional traen consigo problemas en lo que se refiere, por ejemplo, a la estructura del espacio recíproco o a las singularidades de van-Hove en los bordes de banda que aparecen en las densidades de estados.

Existen otras grandes desventajas que debemos estar dispuestos a asumir al utilizar esta aproximación. La más importante es que eliminamos todos los circuitos cerrados. Ello tiene como consecuencia, en primer lugar, la pérdida de caminos alternativos para la transmisión de información a través de la red y, en segundo lugar, la eliminación de algunas interacciones. Una desventaja adicional de la red

de Bethe es que el número de n -ésimos vecinos crece en forma exponencial con n , lo cual adquiere relevancia cuando se trabaja con interacciones de muy largo alcance. Un intento de corregir este problema será presentado en el capítulo VI.

A continuación escribimos la ecuación (2-15), haciendo uso explícitamente de la topología de una red de Bethe de coordinación c . Elegimos la interacción entre espines de manera tal que ésta sea nula a partir del l -ésimo vecino en adelante. Identificamos el sitio de interés con el índice 0, y usamos $1, 2, \dots, n$ para las capas de primeros, segundos, \dots , n -ésimos vecinos del átomo central, respectivamente. No es relevante identificar los átomos dentro de una capa. Adoptamos además la notación:

$$\begin{aligned} G_n(\omega) &\equiv G_{n,0}(\omega) , \\ J_n &\equiv S J_{n,0} , \end{aligned} \tag{2-16}$$

la ecuación (2-13) para $i = N$ y $j = 0$ toma la forma

$$(\omega - \epsilon) G_N(\omega) = \delta_{N0} - \sum_{k=1}^l J_k G_{N+k \text{ pasos}}(\omega) , \tag{2-17}$$

donde se ha utilizado el hecho de que la interacción $J_{0,k}$ entre dos espines sólo depende de la distancia medida en *pasos* sobre la red que los separa, la cual está indicada con el índice k . El índice $N + k$ *pasos* en la función de Green se refiere a las funciones que corresponden al sitio N más k *pasos* sobre la red. Para explicar lo anterior, supongamos que nos situamos en el sitio N , es decir en alguno de los átomos de la N -ésima capa de vecinos del átomo central etiquetado por 0. Para $k = 1$ damos un *paso* sobre la red, distanciandonos del átomo en el cual nos encontrábamos inicialmente. Podemos entonces quedar ubicados en cualquiera de los $c - 1$ sitios de la capa $N + 1$ o bien en el sitio de la capa $N - 1$, que completa la coordinación del átomo del cual partimos. Las posibles ubicaciones corresponden a distintos índices

en la función de Green, a saber, G_{N+1} y G_{N-1} . Cada una de estas funciones lleva un peso diferente, $c-1$ y 1 respectivamente, y la suma de estas dos funciones con sus pesos correspondientes nos da la función de Green $G_{N+1 \text{ paso}}$. Al imponer que los *pasos* no puedan volver sobre si mismos, el dar k *pasos* nos lleva al k -ésimo vecino, y como el alcance de la interacción es l vecinos, el número máximo de *pasos* es l , que corresponde al límite superior de la suma.

En el párrafo anterior quedó de manifiesto que existen varias posibilidades al dar un *paso*. Para dar cuenta de esto es necesario definir la coordinación al dar un *paso* como el número de sitios distintos que podemos alcanzar al darlo. La coordinación al dar un *paso* hacia el sitio central es 1 , al hacerlo en la dirección contraria es $c-1$ y al cambiar de dirección es $c-2$; todo esto en el caso de que no pasemos por el sitio central. La figura 3 ilustra lo anterior para una coordinación de la red igual a cuatro.

Hecha estas consideraciones, para $N \geq l$, la expresión

$$G_{N+k \text{ pasos}} = (1)^k G_{N-k} + (c-1)^k G_{N+k} + \sum'_{m=1}^{k-1} (1)^m (c-2)(c-1)^{k-m-1} G_{N-m+k-m}, \quad (2-18)$$

la entendemos como la suma sobre todas las posibles formas de dar k *pasos* sobre la red. Los factores que acompañan a las funciones de Green son la coordinación al dar k *pasos* hacia el sitio central, para G_{N-k} ; k *pasos* en la dirección contraria, es decir, alejándose del sitio central, para G_{N+k} ; y dar m *pasos* hacia el centro, cambiar de dirección y dar $k-m-1$ *pasos* en la dirección contraria, para $G_{N-m+k-m}$. El símbolo \sum' indica que para $k=1$ la suma se anula.

Remplazando la forma para $G_{N+k \text{ pasos}}$, dada en (2-18), en la ecuación para la

función de Green (2-17) obtenemos, para $N \geq l$,

$$(\omega - \epsilon)G_N(\omega) = - \sum_{k=1}^l J_k \left(G_{N-k}(\omega) + (c-1)^k G_{N+k}(\omega) + \sum_{m=1}^{k-1} (c-2)(c-1)^{k-m-1} G_{N+k-2m}(\omega) \right). \quad (2-19)$$

Para ϵ , definido en (2-14), se obtiene

$$\epsilon = \sum_{k=1}^l c(c-1)^{k-1} J_k, \quad (2-20)$$

al imponer la topología y el alcance de la interacción que estamos usando. El factor $c(c-1)^{k-1}$, que aparece en (2-20), es el número de k -ésimos vecinos de un átomo cualquiera.

4 La Solución de Trias e Yndurain.

Para resolver el sistema infinito de ecuaciones (2-19) usamos el *ansatz*

$$G_N(\omega) = Ax^N(\omega), \quad (2-21)$$

en el espíritu de matriz de transferencia. Las definiciones:

$$\begin{aligned} y &\equiv x(c-1)^{1/2}, \\ W_n &\equiv -J_n(c-1)^{n/2}, \\ \tilde{\omega} &\equiv \omega - \epsilon, \end{aligned} \quad (2-22)$$

nos serán útiles para escribir la ecuación (2-19) en forma compacta,

$$\tilde{\omega} = \sum_{n=1}^l W_n \left(y^{-n} + y^n + \frac{(c-2)}{c-1} \left(\frac{y^{-(n-1)} + y^{(n-1)}}{y^{-1} + y} \right) \right) \equiv W(y), \quad (2-23)$$

en la cual y e y^{-1} aparecen en forma simétrica, es decir, si y satisface $W(y) = \tilde{\omega}$, también lo hace y^{-1} .

Podemos definir

$$P(y) = y^l (W(y) - \tilde{\omega}) , \quad (2-24)$$

el cual resulta ser un polinomio de grado $2l$ en la variable y . Las raíces de este polinomio son las posibles soluciones para la función de Green planteada en (2-21). Supondremos que $P(y)$ tiene l raíces simples, y_1, y_2, \dots, y_l , que satisfacen $|y_i| < 1$, para $i = 1, 2, \dots, l$. Considerando la simetría de las raíces señalada en el párrafo anterior, las l raíces restantes deben ser $y_1^{-1}, y_2^{-1}, \dots, y_l^{-1}$. Estas últimas l raíces satisfacen que $|y_i^{-1}| > 1$, para $i = 1, 2, \dots, l$, lo cual las elimina como posibles soluciones físicas, ya que en este caso la amplitud de las ondas de espín diverge. Concluimos que la solución con sentido físico es la superposición de las l raíces cuyo módulo es menor que uno, es decir, la forma más general para G_N es

$$G_N(\omega) = \sum_{i=1}^l A_i x_i^N = (c-1)^{-1/2} \sum_{i=1}^l A_i y_i^N . \quad (2-25)$$

Las l constantes A_i se fijan imponiendo las condiciones de borde, que corresponden a hacer equivalente el sitio central, etiquetado con el índice 0, con cualquier otro sitio de la red. Lo anterior se consigue escribiendo ecuaciones análogas a la ecuación (2-19), para $N = 0, 1, \dots, l-1$, e imponiendo que tengan exactamente la misma forma que (2-19). El cálculo explícito se incluye en el Apéndice 2.

Una vez determinadas las constantes A_i ,

$$A_i = \frac{1 - y_i^2}{1 - \frac{y_i^2}{(c-1)}} \frac{1}{(-y_i W'(y_i))} , \quad (2-26)$$

donde $W'(y_i)$ es la derivada de $W(y)$, definido en (2-23), con respecto a y evaluada en la raíz correspondiente, y_i , podemos escribir la función de Green usando (2-26).

En particular, la función de Green del sitio central G_0 , adopta la forma simple

$$G_0(\omega) = G_{0,0}(\omega) = \sum_{i=1}^l A_i y_i^0 = \sum_{i=1}^l \frac{1 - y_i^2}{1 - \frac{y_i^2}{(c-1)}} \frac{1}{(-y_i W'(y_i))} . \quad (2-27)$$

Usando el Teorema del Residuo, podemos obtener una expresión integral de G_0 ,

$$G_0(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|y|=1} \frac{1 - y^2}{1 - \frac{y^2}{(c-1)}} \frac{1}{(\tilde{\omega} - W(y))} \frac{dy}{y} , \quad (2-28)$$

debido a que las únicas singularidades del integrando son polos simples en las raíces y_1, y_2, \dots, y_l . El contorno de integración es elegido de manera tal que sólo encierre las raíces con sentido físico.

Parametricemos el contorno de integración usando

$$y = e^{i\phi} , \quad (2-29)$$

donde entendemos ϕ como el cambio de fase al ir de una capa a otra. La distancia entre dos capas adyacentes es la distancia entre primeros vecinos, es decir, el parámetro de red que denotaremos con a . Podemos definir un vector de onda asociado a ϕ mediante

$$\phi = ka . \quad (2-30)$$

Usando esta anterior parametrización en la forma integral (2-28), podemos reescribir G_0 como

$$G_0(\omega) = \frac{2(c-1)}{c\pi} \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2(\phi)}{1 - \frac{4(c-1)\cos^2(\phi)}{c^2}} \frac{1}{\tilde{\omega} - W(\phi)} d\phi , \quad (2-31)$$

donde si extendemos el alcance de la interacción a infinito, $W(\phi)$ viene dado por

$$W(\phi) = \sum_{n=1}^{\infty} W_n \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2}{c-1} \frac{\text{sen}((n-1)\phi)}{\text{sen}(\phi)} \right) . \quad (2-32)$$

Podemos evaluar la densidad local de estados en el sitio central a partir de la relación (2-15), obteniendo

$$D_0(\omega) = \frac{2(c-1)}{c\pi} \frac{\text{sen}^2(\phi(\omega))}{1 - \frac{4(c-1)\cos^2(\phi(\omega))}{c^2}} \phi'(\omega), \quad (2-33)$$

donde $\phi'(\omega)$ es la derivada de ϕ con respecto a ω y ϕ viene dada, en forma implícita, por

$$\omega = \sum_{n=1}^{\infty} J_n c(c-1)^{n-1} - \sum_{n=1}^{\infty} J_n (c-1)^{n/2} \left(2\cos(n\phi) + \frac{c-2}{c-1} \frac{\text{sen}((n-1)\phi)}{\text{sen}(\phi)} \right). \quad (2-34)$$

La ecuación (2-34) nos da la relación de dispersión $\omega(k)$ para magnones sobre una red de Bethe de coordinación c y con interacciones de alcance arbitrario.

5. Discusión.

Los resultados del modelo de Trias e Yndurain son aplicables a arreglos ferromagnéticos de espines, es decir, se requiere un estado fundamental ferromagnético, condición impuesta en estos cálculos en la ecuación (2-10). Esto limita al modelo a interacciones esencialmente de tipo ferromagnético con, a lo más, débiles interacciones competitivas de tipo antiferromagnético. Si consideramos interacciones que satisfagan los requerimientos del modelo y evaluamos la relación de dispersión, los resultados pueden ser de dos tipos: un estado fundamental ferromagnético estable y su respectivo espectro de excitaciones, o bien, un estado ferromagnético inestable, con un magnón "congelado" como estado fundamental. En este último caso, la aparición del nuevo orden magnético invalida el espectro de excitaciones, reflejándose en la relación de dispersión como un mínimo negativo en ω . Ya que ω no puede adoptar valores negativos, lo anterior sólo tiene sentido desde un punto de

vista cualitativo. Si el estado ferromagnético resulta inestable y aparece un orden helicoidal como estado fundamental, es decir, se “congela” un magnón, no tenemos un arreglo ferromagnético y no es posible entonces volver a usar el formalismo para determinar el espectro de excitaciones correspondiente.

Ilustremos lo anterior con un sistema en el cual son nulas todas las interacciones, excepto entre primeros vecinos, de tipo ferromagnético, y a n -ésimos vecinos, de tipo antiferromagnético, tal que esta última es sólo una fracción de la primera. Este particular sistema será estudiado en detalle en el capítulo IV. Las figuras 4 y 5 muestran la relación de dispersión en función del vector de onda k para diferentes razones entre las interacciones y para distintos vecinos a los que afecta la interacción antiferromagnética. En estas figuras vemos ilustradas las dos posibilidades discutidas; ferromagnetismo con el espectro de excitaciones, y orden helicoidal como estado fundamental.

Queda de manifiesto que un modelo mejorado debe considerar no sólo arreglos ferromagnéticos, sino también órdenes magnéticos más generales como son: el antiferromagnético (estado de Néel) y el helicoidal (magnones “congelados”). Debemos también determinar en todos los casos el estado fundamental y su respectivo espectro de excitaciones. En el capítulo siguiente desarrollaremos un modelo que satisface estos requisitos.

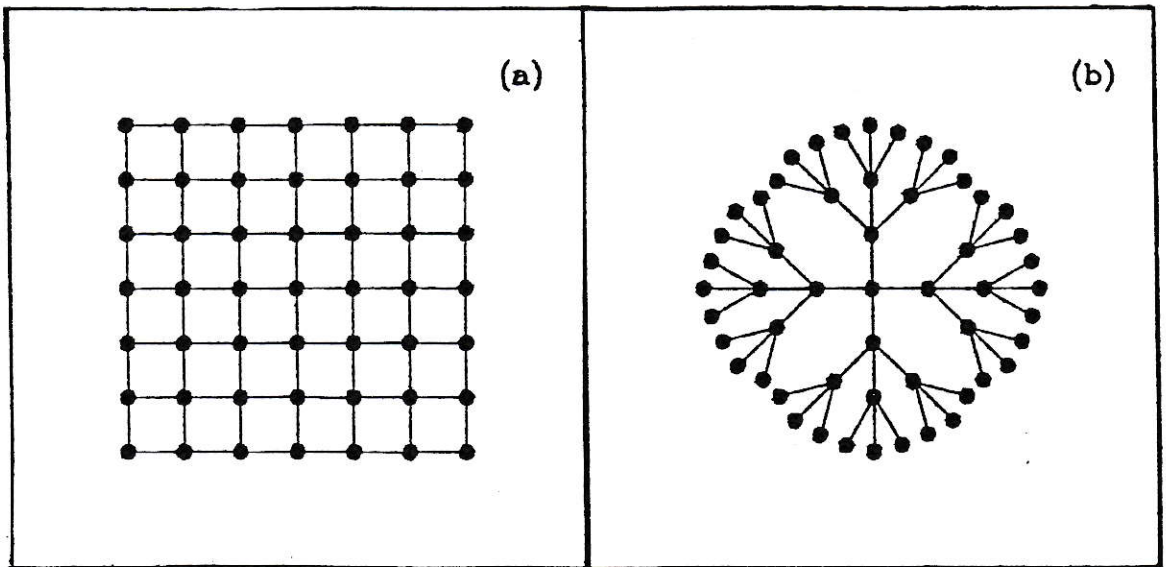


FIGURA 1(a). Mostramos una sección de una red de Bravais de coordinación cuatro, (b) corresponde a una sección de la red de Bethe equivalente. Hacemos notar que en el red de Bethe no existen caminos cerrados.

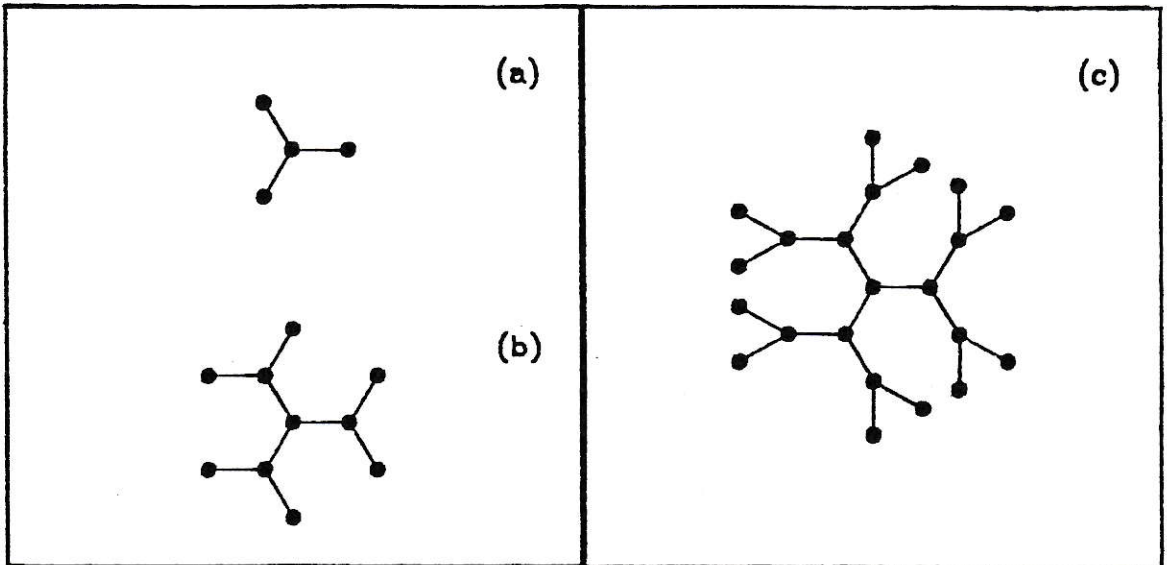


FIGURA 2. Ilustramos la construcción de las primeras capas de una red de Bethe de coordinación tres. En (a) tenemos el sitio central y su capa de primeros vecinos, en (b) agregamos la capa de segundos vecinos y en (c) vemos el sitio central con sus primeras tres capas de vecinos.

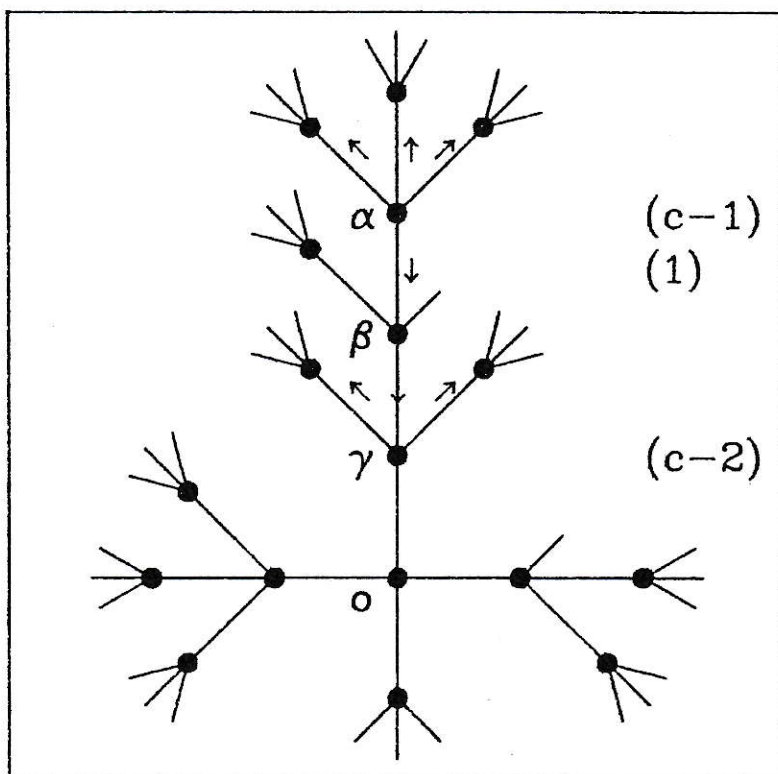


FIGURA 3. Ilustramos las diferentes maneras de dar un *paso* sobre una red de Bethe de coordinación cuatro ($c = 4$). Si nos situamos en el sitio α y damos un *paso* alejandonos del centro o tenemos tres posibilidades ($c - 1$). Si desde α damos un *paso* hacia el centro tenemos sólo una posibilidad (1). Si desde β nos dirigimos hacia el centro, pero en γ cambiamos de dirección tenemos dos posibilidades ($c - 2$).

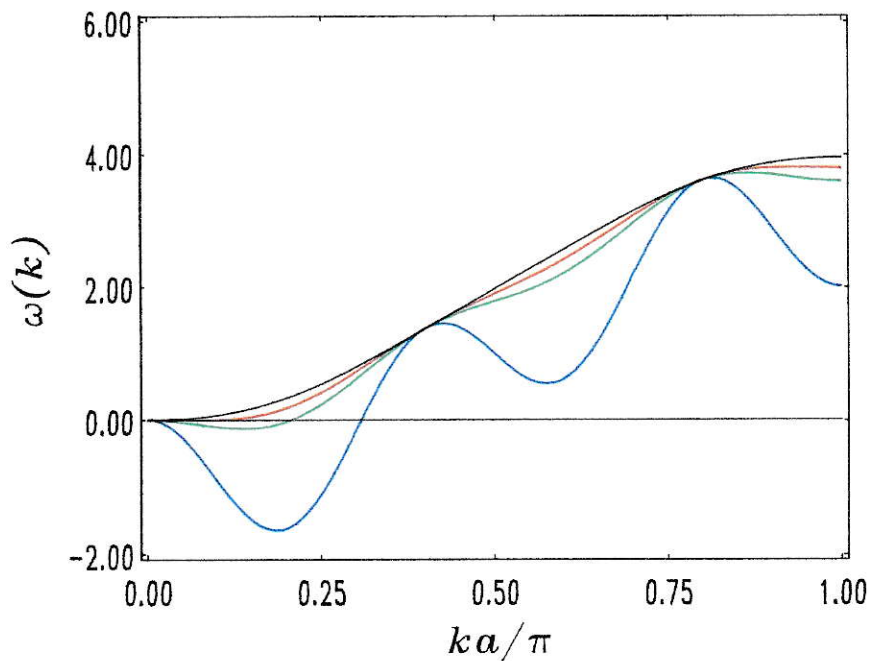


FIGURA 4. Relación de dispersión evaluada usando el formalismo de Trias e Yndurain, para un sistema con sólo dos interacciones, a primeros y a quintos vecinos (J_1 y J_5 respectivamente). Para todas las curvas $J_1 = 1$, en cambio $J_5 = -0.01$ para la curva en negro, $J_5 = -0.05$ para la curva en naranja, $J_5 = -0.1$ para la curva en verde y $J_5 = -0.5$ para la curva en azul.

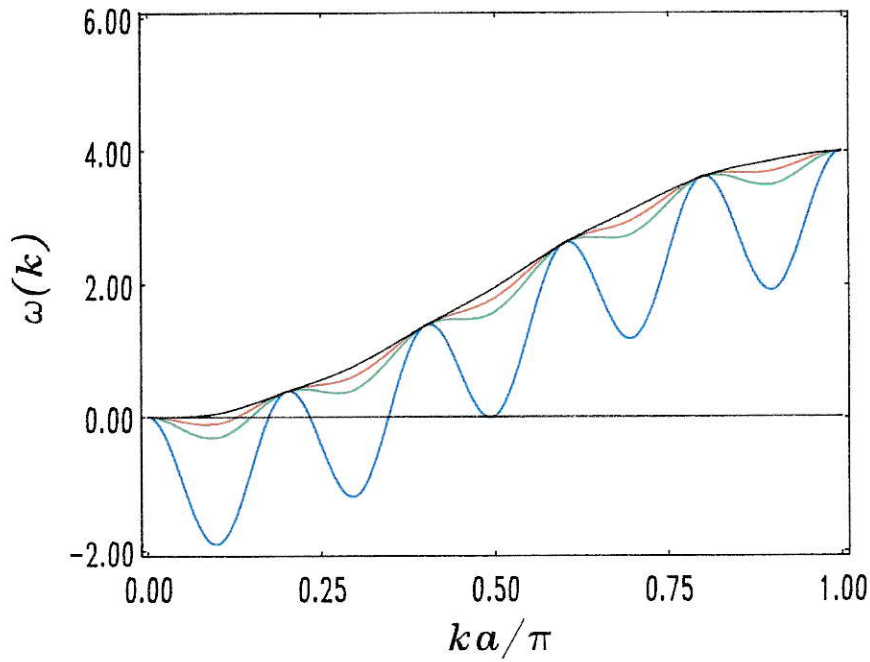


FIGURA 5. Relación de dispersión evaluada usando el formalismo de Trias e Yndurain, para un sistema con sólo dos interacciones, a primeros y a decimos vecinos (J_1 y J_{10} respectivamente). Para todas las curvas $J_1 = 1$, en cambio $J_{10} = -0.01$ para la curva en negro, $J_{10} = -0.05$ para la curva en naranja, $J_{10} = -0.1$ para la curva en verde y $J_{10} = -0.5$ para la curva en azul.

III. SOLUCION CON ORDEN MAGNETICO HELICOIDAL

1. Orden Magnético Helicoidal.

Presentamos ahora la extensión de la solución de Trias e Yndurain a sistemas cuyo estado fundamental no es ferromagnético. Para ello, tomemos como estado fundamental un arreglo helicoidal, tal que el ángulo entre dos espines consecutivos es constante; esto nos permite considerar distintas configuraciones del estado fundamental. Si el ángulo entre espines consecutivos es π , obtenemos como solución el estado antiferromagnético de Néel; si este ángulo es cero, la solución es ferromagnética; y para cualquier otro valor del ángulo, el estado fundamental lo interpretamos como un magnón "congelado". Lo anterior constituye un avance respecto de la solución del capítulo II, que permite como estado fundamental únicamente el ferromagnético y predice un magnón "congelado" sólo en forma cualitativa.

Nuestro sistema es el presentado en el capítulo II, es decir, consideramos un conjunto infinito de átomos dispuestos sobre una Red de Bethe, a cada átomo asignamos un único grado de libertad espinorial. El Hamiltoniano del sistema es el de Heisenberg y el alcance de las interacciones es a l vecinos. Sin embargo, escribimos el Hamiltoniano de la ecuación (2-1) de una forma diferente,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{\Delta=1}^l J_{\Delta} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+\Delta} , \quad (3-1)$$

donde el índice i indica los diferentes sitios de la red, Δ es un índice de *pasos* sobre la red, concepto que introdujimos en el capítulo anterior; \vec{S}_i representa el operador

de espín en el sitio i y J_Δ es la interacción entre espines en el sitio i y los sitios $i + \Delta$ pasos sobre la red. La primera suma en (3-1) es sobre todos los sitios de la red y el factor un medio compensa el doble conteo de cada par $(i, i + \Delta)$.

Nuestra solución requiere que definamos ejes coordenados, ángulos y las posiciones de los distintos átomos; es decir, necesitamos poder describir geoméricamente nuestro sistema. Sin embargo, en una red de Bethe de coordinación arbitraria, no podemos dar siquiera las posiciones de todos los átomos, debido a la imposibilidad de realizar en el espacio tridimensional cualquier red de coordinación mayor que dos. Si consideramos el caso en que la coordinación es dos tenemos una cadena unidimensional, la cual puede ser descrita trivialmente en tres dimensiones, dando la posibilidad así de definir sistemas de coordenadas y hacer cualquier descripción geométrica. Lo anterior implica que es necesario trabajar la geometría del problema como si se tratara de una cadena unidimensional, y luego extender los resultados variando la coordinación.

Consideremos que en cada sitio de la red tenemos un sistema de coordenadas local, de manera tal que el eje x de cada uno de ellos coincide con el eje de la cadena, y los ejes z de cualquier par de sistemas locales consecutivos forman un ángulo θ . El conjunto de ejes locales describe una hélice de paso θ a lo largo de la cadena. Cada espín apunta esencialmente en la dirección de su eje z local, el cual es el eje de cuantización. La suma sobre el índice de sitio i del Hamiltoniano (3-1) la evaluamos término a término en los diferentes sistemas de coordenadas; es decir, para un i fijo escribimos el $\vec{S}_{i+\Delta}$ en el sistema local del sitio i . Dada la invariancia del producto escalar respecto del sistema de coordenadas, lo anterior es totalmente lícito. Realizamos los cambios de coordenadas usando matrices de rotación con

respecto al eje de la cadena en un ángulo $\Delta\theta$ para los Δ -ésimos vecinos. Por Δ -ésimos vecinos entendemos los sitios alcanzados al dar Δ *pasos* sobre la red.

Escribamos el Hamiltoniano (3-1), en función de las componentes de \vec{S}_i como

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{\Delta=1}^l J_{\Delta} \left(S_i^z S_{i+\Delta}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+\Delta}^- + S_{i+\Delta}^+ S_i^-) \right). \quad (3-2)$$

En las relaciones

$$\begin{aligned} S_{i+\Delta}^+ &= \tilde{S}_{i+\Delta}^+ \cos^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) + \tilde{S}_{i+\Delta}^- \sin^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) - i \tilde{S}_{i+\Delta}^z \sin(\Delta\theta), \\ S_{i+\Delta}^- &= \tilde{S}_{i+\Delta}^+ \sin^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) + \tilde{S}_{i+\Delta}^- \cos^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) + i \tilde{S}_{i+\Delta}^z \sin(\Delta\theta), \\ S_{i+\Delta}^z &= -\frac{i}{2} \tilde{S}_{i+\Delta}^+ \sin(\Delta\theta) + \frac{i}{2} \tilde{S}_{i+\Delta}^- \sin(\Delta\theta) + \tilde{S}_{i+\Delta}^z \cos(\Delta\theta), \end{aligned} \quad (3-3)$$

los operadores sin tilde son la expresión de las componentes del operador $\vec{S}_{i+\Delta}$ en el sistema asociado al sitio i , y los operadores con tilde corresponden a las componentes en el sistema local solidario al sitio $i + \Delta$. La expresión (3-3) nos da la posibilidad de escribir el Hamiltoniano en función sólo de operadores en los sistemas locales, en los cuales S^z es esencialmente S .

Utilizando la transformación de Holstein-Primakoff⁽³⁹⁾ podemos cambiar nuestros operadores S^+ , S^- y S^z , por operadores con reglas de conmutación bosónicas, llamados de Holstein-Primakoff

$$\begin{aligned} S_{\nu}^+ &= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}}{2S} \right)^{\frac{1}{2}} a_{\nu}, \\ S_{\nu}^- &= \sqrt{2S} a_{\nu}^{\dagger} \left(1 - \frac{a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}}{2S} \right)^{\frac{1}{2}}, \\ S_{\nu}^z &= S - a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}, \end{aligned} \quad (3-4)$$

donde S está definido en la ecuación (2-3c). Las reglas de conmutación que satisfacen estos operadores son

$$\begin{aligned} [a_{\nu}, a_{\mu}] &= 0, \quad \text{para todo } \nu \text{ y } \mu, \\ [a_{\nu}, a_{\mu}^{\dagger}] &= \delta_{\nu\mu}. \end{aligned} \quad (3-5)$$

Utilizando la aproximación de ondas de espín, es decir, si nos limitamos a pequeñas desviaciones de S^z respecto de S y no consideramos interacciones entre ondas de espín, podemos escribir (3-4) en forma aproximada como:

$$\begin{aligned} S_\nu^+ &= \sqrt{2S} a_\nu , \\ S_\nu^- &= \sqrt{2S} a_\nu^\dagger , \\ S_\nu^z &= S - a_\nu^\dagger a_\nu . \end{aligned} \quad (3-6)$$

Podemos reemplazar las componentes de los operadores de espín en los sistemas locales, por operadores de Holstein-Primakoff en la aproximación (3-6), si tenemos en cuenta que en dichos sistemas se satisface que S^z es esencialmente S . Hecho ésto, el Hamiltoniano adopta la forma

$$H = -E(\theta) + H_0 + H_1 , \quad (3-7)$$

donde

$$E(\theta) = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\Delta=1}^l J_\Delta S^2 \cos(\Delta\theta) . \quad (3-8)$$

Como $E(\theta)$ no contiene operadores y depende sólo del ángulo entre los espines, podemos prescindir de él para calcular las excitaciones. El siguiente término del Hamiltoniano, H_0 , viene dado por:

$$\begin{aligned} H_0 = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{\Delta=1}^l J_\Delta \left(iS \sqrt{\frac{S}{2}} \text{sen}(\Delta\theta) \left(a_{i+\Delta}^\dagger - a_{i+\Delta} + a_i - a_i^\dagger \right) \right. \\ \left. - S \cos(\Delta\theta) \left(a_i^\dagger a_i + a_{i+\Delta}^\dagger a_{i+\Delta} \right) \right. \\ \left. + S \text{sen}^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) \left(a_i a_{i+\Delta} + a_{i+\Delta}^\dagger a_i^\dagger \right) \right. \\ \left. + S \cos^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) \left(a_i a_{i+\Delta}^\dagger + a_{i+\Delta} a_i^\dagger \right) \right) , \end{aligned} \quad (3-9)$$

eliminamos los tildes sobre los nuevos operadores, para simplificar la notación. El Hamiltoniano denotado por H_1 contiene los términos que involucran más de dos

operadores, los que corresponden a la interacción entre ondas de espín. Limitarnos a la aproximación de ondas de espín significa también despreciar este tipo de términos de interacción.

Evaluamos a continuación el espectro de excitaciones utilizando sólo el Hamiltoniano H_0 y recuperamos $E(\theta)$ al final del cálculo, al escribir la energía por sitio del sistema.

2. Funciones de Green.

Definimos dos funciones de Green del tipo Zubarev a temperatura nula (ver Apéndice 1) para nuestro problema, a saber:

$$\begin{aligned} G_{i,j}(t-t') &= \langle\langle a_i(t), a_j^\dagger(t') \rangle\rangle, \\ K_{l,k}(t-t') &= \langle\langle a_l^\dagger(t), a_k^\dagger(t') \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (3-10)$$

Las ecuaciones algebraicas que satisfacen las transformadas temporales de Fourier de nuestras funciones (3-10) son:

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon(\theta))G_{i,j}(\omega) &= \delta_{i,j} - \sum_{\Delta=1}^l V_\Delta \left(\cos^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) G_{i+\Delta,j}(\omega) \right. \\ &\quad \left. + \text{sen}^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) K_{i+\Delta,j}(\omega) \right), \\ (\omega + \epsilon(\theta))K_{l,k}(\omega) &= \sum_{\Delta=1}^l V_\Delta \left(\text{sen}^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) G_{l+\Delta,m}(\omega) \right. \\ &\quad \left. + \cos^2 \left(\frac{\Delta\theta}{2} \right) K_{l+\Delta,k}(\omega) \right), \end{aligned} \quad (3-11)$$

donde hemos hecho uso de las siguientes definiciones:

$$V_\Delta = SJ_\Delta, \quad (3-12)$$

$$\epsilon(\theta) = \sum_{\Delta=1}^l V_\Delta \cos(\Delta\theta). \quad (3-13)$$

Podemos ver que, como consecuencia de haber eliminado los términos de interacción en el Hamiltoniano, las ecuaciones (3-11) no contienen funciones de Green de orden mayor.

3. Solución.

El sistema de ecuaciones (3-11) acopla dos funciones de Green y para resolverlo es necesario desacoplarlas. Para ello usemos dos funciones auxiliares

$$\begin{aligned}\Gamma_{i,j}(\omega) &= G_{i,j}(\omega) + K_{i,j}(\omega) , \\ \Lambda_{i,j}(\omega) &= G_{i,j}(\omega) - K_{i,j}(\omega) ,\end{aligned}\tag{3-14}$$

las cuales satisfacen las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}\omega\Gamma_{i,j}(\omega) &= \delta_{i,j} + \epsilon(\theta)\Lambda_{i,j}(\omega) - \sum_{\Delta=1}^l V_{\Delta} \cos(\Delta\theta)\Lambda_{i+\Delta,j}(\omega) , \\ \omega\Lambda_{i,j}(\omega) &= \delta_{i,j} + \epsilon(\theta)\Gamma_{i,j}(\omega) - \sum_{\Delta=1}^l V_{\Delta} \Gamma_{i+\Delta,j}(\omega) .\end{aligned}\tag{3-15}$$

A continuación hacemos uso explícito de la topología de una red de Bethe de coordinación c . Identificamos el sitio de interés con el índice 0 , y usamos 1, 2, ..., n para las capas de primeros, segundos, ..., n -ésimos vecinos del átomo central respectivamente. Adoptamos además la notación:

$$\begin{aligned}\Gamma_n(\omega) &\equiv \Gamma_{n,0}(\omega) , \\ \Lambda_n(\omega) &\equiv \Lambda_{n,0}(\omega) .\end{aligned}\tag{3-16}$$

Evaluamos (3-15) para $i = N$ y $j = 0$

$$\begin{aligned}\omega\Gamma_N(\omega) &= \delta_{N,0} + \epsilon(\theta)\Lambda_N(\omega) - \sum_{\Delta=1}^l V_{\Delta} \cos(\Delta\theta)\Lambda_{N+\Delta}(\omega) , \\ \omega\Lambda_N(\omega) &= \delta_{N,0} + \epsilon(\theta)\Gamma_N(\omega) - \sum_{\Delta=1}^l V_{\Delta} \Gamma_{N+\Delta}(\omega) .\end{aligned}\tag{3-17}$$

Usando la expresión (2-18), para $N \geq l$, que da cuenta de los *pasos* sobre la red, obtenemos las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} \omega \Gamma_N(\omega) &= \epsilon(\theta) \Lambda_N(\omega) - \sum_{k=1}^l V_k \cos(k\theta) \left(\Lambda_{N-k}(\omega) + (c-1)^k \Lambda_{N+k}(\omega) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=1}^{k-1} (c-2)(c-1)^{k-m-1} \Lambda_{N+k-2m}(\omega) \right), \\ \omega \Lambda_N(\omega) &= \epsilon(\theta) \Gamma_N(\omega) - \sum_{k=1}^l V_k \left(\Gamma_{N-k}(\omega) + (c-1)^k \Gamma_{N+k}(\omega) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=1}^{k-1} (c-2)(c-1)^{k-m-1} \Gamma_{N+k-2m}(\omega) \right), \end{aligned} \quad (3-18)$$

donde el símbolo \sum' indica que la suma se anula para $k = 1$. La expresión que adopta $\epsilon(\theta)$, definido en (3-13), es

$$\epsilon(\theta) = \sum_{k=1}^l c(c-1)^{k-1} V_k \cos(k\theta). \quad (3-19)$$

En el espíritu de la solución de Trias e Yndurain, planteamos como funciones de prueba,

$$\Gamma_N(\omega) = Ax^N(\omega), \quad (3-20)$$

$$\Lambda_N(\omega) = By^N(\omega). \quad (3-21)$$

Imponemos además que, independiente de N , x e y ,

$$\sigma = \frac{Ax^N}{By^N}. \quad (3-22)$$

Definamos:

$$\begin{aligned} p &\equiv x(c-1)^{1/2}, & Y_n &\equiv V_n(c-1)^{n/2}, & \tilde{\omega}_1 &\equiv \omega - \frac{\epsilon(\theta)}{\sigma}, \\ q &\equiv y(c-1)^{1/2}, & Z_n(\theta) &\equiv V_n \cos(n\theta)(c-1)^{n/2}, & \tilde{\omega}_2 &\equiv \omega - \epsilon(\theta)\sigma. \end{aligned} \quad (3-23)$$

Estas definiciones, junto con las funciones de prueba (3-20) y (3-21) y la imposición hecha en (3-22), nos permiten escribir las ecuaciones (3-18) en forma análoga a (2-23), es decir

$$\begin{aligned}\tilde{\omega}_1 &= -\frac{1}{\sigma} \sum_{n=1}^l Z_n(\theta) \left(q^{-n} + q^n + \frac{(c-2)}{c-1} \left(\frac{q^{-(n-1)} + q^{(n-1)}}{q^{-1} + q} \right) \right) \equiv \tilde{W}_1(q), \\ \tilde{\omega}_2 &= -\sigma \sum_{n=1}^l Y_n \left(p^{-n} + p^n + \frac{(c-2)}{c-1} \left(\frac{p^{-(n-1)} + p^{(n-1)}}{p^{-1} + p} \right) \right) \equiv \tilde{W}_2(p),\end{aligned}\quad (3-24)$$

con lo cual obtenemos dos ecuaciones independientes, una para cada función auxiliar de Green, cada una con l condiciones de borde, que corresponden a hacer equivalente el sitio central con cualquier otro sitio de la red. Ambas podemos tratarlas utilizando el formalismo desarrollado en el capítulo anterior, dada la total equivalencia formal entre las ecuaciones (2-23) y (3-24).

Una vez aplicado el formalismo, obtenemos como resultado formas integrales para nuestras funciones auxiliares en el sitio central

$$\begin{aligned}\Gamma_0(\omega) &= \frac{2(c-1)}{c\pi} \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2(\phi)}{1 - \frac{4(c-1)\cos^2(\phi)}{c^2}} \frac{1}{\tilde{\omega}_1 - \tilde{W}_1(\phi)} d\phi, \\ \Lambda_0(\omega) &= \frac{2(c-1)}{c\pi} \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2(\phi)}{1 - \frac{4(c-1)\cos^2(\phi)}{c^2}} \frac{1}{\tilde{\omega}_2 - \tilde{W}_2(\phi)} d\phi.\end{aligned}\quad (3-25)$$

Podemos combinar estas funciones auxiliares, usando (3-14), y despejar σ para obtener la función de Green que nos interesa (ver Apéndice 3),

$$G_0(\omega) = \frac{2(c-1)}{c\pi} \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2(\phi)}{1 - \frac{4(c-1)\cos^2(\phi)}{c^2}} \frac{1}{\omega - \sqrt{W_1(\phi, \theta)W_2(\phi, \theta)}} d\phi, \quad (3-26)$$

donde, si extendemos el alcance de la interacción a infinito, $W_1(\phi, \theta)$ y $W_2(\phi, \theta)$

están dados por

$$\begin{aligned}
 W_1(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} V_n \cos(n\theta) \left(c(c-1)^{n-1} \right. \\
 &\quad \left. - (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2 \operatorname{sen}((n-1)\phi)}{c-1 \operatorname{sen}(\phi)} \right) \right), \\
 W_2(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} V_n \left(\cos(n\theta) c(c-1)^{n-1} \right. \\
 &\quad \left. - (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2 \operatorname{sen}((n-1)\phi)}{c-1 \operatorname{sen}(\phi)} \right) \right).
 \end{aligned} \tag{3-27}$$

Podemos evaluar la densidad local de estados en el sitio central a partir de la relación (2-25), obteniendo

$$D_0(\omega) = \frac{2(c-1)}{c\pi} \frac{\operatorname{sen}^2(\phi(\omega))}{1 - \frac{4(c-1) \cos^2(\phi(\omega))}{c^2}} \phi'(\omega), \tag{3-28}$$

donde $\phi'(\omega)$ es la derivada de ϕ con respecto a ω y ϕ viene dada, en forma implícita, por

$$\omega_\theta(\phi) = \sqrt{W_1(\phi, \theta) W_2(\phi, \theta)} \quad \text{donde } \phi = ka. \tag{3-29}$$

La ecuación (3-29) nos da la relación de dispersión $\omega_\theta(k)$ para magnones sobre una red de Bethe de coordinación c cuando el estado fundamental es helicoidal, el ángulo entre espines consecutivos es θ y el alcance de la interacción es arbitrario.

Falta aún determinar el ángulo entre espines, para lo cual, considerando el término $E(\theta)$ y la energía de la onda de espín con vector k , escribimos la energía por sitio,

$$\mathcal{E}(\theta, k) = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} V_n S c(c-1)^{n-1} \cos(n\theta) + \frac{\omega_\theta(k)}{\mathcal{N}}, \tag{3-30}$$

y luego minimizamos $\mathcal{E}(\theta, k)$ respecto a θ en ausencia de excitaciones, para k fijo, $k = 0$. Sin embargo, dado que el número total de sitios de la red, \mathcal{N} , tiende a infinito en nuestro caso, el segundo término del miembro derecho de la ecuación (3-30) se

anula. Una vez conocido el ángulo que minimiza $\mathcal{E}(\theta, k)$, éste se reemplaza en la relación de dispersión (3-29), quedando ésta totalmente determinada.

4. Casos Conocidos.

El primer caso conocido lo obtenemos imponiendo $\theta = 0$ en (3-27) y (3-29) con lo cual recobramos la solución de Trias e Yndurain, como era de esperar. Pero, nuestros resultados podemos aplicarlos también a una cadena lineal arbitraria; es decir, consideramos una red de Bethe de coordinación dos, y restringimos las interacciones sólo a primeros vecinos, sin especificar el signo de ellas, vale decir; si son ferromagnéticas o antiferromagnéticas. La forma que adopta la energía por sitio, en este caso, es

$$\mathcal{E}(\theta, k = 0) = -\frac{1}{2}VS \cos(\theta) , \quad (3-31)$$

donde V es la interacción a primeros vecinos. Al minimizar obtenemos dos posibles soluciones:

$$\theta_{\min} = \begin{cases} 0, & \text{si } V > 0 \\ \pi, & \text{si } V < 0. \end{cases} \quad (3-32)$$

Las relaciones de dispersión, una vez reemplazado θ_{\min} , son:

$$\omega(k) = \begin{cases} 2V(1 - \cos(ka)), & \text{si } V > 0, \text{ caso ferromagnético,} \\ 2|V||\sin(ka)|, & \text{si } V < 0, \text{ caso antiferromagnético.} \end{cases} \quad (3-33)$$

Notemos que ambas relaciones las obtenemos dentro del mismo formalismo, permitiendonos éste pasar de una relación a otra, de manera continua, al variar el ángulo que minimiza (3-31). Las implicaciones de estos resultados serán discutidas en la última sección de este capítulo.

Finalmente obtenemos las densidades de estados:

$$D_0^f(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{(2V)^2 - (2V - \omega)^2}}, \quad \text{si } V > 0, \text{ caso ferromagnético,}$$

$$D_0^a(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{(2V)^2 - \omega^2}}, \quad \text{si } V < 0, \text{ caso antiferromagnético.} \quad (3-34)$$

Los resultados (3-33) y (3-34) son ampliamente conocidos y en la literatura^{(40),(41)} es posible encontrar varias deducciones alternativas de ellos.

5. Discusión.

En este capítulo hemos desarrollado un formalismo que nos permite estudiar sistemas cuyas interacciones pueden ser ferromagnéticas, antiferromagnéticas o una combinación de ellas, sin ninguna restricción sobre el alcance de las mismas. Podemos caracterizar el estado fundamental como ferromagnético, antiferromagnético (estado de Néel) o como un magnón congelado, caso para el cual determinamos el ángulo entre espines consecutivos. En todos los casos podemos evaluar la relación de dispersión y su respectiva densidad de estados.

Una ventaja importante de nuestro formalismo es que nos permite tratar todos los casos en forma equivalente, sin necesidad del tratamiento usual de subredes para el antiferromagnetismo. Más aún, este método es el único que permite pasar continuamente (por ejemplo, en la relación de dispersión) del caso ferromagnético al antiferromagnético. Esto último quedó ilustrado en el caso de la cadena unidimensional con interacción a primeros vecinos. En este ejemplo tenemos que para $k \rightarrow 0$ la relación de dispersión, en el caso ferromagnético depende cuadráticamente de k , y en el caso antiferromagnético depende linealmente; por lo tanto, el paso continuo de una a otra, variando el ángulo que minimiza (3-31), no es un hecho trivial. Dado que el formalismo da un tratamiento equivalente a todos los órdenes magnéticos que

puedan adoptarse, podemos concluir que poseemos una herramienta poderosa que nos permite estudiar una gran variedad de sistemas, sin un análisis previo del tipo de estado fundamental que posee cada uno en particular.

Los capítulos siguientes los dedicamos a estudiar diferentes sistemas con interacciones competitivas, que sirven para ilustrar como trabaja el método. En forma especial estudiaremos en el capítulo VI la interacción RKKY que, debido a su largo alcance, presenta problemas difíciles de superar mediante los tratamientos convencionales.

IV. APLICACION A SISTEMAS HELICOIDALES

1. Sistemas Helicoidales.

El estudio de cadenas unidimensionales helicoidales ha cobrado interés debido a que proporcionan un modelo simple que permite describir grandes cadenas de moléculas o polímeros que presentan características helicoidales, como por ejemplo, el ácido desoxirribonucleico⁽⁴²⁾. Los trabajos previos^{(42),(43),(44)} que aplican el modelo de cadenas unidimensionales helicoidales al estudio del comportamiento magnético de estos sistemas, utilizan un Hamiltoniano tipo Ising. Es por esto que resultados con un Hamiltoniano de Heisenberg, además de ser originales, representan una ampliación del campo de aplicación del modelo. Con esta finalidad, presentamos a continuación una aplicación del formalismo general desarrollado en el capítulo anterior a sistemas unidimensionales helicoidales.

Los sistemas helicoidales en que estamos interesados están formados por cadenas unidimensionales de átomos enrolladas sobre el manto de un cilindro, de manera tal que la distancia entre dos vueltas consecutiva, llamada el paso de la hélice, es constante. Definimos las posiciones de todos los sitios sobre la hélice en coordenadas cilíndricas, tal que r es constante para todos los sitios y ϕ puede tomar N valores diferentes, que son $\phi_n = 2\pi n/N$, con $n = 0, 1, \dots, N-1$, y N corresponde al número de sitios por vuelta. Finalmente, los valores posibles de z están determinados por una función multivaluada de ϕ de la forma $z_q = hq + h\phi_n/2\pi$, donde $q \in Z$ y h es el paso de la hélice. Los índices (n, q) determinan unívocamente cualquier sitio

sobre la hélice. En la figura 1 vemos el tipo de sistema helicoidal en el cual estamos interesados.

Cada espín interactúa sólo con los espines más cercanos, los que corresponden a sus primeros vecinos a lo largo de la cadena y a los espines ubicados en las vueltas siguiente y anterior de la hélice. Incluir interacciones con espines ubicados en otras vueltas de la hélice no significa necesariamente que las interacciones sean de largo alcance espacial. Esto se entiende debido a que, si bien la distancia que separa a dos vecinos en vueltas consecutivas puede ser grande comparada con la distancia entre primeros vecinos, si la medimos a lo largo de la cadena, espacialmente, esta distancia, resulta ser el paso de la hélice, el cual puede ser comparable a la distancia entre primeros vecinos. De esta manera, interacciones de corto alcance espacial pueden ser las responsables de la interacción entre espines en vueltas consecutivas en la hélice. Elegimos interacciones competitivas, vale decir, una interacción ferromagnética y la otra antiferromagnética, ya que éstas inducen los ordenamientos magnéticos más interesantes.

Para estudiar el sistema propuesto debemos ponerlo en el contexto de nuestro formalismo general, para lo cual consideramos el caso especial de una red de Bethe de coordinación dos y con interacciones definidas de la siguiente manera:

$$V_n = \begin{cases} J_1, & \text{si } n = 1 \\ J_N, & \text{si } n = N \\ 0, & \text{en los demás casos.} \end{cases} \quad (4-1)$$

Lo anterior significa que cada espín interactúa con sus primeros vecinos y además con sus N -ésimos vecinos a lo largo de la cadena, solamente. Los N -ésimos vecinos corresponden a los espines ubicados en la vuelta siguiente y en la anterior de la hélice.

2. Resultados.

Nos interesan especialmente interacciones de tipo competitivas, sin embargo, por completitud, en nuestro estudio consideramos todas las posibles combinaciones de signo para las interacciones. Obtenemos a continuación el ángulo entre espines consecutivos en el estado fundamental como función de las interacciones; para esto minimizamos la energía por sitio, dada por la relación (3-30). La forma que adopta la energía por sitio en este caso es:

$$\mathcal{E}(\theta, k = 0) = -\frac{1}{2}|J_1|S(\operatorname{sgn}(J_1)\cos(\theta) + X_N\cos(N\theta)) \quad , \quad (4-2)$$

donde $|J_1|$ es el módulo de la primera interacción, el cual resulta ser sólo un factor de escala de la energía; sgn es la función signo de J_1 , la cual determina si la interacción es ferromagnética (+) o antiferromagnética (-); y X_N es el cociente entre las interacciones, vale decir

$$X_N = \frac{J_N}{|J_1|} \quad . \quad (4-3)$$

El $\operatorname{sgn}(J_1)$ y X_N son los parámetros físicos determinantes.

En las figuras 2 y 3 vemos el comportamiento del ángulo entre espines consecutivos (θ_{\min}), el cual caracteriza el estado fundamental del sistema, en función de X_N . En cada figura consideramos un valor del signo de la interacción a primeros vecinos; incluimos además varias curvas por figura, las cuales corresponden a distintos valores del número de espines por vuelta (N). Vemos en estas figuras que existen valores críticos del parámetro X_N para los cuales los ordenamientos ferromagnéticos o antiferromagnético se vuelven inestables, adoptando el sistema un orden helicoidal como estado fundamental. Los valores críticos, antes mencionados, los mostramos en las figuras 4, 5 y 6. En el caso de que el $\operatorname{sgn}(J_1) = -1$ los X_N críticos tienen

diferente signo, dependiendo de la paridad de N , lo cual sugiere mostrar por separado los resultados obtenidos para N par e impar. En estas figuras graficamos además la función

$$X_N^{\text{crítico}} = \begin{cases} -\frac{1}{N^2}, & \text{si } \text{sgn}(J_1) = +1 \\ (-1)^{N+1} \frac{1}{N^2}, & \text{si } \text{sgn}(J_1) = -1, \end{cases} \quad (4-4)$$

la cual es la dependencia analítica de $X_N^{\text{crítico}}$ como función de N , cuya demostración incluimos en el Apéndice 4. El signo de $X_N^{\text{crítico}}$ es importante, ya que, en el caso $X_N^{\text{crítico}} < 0$, el sistema adopta un orden helicoidal como estado fundamental para todo $X_N < X_N^{\text{crítico}}$; en cambio, si $X_N^{\text{crítico}} > 0$, el orden helicoidal aparece para todo $X_N > X_N^{\text{crítico}}$.

Si nos alejamos del valor crítico de X_N , manteniendonos en la región en que el estado fundamental es helicoidal, los valores para el ángulo entre espines, θ_{min} , tienden a un límite dependiente de N (el número de espines por vuelta en la hélice) y del $\text{sgn}(J_1)$; las figuras 7 y 8 ilustran este comportamiento. En el caso que $\text{sgn}(J_1) = +1$, es decir, cuando la interacción a primeros vecinos es ferromagnética, el signo de $X_N^{\text{crítico}}$ es negativo, por lo tanto los X_N que nos interesan son aún menores, lo que significa que la interacción a N -ésimos vecinos es antiferromagnética. Para este caso el comportamiento del ángulo en la región "asintótica" es:

$$\theta_{\text{min}} \longrightarrow \frac{\pi}{N}, \quad \text{para } X_N \ll X_N^{\text{crítico}}. \quad (4-5)$$

Este comportamiento se debe a que la interacción dominante es la antiferromagnética a N -ésimos vecinos y por lo tanto, el sistema optimiza esta interacción haciendo antiparalelos los espines en vueltas consecutivas, cuyo ángulo es $N\theta_{\text{min}}$ al ser considerados como parejas de N -ésimos vecinos.

En el caso que $\text{sgn}(J_1) = -1$, es decir, interacción a primeros vecinos antiferromagnética, debemos distinguir dos casos de acuerdo a la paridad de N . Si N es par $X_N^{\text{crítico}}$ es negativo, lo que significa que los X_N de la región "asintótica" son menores, implicando que la interacción a N -ésimos vecinos es también antiferromagnética. Si N es impar $X_N^{\text{crítico}}$ es positivo, por tanto los X_N "asintóticos" son mayores, lo que significa que la interacción a N -ésimos vecinos es ferromagnética. En ambos casos el comportamiento límite del ángulo es el mismo, a saber:

$$\theta_{\min} \longrightarrow \frac{(N-1)\pi}{N} \begin{cases} \text{cuando } X_N \ll X_N^{\text{crítico}} & \text{si } N \text{ es par} \\ \text{cuando } X_N \gg X_N^{\text{crítico}} & \text{si } N \text{ es impar.} \end{cases} \quad (4-6)$$

Sin embargo, el comportamiento del sistema es totalmente distinto en uno y en otro caso. Si N es par la interacción dominante es la antiferromagnética a N -ésimos vecinos, por lo tanto el sistema optimiza esta interacción haciendo el ángulo entre espines en vueltas consecutivas, $N\theta_{\min}$, tender a $(N-1)\pi$. Como N es par, el ángulo resulta equivalente a π , es decir, los espines en vueltas consecutivas tienden a ser antiparalelos. Si N es impar, la interacción dominante es la ferromagnética a N -ésimos vecinos, por lo tanto, al hacer el ángulo $N\theta_{\min}$ tender a $(N-1)\pi$, con N impar, el ángulo resulta equivalente a 2π . Esto hace que los espines en vueltas consecutivas tiendan a ser paralelos, logrando el sistema optimizar la interacción ferromagnética dominante, de esta manera.

Las figuras 9 a la 18 muestran la relación de dispersión en función del vector de onda k . Consideramos diferentes razones entre las interacciones (X_N), distintos número de espines por vuelta (N) y las dos posibilidades de signo de la primera interacción (J_1). Podemos comparar estos resultados con los obtenidos en el capítulo II, para el mismo sistema, usando el formalismo de Trias e Yndurain. Las relaciones de dispersión obtenidas con nuestro formalismo están bien definidas en todo

el espacio k , es decir, la frecuencia no toma valores negativo, lo que caracteriza la inestabilidad del estado ferromagnético en el formalismo del capítulo II. Sin embargo, aparece un efecto nuevo: en las relaciones de dispersión ω tiene un mínimo, con valor de $\omega = 0$, para $ka = \theta_{\min}$. Este es un resultado general para todos los sistemas con coordinación dos dentro de nuestro formalismo, incluimos su demostración en el Apéndice 5. Podemos entender este efecto en base a que superponer una excitación con la periodicidad del estado fundamental con orden helicodal, no puede tener costo energético.

3. Discusión y Conclusiones.

El análisis anterior nos ha permitido ejemplificar las posibilidades que abre el formalismo desarrollado en el capítulo III. El $\text{sgn}(J_1)$ y N caracterizan el sistema, sin embargo, el parámetro X_N , que es la razón entre las interacciones, puede ser variado externamente, por ejemplo, por presión sobre el eje de la hélice, ya que al variar la distancia entre vueltas consecutivas cambia la magnitud de la interacción J_N , y por lo tanto X_N . El hecho que X_N pueda ser variado hace interesante conocer el comportamiento del sistema como función de este parámetro, lo cual motivó el estudio de las diferentes magnitudes en función de éste.

Uno de los resultados más relevantes es la existencia de valores críticos de la razón X_N , para los cuales los ordenamientos magnéticos convencionales, (ferromagnetismo o antiferromagnetismo), se hacen inestables. Los resultados analíticos obtenidos para la dependencia en N de los valores críticos concuerdan con los encontrados en la literatura^{(45),(46),(47)}, para la cadena lineal con interacciones a primeros y segundos vecinos ($N = 2$). Sin embargo, un trabajo reciente⁽⁴⁸⁾, en

el que se estudian estos sistemas helicoidales usando un Hamiltoniano electrónico y considerando explícitamente la integral de intercambio como el mecanismo de las interacciones, mantiene el acuerdo en el caso par, pero corrige nuestro resultado en el caso N impar.

Los límites encontrados para θ_{min} , en la región de orden helicoidal, muestran una tendencia del sistema a estabilizar estructuras conmensuradas con la periodicidad de la hélice. Este resultado lo encontramos en ausencia de anisotropía y como se sabe que incorporarla estabiliza aún más las estructuras conmensuradas, podemos concluir que este tipo de estructuras son las más estables en el caso en que los ordenamientos ferromagnéticos o antiferromagnético son inestables.

Las relaciones de dispersión obtenidas con nuestro formalismo están siempre bien definidas, es decir, ω es siempre mayor o igual a cero, en contraste con lo que sucedía con los resultados de Trias e Yndurain. Los valores nulos en la relación de dispersión encontrados para $ka = \theta_{\text{min}}$, donde θ_{min} es el ángulo entre espines consecutivos que adopta el sistema para minimizar la energía por sitio, no deben ser entendidos como degeneración del estado fundamental, sino como que la superposición de una excitación de la misma periodicidad de la estructura inicial produce una rotación rígida de la configuración, y por lo tanto el estado resultante es el mismo que el inicial. Los mínimos locales en la relación de dispersión son estado metaestables del sistema que se presentan para excitaciones con $ka = n\theta_{\text{min}}$, con $n = 2, 3, 4, \dots$, es decir para excitaciones con longitud de onda conmensurada con la periodicidad del arreglo helicoidal fundamental, ratificando nuevamente la mayor estabilidad de las estructuras conmensuradas.

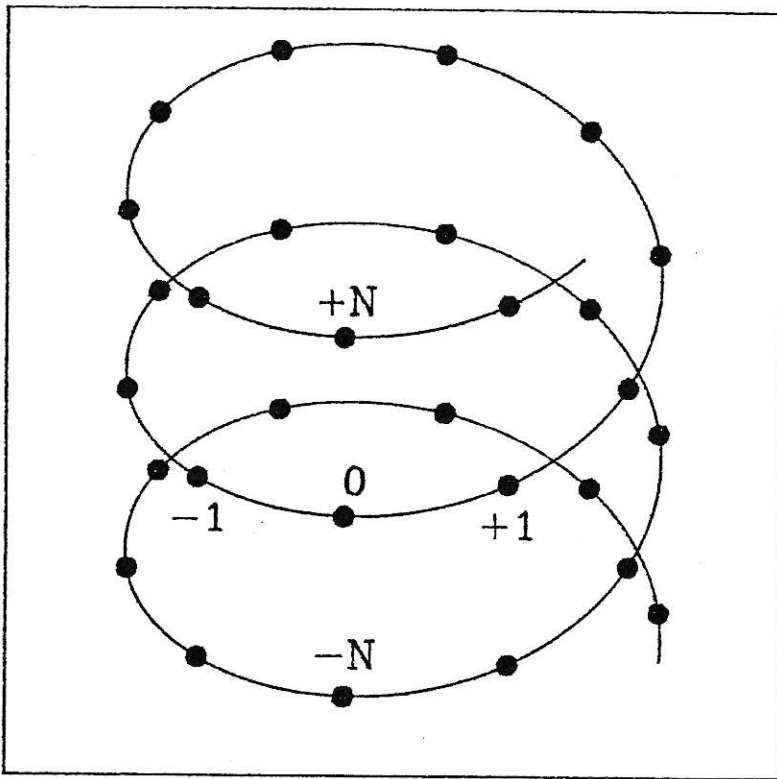


FIGURA 1. Mostramos una sección de un cadena helicoidal con $N = 10$ espines por vuelta. El espín en el sitio etiquetado por cero interactúa con los espines en los sitios ± 1 y $\pm N$.

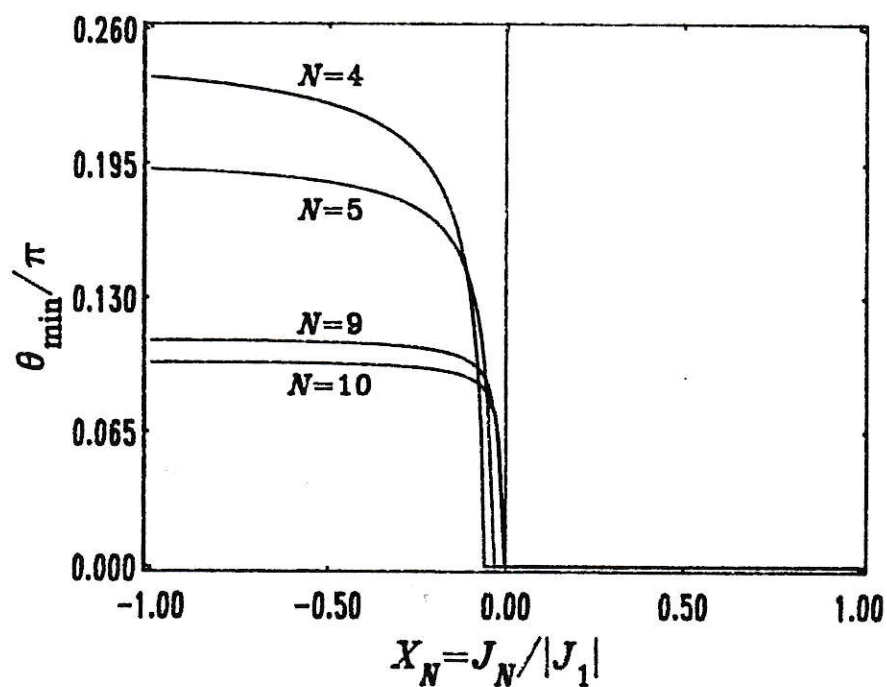


FIGURA 2. Graficamos el ángulo que minimiza la energía por sitio (θ_{\min}/π) como función de X_N para cuatro diferentes valores del número de espines por vuelta (N). La interacción a primeros vecinos es ferromagnética, es decir, $\text{sgn}(J_1) = +1$.

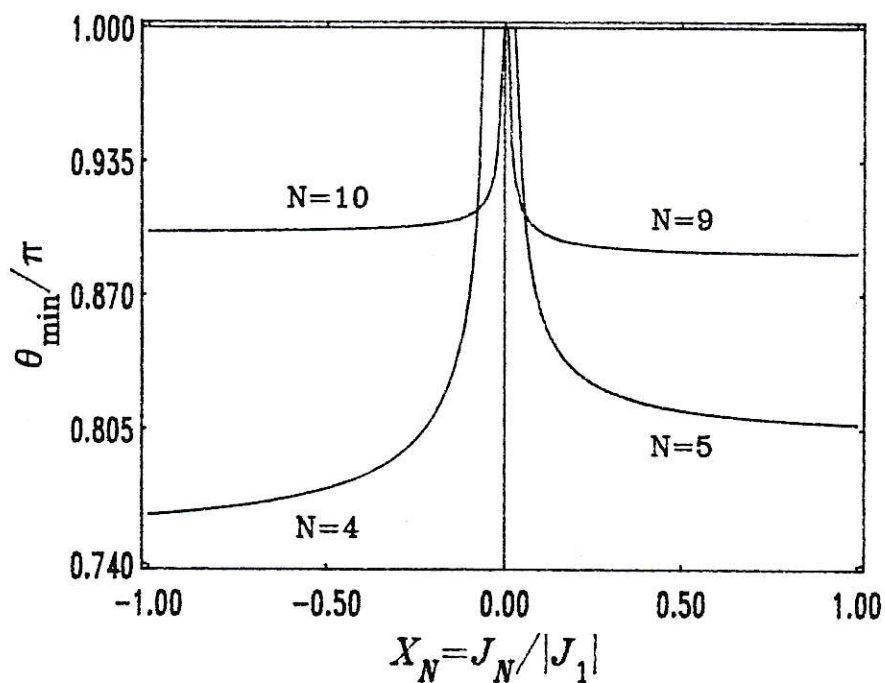


FIGURA 3. Graficamos el ángulo que minimiza la energía por sitio (θ_{\min}/π) como función de X_N para cuatro diferentes valores del número de espines por vuelta (N). La interacción a primeros vecinos es antiferromagnética, es decir, $\text{sgn}(J_1) = -1$.

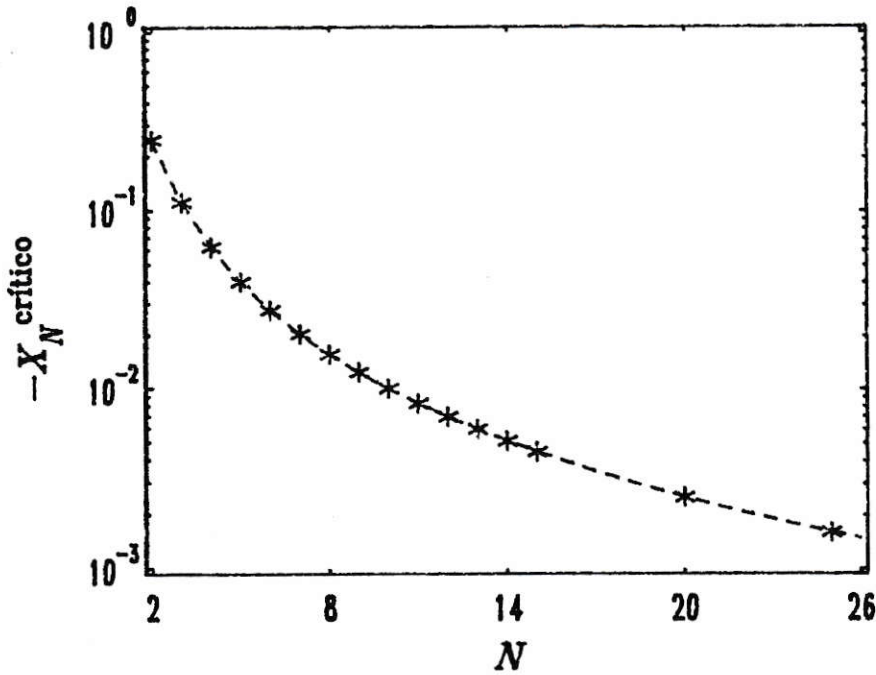


FIGURA 4. Valores críticos de X_N como función del número de espines por vuelta (N). La interacción a primeros vecinos es ferromagnética, es decir, $\text{sgn}(J_1) = +1$. Los asteriscos corresponden a los valores determinados del cálculo de θ_{min} como función de X_N , y la línea segmentada corresponde al resultado analítico.

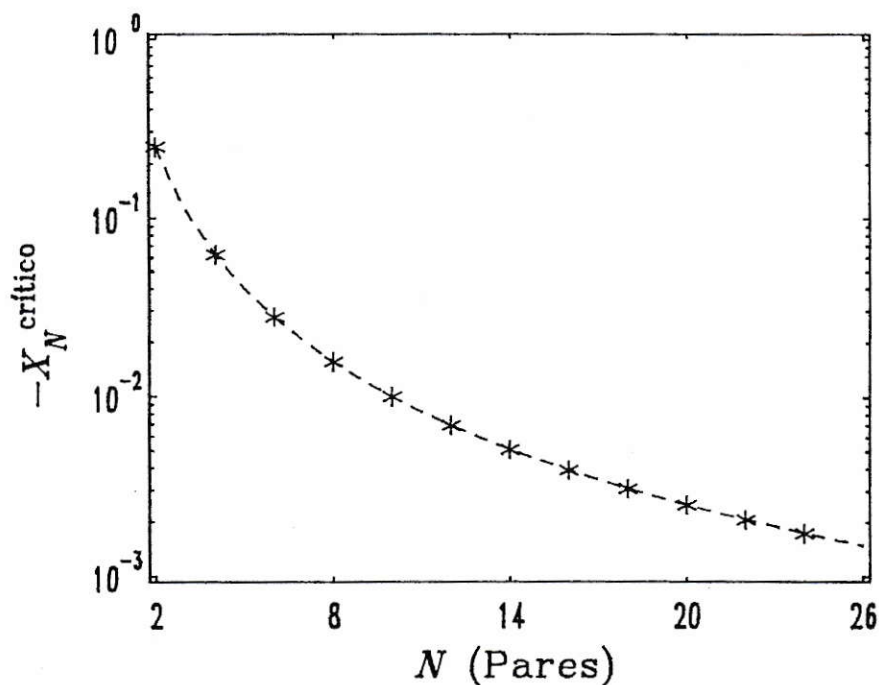


FIGURA 5. Valores críticos de X_N como función del número de espines por vuelta (N), para N par. La interacción a primeros vecinos es antiferromagnética, es decir, $\text{sgn}(J_1) = -1$. Los asteriscos corresponden a los valores determinados del cálculo de θ_{\min} como función de X_N , y la línea segmentada corresponde al resultado analítico.

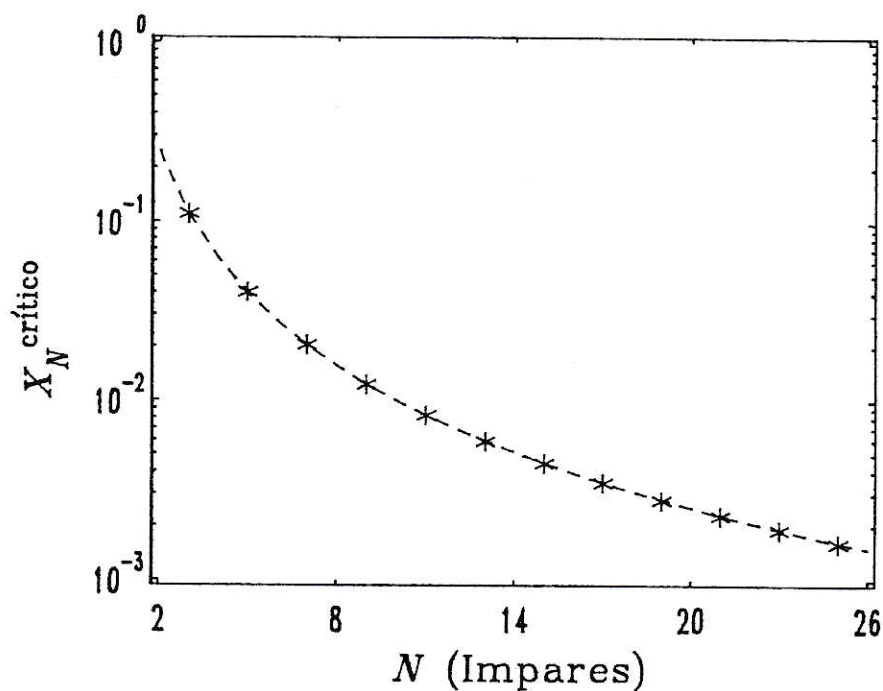


FIGURA 6. Valores críticos de X_N como función del número de espines por vuelta (N), para N impar. La interacción a primeros vecinos es antiferromagnética, es decir, $\text{sgn}(J_1) = -1$. Los asteriscos corresponden a los valores determinados del cálculo de θ_{min} como función de X_N , y la línea segmentada corresponde al resultado analítico.

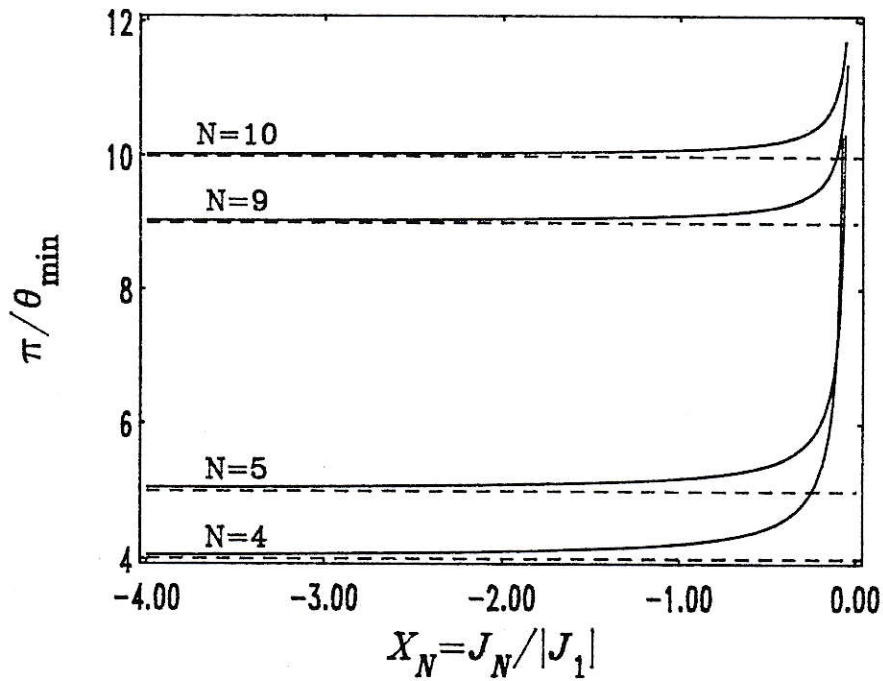


FIGURA 7. Comportamiento de π/θ_{\min} como función de X_N en el caso que $\text{sgn}(J_1) = +1$. La región de X_N que nos interesa es $X_N \ll X_N^{\text{crítico}}$. Incluimos cuatro curvas que corresponden a diferentes valores del número de espines por vuelta (N). Podemos ver que para todas ellas $\theta_{\min} \rightarrow \pi/N$ en la región de interés.

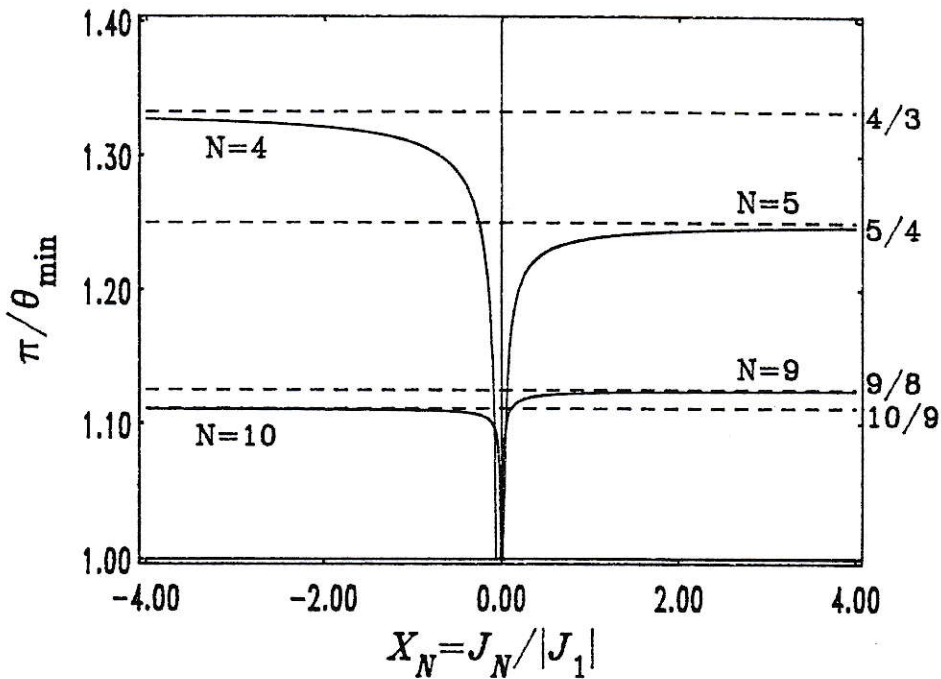


FIGURA 8. Comportamiento de π/θ_{\min} como función de X_N en el caso que $\text{sgn}(J_1) = -1$. Las regiones de X_N que nos interesan son: $X_N \ll X_N^{\text{crítico}}$, cuando N es par; y $X_N \gg X_N^{\text{crítico}}$, cuando N es impar. Incluimos cuatro curvas que corresponden a diferentes valores del número de espines por vuelta (N). Podemos ver que para todas ellas $\theta_{\min} \rightarrow (N-1)\pi/N$ en la región de interés.

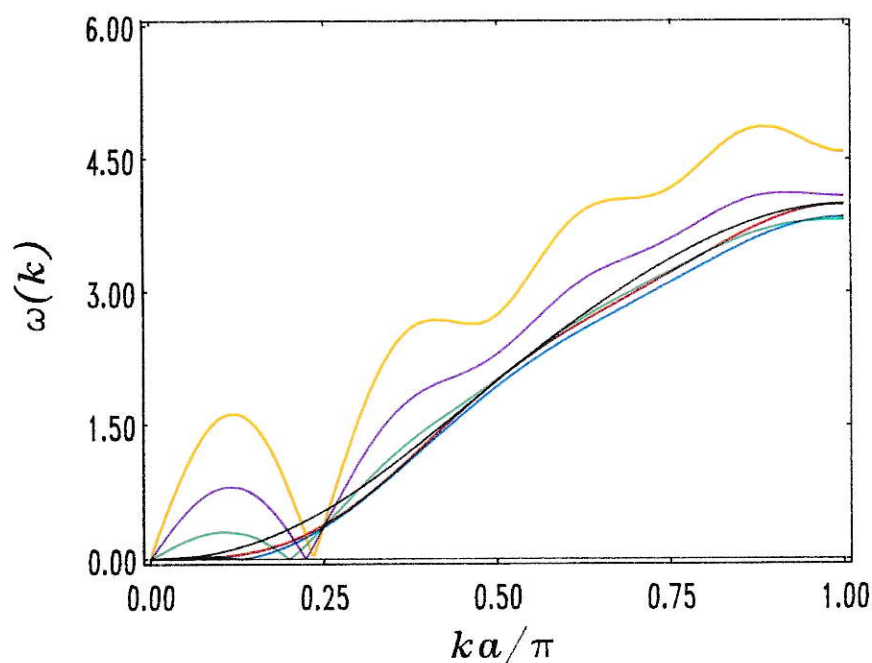


FIGURA 9. Relaciones de dispersión de magnones para una hélice con 4 espines por vuelta y $\text{sgn}(J_1) = +1$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la razón X_4 , teniendo en cuenta que $X_4 = -0.01$ para la curva en negro, $X_4 = -0.05$ para la curva en rojo, $X_4 = -0.1$ para la curva en azul, $X_4 = -0.25$ para la curva en verde, $X_4 = -0.5$ para la curva en violeta y $X_4 = -0.9$ para la curva en amarillo.

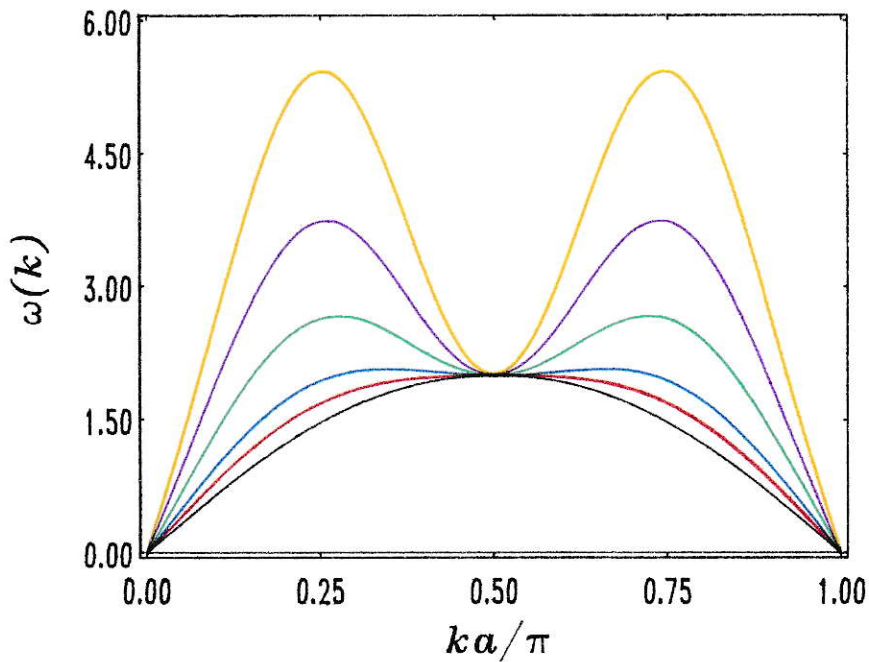


FIGURA 10. Relaciones de dispersión de magnones para una hélice con 4 espines por vuelta y $\text{sgn}(J_1) = -1$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la razón X_4 , teniéndose que $X_4 = +0.01$ para la curva en negro, $X_4 = +0.05$ para la curva en rojo, $X_4 = +0.1$ para la curva en azul, $X_4 = +0.25$ para la curva en verde, $X_4 = +0.5$ para la curva en violeta y $X_4 = +0.9$ para la curva en amarillo.

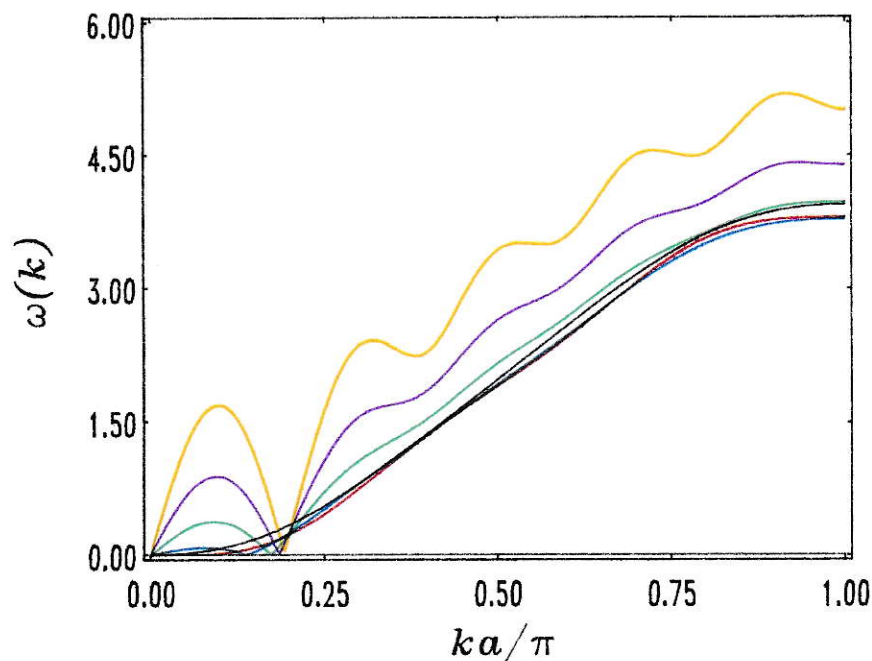


FIGURA 11. Relaciones de dispersión de magnones para una hélice con 5 espines por vuelta y $\text{sgn}(J_1) = +1$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la razón X_5 , teniéndose que $X_5 = -0.01$ para la curva en negro, $X_5 = -0.05$ para la curva en rojo, $X_5 = -0.1$ para la curva en azul, $X_5 = -0.25$ para la curva en verde, $X_5 = -0.5$ para la curva en violeta y $X_5 = -0.9$ para la curva en amarillo.

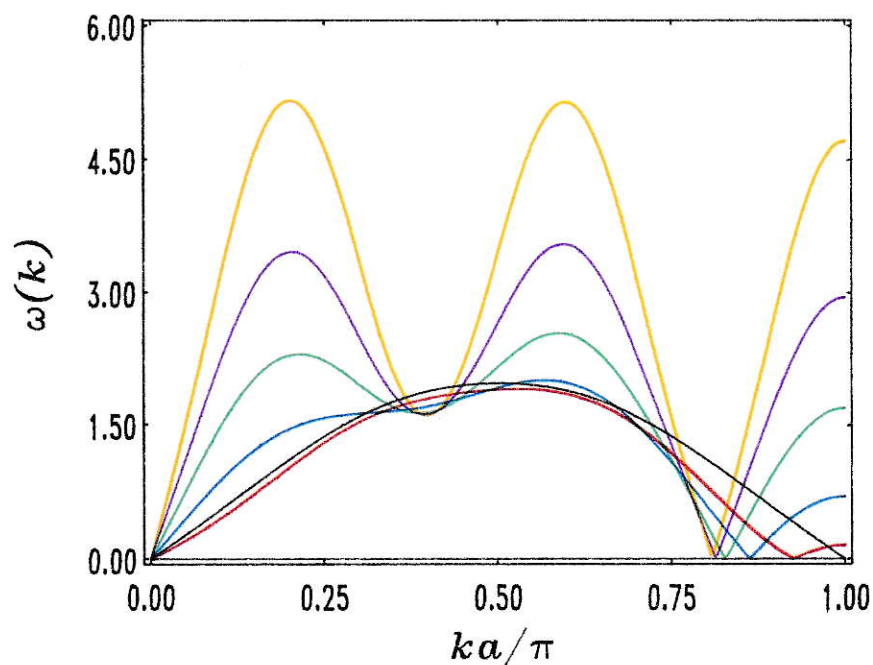


FIGURA 12. Relaciones de dispersión de magnones para una hélice con 5 espines por vuelta y $\text{sgn}(J_1) = -1$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la razón X_5 , teniéndose que $X_5 = +0.01$ para la curva en negro, $X_5 = +0.05$ para la curva en rojo, $X_5 = +0.1$ para la curva en azul, $X_5 = +0.25$ para la curva en verde, $X_5 = +0.5$ para la curva en violeta y $X_5 = +0.9$ para la curva en amarillo.

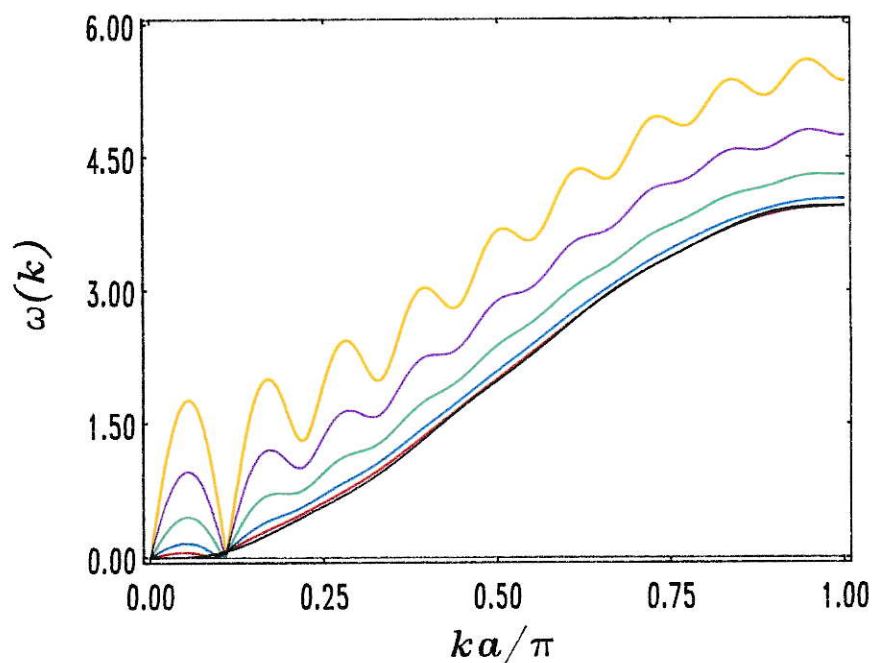


FIGURA 13. Relaciones de dispersión de magnones para una hélice con 9 espines por vuelta y $\text{sgn}(J_1) = +1$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la razón X_9 , teniendo en cuenta que $X_9 = -0.01$ para la curva en negro, $X_9 = -0.05$ para la curva en rojo, $X_9 = -0.1$ para la curva en azul, $X_9 = -0.25$ para la curva en verde, $X_9 = -0.5$ para la curva en violeta y $X_9 = -0.9$ para la curva en amarillo.

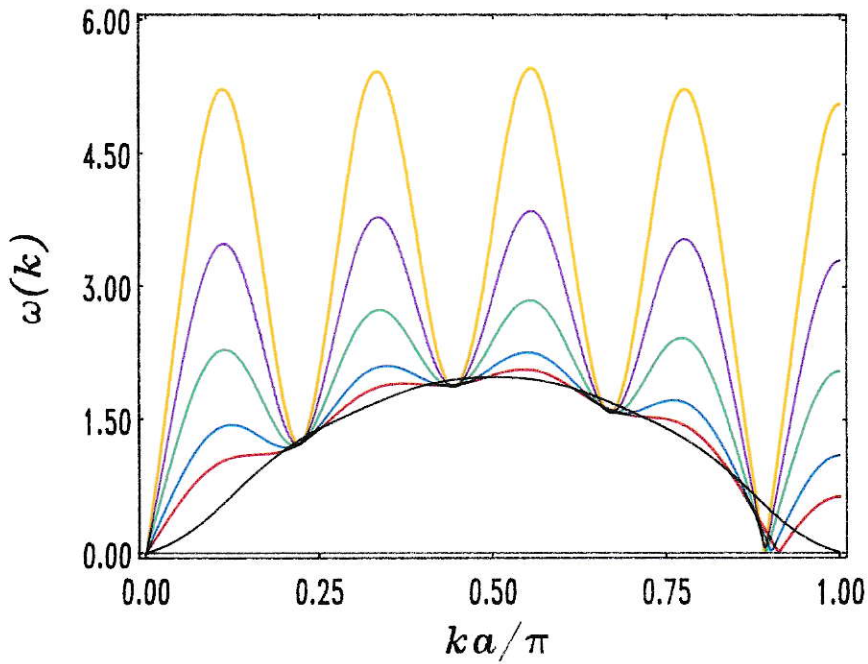


FIGURA 14. Relaciones de dispersión de magnones para una hélice con 9 espines por vuelta y $\text{sgn}(J_1) = -1$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la razón X_9 , teniéndose que $X_9 = +0.01$ para la curva en negro, $X_9 = +0.05$ para la curva en rojo, $X_9 = +0.1$ para la curva en azul, $X_9 = +0.25$ para la curva en verde, $X_9 = +0.5$ para la curva en violeta y $X_9 = +0.9$ para la curva en amarillo.

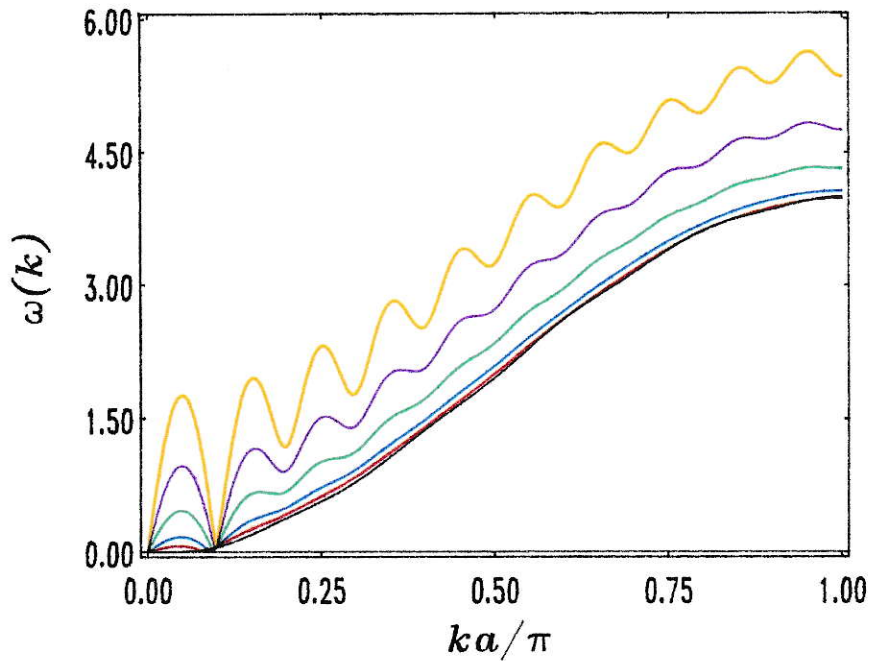


FIGURA 15. Relaciones de dispersión de magnones para una hélice con $N = 10$ y $\text{sgn}(J_1) = +1$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la razón X_{10} , teniéndose que $X_{10} = -0.01$ para la curva en negro, $X_{10} = -0.05$ para la curva en rojo, $X_{10} = -0.1$ para la curva en azul, $X_{10} = -0.25$ para la curva en verde, $X_{10} = -0.5$ para la curva en violeta y $X_{10} = -0.9$ para la curva en amarillo.

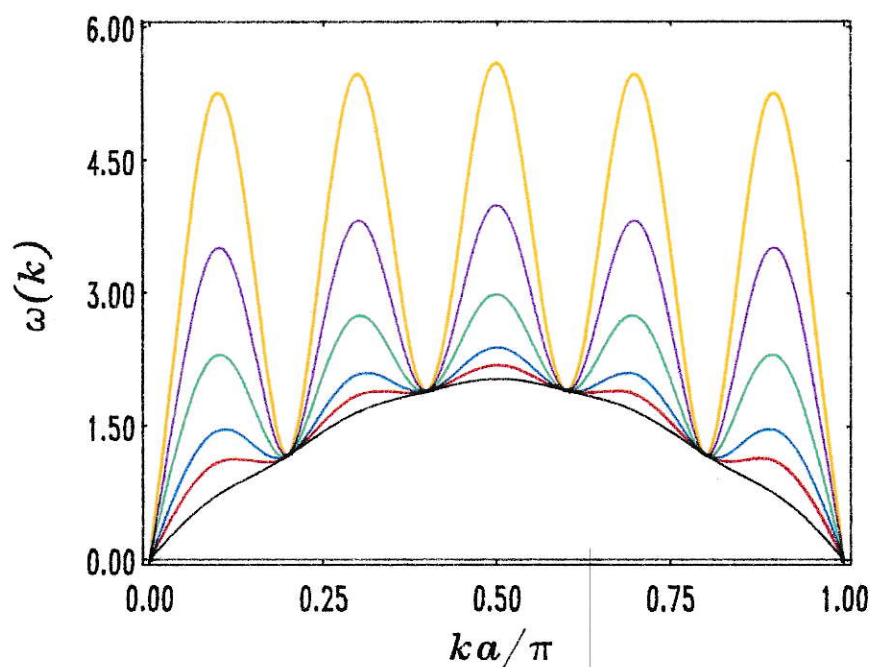


FIGURA 16. Relaciones de dispersión de magnones para una hélice con $N = 10$ y $\text{sgn}(J_1) = -1$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la razón X_{10} , teniéndose que $X_{10} = +0.01$ para la curva en negro, $X_{10} = +0.05$ para la curva en rojo, $X_{10} = +0.1$ para la curva en azul, $X_{10} = +0.25$ para la curva en verde, $X_{10} = +0.5$ para la curva en violeta y $X_{10} = +0.9$ para la curva en amarillo.

V. APLICACION A SISTEMAS CON INTERACCIONES DE MEDIANO ALCANCE

1. Sistemas con interacción a primeros, segundos y terceros vecinos.

El estudio de un sistema descrito por el Hamiltoniano de Heisenberg con interacciones de largo alcance presenta complicaciones, tanto analíticas como numéricas, difíciles de superar con los tratamientos usuales. Nuestro formalismo nos da la posibilidad de tratar el problema, en la aproximación de la red de Bethe, sin grandes dificultades. Sin embargo, antes de pasar al estudio a las interacciones de largo alcance, las cuales trataremos en el capítulo VI, trataremos el caso de interacciones de mediano alcance. En particular nos limitamos a interacciones hasta terceros vecinos. Nuestra limitación, de considerar a lo más las tres primeras interacciones no nulas, se debe a dos razones. La primera es que existen resultados del año 1986, Mesías y Vogel⁽⁴⁹⁾, para sistemas unidimensionales finitos incluyendo tres interacciones, con los cuales podemos comparar nuestros resultados. La segunda razón es que el espacio de parámetros de las tres interacciones puede reducirse a un espacio bidimensional más $\text{sgn}(J_1)$, que sólo toma dos valores, permitiéndonos estudiar en forma global la dependencia de las diferentes magnitudes usando gráficos tridimensionales. Si incluimos cuatro a más interacciones el espacio de parámetros aumenta de dimensión, impidiendo poder analizarlo globalmente; tenemos entonces que fijar algunos parámetros y variar otros en forma separada.

Los sistemas que nos interesan son redes de Bravais, las cuales aproximamos por

redes de Bethe. En cada sitio se ubican espines y el Hamiltoniano del sistema es el de Heisenberg. Cada espín interactúa sólo con sus primeros, segundos y terceros espines vecinos más cercanos. La magnitud y el signo de las tres diferentes interacciones no están correlacionadas, es decir, estudiamos todas las posibles combinaciones de tres interacciones. Incluir interacciones con espines ubicados a lo más a tres vecinos de distancia es lo que definimos como interacciones de mediano alcance espacial.

Para estudiar el sistema antes propuesto en el contexto de nuestro formalismo general, consideramos redes de Bethe de coordinación c arbitraria. En la práctica nos concentramos exclusivamente en las coordinaciones con sentido físico, y definimos las interacciones de la siguiente manera:

$$V_n = \begin{cases} J_1, & \text{si } n = 1, \\ J_2, & \text{si } n = 2, \\ J_3, & \text{si } n = 3, \\ 0, & \text{si } n \geq 4. \end{cases} \quad (5-1)$$

2. Resultados.

Obtenemos a continuación el ángulo entre espines consecutivos en el estado fundamental como función de las interacciones; para ello minimizamos la energía por sitio, dada por la relación (3-30). La forma que adopta la energía por sitio en este caso es:

$$\mathcal{E}(\theta, k = 0) = -\frac{1}{2}|J_1|Sc \left(\text{sgn}(J_1) \cos(\theta) + \alpha(c-1) \cos(2\theta) + \beta(c-1)^2 \cos(3\theta) \right), \quad (5-2)$$

donde $|J_1|$ es el módulo de la primera interacción, el cual resulta ser, nuevamente, sólo un factor de escala de la energía; sgn es la función signo de J_1 , la cual determina si la interacción a primeros vecinos es ferromagnética (+) o antiferromagnética (-);

c es la coordinación; α es el cociente entre la interacción a segundos vecinos y el módulo de J_1 ; y β es el cociente entre la interacción a terceros vecinos y el módulo de J_1 . Estas últimas definiciones las resumimos en las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{J_2}{|J_1|}, \\ \beta &= \frac{J_3}{|J_1|}.\end{aligned}\tag{5-3}$$

El $\text{sgn}(J_1)$, α y β , son los parámetros físicos determinantes.

En las figuras 1 a 18 vemos el comportamiento del ángulo entre espines consecutivos (θ_{min}), el cual caracteriza el estado fundamental del sistema, en función de los parámetros α y β . En cada figura consideramos un valor del signo de la interacción a primeros vecinos y un valor para la coordinación. Incluimos además varias figuras que corresponden a ampliaciones o diferentes vistas en el espacio de parámetros, con el objeto de mostrar mejor la estructura presente en cada caso.

Vemos, en las figuras anteriores, que existen conjuntos de pares (α, β) que forman fronteras entre las regiones, en el espacio de parámetros, en las cuales θ_{min} muestra que el ordenamiento del estado fundamental es ferromagnético, antiferromagnético o helicoidal. Estos conjuntos de pares (α, β) son el análogo, para estos sistemas, de los valores críticos del parámetro X_N del capítulo anterior. Podemos notar que algunas fronteras, entre las regiones antes mencionadas, aparecen como "saltos" abruptos en el valor de θ_{min} . Para estudiar la forma de estos "saltos", graficamos cortes de la superficie para $\beta = \text{constante}$ en función de α , y hasta donde la precisión numérica nos permite discernir, existen discontinuidades en θ_{min} como función de α en las fronteras de las regiones. La figura 19 muestra estas discontinuidades para coordinación dos.

Nos interesa mostrar ahora la forma de las regiones, para lo cual utilizamos una

proyección bidimensional de nuestros gráficos anteriores, en las cuales dibujamos sólo las curvas, en el plano $\alpha\beta$, que forman las fronteras entre dichas regiones. Estas curvas corresponden a los conjuntos de pares (α, β) mencionados en el párrafo anterior. Este tipo de figuras son conocidas como diagrama de fase magnética y en los nuestros aparece, en general, tres regiones: la ferromagnética, la antiferromagnética y la helicoidal. Las figuras 20 a 25 corresponden a estos diagramas para diferentes valores del $\text{sgn}(J_1)$ y diferentes coordinaciones. Hemos incluido también para el caso de coordinación dos, los resultados de Mesías y Vogel con el objeto de comparar con los nuestros. Sin embargo, debemos tener en cuenta que los resultados obtenidos por estos autores son para sistemas finitos, lo que introduce una dependencia del número de espines considerados, en los diagramas de fase magnética. Nuestros resultados son para una cadena genuinamente infinita, es decir, no imponemos condiciones de borde periódicas en nuestra solución. Por lo tanto, nuestros resultados son equivalentes al límite en que el número de espines tiende a infinito, de los resultados de estos autores.

Estas figuras nos muestran un resultado importante: en un sistema en que sólo las tres primeras interacciones son no nulas, si $\alpha < -0.5$, es decir, si el cociente entre la interacción a segundos vecinos y el módulo de la interacción a primeros vecinos es menor que cierta cantidad negativa, el estado fundamental no es ni ferromagnético ni antiferromagnético. Queda entonces sólo la posibilidad de orden helicoidal para él. Este resultado es independiente del signo de la primera interacción y depende débilmente de los valores de β y de la coordinación. Sin embargo, el valor $\alpha < -0.5$ impone un límite universal.

Para estudiar el límite del ángulo entre espines, θ_{min} , debemos limitarnos a la

región en que $\alpha < -0.5$, es decir, donde el estado fundamental es helicoidal. Las figuras 26 y 27 ilustran el comportamiento de θ_{\min} en esta región del espacio de parámetros, cada una corresponde a un valor del $\text{sgn}(J_1)$. Incluimos además, varias curvas por figura, las cuales corresponden a diferentes valores de la coordinación. Lo anterior, con el objetivo de ver como influye este parámetro en el valor límite de θ_{\min} . Hemos elegido para nuestras figuras cortes en $\alpha = -1.0$, ya que valores menores para este parámetro sólo disminuyen la rapidez de la convergencia a los valores límites. Existen dos valores a los cuales tiende θ_{\min} dependiendo del signo de β , a saber:

$$\theta_{\min} \rightarrow \begin{cases} \frac{\pi}{3} & \text{cuando } \beta \ll -1 \\ \frac{2\pi}{3} & \text{cuando } \beta \gg +1 \end{cases} \quad (5-6)$$

Estos valores resultan ser independientes del $\text{sgn}(J_1)$ y de la coordinación.

Podemos entender el comportamiento del sistema en el sentido que él optimiza la interacción dominante. Si $\beta \ll -1$, la interacción dominante es la antiferromagnética a terceros vecinos, por tanto los espines que son terceros vecinos tienden a estar antiparalelos, y si por el contrario, $\beta \gg +1$, la interacción dominante es la ferromagnética a terceros vecinos, por tanto los espines que son terceros vecinos tienden a estar paralelos. Lo anterior, teniendo en cuenta que el ángulo entre espines que son terceros vecinos es $3\theta_{\min}$.

Con el propósito de probar las posibilidades del formalismo, reproducimos los resultados de un cálculo hecho por Mesías y Vogel de la energía del estado fundamental antiferromagnético como función de las interacciones a segundos y terceros vecinos, es decir, α y β . Para esto imponemos que el $\text{sgn}(J_1) = -1$, nos restringimos a coordinación dos y graficamos la energía por sitio en función de α para diferentes valores del parámetro β . La figura 28 muestra este cálculo para cinco valores

diferentes de β , incluyendo $\beta = 0$. Podemos observar que la forma de las curvas es esencialmente la misma para todos los valores de β , mostrando sólo una tendencia a un máximo más agudo a medida que β crece. Los máximos de las curvas se mueven hacia valores mayores de α a medida que incrementamos β . Los valores para la energía por sitio en estos máximos primero aumentan, después tienen un máximo y finalmente disminuyen al crecer β . El máximo valor de la energía por sitio en función de β es en $\beta = -0.2$, y esto ocurre para el valor de $\alpha \simeq -0.6$.

Al comparar nuestros resultados con los de Mesías y Vogel⁽⁴⁹⁾ encontramos un acuerdo cualitativo, pero importantes diferencias cuantitativas. Lo primero que debemos tener en cuenta es que nuestro formalismo supone el estado de Néel como el estado fundamental antiferromagnético, lo cual no es correcto desde el punto de vista cuántico. Por otro lado, estos autores resuelven numéricamente el problema cuántico para un sistema finito y extrapolando obtienen el límite para el sistema infinito. Esto les da muy buenos resultados, especialmente en el caso de que la interacción a terceros vecinos es nula, en el cual son capaces de reproducir resultados analíticos. Por todo lo anterior, entendemos el desacuerdo respecto a las energías que nosotros obtenemos, ya que ellos trabajan con $S = 1/2$ muy lejos del límite de ondas de espín, es decir, $S \rightarrow \infty$.

Respecto al máximo de la energía del estado antiferromagnético, estos autores determinan que ocurre para los valores de los parámetros $\beta = 0.0$ y $\alpha = -0.5$. Al buscar este punto en su diagrama de fases magnéticas encontramos que corresponde a un estado fundamental antiferromagnético. Sin embargo, en nuestro diagrama corresponde a un estado fundamental con orden helicoidal. Nosotros determinamos que el máximo ocurre para los valores de los parámetros $\beta = -0.2$ y $\alpha = -0.6$. En

nuestros diagramas este punto corresponde a la región antiferromagnética. Teniendo en cuenta que nos interesa la posición y no el valor del máximo, este desacuerdo resulta difícil de dirimir, ya que, el método de extrapolación usado para evaluar el límite cuando el número de espines tiende a infinito es muy inestable para las curvas con $\beta \neq 0$ según los propios autores⁽⁴⁹⁾.

Las figuras 29 a la 35 muestran la relación de dispersión en función del vector de onda k . En las diferentes figuras ilustramos los resultados con distintas elecciones para las interacciones a segundos y terceros vecinos, (α, β) , el signo de la primera interacción y la coordinación. Esto nos permite una visión global del cambio de la relación de dispersión como función de los diferentes parámetros del sistema. Nuevamente, las relaciones de dispersión obtenidas están bien definidas en todo el espacio k , apareciendo un efecto nuevo para coordinación alta.

En el caso de coordinación dos, $\omega(\theta_{\text{min}} = ka) = 0$, donde θ_{min} es el ángulo entre espines que son primeros vecinos que minimiza la energía por sitio, el cual ya discutimos en el capítulo anterior. En el caso de coordinaciones altas, vale decir seis o doce, y con interacciones en la región de orden helicoidal para el estado fundamental, nos encontramos que para $ka = \theta_{\text{min}}$ las curvas presentan un mínimo menor que para $ka = 0$. Esto nos dice que el estado fundamental con orden helicoidal es inestable frente al congelamiento de un magnón con una periodicidad igual a la del orden helicoidal inicial. Debemos aclarar que en el caso de coordinaciones mayores que dos, no podemos dar una interpretación de simples rotaciones a estas excitaciones de igual periodicidad que el orden helicoidal que se establece. Ello se debe a que las redes de Bethe con coordinaciones mayores que dos no son cadenas lineales, sino estructuras complejas con cierto grado de multidimensionalidad que no tienen

realización en el espacio tridimensional.

3. Discusión y Conclusiones.

Para los sistemas estudiados en este capítulo, es decir, sistemas con sólo las tres primeras interacciones no nulas, no existen muchos resultados ni numéricos ni analíticos debido a las dificultades, formales en el primer caso, y de tiempo de computador en el segundo, para obtenerlos. Por esta razón nuestros resultados, a pesar de no ser cuánticamente exactos, son un primer paso para entender este tipo de sistemas con interacciones competitivas de mediano alcance.

Al estudiar θ_{\min} , es decir, el ángulo entre espines primeros vecinos que minimiza la energía por sitio, como función de $\text{sgn}(J_1)$, α y β , podemos ver la compleja estructura que presenta esta variable, sobresaliendo dos aspectos: 1) Para algunas fronteras entre regiones con distinto estado fundamental, el paso entre diferentes estados no es continuo, sino que presenta transiciones abruptas para pequeñas variaciones en los parámetros. Esta situación se manifiesta principalmente entre antiferromagnetismo y orden helicoidal en la región en que $\theta_{\min} \rightarrow \pi/3$, entre antiferromagnetismo y ferromagnetismo, y también, entre ferromagnetismo y orden helicoidal en la región en que $\theta_{\min} \rightarrow 2\pi/3$. Podemos concluir entonces, que los ordenamientos ferromagnético y antiferromagnético son los más estables. De no ser éste el caso, el sistema pasaría continuamente de estos estados a otros con orden helicoidal, sin gran cambio en el ordenamiento magnético. Esta situación se manifiesta en la frontera entre ferromagnetismo y orden helicoidal en la región en que $\theta_{\min} \rightarrow \pi/3$, en el caso $\text{sgn}(J_1) = +1$, en la cual el ferromagnetismo no le presenta al sistema ninguna ventaja energética respecto de un estado fundamental con orden helicoidal; también en la frontera entre antiferromagnetismo y orden helicoidal

en la región en que $\theta_{\text{min}} \rightarrow 2\pi/3$, en el caso $\text{sgn}(J_1) = -1$. Debemos consignar que los pasos continuos entre los ordenamientos magnéticos convencionales, (ferromagnetismo o antiferromagnetismo), y los estados helicoidales ocurren sólo entre regiones con ordenamientos similares. Sin embargo, este tipo de fronteras continua se hace cada vez más estrecha a medida que la coordinación aumenta.

2) A partir de nuestros resultados podemos concluir que en la región del espacio de parámetros en que el estado fundamental adopta un orden helicoidal, el sistema optimiza la interacción a terceros vecinos. Vale decir, a medida que esta interacción se hace más ferromagnética $\theta_{\text{min}} \rightarrow 2\pi/3$, de manera tal que los espines que son terceros vecinos tienden a estar paralelos, en cambio, cuando la interacción a terceros vecinos es antiferromagnética y a medida que ésta crece en magnitud $\theta_{\text{min}} \rightarrow \pi/3$, de forma que los espines que son terceros vecinos tienden a estar antiparalelos.

Uno de nuestros resultados relevantes son los diagramas de fase magnética que presentamos. Estos determinan no sólo las regiones del espacio de parámetros en que se establece un ordenamiento ferromagnético o antiferromagnético, sino también, podemos distinguir regiones con orden helicoidal, pudiendo así determinar, dadas las interacciones, que tipo de ordenamiento presenta el estado fundamental. El resultado de que una interacción a segundos vecinos antiferromagnética, ($\alpha < -0.5$), induce siempre un orden helicoidal, no es difícil de entender teniendo en cuenta que, una interacción antiferromagnética a segundos vecinos siempre produce frustración, independiente de las otras interacciones presentes. Para evitar estas frustraciones el sistema adopta un orden helicoidal que no satisface completamente a ninguna interacción, pero tampoco frustra completamente a ninguna.

Otro aspecto estudiado en este capítulo fue el máximo de la energía por sitio, en

el caso que la coordinación es dos. Los resultados obtenidos con nuestro formalismo no concuerdan con los obtenidos por Mesías y Vogel, siendo difícil de decidir cual de ellos es el correcto. Por una parte, la solución de estos autores es exacta desde el punto de vista cuántico para un sistema finito, pero su método de extrapolación, para obtener el resultado en el límite de una cadena infinita, es muy inestable en la región de interés. Por la otra, nuestro resultado es para una cadena genuinamente infinita, pero no es cuánticamente exacto. Todo lo anterior, no nos permite una conclusión definitiva sobre ninguno de los dos resultados.

Las relaciones de dispersión obtenidas para coordinaciones dos mantienen la estructura de las encontradas en el capítulo anterior. Sin embargo, en el caso de coordinaciones altas, nos encontramos que las curvas tienen un mínimo absoluto para un magnón con igual periodicidad que el orden helicoidal postulado. Esta inestabilidad del estado fundamental implica que nuestra manera de caracterizar el estado fundamental es incorrecta para estos sistemas de coordinación alta. Es claro que la estructura óptima difiere muy poco de la estructura helicoidal propuesta, ya que es suficiente congelar un magnón con la misma periodicidad que el orden helicoidal, para obtenerla. Debemos adjudicar a las restricciones impuestas, vale decir, que los espines se mantengan esencialmente en el plano perpendicular al eje de la red, que no podamos reproducir la estructura óptima y es necesario reformular el problema para obtener el nuevo estado fundamental.

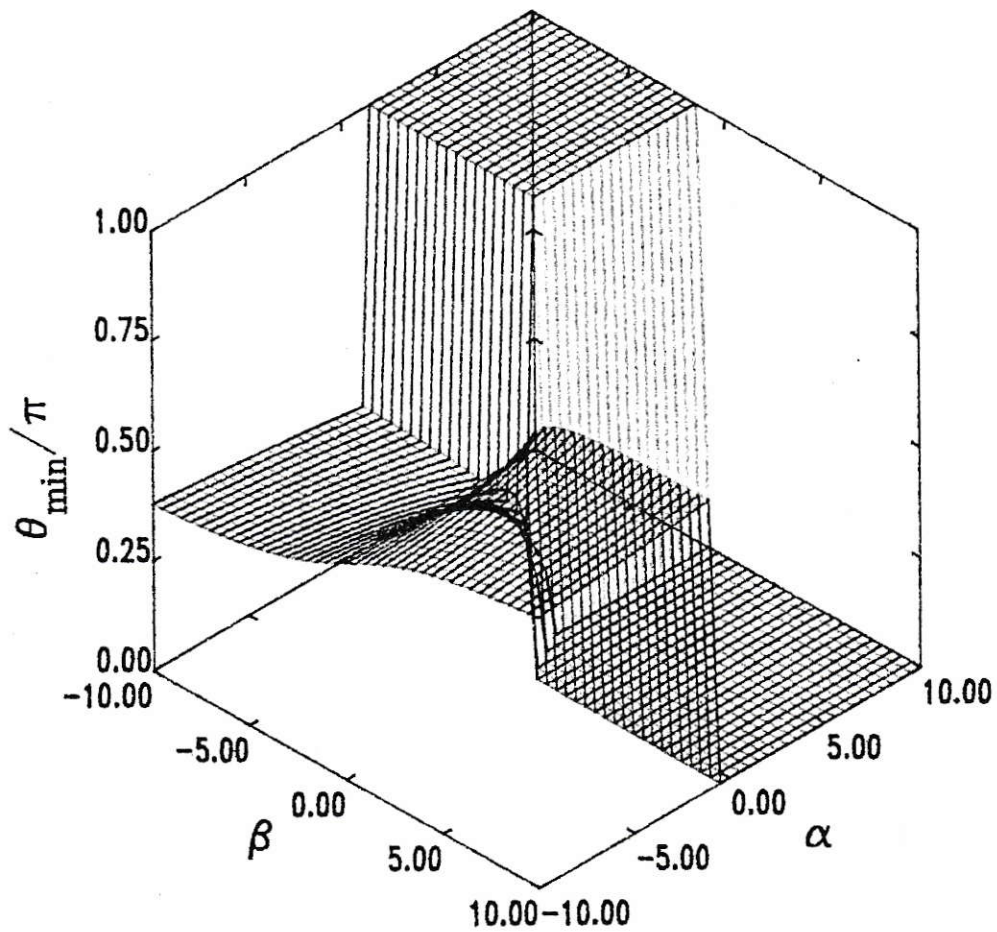


FIGURA 1. Valor del ángulo entre espines consecutivos normalizado a π , es decir, (θ_{\min}/π) , como función de α y β , definidos en la ecuación (5-3). El signo de la interacción a primeros vecinos $\text{sgn}(J_1) = +1$, y el valor de la coordinación $c = 2$.

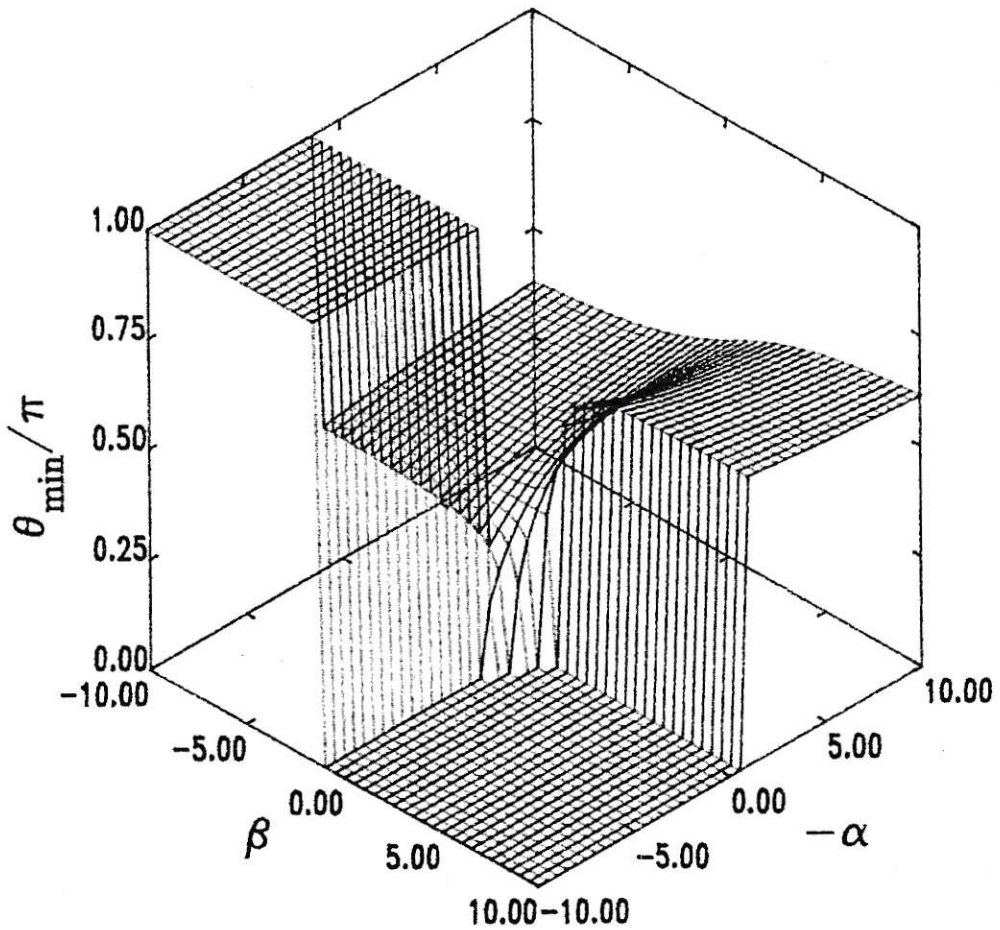


FIGURA 2. El mismo caso anterior, $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 2$, reflejado respecto a un plano, perpendicular al plano (α, β) , que pasa por $\alpha = 0$. En esta vista se aprecia mejor las fronteras entre las regiones ferromagnética, antiferromagnética y de orden helicoidal.

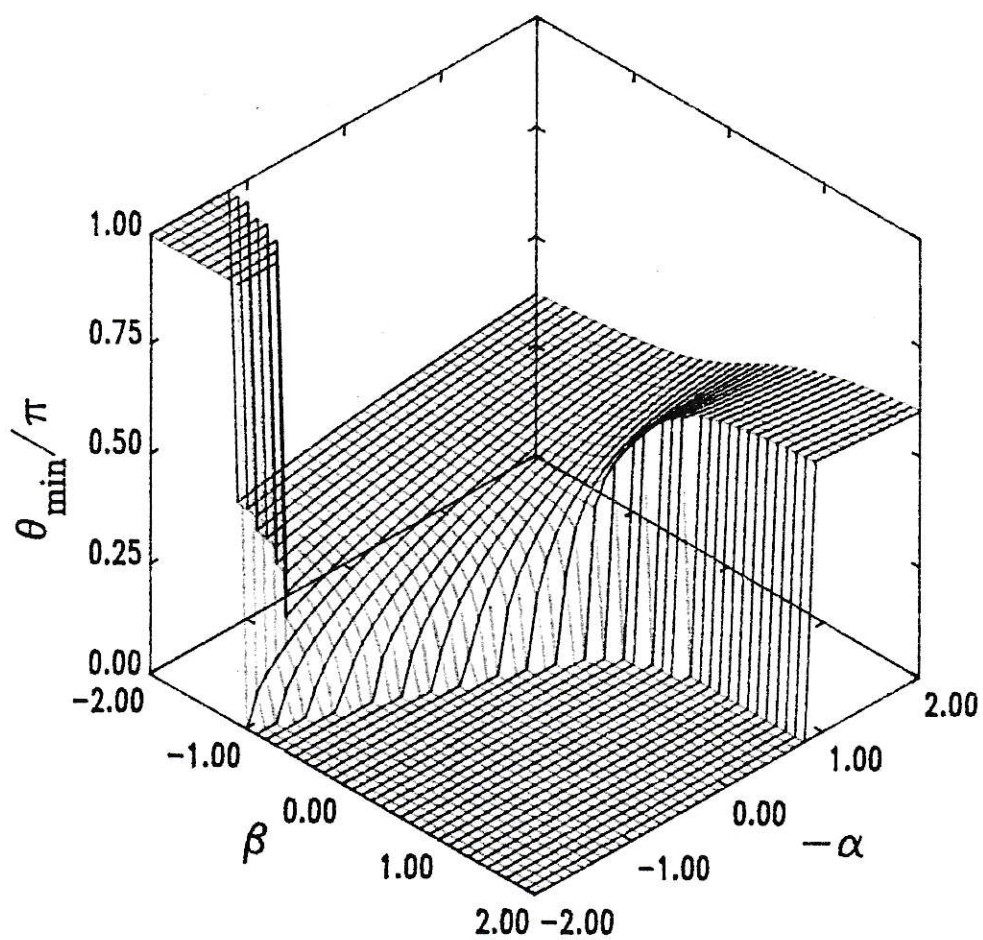


FIGURA 3. Ampliación de la zona central de la figura anterior, los valores de los parámetros son $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 2$.

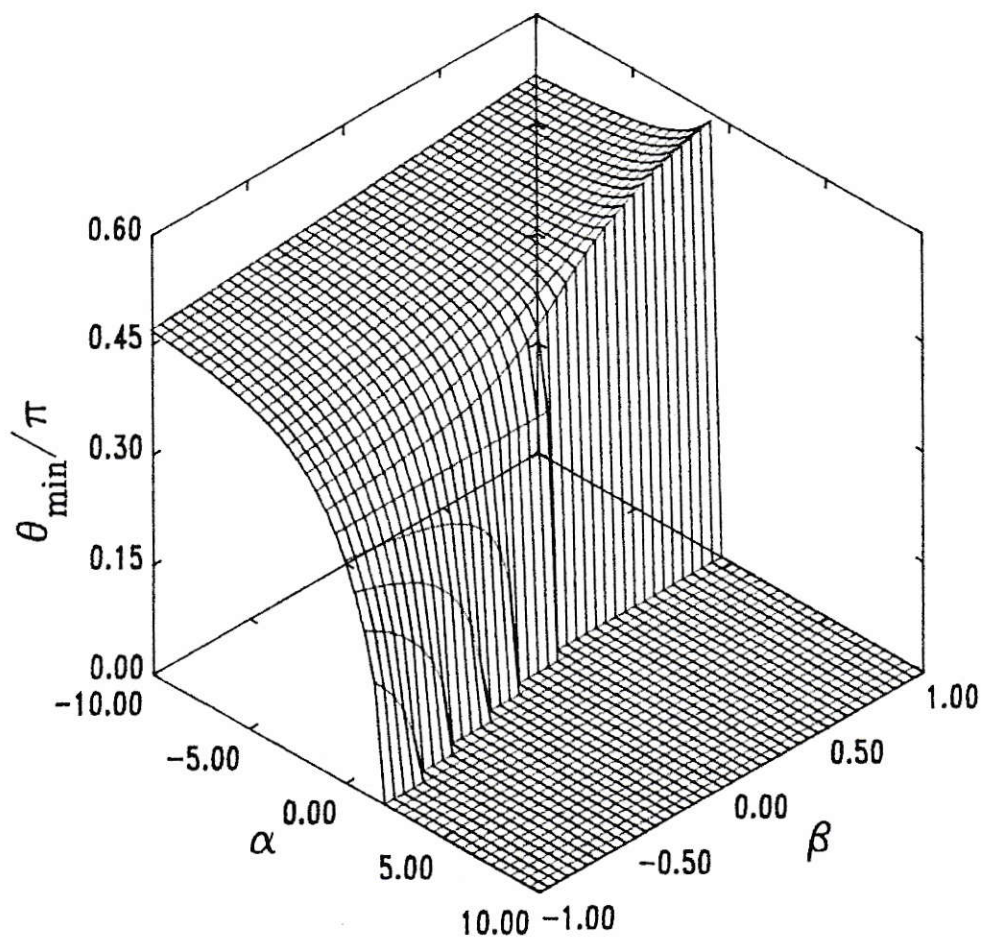


FIGURA 4. En esta figura vemos una ampliación de la frontera entre la región con orden helicoidal y la región ferromagnética, con $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 2$.

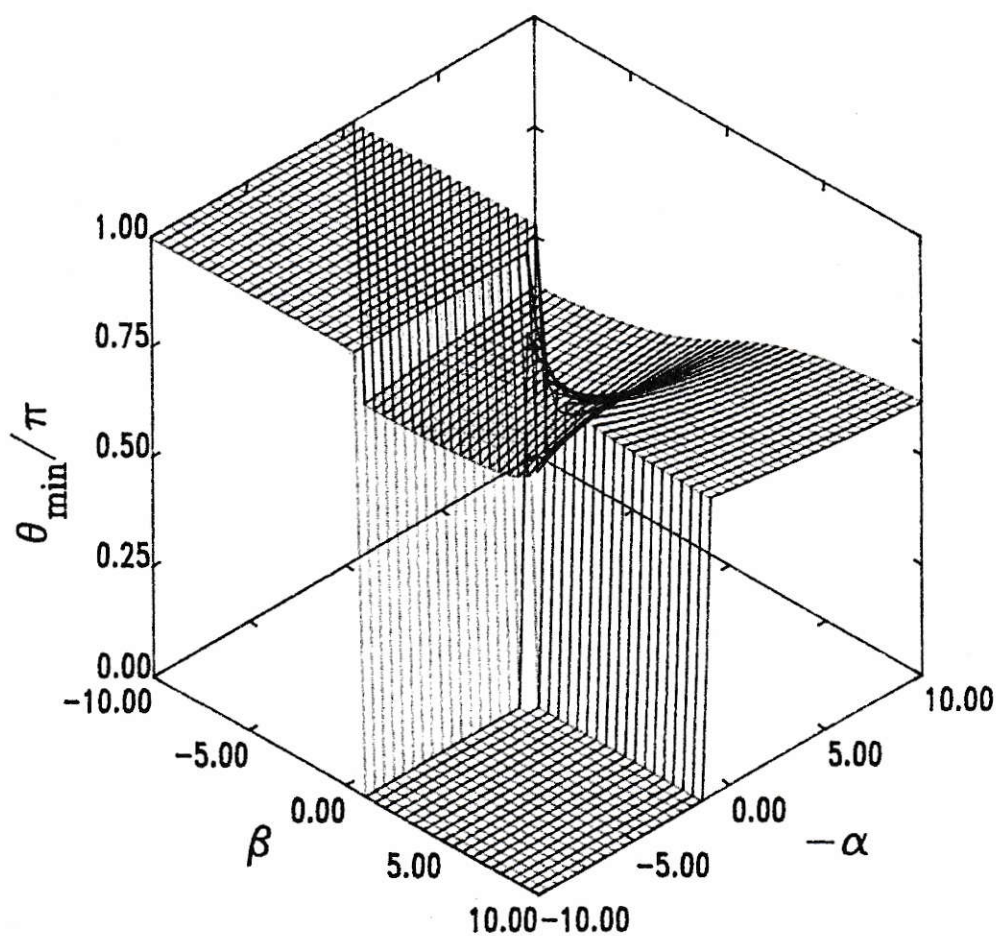


FIGURA 5. Valor del ángulo entre espines consecutivos normalizado a π , es decir, (θ_{\min}/π) , como función de α y β . El signo de la interacción a primeros vecinos $\text{sgn}(J_1) = -1$, y el valor de la coordinación $c = 2$.

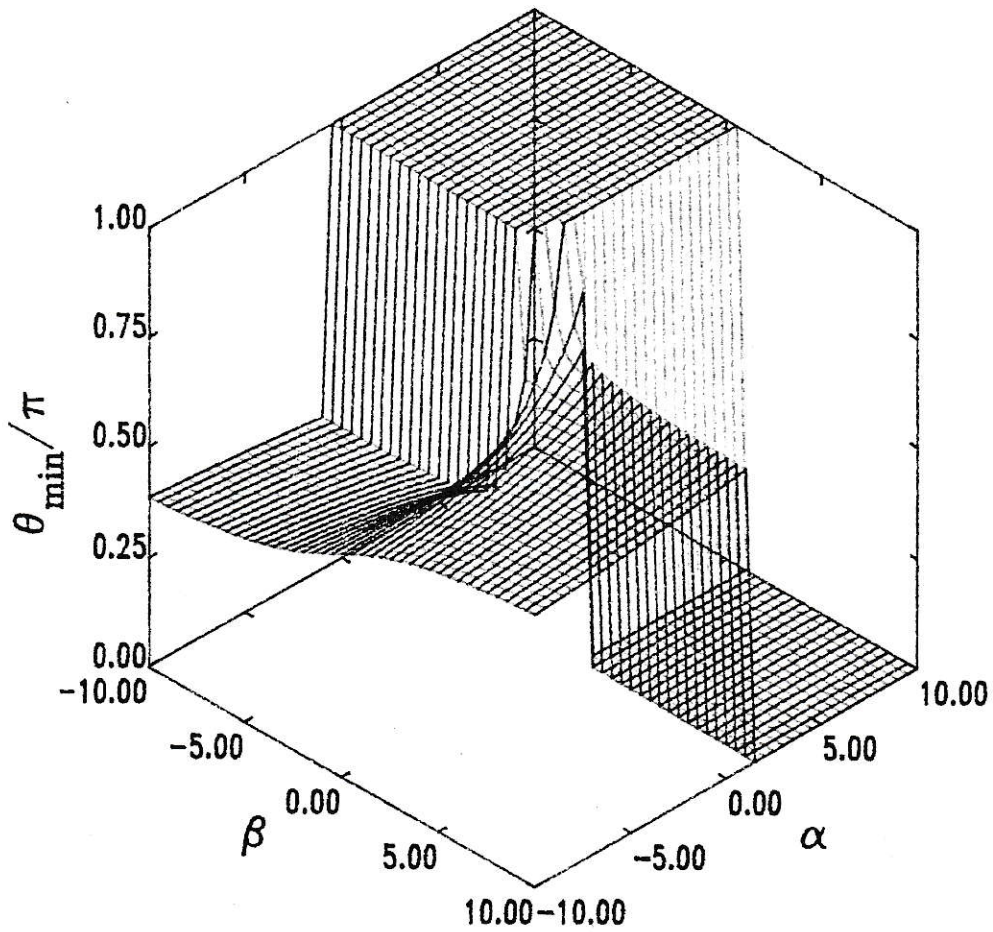


FIGURA 6. El mismo caso anterior, $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 2$, reflejado respecto a un plano, perpendicular al plano (α, β) , que pasa por $\alpha = 0$. En esta vista se aprecia mejor las fronteras entre las regiones ferromagnética, antiferromagnética y de orden helicoidal.

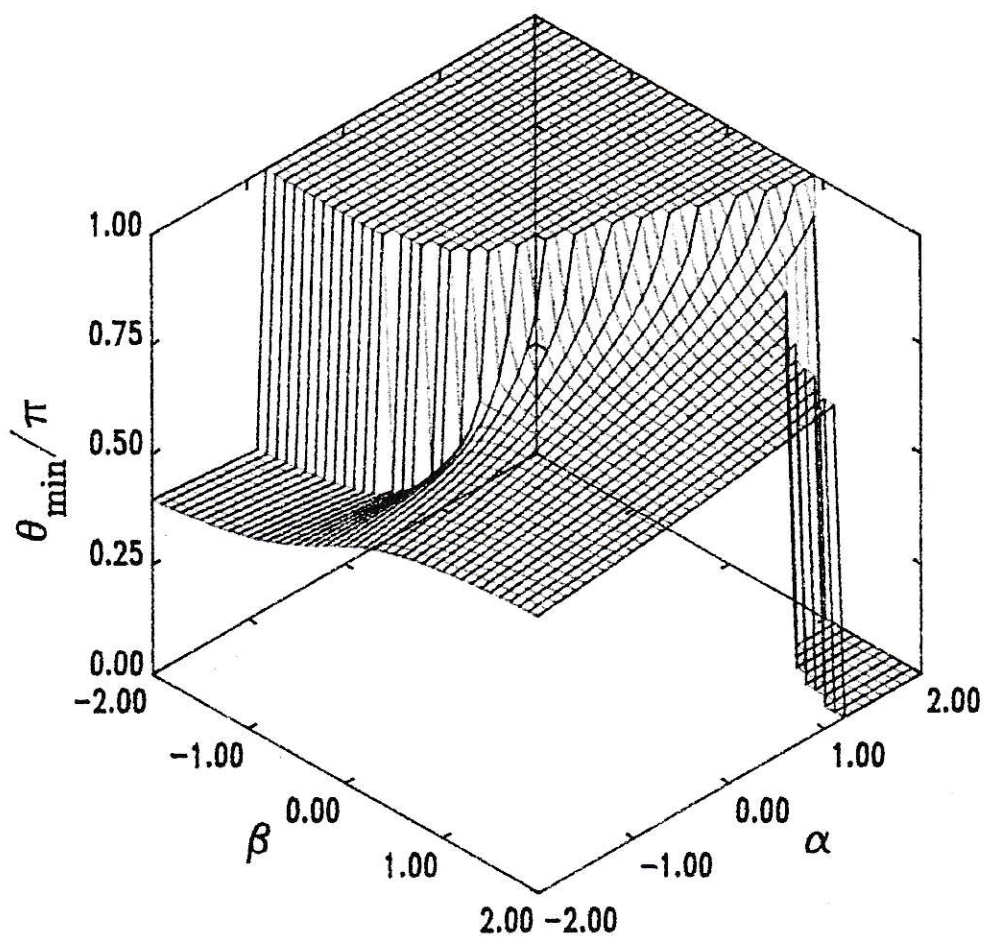


FIGURA 7. Ampliación de la zona central de la figura anterior, los valores de los parámetros son $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 2$.

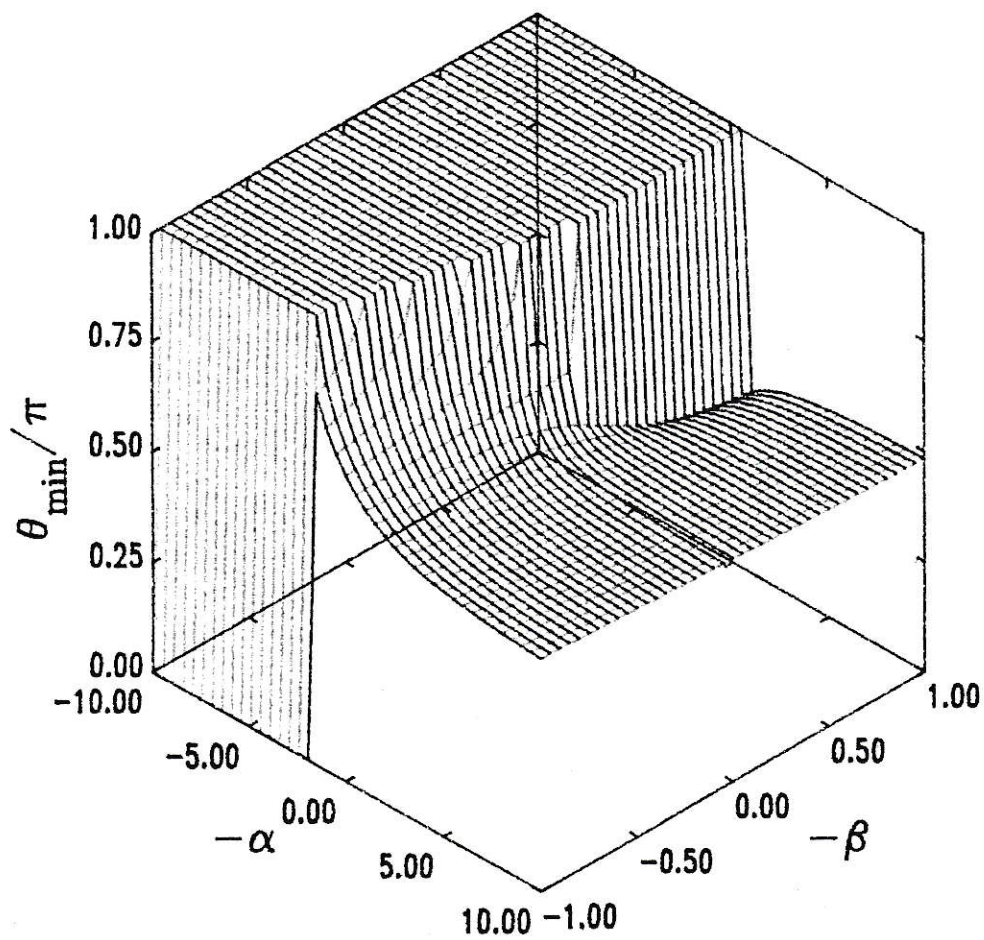


FIGURA 8. Ampliación de la frontera entre la región con orden helicoidal y la región antiferromagnética, con $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 2$.

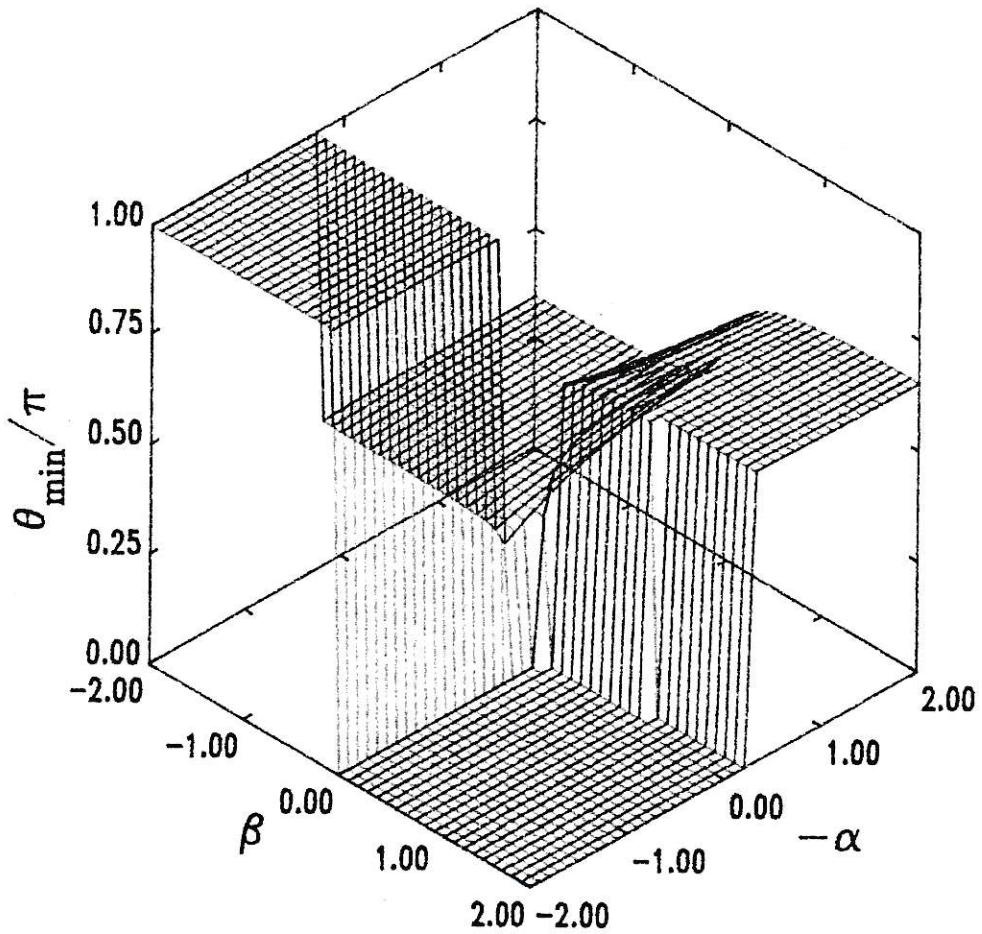


FIGURA 9. Valor del ángulo entre espines consecutivos normalizado a π , es decir, (θ_{\min}/π) , como función de α y β . El signo de la interacción a primeros vecinos $\text{sgn}(J_1) = +1$, y el valor de la coordinación $c = 6$.

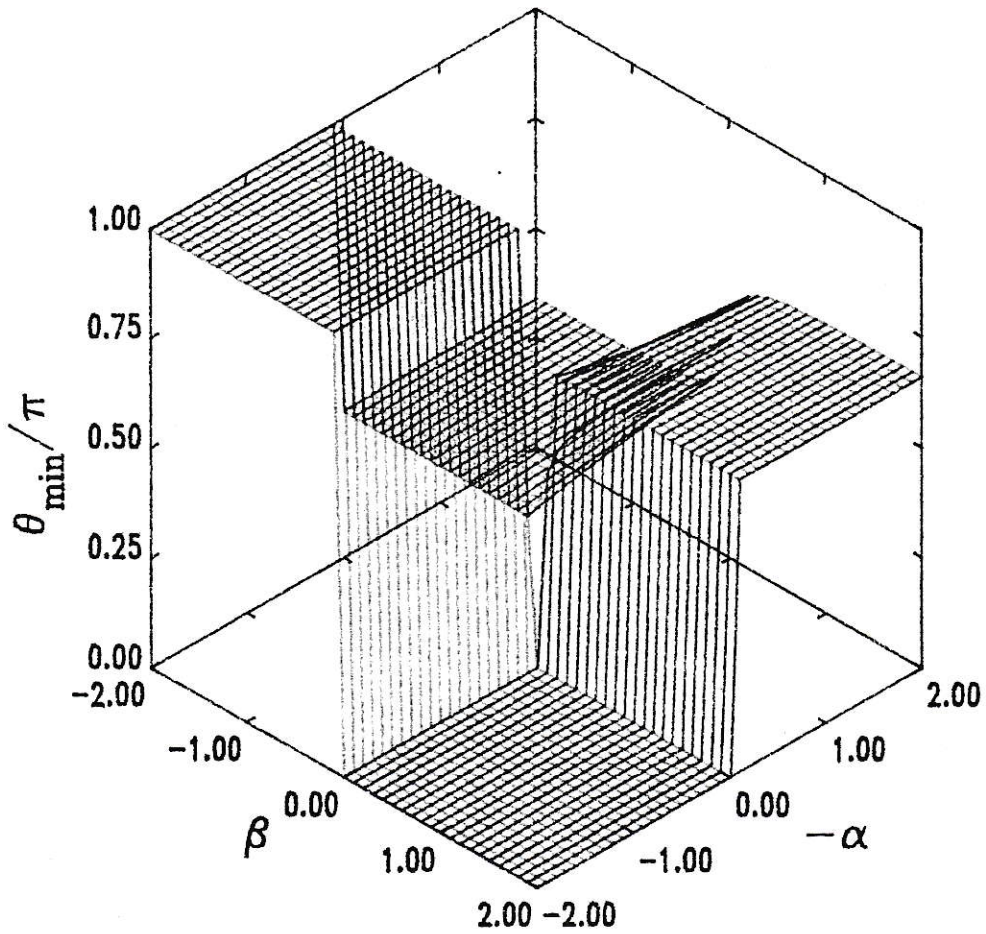


FIGURA 10. Valor del ángulo entre espines consecutivos normalizado a π , es decir, (θ_{\min}/π) , como función de α y β . El signo de la interacción a primeros vecinos $\text{sgn}(J_1) = +1$, y el valor de la coordinación $c = 12$.

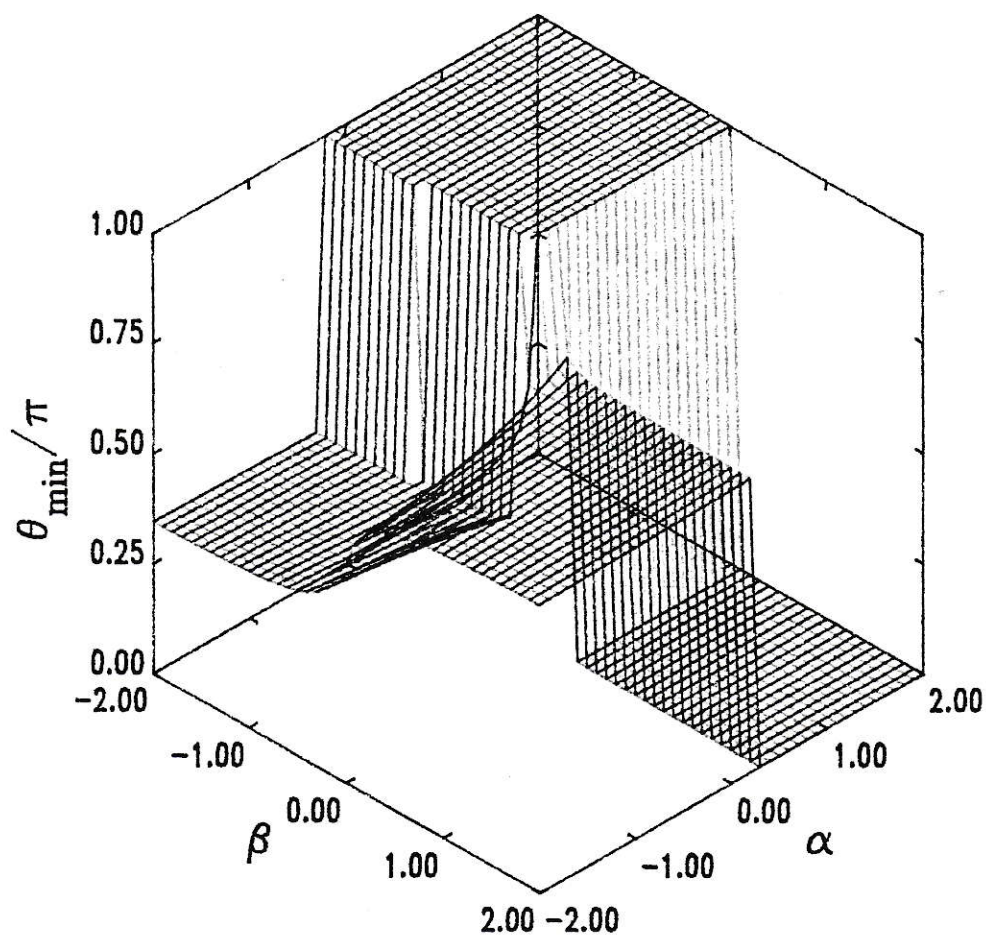


FIGURA 11. Valor del ángulo entre espines consecutivos normalizado a π , es decir, (θ_{\min}/π) , como función de α y β . El signo de la interacción a primeros vecinos $\text{sgn}(J_1) = -1$, y el valor de la coordinación $c = 6$.

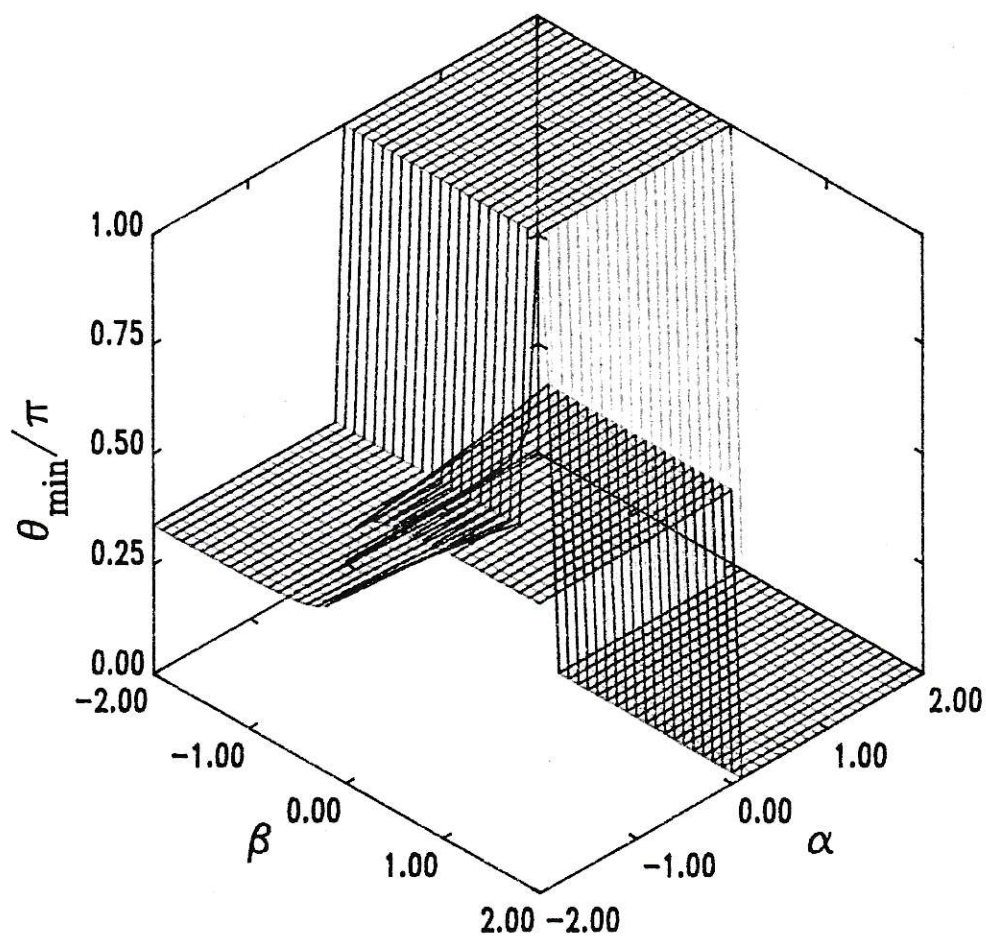


FIGURA 12. Graficamos el valor del ángulo entre espines consecutivos normalizado a π , es decir, (θ_{\min}/π) , como función de α y β . El signo de la interacción a primeros vecinos $\text{sgn}(J_1) = -1$, y el valor de la coordinación $c = 12$.

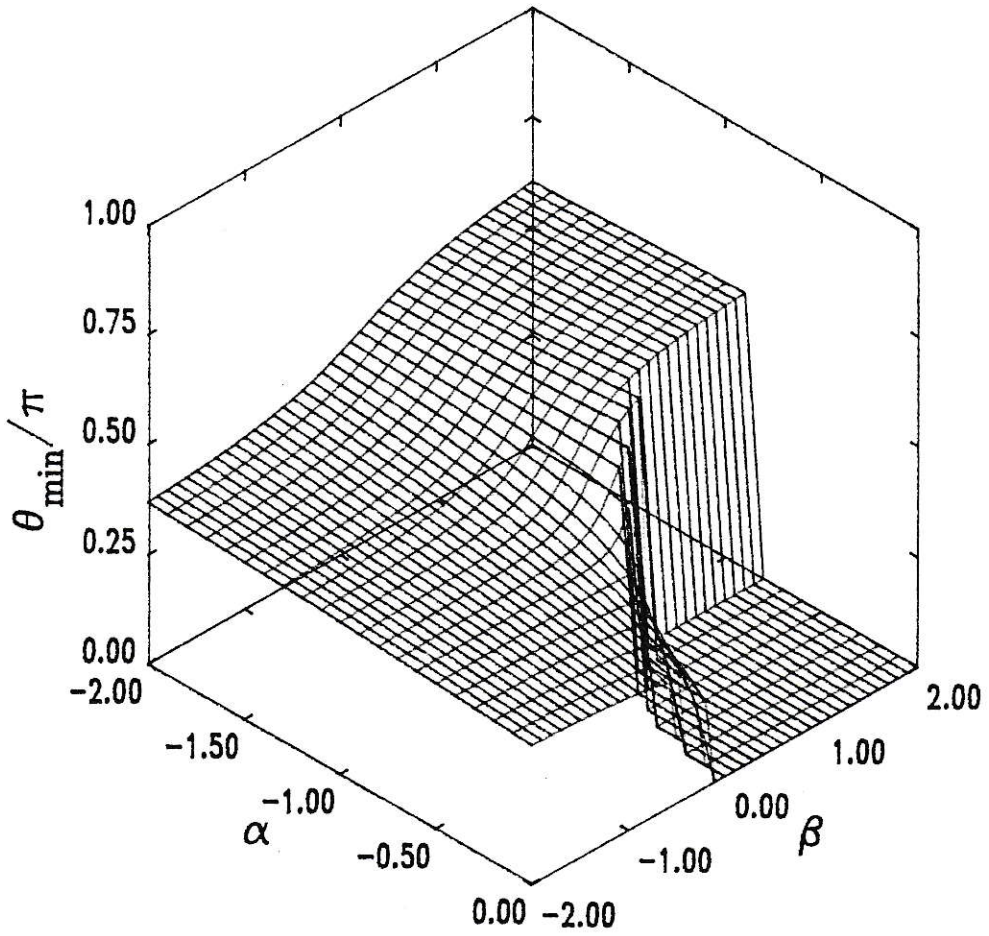


FIGURA 13. Ampliación de la región con orden helicoidal, para el caso $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 2$.

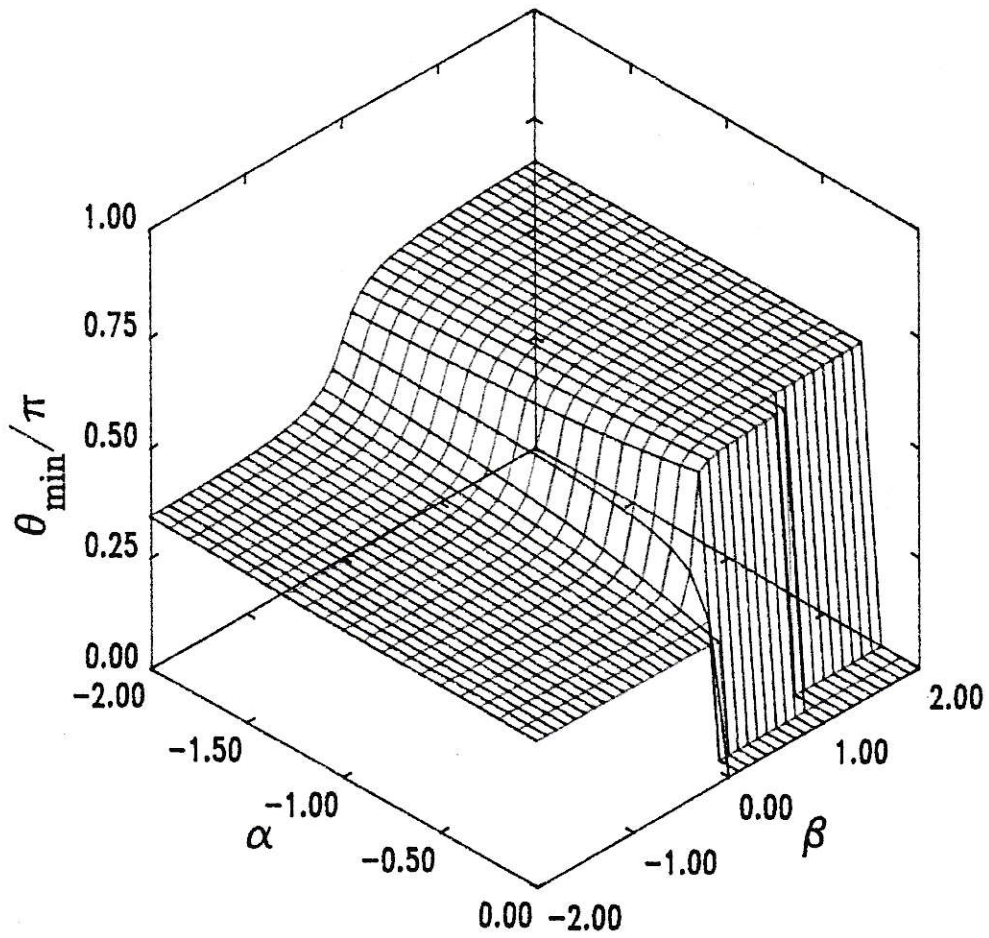


FIGURA 14. Ampliación de la región con orden helicoidal, para el caso $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 6$.

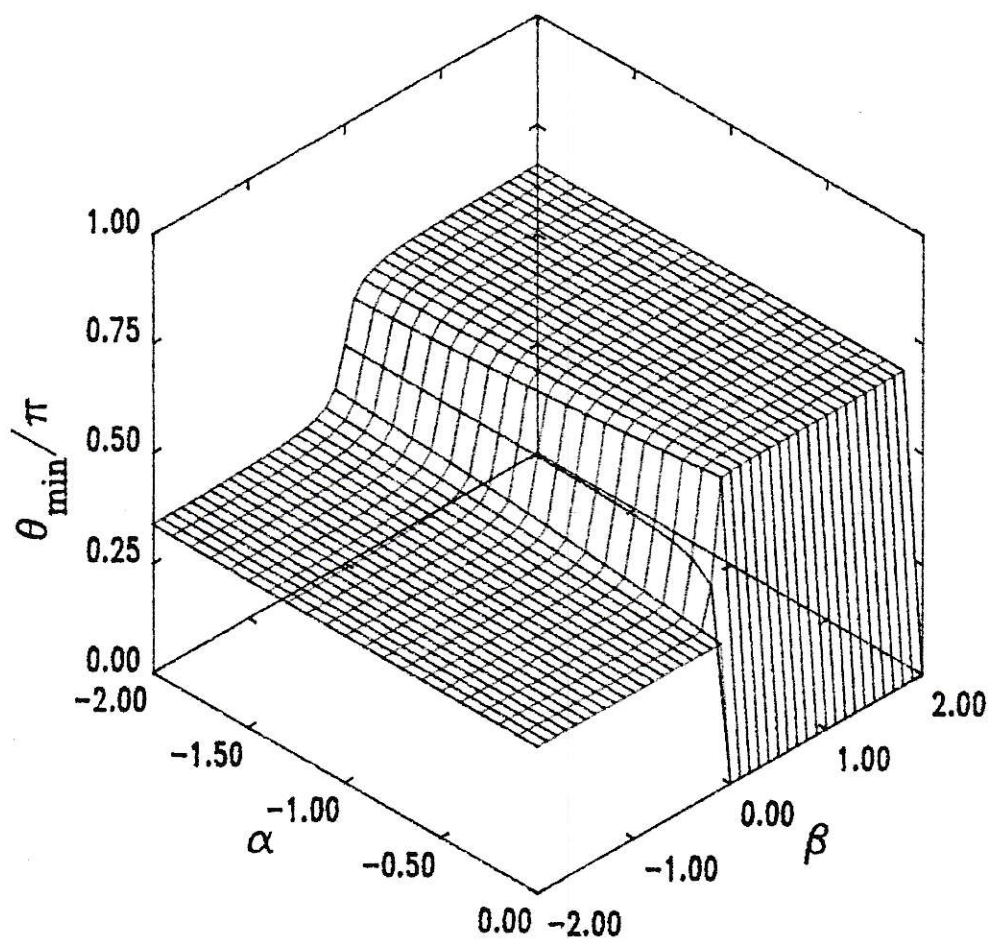


FIGURA 15. Ampliación de la región con orden helicoidal, para el caso $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 12$.

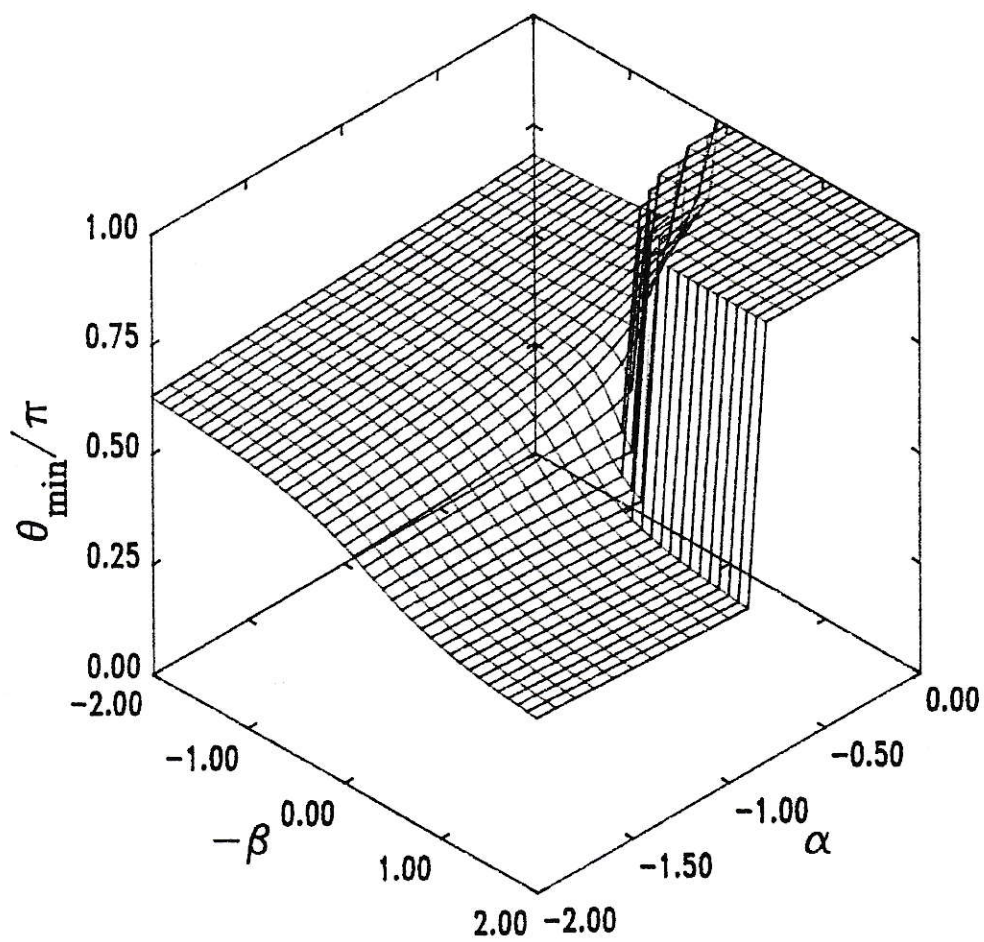


FIGURA 16. Ampliación de la región con orden helicoidal, para el caso $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 2$.

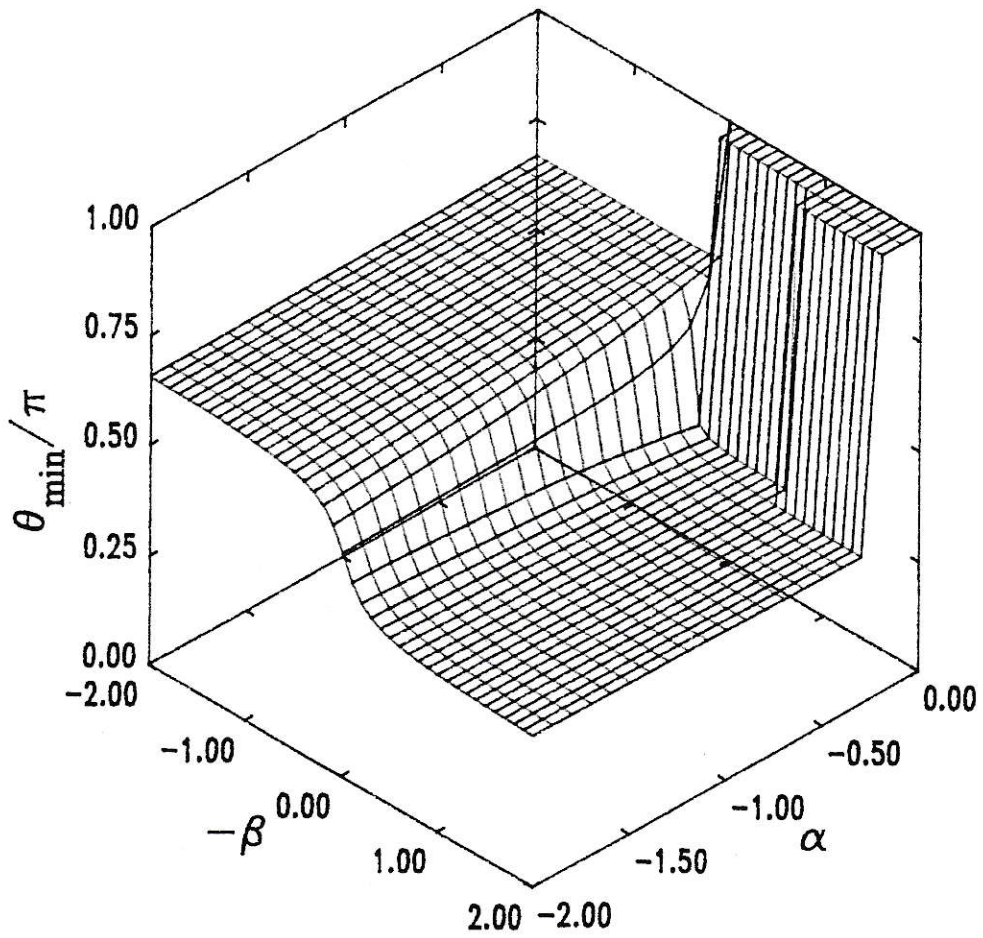


FIGURA 17. Ampliación de la región con orden helicoidal, para el caso $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 6$.

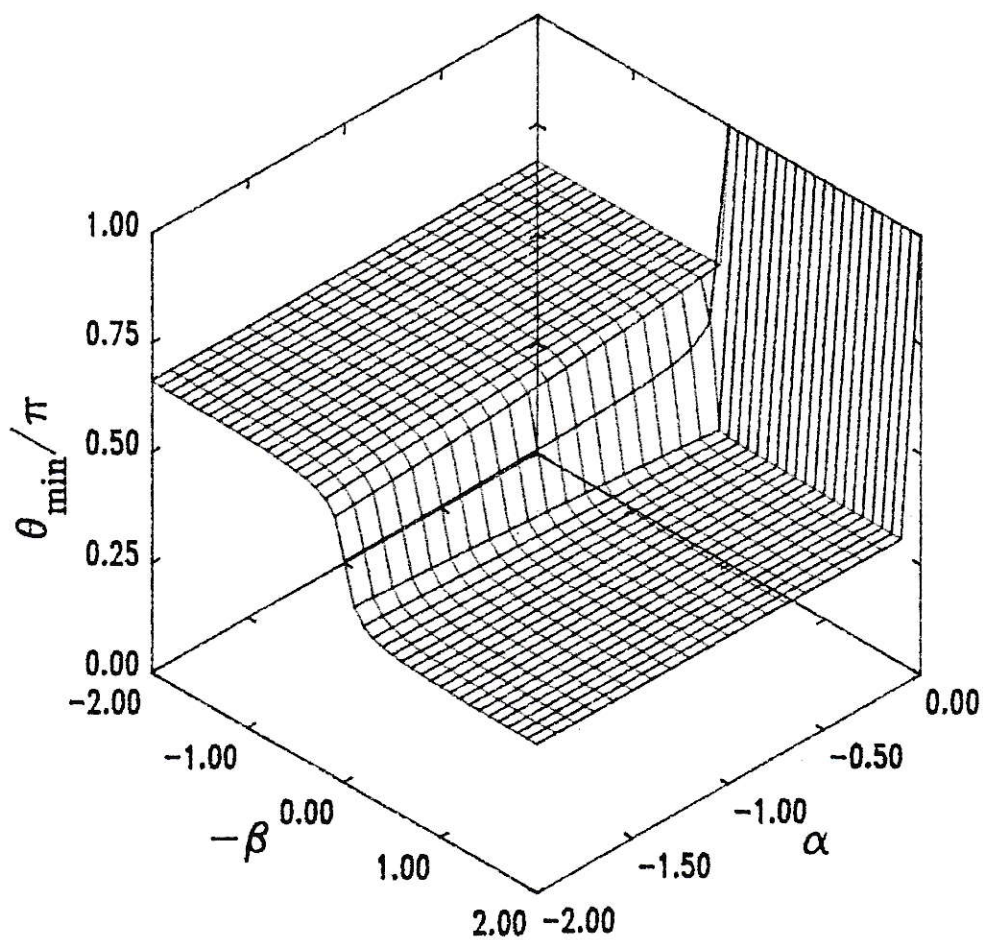


FIGURA 18. Ampliación de la región con orden helicoidal, para el caso $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 12$.

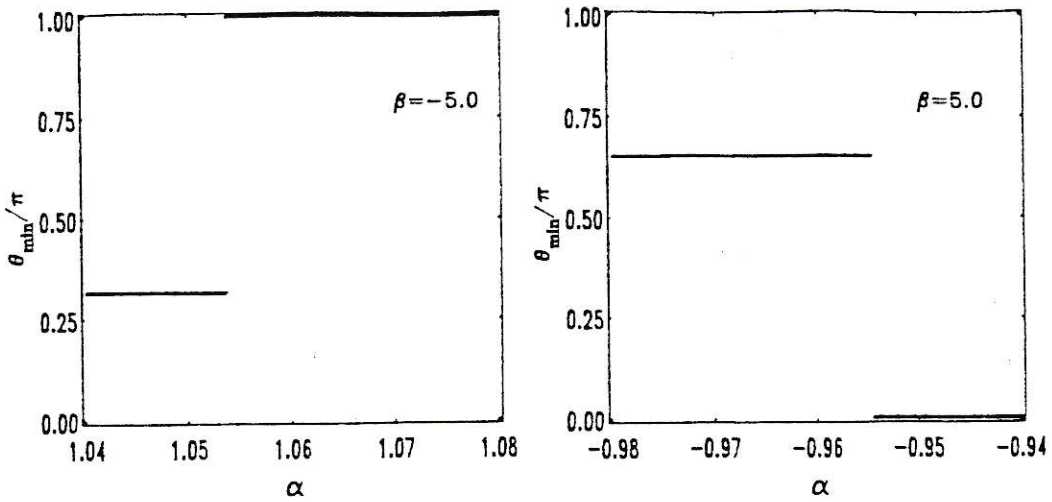


FIGURA 19. Angulo entre espines consecutivos normalizado a π como función de α para dos valores de β fijos. Los valores de los parámetros son $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 2$. Se muestran las discontinuidades que existen en las fronteras entre diferentes regiones, la precisión numérica permite decir que la transición entre regiones ocurre en un intervalo en $\alpha \leq 0.0001$.

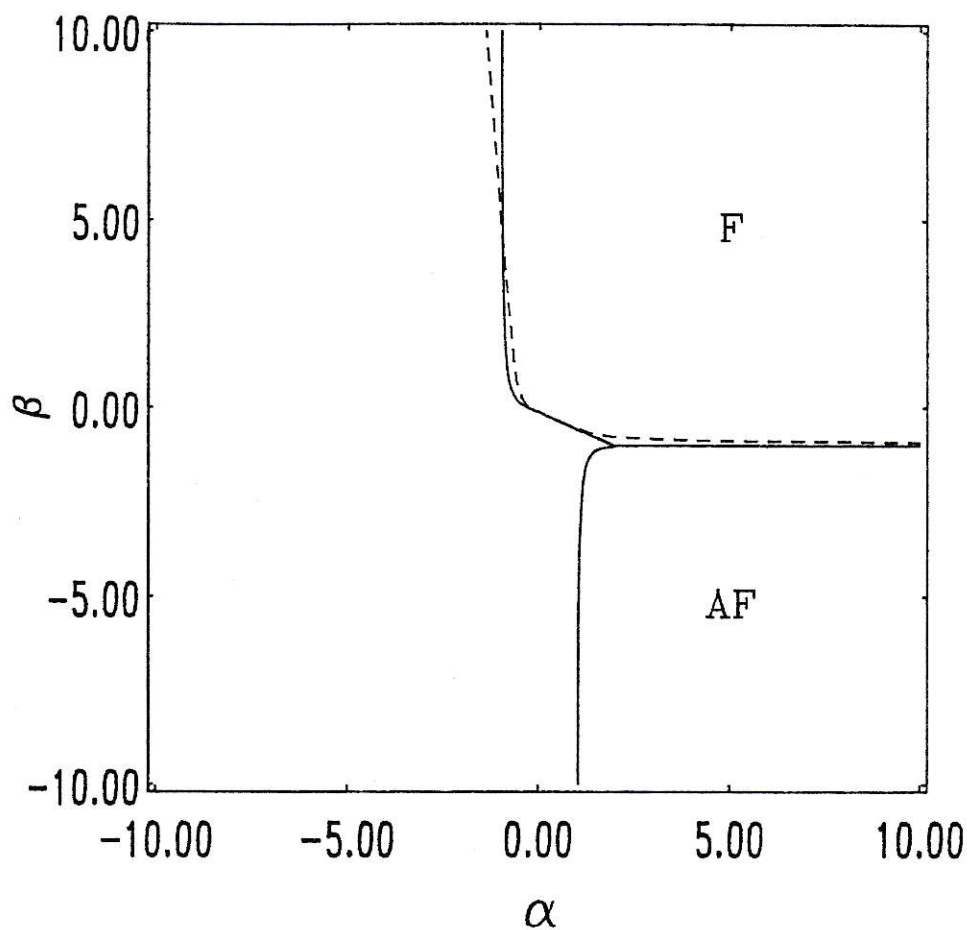


FIGURA 20. Diagrama de fase magnética correspondiente a $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 2$. La región etiquetada con "F" es la ferromagnética, la región etiquetada con "AF" es la antiferromagnética y la región sin etiqueta es la con orden helicoidal. La línea segmentada son los resultados de Mesías y Vogel para un cadena finita de 10 espines.

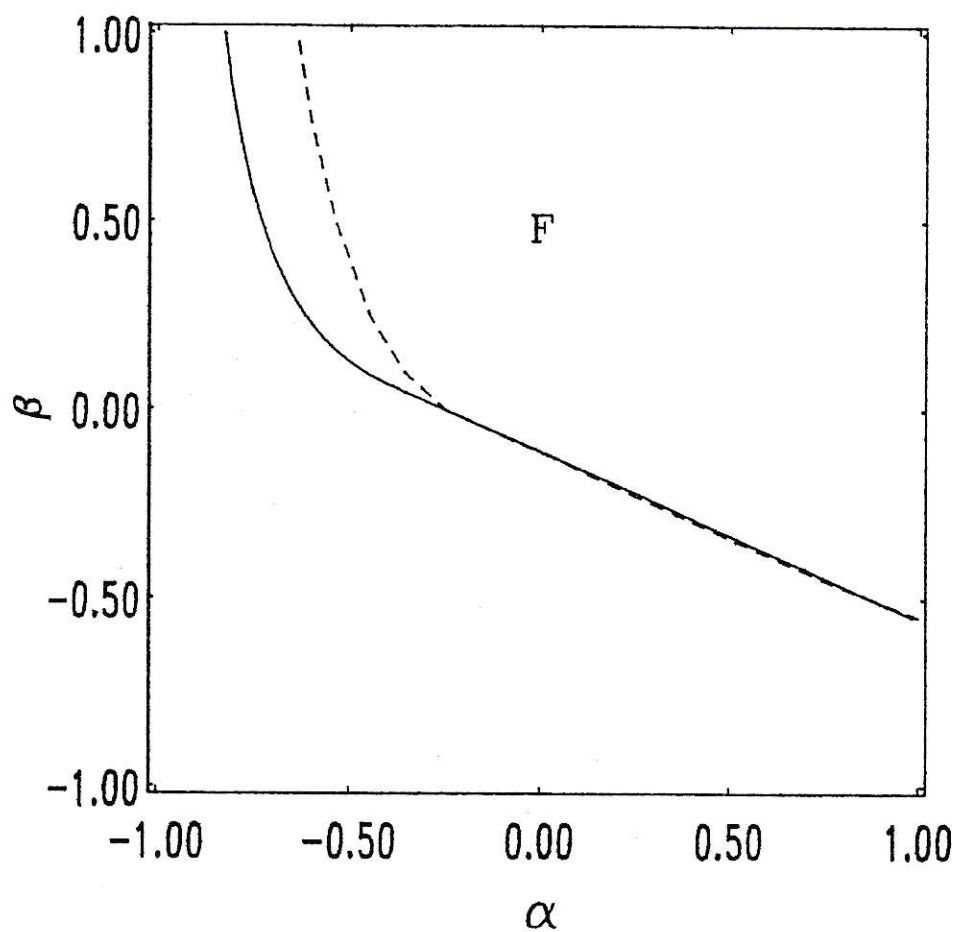


FIGURA 21. Ampliación de la zona central de la figura anterior, los valores de los parámetros son: $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 2$.

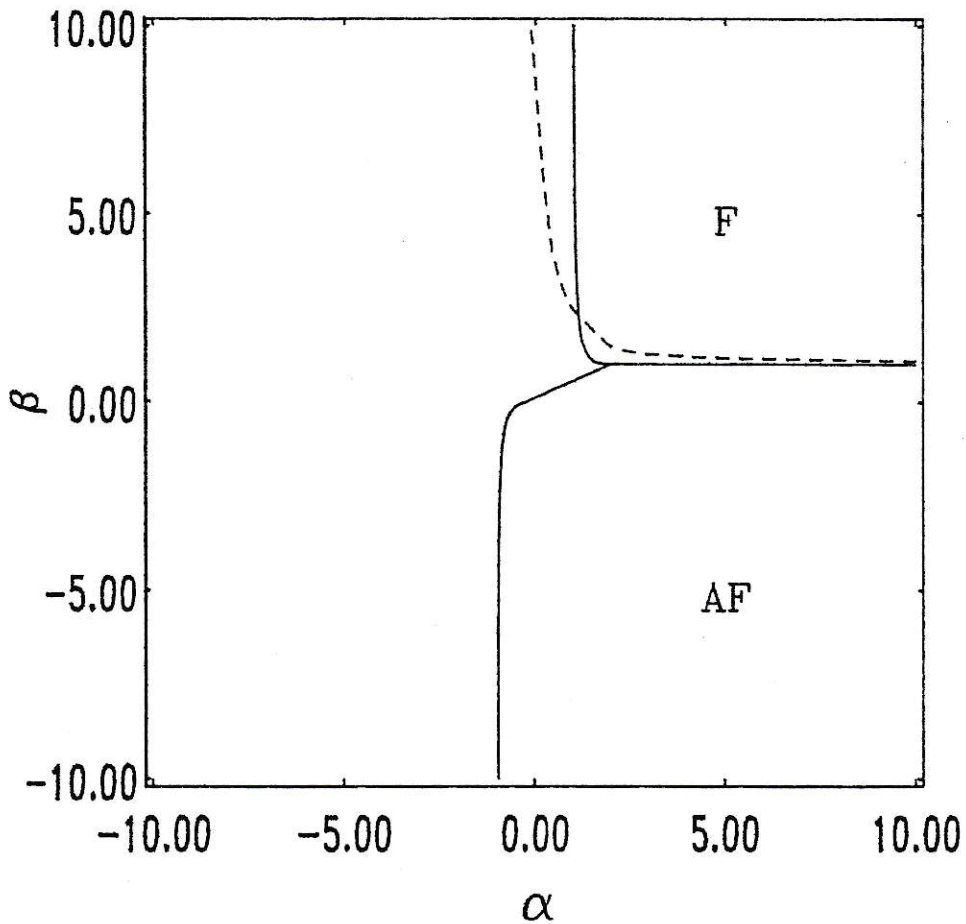


FIGURA 22. Diagrama de fase magnética correspondiente a $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 2$. La región etiquetada con "F" es la ferromagnética, la región etiquetada con "AF" es la antiferromagnética y la región sin etiqueta es la con orden helicoidal. La línea segmentada son los resultados de Mesías y Vogel para un cadena finita de 10 espines.

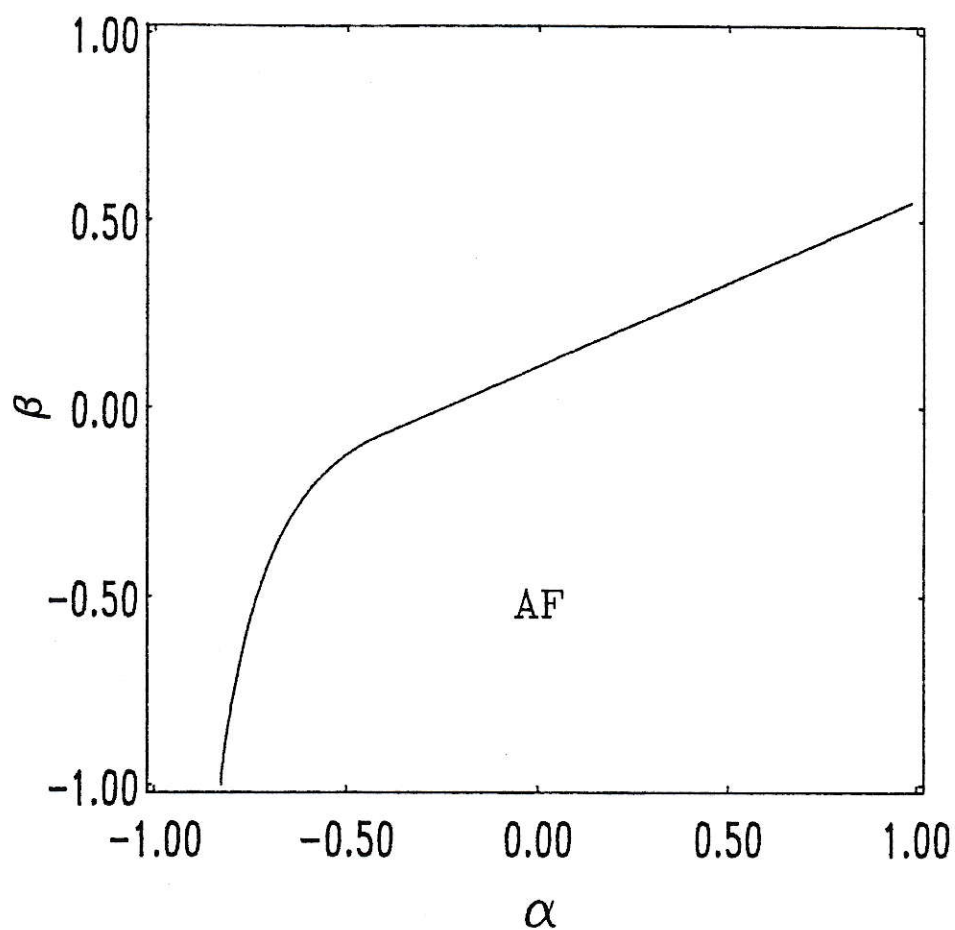


FIGURA 23. Ampliación de la zona central de la figura anterior, los valores de los parámetros son: $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 2$.

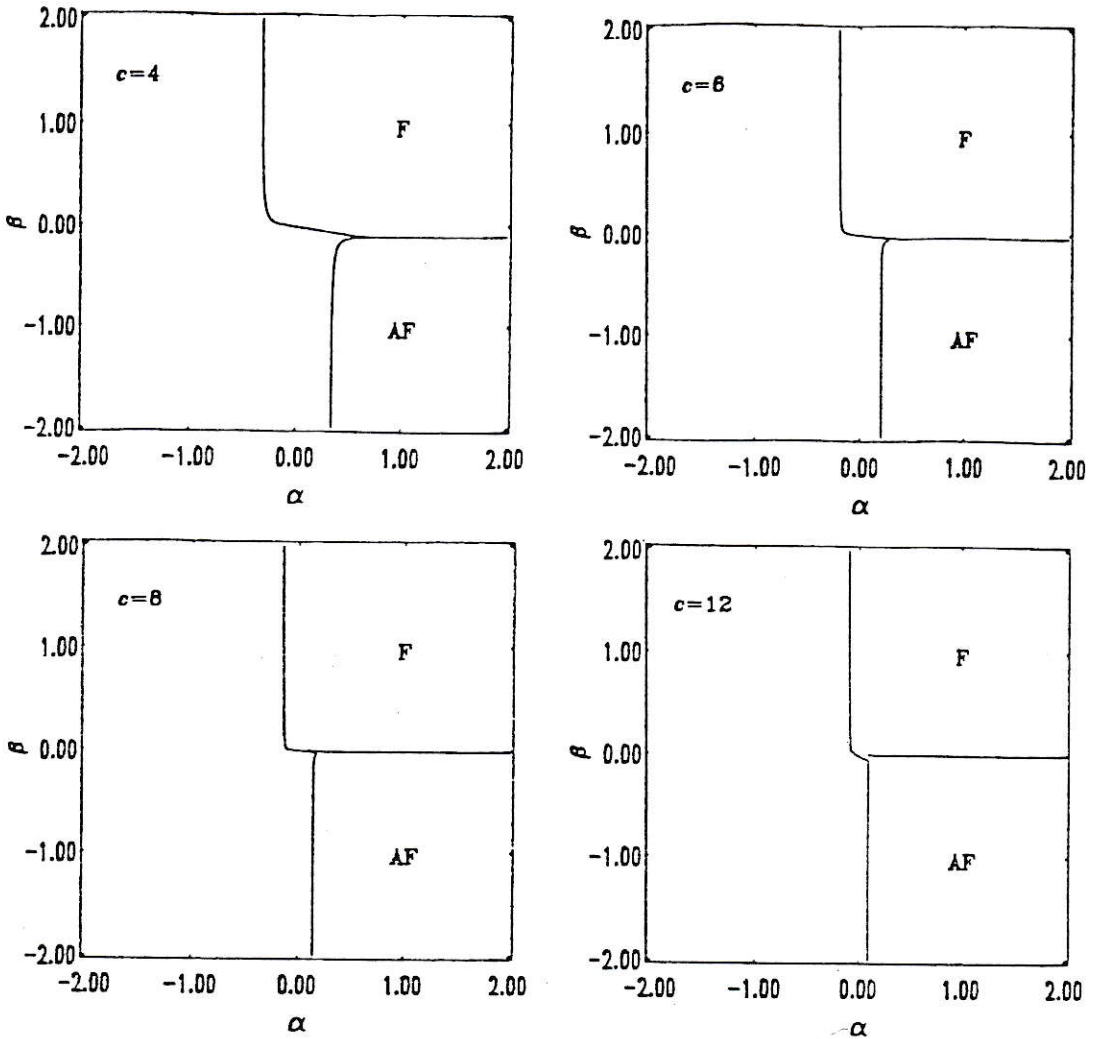


FIGURA 24. Diagramas de fase magnética correspondiente a $\text{sgn}(J_1) = +1$ para 4 diferentes valores de la coordinación c . Las regiones etiquetadas con "F" corresponden a las ferromagnéticas, las regiones etiquetadas con "AF" corresponden a las antiferromagnéticas y las regiones sin etiqueta a las con orden helicoidal.

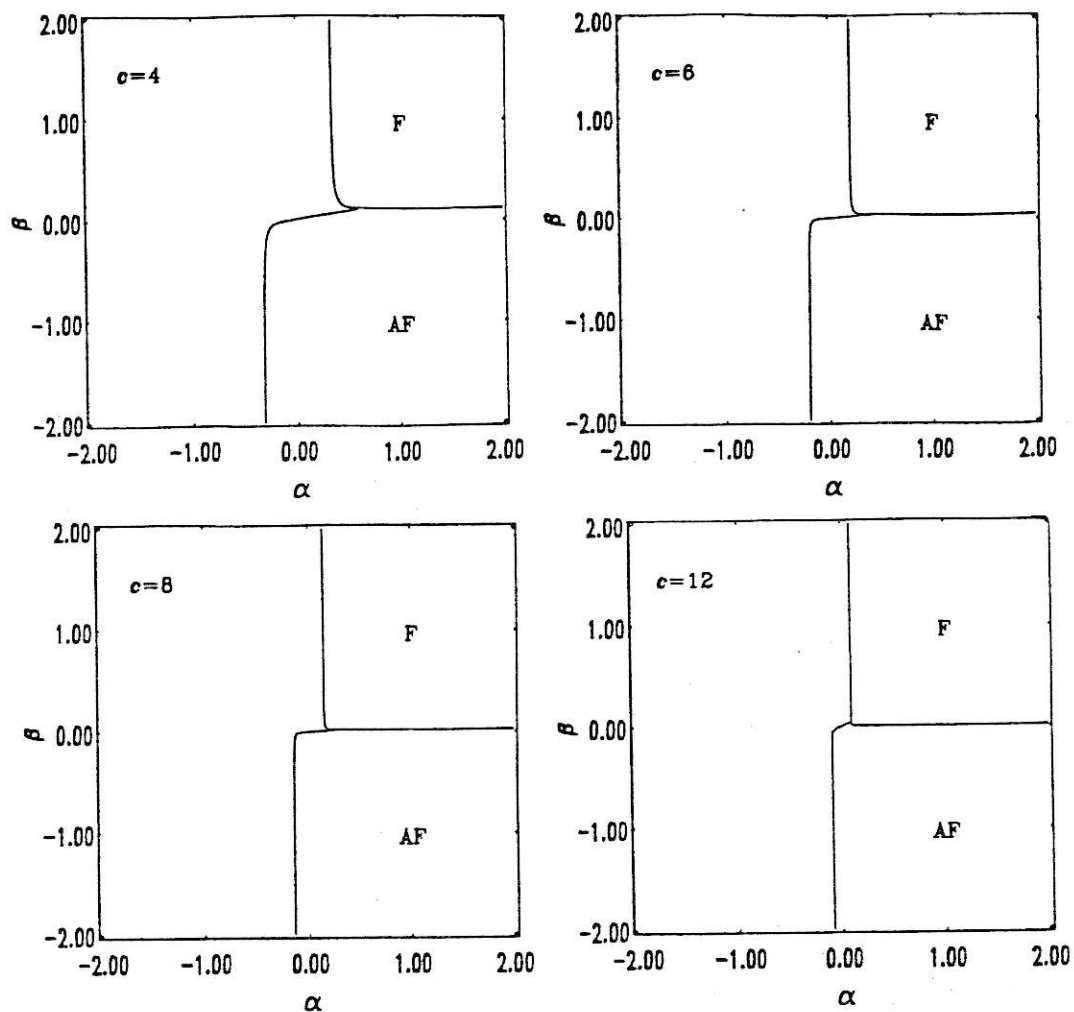


FIGURA 25. Diagramas de fase magnética correspondiente a $\text{sgn}(J_1) = -1$ para 4 diferentes valores de la coordinación c . Las regiones etiquetadas con "F" corresponden a las ferromagnéticas, las regiones etiquetadas con "AF" corresponden a las antiferromagnéticas y las regiones sin etiqueta a las con orden helicoidal.

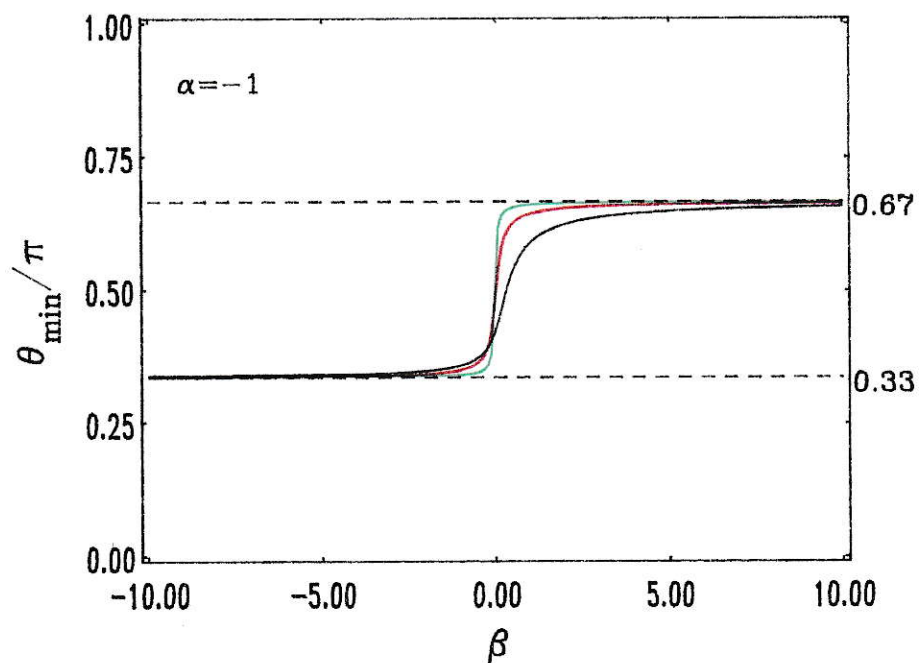


FIGURA 26. Ángulo entre espines consecutivos normalizado a π como función de β para un valor de α fijo para $\text{sgn}(J_1) = +1$. Los valores de la coordinación son: $c = 2$ para la curva en negro, $c = 4$ para la curva en rojo y $c = 12$ para la curva en verde. Las líneas segmentadas corresponden a los valores límites a que tienden todas las curvas.

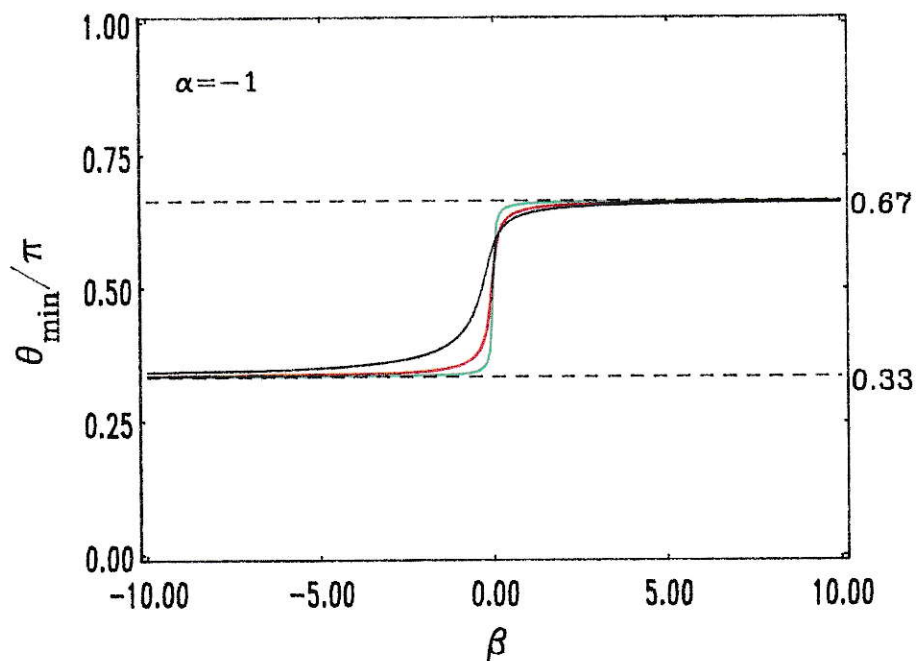


FIGURA 27. Ángulo entre espines consecutivos normalizado a π como función de β para un valor de α fijo para $\text{sgn}(J_1) = -1$. Los valores de la coordinación son: $c = 2$ para la curva en negro, $c = 4$ para la curva en rojo y $c = 12$ para la curva en verde. Las líneas segmentadas corresponden a los valores límites a que tienden todas las curvas.

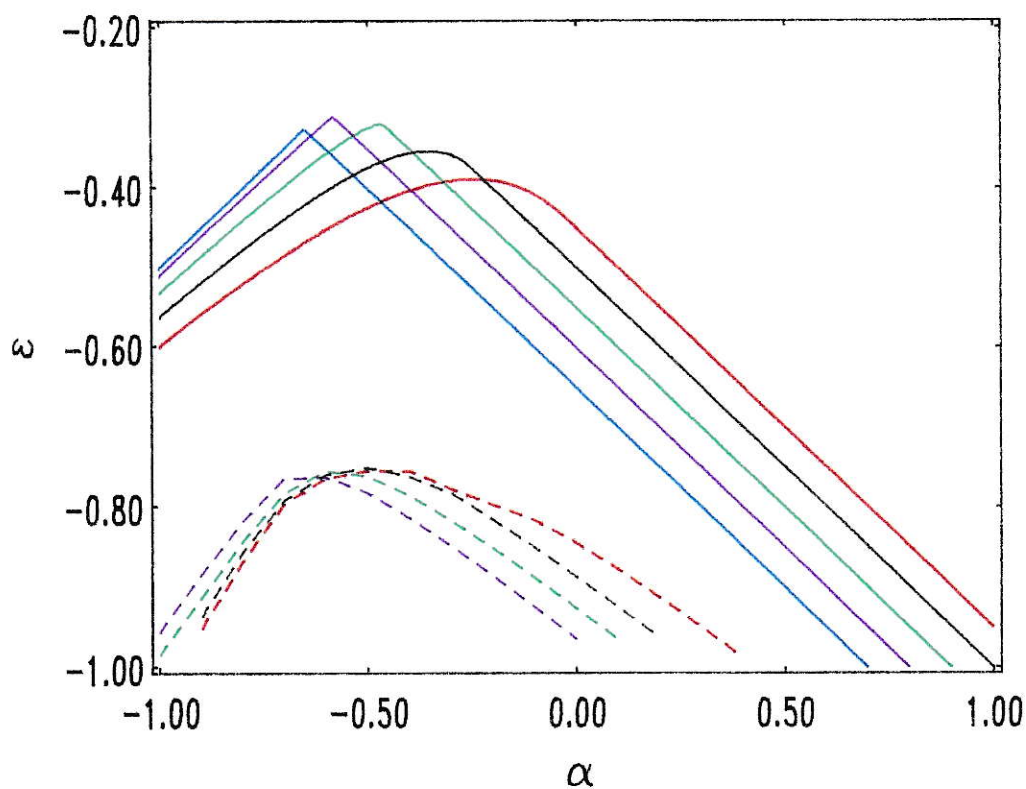


FIGURA 28. Energía por sitio ε como función de α para 5 valores diferentes de β . El $\text{sgn}(J_1) = -1$ y la coordinación es dos. Las curvas segmentadas corresponden a los resultados de Mesías y Vogel. Las curvas en negro $\beta = 0.0$, las curvas en rojo $\beta = 0.1$, las curvas en verde $\beta = -0.1$, las curvas en violeta $\beta = -0.2$ y la curva en azul $\beta = -0.3$.

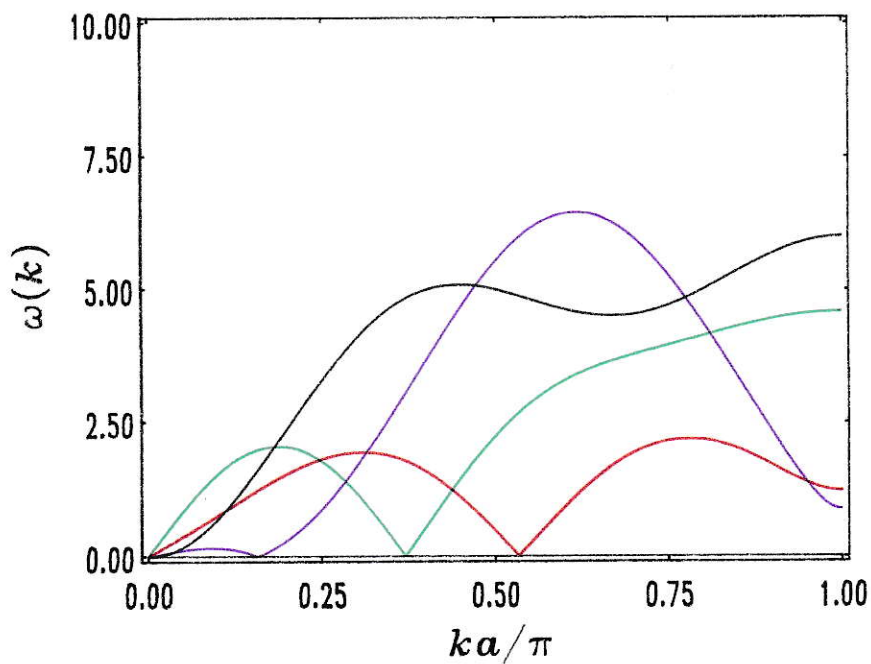


FIGURA 29. Relaciones de dispersión de magnones para $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 2$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del par (α, β) , teniéndose que $(\alpha, \beta) = (0.5, 0.5)$ para la curva en negro, $(\alpha, \beta) = (-1.0, 0.5)$ para la curva en rojo, $(\alpha, \beta) = (-1.0, -0.5)$ para la curva en verde, $(\alpha, \beta) = (1.5, -1.0)$ para la curva en violeta.

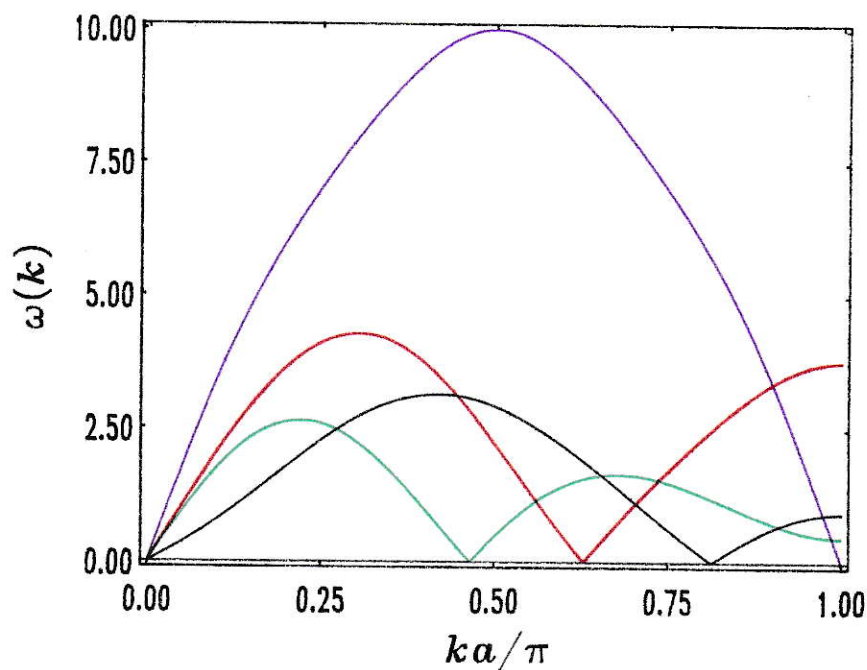


FIGURA 30. Relaciones de dispersión de magnones para $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 2$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del par (α, β) , teniéndose que $(\alpha, \beta) = (0.5, 0.5)$ para la curva en negro, $(\alpha, \beta) = (-1.0, 0.5)$ para la curva en rojo, $(\alpha, \beta) = (-1.0, -0.5)$ para la curva en verde, $(\alpha, \beta) = (1.5, -1.0)$ para la curva en violeta.

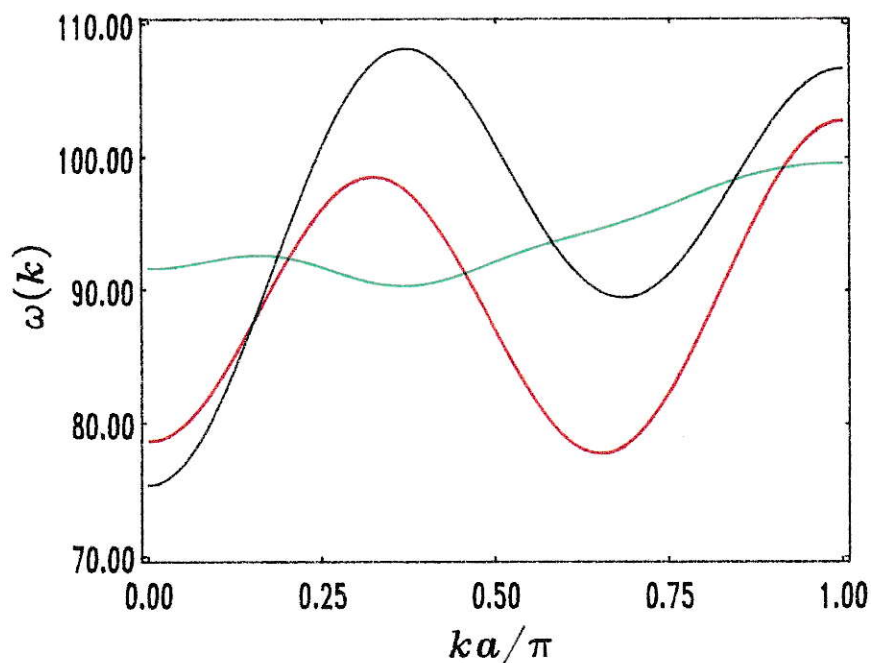


FIGURA 31. Relaciones de dispersión de magnones para $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 6$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del par (α, β) , incluimos también el valor de θ_{min}/π para cada curva. Tenemos que $(\alpha, \beta) = (0.5, 0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.000$ para la curva en negro, $(\alpha, \beta) = (-1.0, 0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.642$ para la curva en rojo, $(\alpha, \beta) = (-1.0, -0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.353$ para la curva en verde.

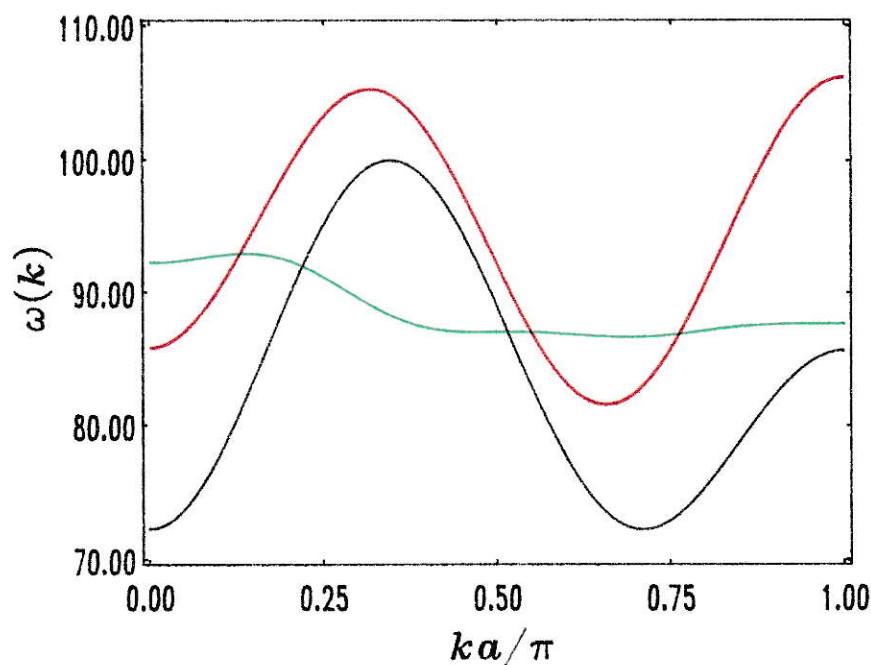


FIGURA 32. Relaciones de dispersión de magnones para $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 6$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del par (α, β) , incluimos también el valor de θ_{min}/π para cada curva. Tenemos que $(\alpha, \beta) = (0.5, 0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.000$ para la curva en negro, $(\alpha, \beta) = (-1.0, 0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.647$ para la curva en rojo, $(\alpha, \beta) = (-1.0, -0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.358$ para la curva en verde.

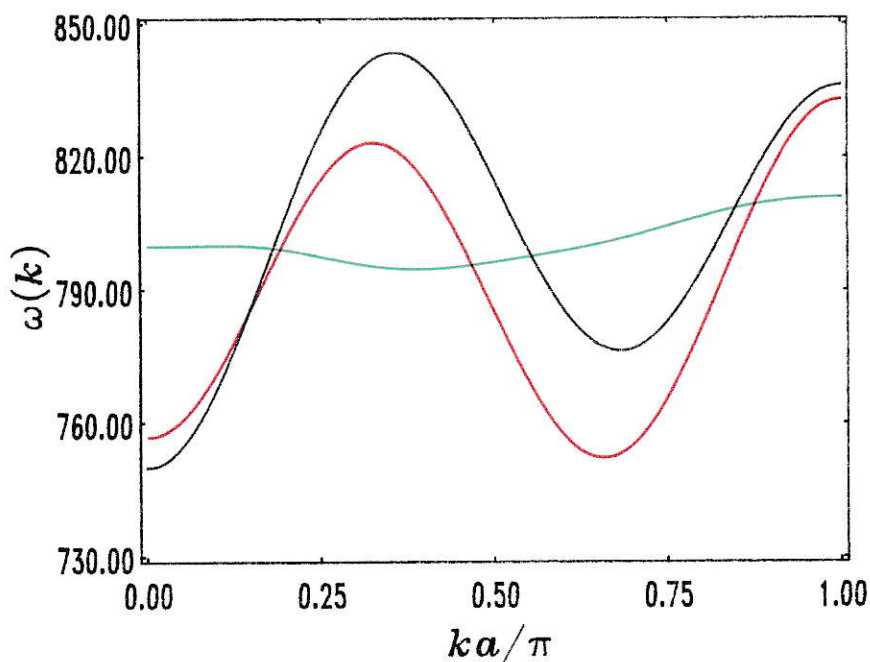


FIGURA 33. Relaciones de dispersión de magnones para $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 12$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del par (α, β) , incluimos también el valor de θ_{min}/π para cada curva. Tenemos que $(\alpha, \beta) = (0.5, 0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.000$ para la curva en negro, $(\alpha, \beta) = (-1.0, 0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.656$ para la curva en rojo, $(\alpha, \beta) = (-1.0, -0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.344$ para la curva en verde.

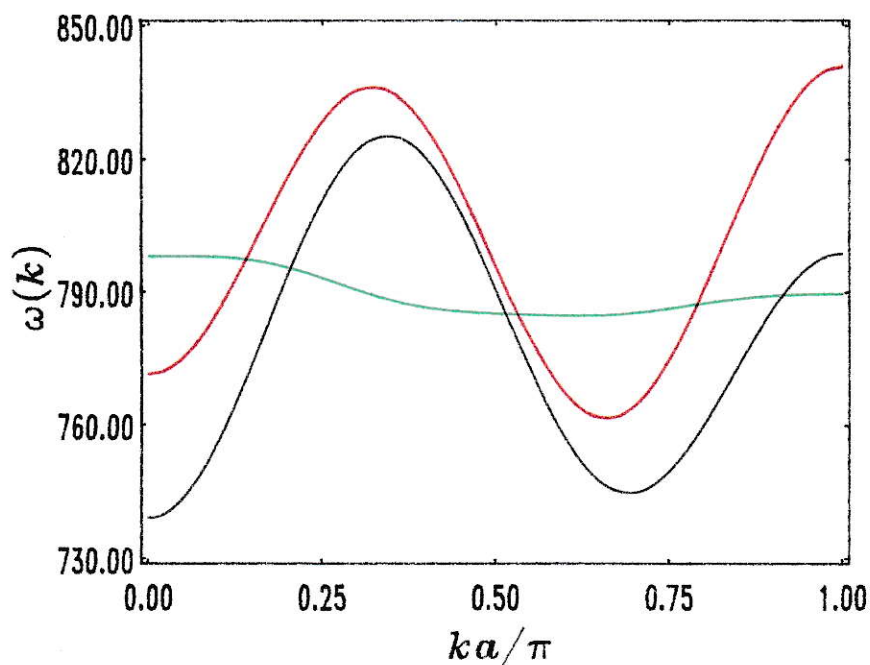


FIGURA 34. Relaciones de dispersión de magnones para $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 12$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del par (α, β) , incluimos también el valor de θ_{min}/π para cada curva. Tenemos que $(\alpha, \beta) = (0.5, 0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.000$ para la curva en negro, $(\alpha, \beta) = (-1.0, 0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.657$ para la curva en rojo, $(\alpha, \beta) = (-1.0, -0.5)$ y $\theta_{\text{min}}/\pi = 0.346$ para la curva en verde.

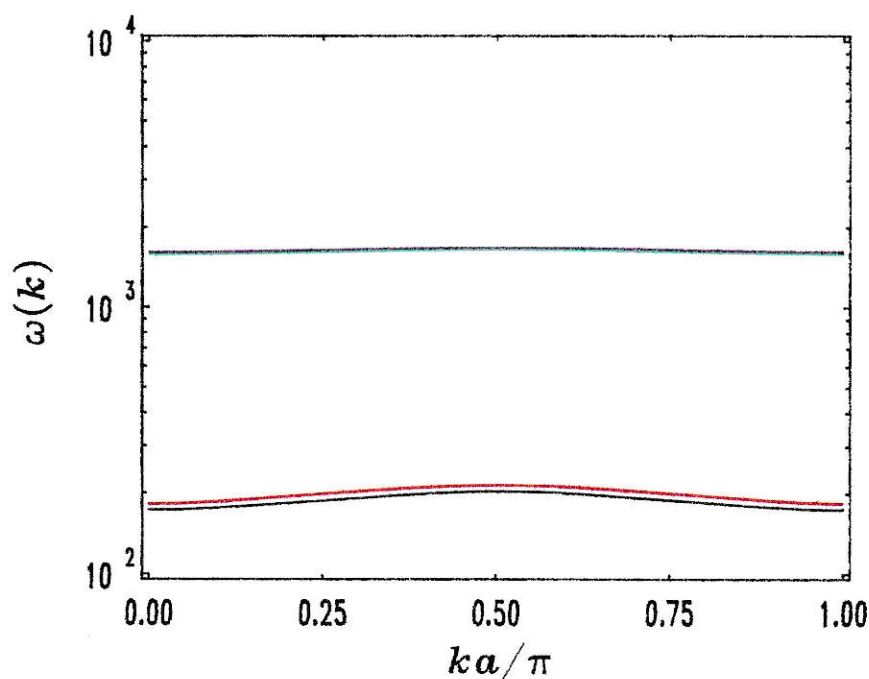


FIGURA 35. Relaciones de dispersión de magnones evaluadas todas para el par $(\alpha, \beta) = (1.5, -1.0)$ con $\theta_{\min}/\pi = 1.0$ para todas las curvas. Ellas corresponden a distintos valores del $\text{sgn}(J_1)$ y c . Tenemos que $\text{sgn}(J_1) = +1$ y $c = 6$ para la curva en negro, $\text{sgn}(J_1) = -1$ y $c = 6$ para la curva en rojo. En la curva azul coinciden los resultados para los dos signos de la interacción a primeros vecinos, cuando $c = 12$.

VI. APLICACION A SISTEMAS CON INTERACCIONES DE LARGO ALCANCE

1. Magnetismo de las Tierras Raras Metálicas

Las tierras raras son quince elementos desde el Lantano, con número atómico $z = 57$, hasta el Lutecio, con número atómico $z = 71$; conocidas usualmente también como la serie de los Lantanidos. Se caracterizan por tener electrones en orbitales $4f$ muy localizados ($r \sim 0.3\text{Å}$). Debido a su momento angular, cuando no hay apareamiento entre los espines de los electrones, determinan que los átomos posean momentos magnéticos. El carácter metálico de este tipo de elementos se debe a que los electrones de valencia $5d$ y $6s$ forman bandas, las cuales se llenan en forma incompleta. La banda de conducción es entonces esencialmente de tipo $s - d$, aún cuando existe una pequeña hibridización de estas bandas con los orbitales $4f$.

El Hamiltoniano que describe el comportamiento magnético de las tierras raras metálicas es el de Heisenberg; sin embargo, el mecanismo de interacción no es el habitual. Usualmente los orbitales magnéticos de dos iones primeros vecinos interactúan vía intercambio, el cual depende del traslape entre los orbitales, razón por la cual la interacción magnética es generalmente de corto alcance. En las tierras raras metálicas la integral de intercambio entre los orbitales magnéticos ($4f$), de los iones primeros vecinos, cuya separación en promedio es de 3Å , resulta prácticamente nula, debiéndose postular un mecanismo diferente. El mecanismo, propuesto inicialmente por Ruderman y Kittel⁽¹⁸⁾ en relación con resonancia magnética nuclear, consiste

en que los espines nucleares, inmersos en un “mar” de electrones libres se acoplan, debido a la interacción hiperfina, con este “mar” de electrones, dando lugar a una interacción magnética efectiva de largo alcance. Este mecanismo es conocido como intercambio indirecto. El estudio de Ruderman y Kittel se limitó a interacciones entre espines nucleares y electrones libres; trabajos posteriores de Kasuya⁽¹⁹⁾ y Yosida⁽²⁰⁾ extendieron este análisis a la interacción entre momentos magnéticos atómicos mediado por la banda de conducción. Todos estos autores usan teoría de perturbaciones a segundo orden para obtener un Hamiltoniano efectivo entre los momentos magnéticos locales, reduciendo el rol de los electrones de conducción a la transmisión de la interacción; es decir, surge una simple susceptibilidad no local. El Hamiltoniano efectivo que obtienen es el de Heisenberg, donde la interacción que reemplaza la integral de intercambio es oscilatoria y de largo alcance. Ella es usualmente conocida como interacción RKKY, debido a sus autores Ruderman, Kittel, Kasuya y Yosida.

Nuestro formalismo nos da la posibilidad de tratar sistemas descritos por el Hamiltoniano de Heisenberg con interacciones de largo alcance, en la aproximación de la red de Bethe, sin grandes dificultades. Considerando entonces que las tierras raras metálicas son sistemas reales que presentan estas características, nos concentramos exclusivamente en ellas. Una razón adicional que motiva nuestro interés es que experimentos de difracción de neutrones, combinados con medidas de magnetización en cristales simples, han logrado determinar la estructura magnética de las tierras raras pesadas, es decir, desde el Gd al Yb (Koehler⁽⁵¹⁾ y Rhyne⁽⁵²⁾), obteniéndose que los ordenamientos magnéticos presentes son principalmente del tipo ferromagnético y helicoidal. Sin embargo, existen ordenamientos más complejos que

son mezclas entre estos.

Fundamentalmente, estamos interesados en sistemas que son redes de Bravais coordinación alta, ($c = 6, 8$ y 12), ya que las tierras raras metálicas presentan una estructura cristalina hexagonal compacta o bien cúbica de cara centrada, ambas con coordinación doce; incluimos las coordinaciones seis y ocho solamente para completar las estructuras cúbicas. Aproximamos la topología por la red de Bethe equivalente, es decir, con la misma coordinación, de manera tal que en cada sitio se ubican espines y el Hamiltoniano efectivo que gobierna el sistema es el de Heisenberg. Cada espín interactúa, vía los electrones de conducción, con una gran cantidad de vecinos. La forma exacta de la interacción, basada en el modelo RKKY, es la siguiente:

$$V_n = -Jq^4 \left(\frac{\text{sen}(\pi qn) - (\pi qn) \cos(\pi qn)}{(\pi qn)^4} \right) f_n, \quad (6-1)$$

donde J es una constante positiva que escala la interacción, q es la razón entre el módulo del vector de onda de Fermi y la mitad del módulo del vector de onda máximo de la zona de Brillouin, c es la coordinación y la función f_n está definida de la siguiente manera:

$$f_n = \begin{cases} 1, & \text{si } n < M, \\ \exp(-(n - M)^2 / \sigma^2), & \text{si } n \geq M, \end{cases} \quad (6-2)$$

donde M es el número de vecinos a partir del cual empieza a apantallarse la interacción y σ es un parámetro de amortiguamiento, que da cuenta de como decrece la interacción debido al apantallamiento. Este último término no aparece en la interacción original, sin embargo, su justificación es dada más adelante.

En la interacción original se incluye un factor exponencial decreciente, el cual tiene como argumento el cociente entre la distancia a la cual se evalúa la interacción y el camino libre medio de los electrones en el metal. En nuestro caso, este término

es uno, debido a que para una red pura a temperatura nula el camino libre medio de los electrones es infinito, hecho que anula el argumento y por lo tanto hace uno el factor exponencial.

En nuestro esquema J aparece sólo como un factor de escala y podemos fijarlo arbitrariamente; por simplicidad, elegimos $J = 1$ al efectuar los cálculos siguientes. El parámetro q , que como ya dijimos, corresponde a la razón entre módulo del vector de onda de Fermi y la mitad del módulo del vector de onda máximo de la zona de Brillouin, al tener en cuenta que el espacio recíproco asociado a la una red de Bethe es isotrópico, adopta la siguiente forma:

$$q = \frac{2k_F}{k_B^{max}} = \frac{2k_F a}{\pi}, \quad (6-3)$$

siendo a el parámetro de red. Podemos ver de (6-1), que la interacción es oscilante decreciente y la conmensurabilidad de las oscilaciones de la interacción con respecto a los sitios la red está determinada por el parámetro q . Los valores enteros y semienteros de q corresponden a interacciones conmensuradas, vale decir, después de un número entero de veces la constante de la red la interacción cambia de signo, o bien, mantiene el mismo signo para todos los sitios, por ejemplo:

| | $n =$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | ... |
|--------------------------------------|-------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|----|----|----|----|-----|
| $q = 1/2, \text{sgn}(V_n) =$ | | - | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | + | ... |
| $q = e/\pi, \text{sgn}(V_n) =$ | | - | + | - | - | + | - | + | - | + | - | + | + | - | + | - | + | ... |
| $q = 1, \text{sgn}(V_n) =$ | | - | + | - | + | - | + | - | + | - | + | - | + | - | + | - | + | ... |
| $q = 3/2, \text{sgn}(V_n) =$ | | + | - | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | + | - | - | + | ... |
| $q \rightarrow 2, \text{sgn}(V_n) =$ | | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | ... |

TABLA 6-1

Hemos incluido en la Tabla 6-1 el caso $q = e/\pi$, es decir un irracional, con el objetivo

de mostrar que en este caso el signo de la interacción varía en forma no periódica con el número de sitio. Nos interesa variar el parámetro q en forma continua, incluyendo así casos conmesurados y no conmensurados, y de esta manera poder estudiar el comportamiento del sistema en las diferentes situaciones. Sin embargo, el parámetro q está limitado a un intervalo $(0, 2)$, el cual no incluye los extremos, ya que el valor $q = 0$ implica $k_F = 0$, es decir, el vector de onda de Fermi nulo, lo cual carece de sentido físico; y el valor $q = 2$ implica $k_F = k_B^{max}$, es decir, el vector de onda de Fermi es igual al vector máximo de la zona de Brillouin, lo cual indica que la banda esta llena y, por lo tanto, no se trata de un metal.

Los factores f_n que aparecen en la interacción, los incluimos pues esperamos que la interacción se apantalle, dando un alcance efectivo menor que el dado por su razón de decaimiento (n^{-4}). La forma exponencial con la cual se modula el decaimiento, relación (6-2) en el caso $n \geq M$, es escogida exclusivamente por simplicidad. La distancia para la cual conectamos el apantallamiento, M veces el parámetro de red y el parámetro σ , el cual gobierna la razón de decaimiento, son parámetros libres, los cuales variamos para estudiar su influencia sobre las magnitudes evaluadas.

2. Resultados.

A continuación determinamos el ángulo entre espines consecutivos en el estado fundamental, como función del parámetro q , obtenido de minimizar la energía por sitio dada por la relación (3-30). La forma que adopta la energía por sitio en este caso es:

$$\mathcal{E}(\theta, k = 0) = \frac{1}{2} JS q^4 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\text{sen}(\pi qn) - (\pi qn) \cos(\pi qn)}{(\pi qn)^4} \right) f_n Z_c(n) \cos(n\theta), \quad (6-4)$$

donde JS pasa a ser sólo un factor de escala para la energía, c es la coordinación y

q es el parámetro que determina la conmensurabilidad de la interacción respecto de la red.

Notemos que el factor $(c(c-1)^{n-1})$, correspondiente al número de n -ésimos vecinos de una red de Bethe de coordinación c , lo hemos reemplazado por $Z_c(n)$. Hemos hecho este reemplazo con el objeto de corregir el problema de sobreestimación del número de n -ésimos vecinos que presenta la red de Bethe, relativa a una red de Bravais de la misma coordinación. De no hacerlo, las magnitudes de interés no pueden ser evaluadas, ya que el número de n -ésimos vecinos crece en forma exponencial con n y la interacción decrece asintóticamente como n^{-3} y por lo tanto, el producto de estos factores crece con n , haciendo diverger la suma sobre n que se necesita evaluar para obtener todas las contribuciones de las diferentes capas. Otra manera de visualizar este problema es tener en cuenta que el número de átomos de "la superficie" de una red de Bethe es del mismo orden que el número de átomos del "volumen", a diferencia de un sólido normal, en que el número de átomos en la superficie es $N^{2/3}$ cuando el número de átomos en el volumen es N . Hemos calculado el nuevo factor correspondiente a los n -ésimos vecinos de la siguiente manera: definimos los n -ésimos vecinos de un sitio dado, llamémoslo central, como todos aquellos sitios para los cuales, partiendo de cada uno de ellos, podemos alcanzar el sitio central con un camino mínimo de n pasos sobre la red. Evaluamos el número de estos vecinos, para las diferentes redes cúbicas, obteniendo $Z_c(n)$, el cual se puede expresar en forma analítica como:

$$Z_c(n) = 2 + n^2(c - 2) . \quad (6-5)$$

Este resultado lo reemplazamos como el número de n -ésimos vecinos de una red de Bethe de coordinación c , cuando ella aproxima la topología de una red cúbica

de la misma coordinación, naturalmente. Lo anterior, soluciona el problema de sobreestimación de los n -ésimos vecinos que presenta la red de Bethe, y hace el cálculo un poco más realista.

En las figuras 1 a 3 evaluamos la interacción como función del número de vecinos. Incluimos en cada figura los valores correspondientes a multiplicar la interacción por los pesos dados por el nuevo número de vecinos en cada capa, y los valores cuando evaluamos sólo la interacción, relación (6-1). Las diferentes figuras corresponden a distintas elecciones de los parámetros q , c , M y σ , con el objeto de mostrar explícitamente como influyen estos parámetros en la interacción efectiva.

Estudiamos a continuación el comportamiento del ángulo entre espines consecutivos (θ_{min}), el cual caracteriza el estado fundamental del sistema. Nos interesa estudiar esta variable como función de los parámetros físicos, q y c ; sin embargo, también es necesario determinar como afectan a (θ_{min}), los parámetros que determinan el apantallamiento, es decir, M y σ .

Para estudiar como influye el parámetro σ en la determinación de θ_{min} , fijamos la coordinación y la distancia a la cual empieza a actuar el apantallamiento, vale decir M , y variamos σ , restringiéndonos sólo a un intervalo pequeño [2,6]. En la figura 4 podemos ver que las variaciones del parámetro σ prácticamente no afectan los resultados del ángulo θ_{min} y, por lo tanto, dejamos fijo este parámetro en todos los cálculos posteriores. Estamos ciertos que variaciones mayores de este parámetro afectan los resultados, sin embargo, valores de σ mayores son equivalentes a aumentar M y mantener σ en el intervalo antes mencionado, y los casos e valores del parámetro σ mucho menores, son similares a disminuir M y elegir σ en el mismo intervalo. En la figura 5 graficamos los resultados para un valor fijo de la

coordinación y tres diferentes valores del parámetro M .

La figura 6 corresponde a los resultados para diferentes coordinaciones. Incluimos coordinaciones bajas ($c = 2$ y $c = 4$) con el objeto de mostrar los efectos de variar este parámetro sobre todo el intervalo físico. El caso de coordinación dos es claramente diferente a los demás. Sin embargo, a medida que aumenta la coordinación, la forma de la curva θ_{min} como función de q se hace independiente del parámetro c , siendo practicamente la misma para las tres coordinaciones en que estamos interesados.

Todas las curvas presentan pequeños intervalos en q , centrados en torno a los valores enteros de este parámetro, para los cuales el sistema adopta ordenamientos convencionales, vale decir, ferromagnetismo ($\theta_{\text{min}} = 0$) y antiferromagnetismo ($\theta_{\text{min}} = 1$). Los valores enteros de q corresponde a interacciones conmensuradas con la red de período uno (ver Tabla (6-1)) y los ordenamientos convencionales son claramente conmensurados. Sin embargo, las fases ferromagnética y antiferromagnética aparecen para valores menores que el entero correspondiente, y se mantienen hasta valores mayores que el entero. Podemos notar además, que en estas regiones la curva se desvía de su comportamiento lineal, que extrapolado da sólo el valor entero de q para $\theta_{\text{min}} = 0$ o 1. El fenómeno antes descrito es conocido como "trabamiento de fase" (phase locking)⁽⁵⁰⁾, y se presenta cuando en un sistema hay dos periodicidades competitivas, que al estar conmensuradas bajan la energía del sistema. Sin embargo el sistema adopta este estado de menor energía un poco antes de que se presente el valor conmensurado y lo mantiene hasta un poco después, y al hacerlo se desvía del comportamiento que tiene en los casos no conmensurados. En nuestro caso tenemos que compiten la periodicidad de la interacción y la periodicidad de la red. La

estructura magnética que adopta el sistema como estado fundamental es el resultado de esta competencia. En los casos en que el valor de q es entero la interacción y la red poseen la misma periodicidad, a esto se debe que se presente este “trabamiento de fase”, en el cual hay una clara desviación del comportamiento lineal que presenta el sistema para los valores no enteros. Podemos ver que a medida que el parámetro M crece, el intervalo en q en que se produce el “trabamiento de fase” se reduce, manteniéndose siempre centrado respecto al valor entero. Debemos aclarar que en un sistema físico M no adopta valores superiores a diez o veinte veces el parámetro de red. Sin embargo, como un límite puramente matemático vemos que si M muy grande o cuando no hay apantallamiento, es decir todos los espines interactuando con todos, el intervalo en q se reduce sólo al valor entero de q , desapareciendo el efecto de “trabamiento de fase”.

Finalmente, con el objeto de ilustrar lo sensible que es el cálculo a la elección del número de vecinos, presentamos resultados (figuras 7 y 8) en los cuales se muestra el comportamiento de θ_{\min} en función de q , pero usando el número de n -ésimos vecinos de una red de Bethe de coordinación c , vale decir:

$$Z_c(n) = c(c - 1)^{n-1} . \quad (6-6)$$

Podemos ver en estas figuras que, a medida que M crece, las curvas para θ_{\min} poseen cada vez más estructura, lo mismo ocurre si incrementamos el parámetro σ . En ambos casos lo que sucede es que al incluir más capas de vecinos, como cada capa está multiplicada por el número de espines que en ella hay, que en este cálculo corresponden a $c(c - 1)^{n-1}$ para la capa n -ésima, sobreestimamos la interacción entre n -ésimos vecinos al multiplicarla por un peso “artificialmente” grande. La estructura que aparece corresponde a pequeños intervalos en q en torno a fracciones

“simples” cercanas a los valores enteros de q . Entendemos por fracciones “simples”, expresiones racionales p/r , donde p y r son primos relativos, pequeños. A medida que aumentamos el número de capas incluídas, las regiones antes mencionadas se hacen más estrechas, sin embargo, aparecen nuevos valores de q para los cuales se establecen ordenamientos convencionales. Una evidencia clara de que se trata de valores muy precisos de q , es la forma aguda en que se desvía la curva para alcanzar los valores $\theta_{\text{min}} = 0$ y $\theta_{\text{min}} = 1$.

Con el proposito de estudiar la estabilidad de los diferentes ordenamientos magnéticos que encontramos al evaluar θ_{min} como función de q , incluimos en las figuras 9 a 13, los resultados del cálculo de la energía por sitio en función del parámetro q . Nos interesan los resultados desde un punto de vista esencialmente cualitativo, ya que las curvas de energía obtenidas nos permiten determinar los ordenamientos más estable y la estabilidad relativa entre distintas elecciones de q . Podemos ver, de estas figuras, que a medida que el parámetro q aumenta la energía disminuye. Sin embargo, las curvas presentan mínimos locales en torno a los valores enteros de q y presentan máximos para los valores semienteros de éste. Lo anterior nos indica que los ordenamientos convencionales, que son los que se establecen para los valores enteros de q , son más estables que los órdenes helicoidales que se presentan para valores de q no enteros. Destacamos que el valor $q = 1/2$ se presenta como el más inestable, ya que es el mayor máximo local, hecho que es de especial importancia en el análisis de las relaciones de dispersión.

En la figura 9 se aprecia el efecto de variar σ en la energía. Nuevamente las variaciones de este parámetro practicamente no influyen en los resultados lo que confirma nuestra decisión de fijar este parámetro para los cálculos siguientes.

Las figuras 10 a 12 corresponden a los resultados con diferentes elecciones de la coordinación y en cada una incluimos los resultados para tres distintos valores de M .

El efecto de elegir el apantallamiento a diferentes distancias es de disminuir globalmente la energía. Otro efecto adicional es variar el ancho del mínimo local en torno a los valores enteros de q , vale decir, para valores crecientes de M los mínimos se estrechan. Sin embargo, a medida que se estrechan se hacen más profundos, manteniendo la mayor estabilidad de los ordenamientos ferromagnético y antiferromagnético. La forma de los máximos se mantiene inalterada al variar M , mostrando sólo diferencias en las zonas periféricas al mínimo, vale decir, en las zonas donde comienza o termina el efecto de “trabamiento de fase”.

La influencia de la coordinación la apreciamos en la figura 13, en ella vemos que a medida que c aumenta los ordenamientos magnéticos, cualesquiera que ellos sean, son más estables. La forma de las curvas no cambia, sólo los valores de la energía por sitio disminuyen a medida que crece la coordinación. En la figura 14 incluimos los resultados usando el número original de n -ésimos vecinos de una red de Bethe de coordinación c y podemos ver que el sistema se vuelve totalmente inestable frente a pequeñas variaciones del parámetro q , evidenciando la necesidad de cambiar el número original de n -ésimos vecinos para evitar resultados sin sentido físico.

Las figuras 15 a 26 muestran la relación de dispersión $\omega = \omega(k)$. En ellas ilustramos los resultados con distintos valores del parámetro de conmensurabilidad (q), la distancia a la cual comienza el apantallamiento (M) y la coordinación, lo que nos permite una visión global de como cambia la relación de dispersión como función de los diferentes parámetros del modelo. Nuevamente, las relaciones de dispersión

obtenidas están bien definidas en todo el espacio k . Sin embargo, para lograr esto, hemos debido introducir un cambio en los factores W_1 y W_2 de la ecuación (3-27).

Las ecuaciones originales son:

$$\begin{aligned}
 W_1(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} V_n \cos(n\theta) \left(c(c-1)^{n-1} \right. \\
 &\quad \left. - (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2}{c-1} \frac{\text{sen}((n-1)\phi)}{\text{sen}(\phi)} \right) \right), \\
 W_2(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} V_n \left(\cos(n\theta) c(c-1)^{n-1} \right. \\
 &\quad \left. - (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2}{c-1} \frac{\text{sen}((n-1)\phi)}{\text{sen}(\phi)} \right) \right),
 \end{aligned} \tag{6-7}$$

pero, ahora las escribimos de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 W_1(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} V_n \cos(n\theta) \left(Z_c(n) \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{\frac{(c-1)Z_c(n)}{c}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2}{c-1} \frac{\text{sen}((n-1)\phi)}{\text{sen}(\phi)} \right) \right), \\
 W_2(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} V_n \left(\cos(n\theta) Z_c(n) \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{\frac{(c-1)Z_c(n)}{c}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2}{c-1} \frac{\text{sen}((n-1)\phi)}{\text{sen}(\phi)} \right) \right).
 \end{aligned} \tag{6-8}$$

Si reemplazamos $Z_c(n)$ por el número de n -ésimos vecinos correspondiente a una red de Bethe de coordinación c , es decir, por la expresión de $Z_c(n)$ dada en (6-6), recobramos las expresiones (6-7). Sin embargo, para evaluar θ_{\min} , hemos usado una expresión del número de n -ésimos vecinos distinta, dada en la ecuación (6-5) y, por lo tanto, para ser consistentes, debemos usar el mismo $Z_c(n)$ en todos los cálculos. Lo anterior implica que las relaciones (6-8) difieren de (6-7) en este caso, lo cual influye directamente sobre la relación de dispersión, ecuación (3-29), la cual tiene la forma

$$\omega_{\theta}(\phi) = \sqrt{W_1(\phi, \theta)W_2(\phi, \theta)}, \quad \text{donde } \phi = ka. \tag{6-9}$$

En las figuras 15 a 17 estudiamos la influencia del parámetro M sobre la relación de dispersión y podemos ver que, a pesar de las diversas formas que adoptan las curvas de dispersión obtenidas al elegir diferentes valores de la coordinación o del parámetro q , el efecto de variar M es siempre el mismo. Si fijamos c y q , como el valor de σ quedo fijado de antemano, nos encontramos que al aumentar el valor de M , es decir, aumentar la distancia para la cual el apantallamiento empieza a actuar, la forma de las curvas sufre muy poca variación. Sin embargo, las curvas son trasladadas a valores de ω mayores, es decir, a energías más altas, implicando que la influencia de un mayor número de capas de vecinos, que es el efecto de aumentar M , aumenta el costo en energía para excitar el sistema con un valor fijo de ka . Dentro de nuestra elecciones de q incluimos un caso conmesurado y algunos casos no conmesurados, con la intención de cubrir diferentes situaciones en el análisis del efecto producido al variar el parámetro M .

El efecto de variar la coordinación lo podemos apreciar en las figuras 18 a 20. En ellas vemos que a medida que la coordinación aumenta, la forma de las curvas cambia muy suavemente, haciéndose más profundos los mínimos y más altos los máximos. Nuevamente, para valores de c crecientes, las curvas son trasladadas a valores de ω mayores, es decir, a energías a más altas. Esto se explica pues al aumentar la coordinación el número de vecinos por capa aumenta; por lo tanto, aumenta el costo en energía de excitar el sistema para un valor fijo de ka , debido a que para establecer la misma excitación es necesario alterar la orientación de un número mayor de espines.

También interesa estudiar como varía la forma de la relación de dispersión como función de q . Las figuras 18 a 24 muestran las relaciones de dispersión para

diferentes valores del parámetro q , para un valor fijo de la coordinación. En la figura 21 podemos ver las curvas correspondiente a valores de $q \leq 1/2$; todas ellas presentan una forma anómala, ya que para valores grandes de ka las curvas presentan un mínimo menor que en el caso en que no hay excitaciones, es decir, para $ka = 0$. Podemos ver que para $ka = \theta_{\min}$ las curvas ya no presentan un mínimo, si no un punto de inflexión. El hecho de que $ka = 0$ no sea el mínimo absoluto de la curva, y que tampoco lo sea $ka = \theta_{\min}$, nos dice que para estos valores de q nuestro formalismo no es capaz de entregarnos el estado fundamental, como tampoco de predecir su periodicidad, tal como sucedía en el capítulo anterior. Podemos ver que para valores mayores de q la situación cambia. En la figura 22 se incluyen las curvas de dispersión para valores de $q = 0.75, 0.9, 1$. Para $q = 0.75$ tenemos que $ka = 0$ es el mínimo absoluto de la curva y $ka = \theta_{\min}$ pasa a ser un mínimo local. Para $q = 0.9$ vemos como la relación de dispersión tiende a hacerse simétrica respecto a $\pi/2$, característica usual de las relaciones de dispersión antiferromagnéticas. El caso $q = 1$, corresponde claramente a una relación antiferromagnética en total acuerdo con los resultados previos de θ_{\min} . También podemos entender que para valores de q cercanos a uno, las curvas tiendan a parecerse al caso antiferromagnético debido a que esos valores de q corresponden a la zona de “trabamiento de fase” del caso antiferromagnético. Las curvas de dispersión para valores del parámetro q en el intervalo $[1, 1.5]$ presentan su mínimo absoluto para $ka = 0$ y un mínimo local en $ka = \theta_{\min}$. Para valores de $q > 1.5$ las relaciones de dispersión se asemejan a una curva de dispersión ferromagnética; a medida que q se acerca al valor dos el mínimo local en $ka = \theta_{\min} \rightarrow 0$. Las figuras 23 y 24 corresponden a las relaciones de dispersión con valores de $[1 \leq q < 2]$.

mínimo local en $ka = \theta_{\min} \rightarrow 0$. Las figuras 23 y 24 corresponden a las relaciones de dispersión con valores de $[1 \leq q < 2]$.

Incluimos a continuación, en la figura 25, para las diferentes coordinaciones, el cálculo de la posición del mínimo absoluto de la relación de dispersión como función de q . Si para un determinado valor de q , la posición del mínimo absoluto es $ka = 0$, podemos concluir que nuestro formalismo nos da la estructura del estado fundamental, y si por el contrario, la posición del mínimo absoluto es $ka \neq 0$, concluimos que para ese valor de q el formalismo falla. Podemos ver en la figura que variar la coordinación influye muy poco sobre los resultados, y que para $q > 0.66$, en todos los caso, la localización del mínimo absoluto es $ka = 0$. Es decir, para todos los valores de $q > 0.66$ el formalismo es capaz de determinar el ordenamiento magnético del estado fundamental. Sin embargo, para valores de $q < 0.62$ el formalismo falla siempre. Una posible explicación de este hecho es que esta región de q es la más inestable, debido a que en ella se presentan los valores máximos de la energía por sitio como función de q .

Finalmente, las siguientes tres figuras (de la 26 a la 28) presentan gráficos tridimensionales, uno para cada valor de la coordinación, en los cuales tratamos de mostrar en forma global como varía la relación de dispersión como función del parámetro q . Podemos ver en ellas que la variación de la coordinación influye sólo en los valores de ω , manteniendose la misma forma de la superficie para todos los casos. La forma que presenta la superficie es creciente como función de q , tiene un máximo local en el plano $q = 1$ y luego decrece hasta un mínimo local en el plano $q = 3/2$ para volver a crecer a medida que $q \rightarrow 2$. Los dos máximos presentes en $q = 1$ y $q = 2$, son consecuencia de que los ordenamientos antiferromagnético,

3. Discusión y Conclusiones.

Para los sistemas estudiados en este capítulo, es decir, sistemas con coordinación alta (6,8,12), cuyo Hamiltoniano efectivo es el de Heisenberg y con interacciones de largo alcance, dadas por el modelo RKKY, nuevamente, no existen muchos resultados ni numéricos ni analíticos. Por esta razón nuestros resultados, a pesar de ser sólo un primer intento de estudiar este tipo de sistema, constituyen un antecedente para futuro cálculos y nos permiten además sacar algunas conclusiones.

Una conclusión importante, considerando los resultados obtenidos, es que utilizar el número de vecinos original de la red de Bethe introduce factores de peso no físicos, los cuales desestabilizan el sistema, en el caso de coordinaciones altas y una interacción de largo alcance. El número de n -ésimos vecinos, que hemos definido para redes cúbicas, ecuación (6-5), resuelve el problema de la sobreestimación. Esta manera de contar los vecinos puede ser extendida a otro tipo de redes, lo cual permite usar la aproximación de red de Bethe, dando una alternativa para resolver el problema de la sobreestimación del número de vecinos lejanos, el cual es uno de los mayores obstáculos para el uso de esta aproximación en sistemas en los cuales las interacciones son de largo alcance.

Podemos concluir del estudio de θ_{\min} , es decir, el ángulo entre espines primeros vecinos que minimiza la energía por sitio, como función de M , c y σ , lo siguiente:

- 1) Si nos restringimos a un intervalo pequeño en el parámetro σ , las variaciones de éste no tienen un efecto relevante en los resultados; variaciones mayores en este parámetro son equivalentes a variaciones en M .
- 2) El efecto de variar la coordinación, cuando nos restringimos a estructuras cúbicas, no es importante en los resultados; sin embargo, las coordinaciones bajas afectan la forma de las curvas de

θ_{\min} como función de q . 3) En todos los casos estudiados se presenta el fenómeno de “trabamiento de fase”, discutido en la sección anterior, teniéndose que para valores crecientes del parámetro M el ancho de los intervalos en q , para los cuales se presenta el “trabamiento”, disminuye. 4) Exceptuando las regiones para las cuales se presenta el “trabamiento”, el comportamiento de las curvas es lineal en q , y las regiones en que el sistema adopta el orden helicoidal, son mucho mayores que las regiones en que se establecen ordenamientos convencionales, vale decir, ferromagnetismo y antiferromagnetismo. Lo anterior, es un buen argumento para explicar los ordenamientos presentes en las tierras raras; sin embargo, el ordenamiento antiferromagnético no está presente, lo cual puede ser consecuencia de que el Hamiltoniano que describe el comportamiento magnético de las tierras raras es el de Heisenberg, más un primer término correctivo asociado a una anisotropía hexagonal. Esta última debe ser la responsable de eliminar el ordenamiento antiferrromagnético, además de ayudar a estabilizar algunos de los órdenes helicoidales.

Otro aspecto estudiado en este capítulo es la energía por sitio como función del parámetro q . Este estudio nos permite mostrar explícitamente que los ordenamientos convencionales son más estables que los órdenes helicoidales; esto lo concluimos a partir de los mínimos locales que presentan las curvas de energía por sitio como función de q , para los valores enteros de este parámetro. Otro aspecto relevante de las curvas de energía es que para valores semienteros del parámetro q ellas presentan máximos locales, indicando que estos valores de q son los más inestables, lo cual se refleja en las relaciones de dispersión. El efecto de aumentar M o la coordinación es incluir un mayor número de espines interactuando, haciendo más estable la configuración, lo que queda en evidencia ya que las curvas de energía mantienen su forma,

pero sufren un corrimiento a valores menores de energía.

Las relaciones de dispersión que obtenemos están bien definidas; hemos logrado esto incorporando en los factores W_1 y W_2 de la ecuación (3-27), la expresión del número de n -ésimos vecinos dada en la ecuación (6-5), que es la misma que usamos para evaluar θ_{\min} . Lo anterior pone nuevamente de manifiesto la importancia de cambiar el número original de n -ésimos vecinos de la red de Bethe, para evitar resultados sin sentido, producto de la sobreestimación que da la red de Bethe para el número de sitios de las capas muy lejanas del sitio de interés.

Podemos concluir, a partir de los resultados obtenidos al variar los parámetros c y M , que el incluir más espines interactuando, ya sea aumentando la coordinación o aumentando la distancia a la cual empieza a actuar el apantallamiento, se traduce en aumento del costo en energía que tiene excitar un modo particular. Esto se explica debido a que se debe alterar la orientación de un número mayor de espines para establecer el mismo modo.

El comportamiento de las curvas de dispersión como función del parámetro q es muy variado, presentándose dos intervalos claramente distintos. El primer intervalo es aquel en que las relaciones de dispersión nos indican que el formalismo no es capaz de dar cuenta de la periodicidad del estado fundamental. El otro intervalo presente, es donde el formalismo funciona sin problema, encontramos distintos tipos de relaciones de dispersión, a saber, del ferromagnética, antiferromagnética y una gran cantidad de situaciones intermedias. El intervalo $(0, 0.66)$, donde el límite superior tiene una débil dependencia de la coordinación, es el que presenta problemas para el formalismo, ya que, el mínimo absoluto de la curva de dispersión no es $ka = 0$, es decir, la ausencia de excitaciones, sino un $ka \neq 0$, que se interpreta

como el congelamiento de un magnón como estado fundamental, cuya periodicidad no somos capaces de predecir por nuestro formalismo. Para valores mayores de q desaparece el problema, dando cuenta nuestro formalismo de la periodicidad del estado fundamental y de su espectro de excitaciones. Una explicación posible de este fracaso del formalismo, es que la región de q donde se presenta el problema, es la más inestable de acuerdo a los resultados de la energía por sitio. Sin embargo, que exista una región para la cual suponer un estado fundamental con orden helicoidal no es la solución del problema, deja abierta la posibilidad de ordenamientos magnéticos más complejos que el ferromagnético, antiferromagnético o un magnón helicoidal, los cuales claramente están presentes en las tierras raras, Koehler⁽⁵¹⁾ y Rhyne⁽⁵²⁾.

Finalmente podemos resaltar, que la mayor estabilidad de los ordenamientos convencionales, los cuales son conmensurados y presentan el fenómeno de "trabamiento" de fase, se ve como las curvas de máximo valor en los gráficos de la relación de dispersión en función de q , lo que significa que excitar un modo, cuando el estado fundamental es muy estable, tiene un alto costo en energía.

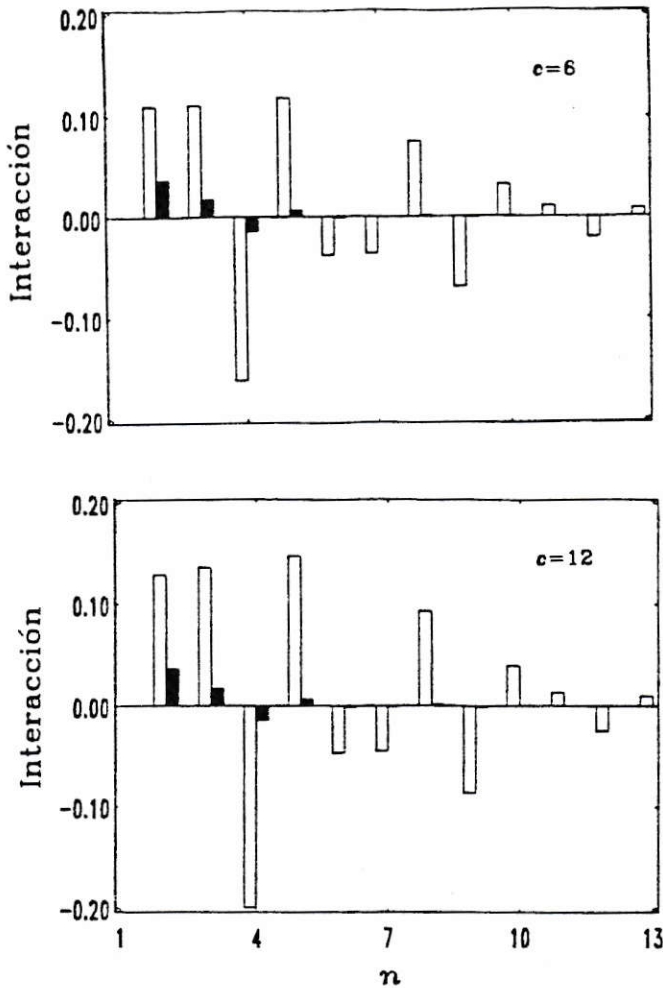


FIGURA 1. Interacción normalizada entre dos espines n -ésimos vecinos, $V_n/|V_1|$ (barras negras), y la interacción anterior multiplicada por el número de n -ésimos vecinos definido en ec. (6-5), $Z_c(n)V_n/|Z_c(1)V_1|$ (barras blancas), como función de n . Cada figura corresponde a un valor de la coordinación c , y en ambos casos $\text{sgn}(V_1) = -1$. Los valores de los parámetros son $q = 0.765$, $M = 10$ y $\sigma = 5$.

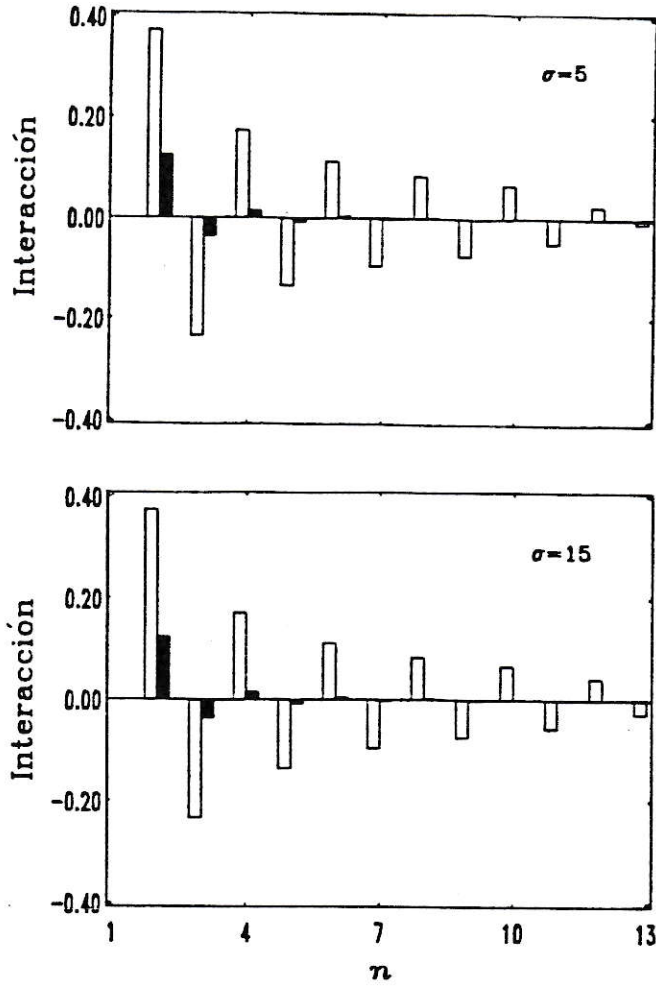


FIGURA 2. Interacción normalizada entre dos espines n -ésimos vecinos, $V_n/|V_1|$ (barras negras), y la interacción anterior multiplicada por el número de n -ésimos vecinos definido en ec. (6-5), $Z_c(n)V_n/|Z_c(1)V_1|$ (barras blancas), como función de n . Cada figura corresponde a un valor del parámetro σ , y en ambos casos $\text{sgn}(V_1) = -1$. Los valores de los parámetros son $q = 1.000$, $c = 6$ y $M = 10$.

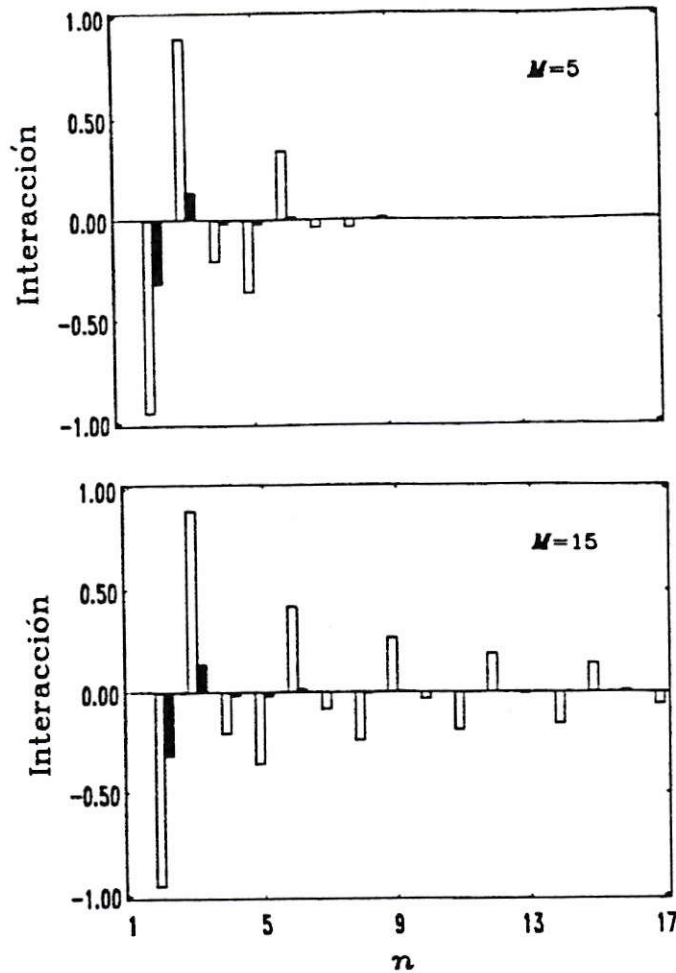


FIGURA 3. Interacción normalizada entre dos espines n -ésimos vecinos, $V_n/|V_1|$ (barras negras), y la interacción anterior multiplicada por el número de n -ésimos vecinos definido en ec. (6-5), $Z_c(n)V_n/|Z_c(1)V_1|$ (barras blancas), como función de n . Cada figura corresponde a un valor del parámetro M , y en ambos casos $\text{sgn}(V_1) = -1$. Los valores de los parámetros son $q = 1.345$, $c = 6$ y $\sigma = 5$.

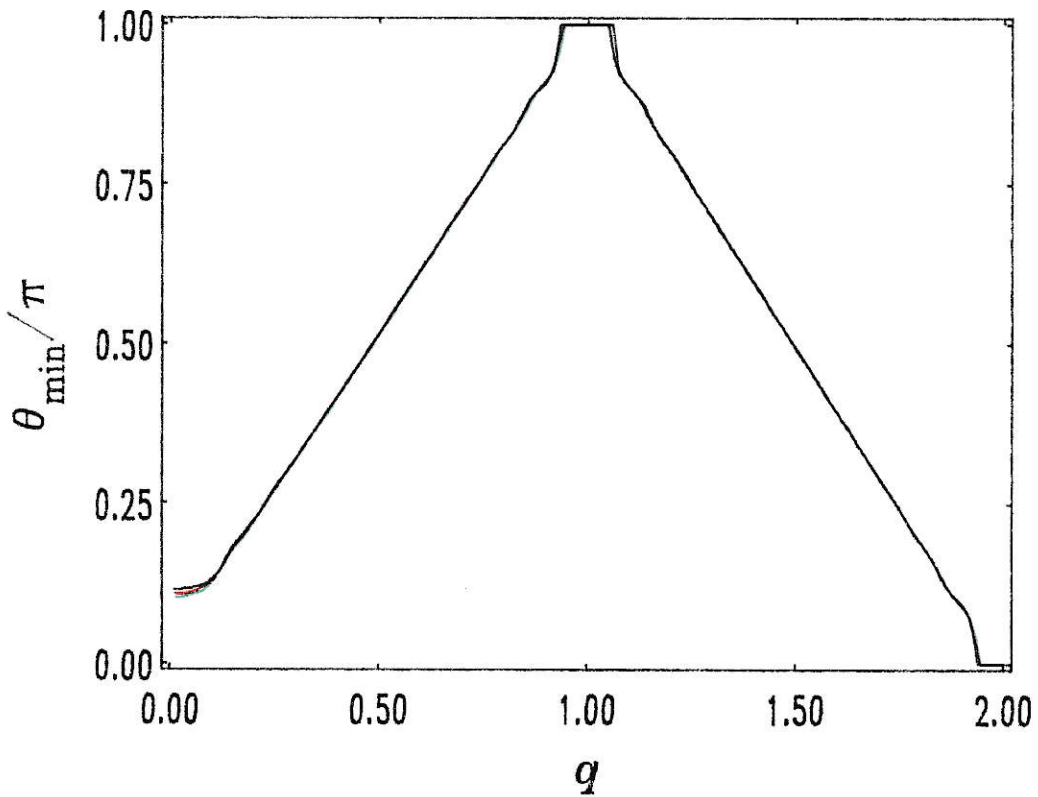


FIGURA 4. Graficamos θ_{\min}/π como función de q para tres valores del parámetro σ , en todos los casos $M = 10$ y $c = 6$. La curva correspondiente a $\sigma = 2$ es negra, a $\sigma = 4$ es roja y a $\sigma = 6$ es verde; sin embargo, las tres curvas prácticamente no se diferencian.

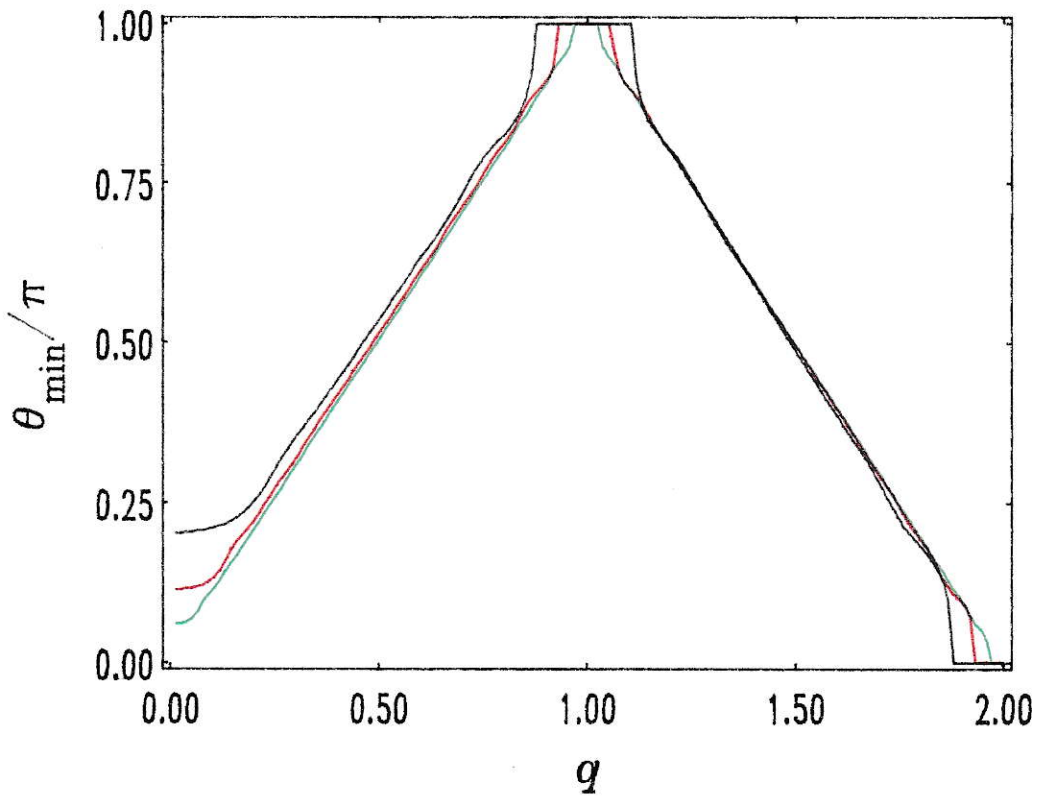


FIGURA 5. Graficamos θ_{\min}/π como función de q para tres valores del parámetro M , en todos los casos $\sigma = 2$ y $c = 12$. La curva correspondiente a $M = 5$ es negra, a $M = 10$ es roja y a $M = 20$ es verde.

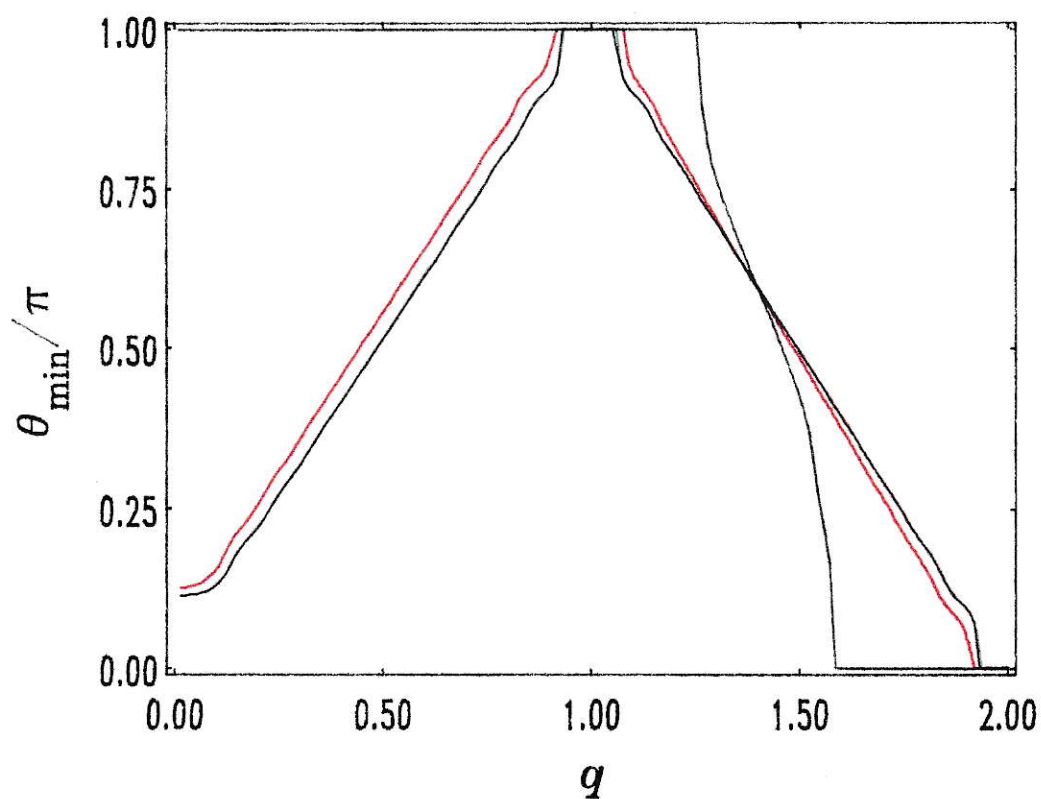


FIGURA 6. Graficamos θ_{\min}/π como función de q para cinco valores de la coordinación c , en todos los caso $M = 10$ y $\sigma = 2$. La curva correspondiente a $c = 2$ es negra, a $c = 4$ es roja, a $c = 6$ es verde, a $c = 8$ es violeta y a $c = 12$ es naranja. Sin embargo, las tres curvas correspondientes a $c = 6, 8, 12$ prácticamente no se diferencian, fundiéndose en la curva negra con forma similar a la roja.

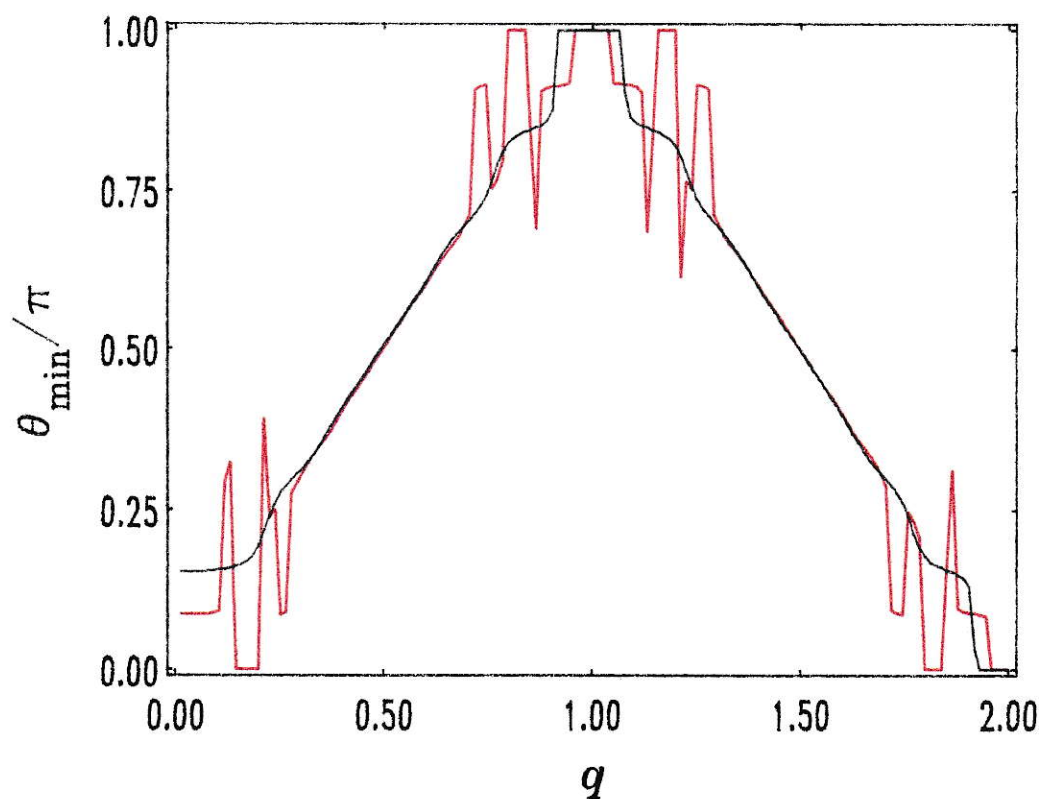


FIGURA 7. Graficamos θ_{\min}/π como función de q para dos valores del parámetro M usando el número original de n -ésimos vecinos de la red de Bethe. En todos los casos $\sigma = 2$ y $c = 6$. La curva correspondiente a $M = 5$ es negra y a $M = 10$ es roja.

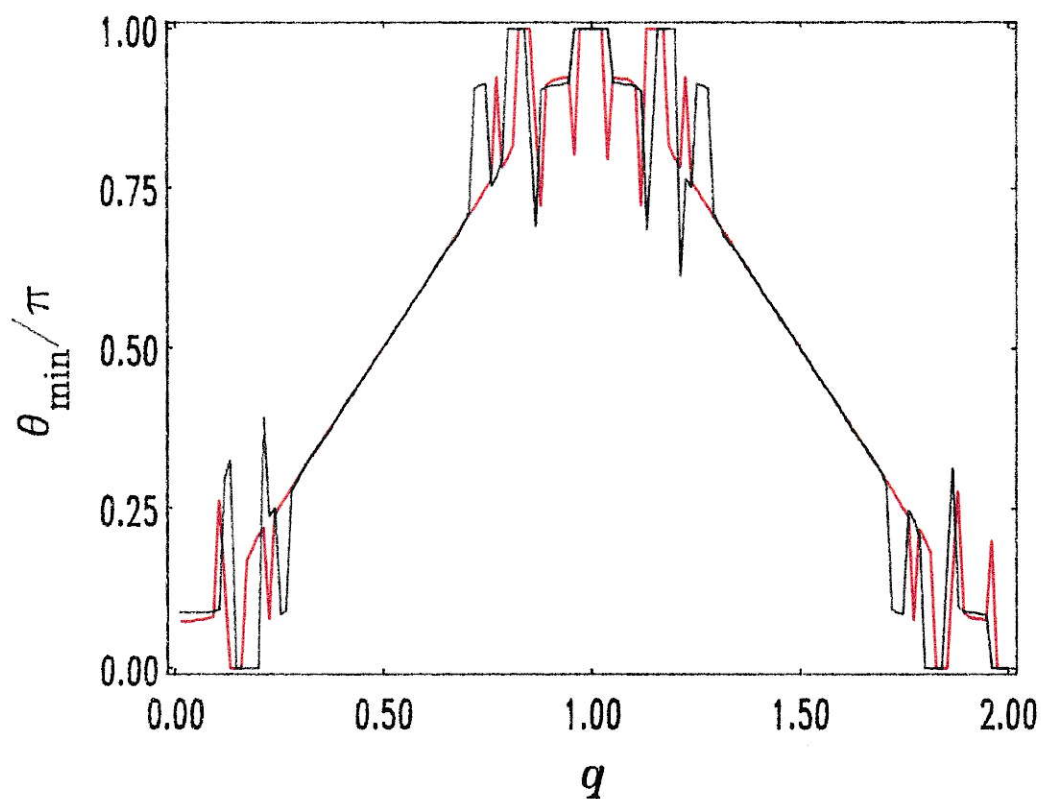


FIGURA 8. Graficamos θ_{\min}/π como función de q para dos valores del parámetro σ usando el número original de n -ésimos vecinos de la red de Bethe. En todos los casos $M = 10$ y $c = 6$. La curva correspondiente a $\sigma = 5$ es negra y a $\sigma = 10$ es roja.

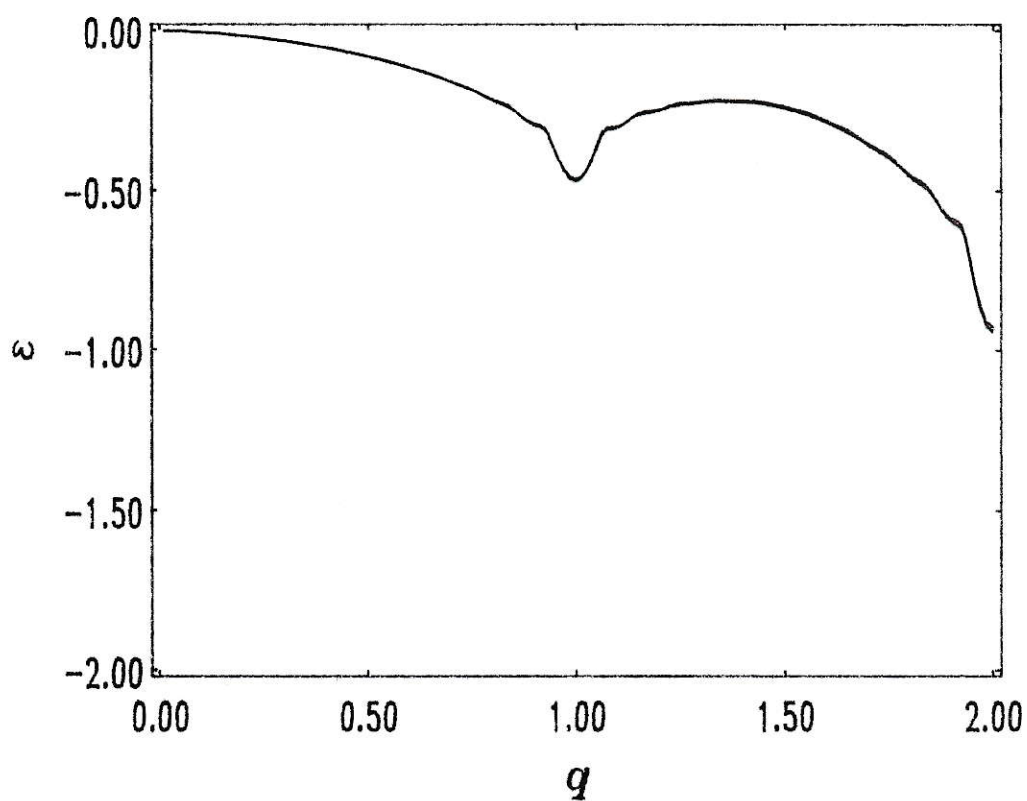


FIGURA 9. Energía por sitio como función de q para tres valores del parámetro σ . En todos los casos $M = 10$ y $c = 6$. La curva correspondiente a $\sigma = 2$ es negra, a $\sigma = 4$ es roja y a $\sigma = 6$ es verde; sin embargo, las tres curvas prácticamente no se diferencian.

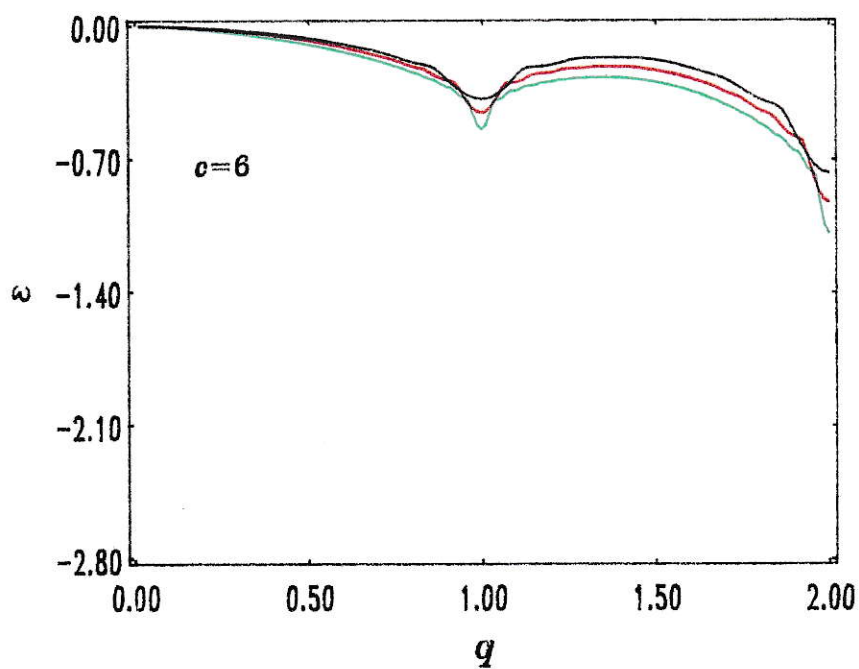


FIGURA 10. Energía por sitio como función de q para tres valores del parámetro M . En todos los casos $\sigma = 2$ y $c = 6$. La curva correspondiente a $M = 5$ es negra, a $M = 10$ es roja y a $M = 20$ es verde.

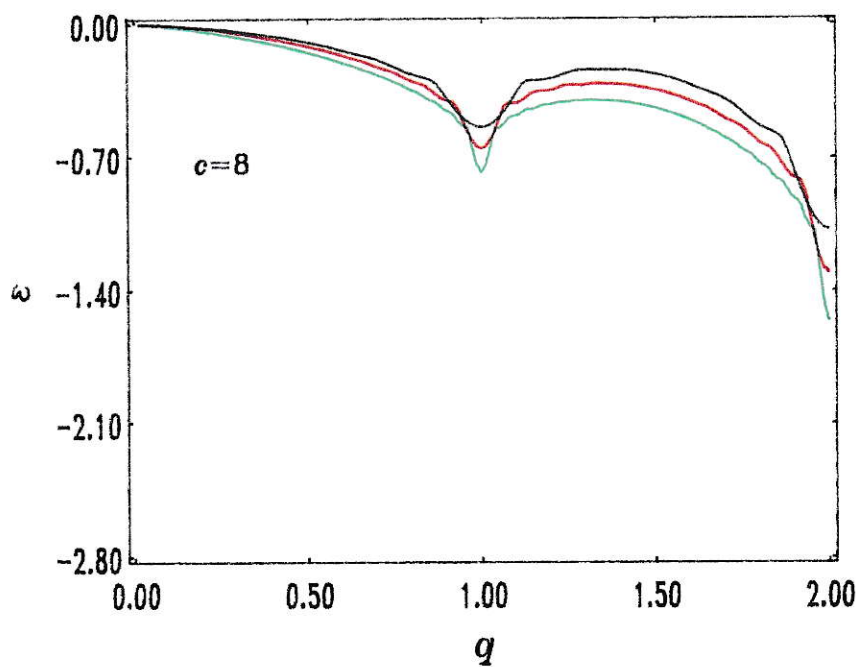


FIGURA 11. Energía por sitio como función de q para tres valores del parámetro M . En todos los casos $\sigma = 2$ y $c = 8$. La curva correspondiente a $M = 5$ es negra, a $M = 10$ es roja y a $M = 20$ es verde.

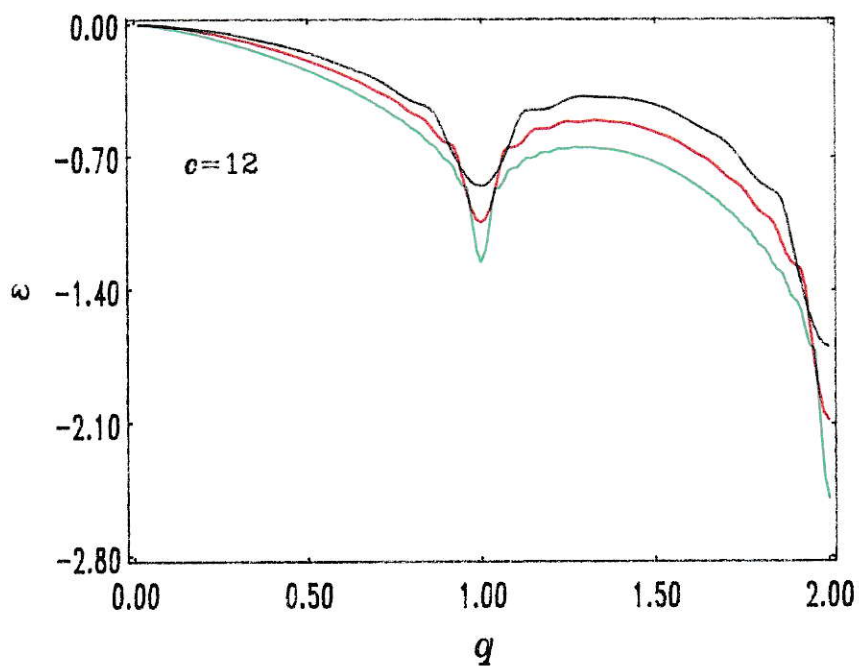


FIGURA 12. Energía por sitio como función de q para tres valores del parámetro M . En todos los casos $\sigma = 2$ y $c = 12$. La curva correspondiente a $M = 5$ es negra, a $M = 10$ es roja y a $M = 20$ es verde.

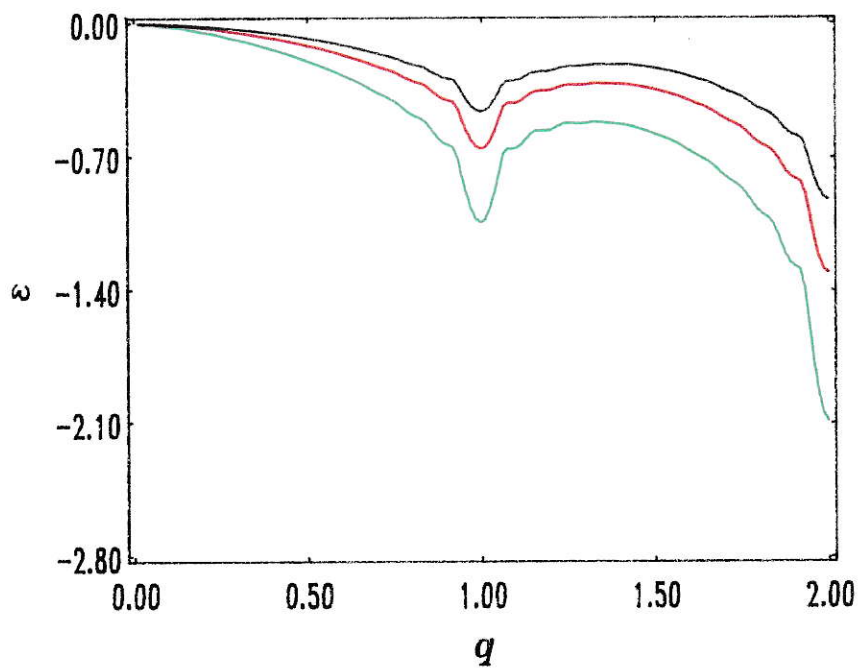


FIGURA 13. Energía por sitio como función de q para tres valores de la coordinación c . En todos los caso $M = 10$ y $\sigma = 2$. La curva correspondiente a $c = 6$ es negra, a $c = 8$ es roja y a $c = 12$ es verde.

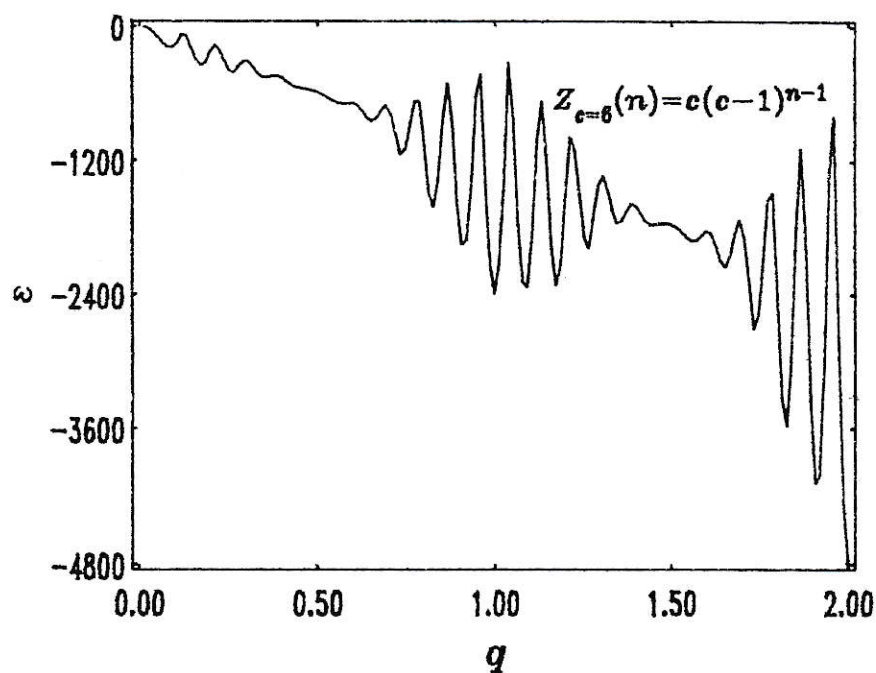


FIGURA 14. Energía por sitio como función de q usando el número original de n -ésimos vecinos de la red de Bethe. El valor de los parámetros es $M = 10$, $\sigma = 2$ y la coordinación es $c = 6$.

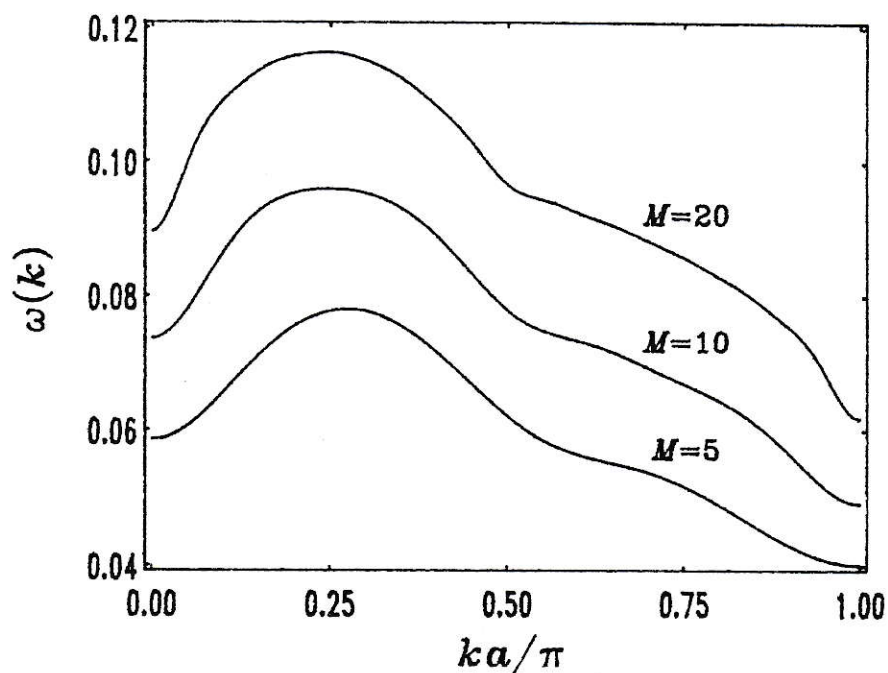


FIGURA 15. Relaciones de dispersión de magnones para $q = 0.5000$, $\sigma = 2$ y la coordinación $c = 6$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del parámetro M , se tiene que para $M = 5$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.543$, para $M = 10$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.515$ y para $M = 20$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.505$.

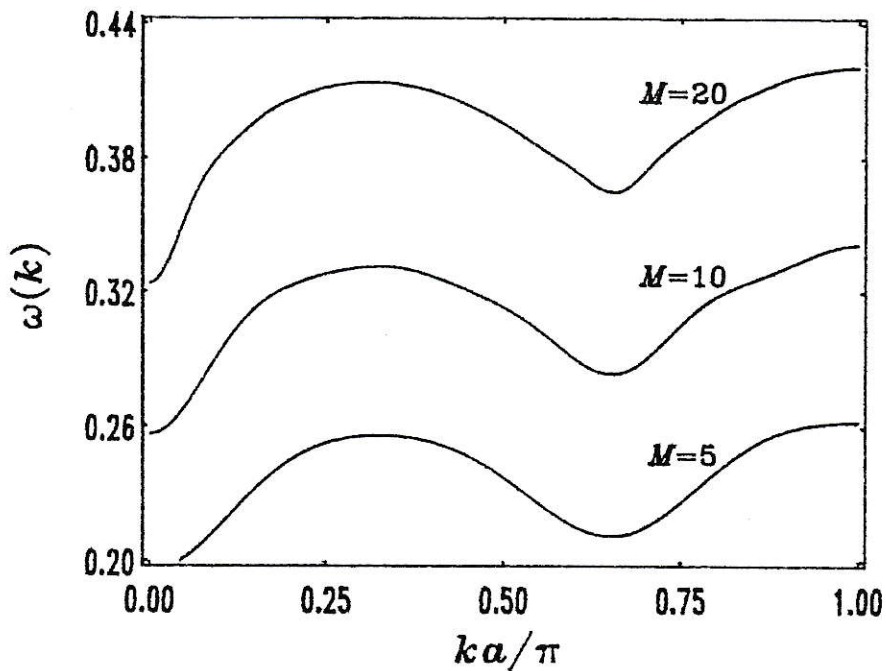


FIGURA 16. Relaciones de dispersión de magnones para $q = 1.3276$, $\sigma = 2$ y la coordinación $c = 8$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del parámetro M , se tiene que para $M = 5$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.665$, para $M = 10$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.670$ y para $M = 20$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.673$.

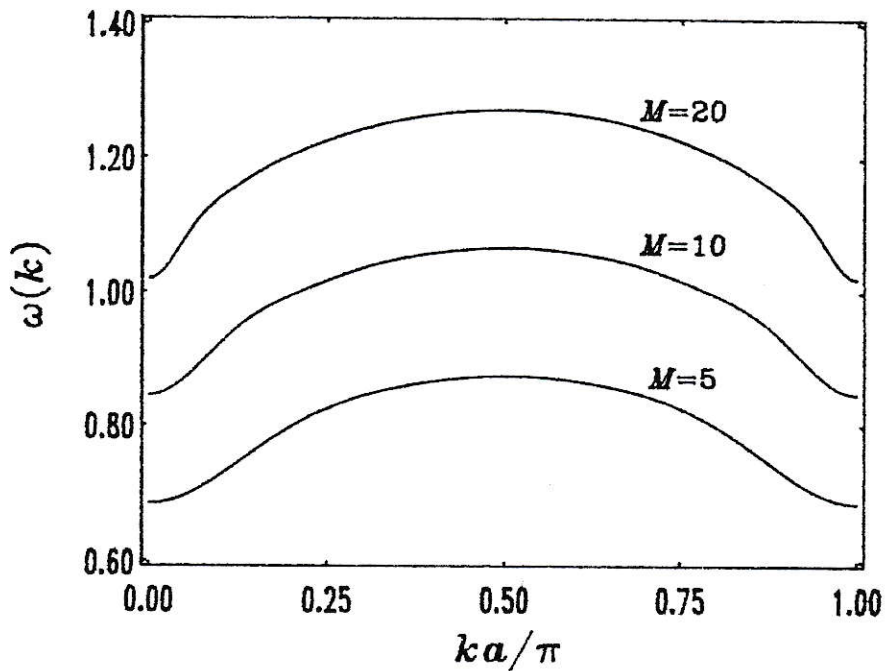


FIGURA 17. Relaciones de dispersión de magnones para $q = 1.0000$, $\sigma = 2$ y la coordinación $c = 6$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del parámetro M , se tiene que para $M = 5$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 1.000$, para $M = 10$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 1.000$ y para $M = 20$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 1.000$.

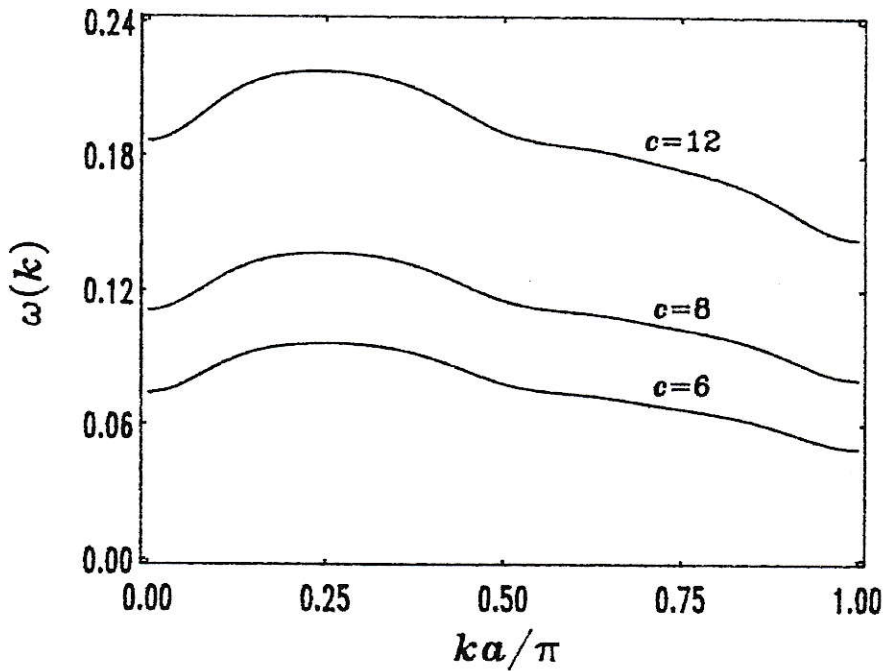


FIGURA 18. Relaciones de dispersión de magnones para $q = 0.5000$, $M = 10$ y $\sigma = 2$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la coordinación c , se tiene que para $c = 6$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.515$, para $c = 8$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.515$ y para $c = 12$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.515$.

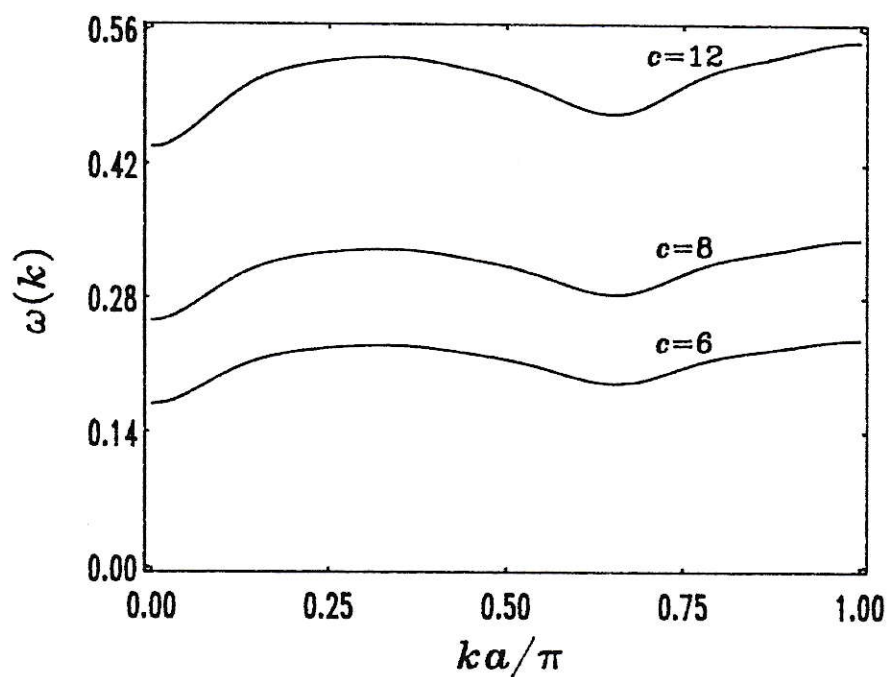


FIGURA 19. Relaciones de dispersión de magnones para $q = 1.3276$, $M = 10$ y $\sigma = 2$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la coordinación c , se tiene que para $c = 6$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.670$, para $c = 8$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.670$ y para $c = 12$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 0.670$.

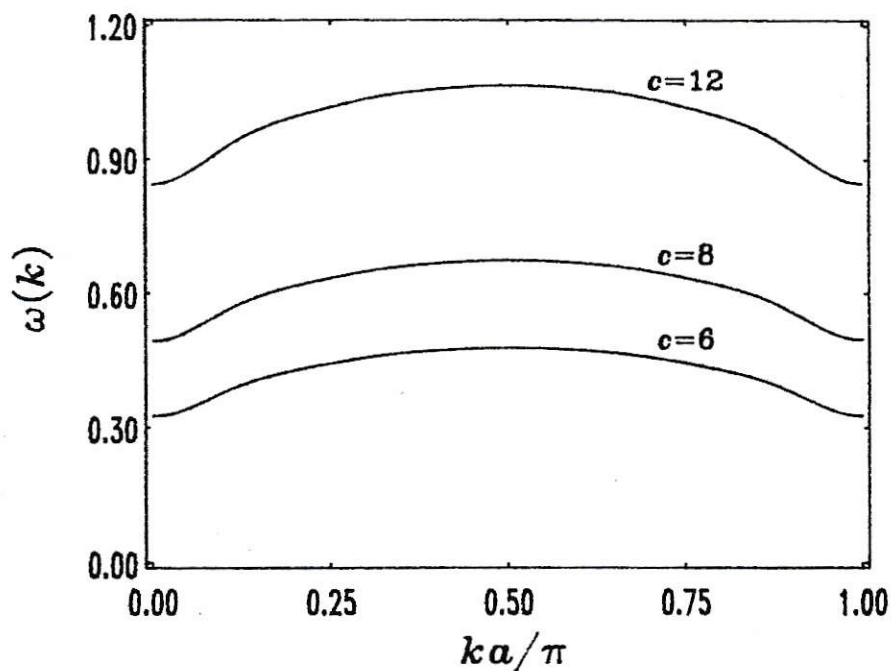


FIGURA 20. Relaciones de dispersión de magnones para $q = 1.0000$, $M = 10$ y $\sigma = 2$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores de la coordinación c , se tiene que para $c = 6$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 1.000$, para $c = 8$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 1.000$ y para $c = 12$ el valor de $\theta_{\min}/\pi = 1.000$.

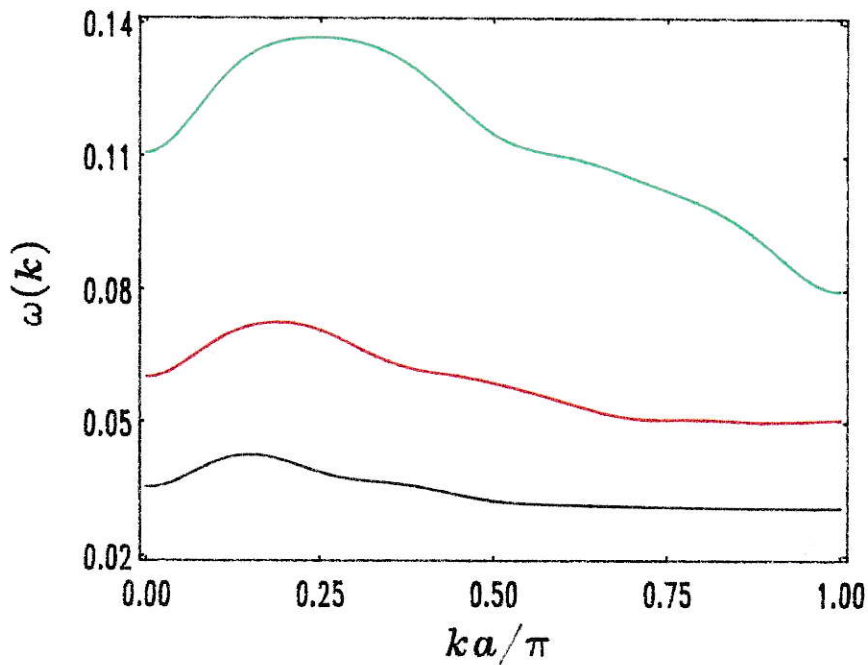


FIGURA 21. Relaciones de dispersión de magnones para coordinación $c = 8$, con $M = 10$ y $\sigma = 2$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del parámetro q ; se tiene que $q = 0.2390$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.260$ para la curva negra, $q = 0.3333$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.350$ para la curva roja, y $q = 0.5000$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.500$ para la curva verde.

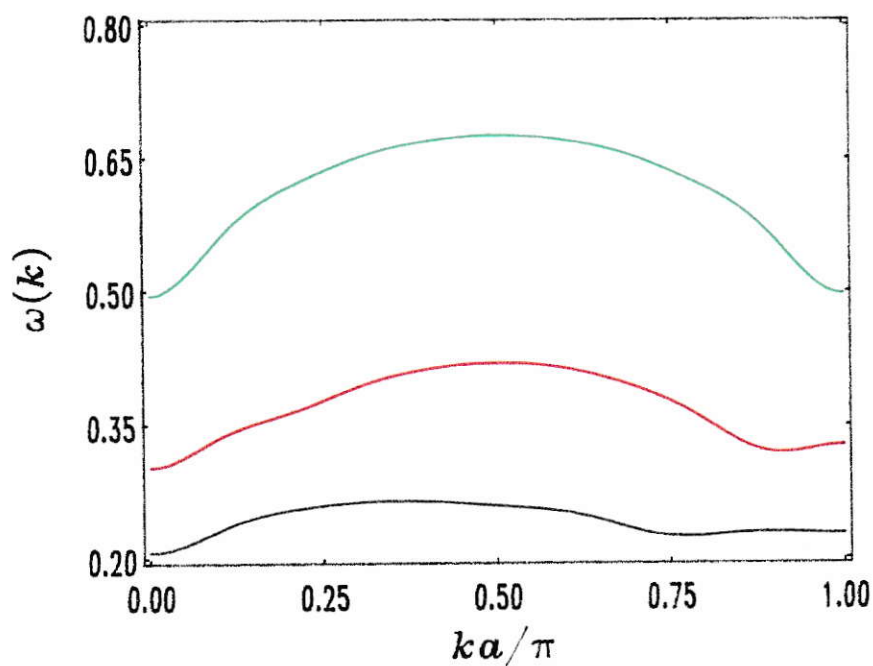


FIGURA 22. Relaciones de dispersión de magnones para coordinación $c = 8$, con $M = 10$ y $\sigma = 2$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del parámetro q , se tiene que $q = 0.7500$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.763$ para la curva negra, $q = 0.9000$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.908$ para la curva roja, y $q = 1.0000$ y $\theta_{\min}/\pi = 1.000$ para la curva verde.

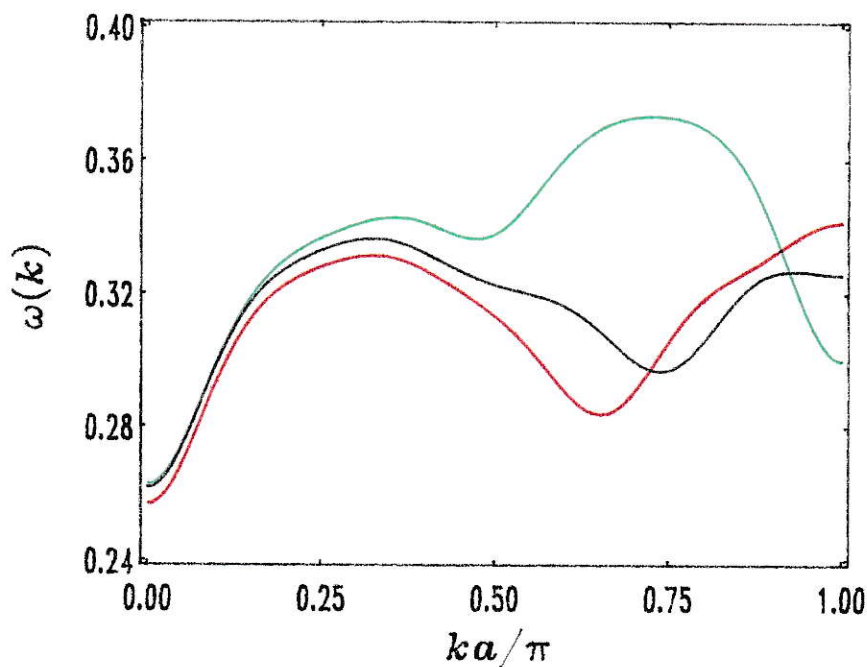


FIGURA 23. Relaciones de dispersión de magnones para coordinación $c = 8$, con $M = 10$ y $\sigma = 2$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del parámetro q , se tiene que $q = 1.2390$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.763$ para la curva negra, $q = 1.3276$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.670$ para la curva roja, y $q = 1.5000$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.495$ para la curva verde.

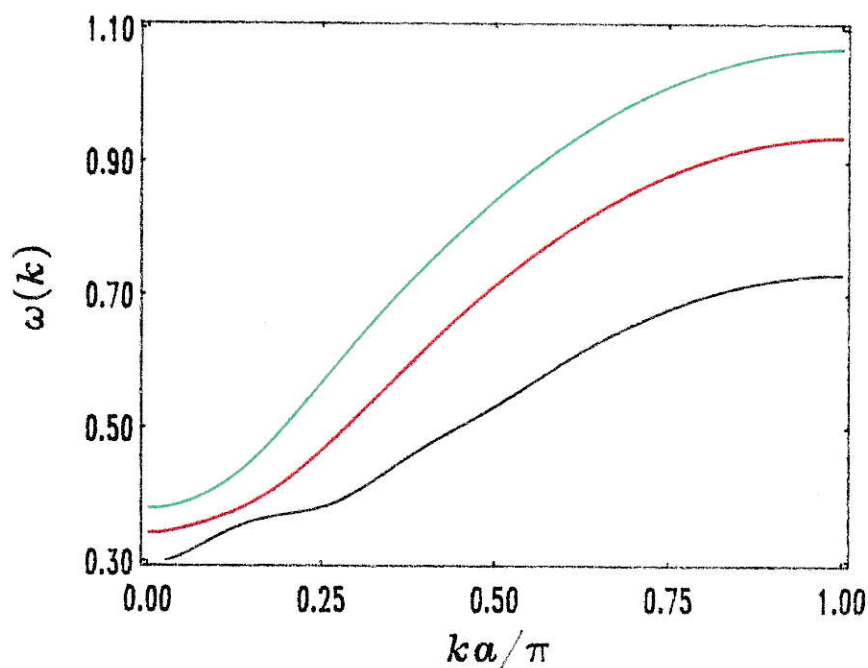


FIGURA 24. Relaciones de dispersión de magnones para coordinación $c = 8$, con $M = 10$ y $\sigma = 2$. Las diferentes curvas corresponden a distintos valores del parámetro q , se tiene que $q = 1.7390$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.255$ para la curva negra, $q = 1.8500$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.138$ para la curva roja, y $q = 1.9000$ y $\theta_{\min}/\pi = 0.095$ para la curva verde.

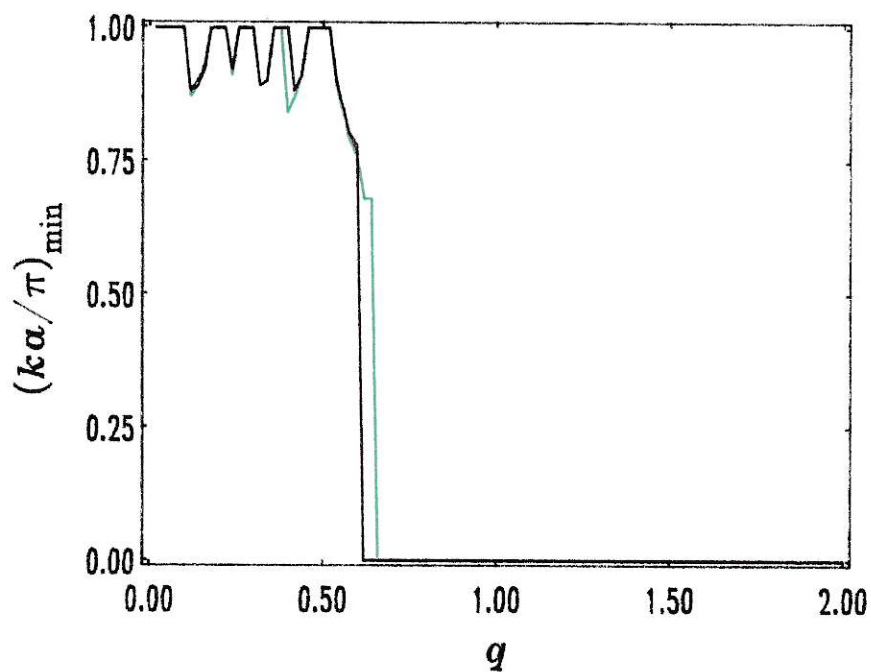


FIGURA 25. Valor de ka/π para el cual la relación de dispersión es mínima como función de q , para tres valores diferentes de la coordinación. Las curvas correspondientes a $c = 6$ (negra) y a $c = 8$ (roja) se funden en una sola, la curva en verde corresponde a $c = 12$.

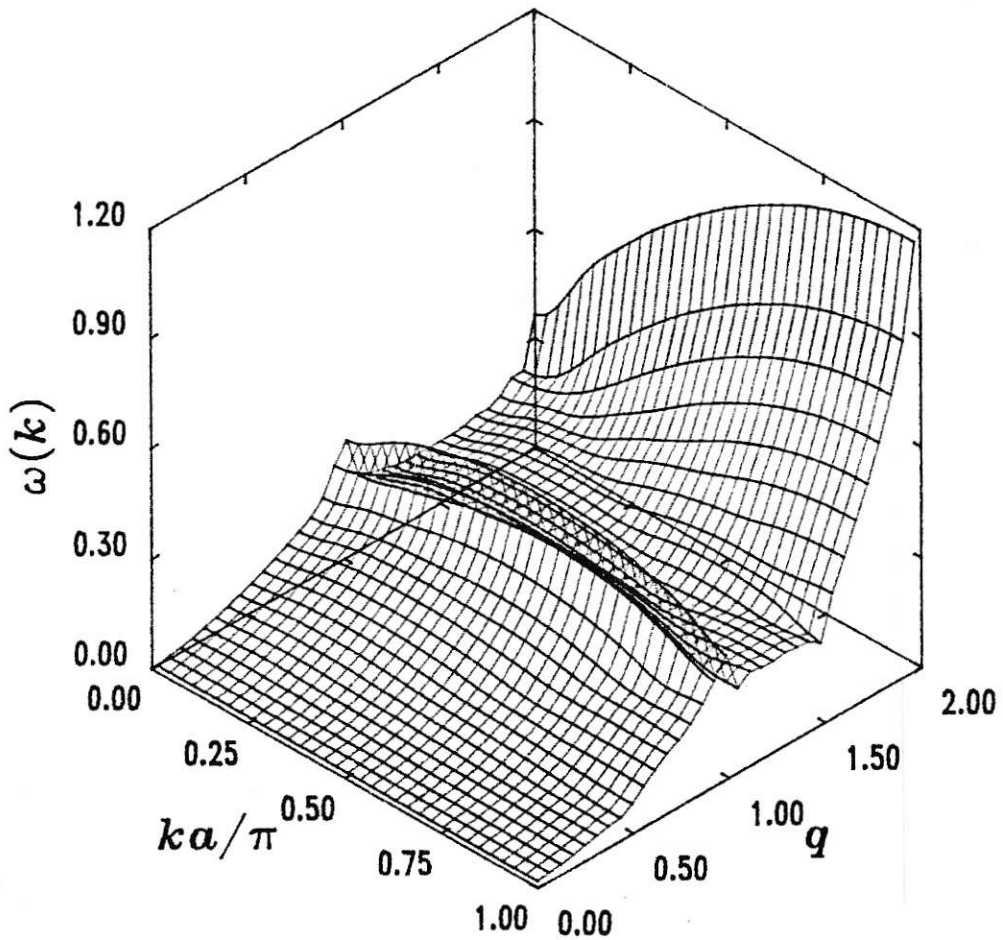


FIGURA 26. Gráficos tridimensionales que ilustran la relación de dispersión de magnones para coordinación $c = 6$ como función de ka/π y q . El valor de los parámetros es $M = 10$ y $\sigma = 2$.

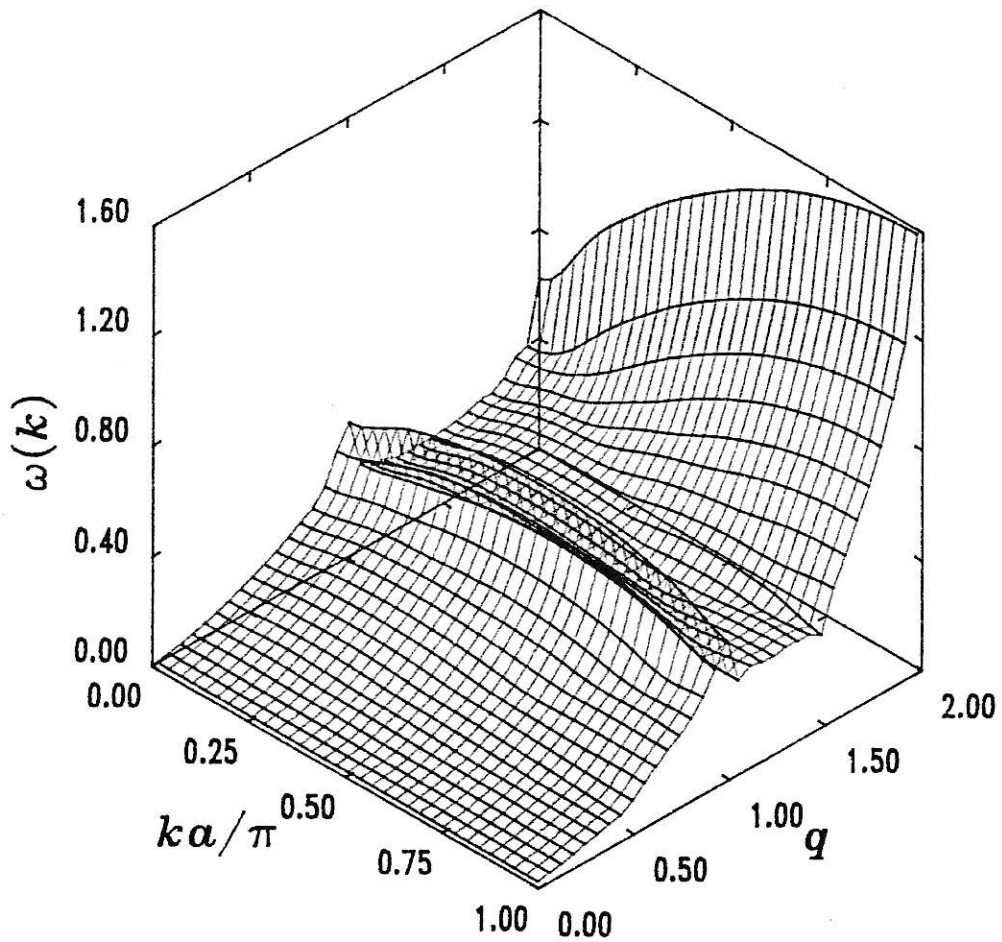


FIGURA 27. Gráficos tridimensionales que ilustran la relación de dispersión de magnones para coordinación $c = 8$ como función de ka/π y q . El valor de los parámetros es $M = 10$ y $\sigma = 2$.

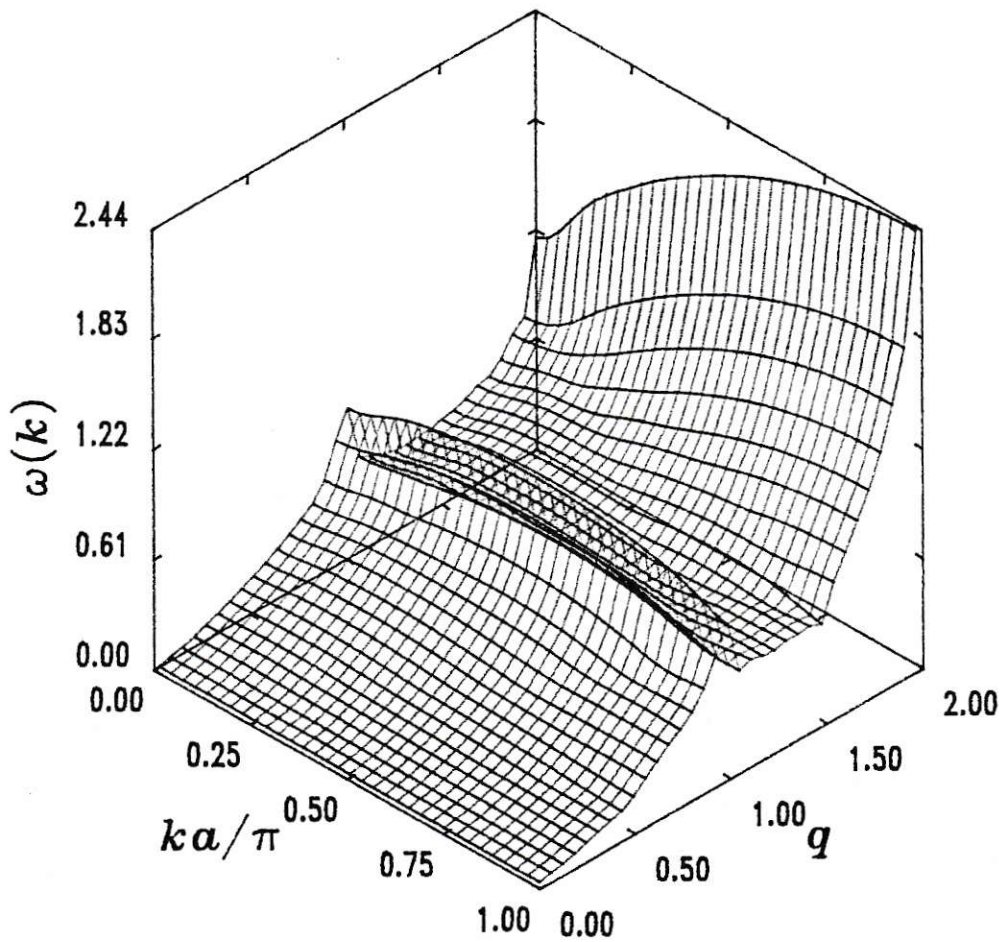


FIGURA 28. Gráficos tridimensionales que ilustran la relación de dispersión de magnones para coordinación $c = 12$ como función de ka/π y q . El valor de los parámetros es $M = 10$ y $\sigma = 2$.

VII. CONCLUSIONES

1. Aspectos Generales.

En este capítulo resumimos los resultados y las conclusiones más importantes de este trabajo. Incluimos además algunos comentarios sobre las diferentes posibilidades para extenderlo, o de usarlo como punto de partida para nuevos cálculos.

El interesante comportamiento magnético que presentan las tierras raras metálicas pesadas⁽⁵³⁾, incluye ordenamientos magnéticos complejos, los cuales difieren de los convencionales: ferromagnetismo y antiferromagnetismo. Muchos de estos ordenamientos poseen características helicoidales⁽²⁾, con periodicidades que pueden o no ser conmensuradas con la estructura cristalina del elemento. Este tipo de sistemas son descritos por un Hamiltoniano efectivo de Heisenberg con interacción de largo alcance y oscilatoria, dada por el modelo RKKY⁽¹⁸⁾. Lo anterior motivó nuestro interés en el estudio del ordenamiento magnético del estado fundamental y del espectro de excitaciones del Hamiltoniano de Heisenberg con interacciones competitivas de alcance arbitrario. Considerando además, que un planteamiento tan general del problema incluye como casos particulares a muchos otros sistemas magnéticos, además de las tierras raras, su solución general es entonces un objetivo muy deseable. Sin embargo, trabajar en forma analítica o numérica una interacción de alcance arbitrario, para un sistema real, mediante los métodos usuales es prácticamente imposible. Por lo tanto, se hace necesario trabajar con sistemas más simples que preserven los aspectos físicos fundamentales del problema. Un

enfoque relacionado, propuesto por Trias e Yndurain⁽³⁶⁾, consiste en resolver el problema mediante la técnica de funciones de Green sobre la topología de una red de Bethe. En el capítulo II analizamos el formalismo desarrollado por estos autores, evaluando de esta manera las ventajas y desventajas de este particular enfoque del problema. Concluimos de este análisis, que este tipo de solución tiene la interesante ventaja que nos permite obtener, en forma analítica, el espectro de excitaciones del Hamiltoniano de Heisenberg, con interacciones de alcance arbitrario, y para cualquier coordinación. Sin embargo, la restricción de estos autores solamente a un estado fundamental ferromagnético es la mayor limitación del formalismo, sobre todo cuando estamos interesados en interacciones de carácter competitivo, las cuales, en general, tienden a establecer ordenamientos distintos del ferromagnético. Lo anterior nos motivó para buscar una extensión del formalismo, considerando un estado fundamental más general, que permita incluir interacciones competitivas.

Así desarrollamos un formalismo que nos permite estudiar sistemas descritos por el Hamiltoniano de Heisenberg, con interacciones ferromagnéticas, antiferromagnéticas o una combinación de ellas, sin ninguna restricción sobre el alcance de las mismas. Considerando las ventajas del formalismo de Trias e Yndurain, estudiamos estos sistemas con la técnica de funciones de Green en la aproximación de la red de Bethe. Sin embargo, desarrollamos un formalismo en el cual se parte de un estado fundamental semiclásico, un arreglo helicoidal de espines. Con esta elección podemos caracterizar el estado fundamental como ferromagnético, antiferromagnético (estado de Néel) o como un magnón congelado. En todos los casos determinamos la periodicidad que adopta el estado fundamental, evaluando el ángulo entre espines consecutivos que minimiza la energía por sitio del sistema, ya que este ángulo

caracteriza completamente al estado propuesto. Finalmente, evaluamos la relación de dispersión, y eventualmente, la densidad local de estados de magnones.

Nuestro formalismo permite reobtener resultados analíticos ya conocidos. Si imponemos un ángulo cero entre espines consecutivos, es decir, un estado fundamental ferromagnético, recobramos los resultados de Trias e Yndurain⁽³⁶⁾. Además, en el caso de la cadena unidimensional con interacción a primeros vecinos, obtenemos las relaciones de dispersión y las densidades locales de estados correspondientes a ambos casos, ferromagnético⁽⁴⁰⁾ y antiferromagnético⁽⁴¹⁾, dependiendo de la elección del signo de la interacción.

Uno de los resultados más importante de este trabajo es que el formalismo desarrollado permite tratar todos los casos en forma equivalente, sin necesidad del tratamiento usual de subredes para el antiferromagnetismo^{(54),(55),(56)}. Más aún, este método es el único que permite pasar continuamente (por ejemplo, en la relación de dispersión) del caso ferromagnético al antiferromagnético. Esto último quedó ilustrado en el caso de la cadena unidimensional con interacción a primeros vecinos, en el capítulo III.

Dado que el formalismo da un tratamiento equivalente a todos los ordenamientos magnéticos que puedan adoptarse, podemos concluir que desarrollamos una herramienta poderosa que nos permite estudiar una gran variedad de sistemas, sin un análisis previo del tipo de estado fundamental que posee cada uno en particular. Además de mostrar explícitamente que el modelo de dos subredes no es un requisito esencial en el tratamiento del antiferromagnetismo.

Los distintos tipos de sistemas a los cuales aplicamos nuestro formalismo nos permiten tener una visión global de sus posibilidades y limitaciones. A continuación

proporcionamos algunos de los resultados y conclusiones generales así obtenidos.

El ángulo entre espines consecutivos caracteriza completamente el estado fundamental semiclásico propuesto, lo que nos motiva a estudiar la dependencia de esta magnitud como función de los parámetros que caracterizan los diferentes sistemas. El ángulo se determina exigiendo que su configuración resultante minimice la energía por sitio. Este ángulo tiende a adoptar valores tales que el ordenamiento obtenido sea conmesurado con la periodicidad presente. En el caso de los sistemas helicoidales y en aquellos con interacciones de mediano alcance, el ángulo tiende asintóticamente a valores que producen configuraciones conmesuradas con la periodicidad de la hélice en el primero caso, o de la red, en el segundo. Estos límites asintóticos se obtienen para valores grandes de la interacción competitiva, comparados con el valor de la interacción a primeros vecinos. En el caso de sistemas con interacciones RKKY, la tendencia del ángulo a adoptar valores que implican ordenamientos conmesurados con la periodicidad se manifiesta mediante el fenómeno de "trabamiento de fase"⁽⁵⁰⁾, en el cual los ordenamientos conmesurados se adoptan y mantienen en un intervalo en torno al valor exacto del parámetro que hace conmensurable la interacción con la periodicidad de la red. También podemos encontrar grandes regiones en el espacio de parámetros en que el ángulo adopta valores que corresponden a ordenamientos no conmensurados, o de periodicidad muy larga. Lo anterior permite comprender, en base al formalismo planteado, la existencia de estos ordenamientos no conmesurados, los cuales se presentan en diferentes materiales magnéticos con interacciones competitivas.

Otra magnitud estudiada en este trabajo es la energía por sitio; sin embargo, este cálculo se realiza para un estado semiclásico, lo que significa que los valores

obtenidos son mayores que los obtenidos de un cálculo cuántico. Este hecho le resta importancia a los valores obtenidos; sin embargo, teniendo en cuenta el buen acuerdo cualitativo logrado al comparar de nuestros resultados con resultados numéricos cuánticos⁽⁴⁹⁾, obtenidos para sistemas finitos en el caso unidimensional, podemos postular que la dependencia de la energía por sitio como función de los diferentes parámetros del sistema refleja el comportamiento de la solución exacta. Es decir, que nuestro cálculo mantiene esencialmente la estructura de máximos y mínimos del cálculo cuántico de esta magnitud. En base a la anterior suposición podemos explicar la tendencia del sistema a adoptar ordenamientos conmensurados dado que para estos valores la energía por sitio tiene un mínimo local.

2. La Relación de Dispersión.

En todos los casos evaluamos las relaciones de dispersión, pudiendo concluir lo siguiente:

i) Nuestro formalismo permite obtener relaciones de dispersión bien definidas, es decir, $\omega(k) \geq 0$ en todo el intervalo de interés en el espacio k .

ii) En los casos en que el ordenamiento del estado fundamental resulta ferromagnético, la relación de dispersión se caracteriza por tener un mínimo absoluto en $k = 0$. La curva de dispersión para $k \neq 0$ resulta ser monótonamente creciente como función de k .

iii) En los casos en que el ordenamiento del estado fundamental resulta antiferromagnético, la relación de dispersión se caracteriza por tener un mínimo absoluto en $k = 0$, y ser simétrica en torno a $k = \pi/2a$. Esta simetría se debe a que para el caso antiferromagnético se establece una nueva periodicidad igual a $2a$, donde a

es el parámetro de red. Lo anterior implica que el vector máximo de la primera zona de Brillouin, que inicialmente es π/a , se reduce a la mitad, es decir, a $\pi/2a$, produciendo esto la simetría en torno a $k = \pi/2a$.

iv) Los resultados obtenidos para las relaciones de dispersión en los casos de coordinación dos presentan dos aspectos relevantes. El primero es que en ausencia de excitaciones $k = 0$ siempre resulta ser la posición del mínimo absoluto de la curva de dispersión, lo cual confirma que el ordenamiento predicho como el estado fundamental es el de mínima energía. El segundo aspecto es que en los casos que el estado fundamental presenta orden helicoidal encontramos que el costo en energía de una excitación con la misma periodicidad del estado fundamental es cero. Es decir, las curvas de dispersión en el caso de un estado fundamental helicoidal tienen dos mínimos absolutos, uno en $k = 0$ y el otro en $ka = \theta_{\min}$ y en ambos casos $\omega(k) = 0$. Este resultado es probado analíticamente en el Apéndice 5, y nuestra interpretación es que se trata de una rotación rígida de la cadena unidimensional, teniendo en cuenta que sólo se presenta para coordinación dos.

v) Las relaciones de dispersión obtenidas para los casos de coordinación mayores que dos difieren bastante de las obtenidas para el caso $c = 2$. Una de las diferencias más importantes, que se presenta con interacciones de mediano alcance, es que si el estado fundamental tiene orden helicoidal $ka = \theta_{\min}$ pasa a ser el mínimo absoluto de la curva. Lo anterior implica que el estado con $k = 0$ no es el de menor energía; sin embargo, el ordenamiento que se establece como el de menor energía tiene la misma periodicidad que el estado fundamental propuesto. Este hecho induce a concluir que el ordenamiento helicoidal propuesto como el estado fundamental es aún restrictivo para el sistema, y si bien el formalismo es capaz de predecir la

periodicidad del estado fundamental, obtener la estructura precisa de éste requiere postular como punto de partida un ordenamiento más general. Debemos también tener en cuenta que redes de Bethe con coordinaciones mayores que dos no tienen realización en el espacio tridimensional, lo cual restringe la interpretación de los resultados obtenidos. En el caso de la interacción RKKY no encontramos el problema antes enunciado; sin embargo existe un intervalo anómalo en el parámetro de conmensurabilidad, en el cual el formalismo no predice correctamente el ordenamiento del estado fundamental y ni siquiera su periodicidad. En este caso el mínimo absoluto de las relaciones de dispersión no está ni en $k = 0$, ni en $ka = \theta_{\min}$, sino que se presenta para $ka = \pi$, sin que del formalismo resulte un estado fundamental antiferromagnético, y sin presentar la usual simetría en torno a $ka = \pi/2$, característica del antiferromagnetismo. La única explicación que podemos dar para este hecho es que la región en que se presenta, la cual hemos dado en llamar anómala, es la región más inestable desde el punto de vista energético.

3. Los Sistemas Estudiados.

A continuación resumiremos las conclusiones para cada uno de los sistemas que hemos estudiado:

i) En los sistemas helicoidales, estudiados en capítulo IV, el resultado más relevante es la existencia de valores críticos del cociente entre la interacción al N -ésimo vecinos y el módulo de la interacción a primeros vecinos, ecuación (4-3). Para estos valores críticos los ordenamientos magnéticos convencionales, (ferromagnetismo o antiferromagnetismo), se hacen inestables. Los resultados analíticos obtenidos para la dependencia en N de los valores críticos concuerdan con los encontrados en la

literatura^{(45),(46),(47)}, para la cadena lineal con interacciones a primeros y segundos vecinos ($N = 2$), y razonablemente con un trabajo reciente⁽⁴⁸⁾, en el que se estudian estos sistemas helicoidales desde un punto de vista electrónico. El anterior resultado nos permite concluir que a medida que la interacción competitiva se establece con un vecino más distante, la magnitud de ella requerida para inestabilizar los ordenamientos convencionales es menor. Otro resultado relevante para estos sistemas es que las relaciones de dispersión obtenidas tienen mínimos locales. Estos son interpretados como estados metaestables del sistema, que se presentan para excitaciones con $ka = n\theta_{\min}$, con $n = 2, 3, 4, \dots$, es decir son excitaciones con longitud de onda conmensurada con la periodicidad del arreglo helicoidal fundamental. Lo anterior ratifica nuestra conclusión de la mayor estabilidad de las estructuras conmensuradas; en este caso son conmensuradas la periodicidad de las excitaciones y la periodicidad del estado fundamental.

ii) Para los sistemas con sólo las tres primeras interacciones no nulas obtenemos los diagramas de fase magnética que presentamos en el capítulo V. Estos nos permiten determinar, dadas las interacciones, que tipo de ordenamiento presenta el estado fundamental. Sin embargo, las relaciones de dispersión obtenidas para estos sistemas nos muestran, en el caso de coordinaciones altas, un mínimo absoluto para un magnón con igual periodicidad que el orden helicoidal postulado. Esta inestabilidad del estado fundamental implica que nuestro *ansatz* original no es del todo correcto; sin embargo, la estructura óptima difiere muy poco del ordenamiento propuesto, ya que es suficiente congelar un magnón con la misma periodicidad que el orden helicoidal, para obtenerla. Concluimos de lo anterior que si bien podemos determinar el ordenamiento del estado fundamental, dadas las interacciones, la

restricción impuesta, vale decir, que los espines se mantengan esencialmente en el plano perpendicular al eje de la red, es todavía excesiva para reproducir la estructura óptima, haciéndose necesario reformular el problema para obtener el nuevo estado fundamental. Sin embargo, teniendo en cuenta que estamos trabajando en la aproximación de la red de Bethe, lo que significa una topología distinta a la del espacio tridimensional, y que nuestro estado fundamental es semiclásico, los resultados obtenidos son aceptables bajo estas restricciones.

iii) Los últimos sistemas que estudiamos son aquellos cuyo Hamiltoniano efectivo es el de Heisenberg con interacciones de largo alcance, dadas por la interacción de RKKY. Una conclusión importante, considerando los resultados obtenidos, es que utilizar el número de vecinos original de la red de Bethe introduce factores de peso no físicos, los cuales desestabilizan el sistema, en el caso de coordinaciones altas y una interacción de largo alcance. El número de n -ésimos vecinos, que hemos definido para redes cúbicas, ecuación (6-4), resuelve el problema de la sobreestimación. Esta manera de contar los vecinos puede ser extendida a otro tipo de redes, lo cual permitiría usar la aproximación de red de Bethe, dando una alternativa para resolver el problema de la sobreestimación del número de vecinos lejanos, el cual es uno de los mayores obstáculos para el uso de esta aproximación en sistemas en los cuales las interacciones son de largo alcance.

4. Ordenamientos con interacción RKKY.

Del estudio del ángulo entre espines primeros vecinos que minimiza la energía por sitio, como función de los parámetros relevantes del sistema, podemos concluir lo siguiente:

i) El efecto de variar la coordinación en la determinación del ordenamiento que presenta el estado fundamental, cuando nos restringimos a estructuras cúbicas, es prácticamente inapreciable. El ordenamiento sólo depende de la forma de la interacción, la cual es determinada por el parámetro de conmensurabilidad.

ii) En todos los casos estudiados se presenta el fenómeno de “trabamiento de fase”⁽⁵⁰⁾, el cual refleja la mayor conveniencia para el sistema de establecer un ordenamiento magnético conmensurado con la red.

iii) Exceptuando las regiones para las cuales se presenta el “trabamiento”, el comportamiento de las curvas es lineal como función del parámetro de conmensurabilidad q , presentando grandes regiones en que el sistema adopta el orden helicoidal. De este modo, nuestros resultados dan cuenta de los ordenamientos presentes en las tierras raras; sin embargo, el antiferromagnetismo predicho por nuestros cálculos no está presente en ellas⁽²⁾. Adjudicamos este desacuerdo a que el Hamiltoniano que describe el comportamiento magnético de las tierras raras es el de Heisenberg, más un primer término correctivo asociado a una anisotropía hexagonal^{(25),(57),(58)}. Esta última debe ser la responsable de eliminar el ordenamiento antiferromagnético, además de ayudar a estabilizar algunos de los órdenes helicoidales. Debemos también tener presente que la interacción indirecta en las Tierras Raras reales es mucho más compleja que RKKY debido a que las superficies de Fermi en estos elementos distan mucho de ser esféricas como supone el modelo.

5. Energía y Relación de Dispersión con interacción RKKY.

Otro aspecto estudiado para estos sistemas es la energía por sitio como función del parámetro q . Este estudio nos permite reafirmar nuestra conclusión de que los

ordenamientos conmensurados, en este caso los convencionales, son más estables que los órdenes helicoidales, debido a que para los primeros se presentan mínimos locales de la energía. Por otra parte, al crecer la coordinación se hace más estable la configuración, lo que queda en evidencia ya que las curvas de energía mantienen su forma, pero sufren un corrimiento a valores menores de energía.

Las conclusiones obtenidas al analizar las relaciones de dispersión para estos sistemas son:

i) Al incorporar la expresión del número de n -ésimos vecinos dada en la ecuación (6-4), las relaciones de dispersión resultan bien definidas. Lo anterior pone nuevamente de manifiesto la importancia de cambiar el número original de n -ésimos vecinos de la red de Bethe, para evitar resultados sin sentido, producto de la sobreestimación que da esta red para el número de sitios de las capas muy lejanas del sitio de interés.

ii) Aumentar la coordinación, es decir, incluir más espines interactuando, se traduce en aumento del costo en energía que tiene excitar un modo particular. Esto se explica debido a que se debe alterar la orientación de un número mayor de espines para establecer el mismo modo.

iii) Las curvas de dispersión como función del parámetro q , donde q es el parámetro de conmensurabilidad, presentan dos intervalos claramente distintos. El primero, en el que las relaciones de dispersión nos indican que el formalismo no da cuenta de la periodicidad del estado fundamental. En el otro intervalo el formalismo funciona sin problema. En el intervalo que presenta problemas, el mínimo absoluto de la curva de dispersión no es la ausencia de excitaciones, sino que el congelamiento de un magnón, cuya periodicidad no somos capaces de predecir con

nuestro formalismo. Sin embargo, que exista una región para la cual suponer un estado fundamental con orden helicoidal no es la solución del problema, deja abierta la posibilidad de ordenamientos magnéticos más complejos que el ferromagnético, antiferromagnético o un magnón helicoidal, los cuales claramente están presentes en las tierras raras. (Koehler⁽⁵¹⁾ y Rhyne⁽⁵²⁾).

6. Extensiones y Proyecciones.

Finalmente nos interesa mencionar algunos cálculos que completan el análisis de los sistemas estudiados, extensiones del formalismo desarrollado y posibles problemas que pueden ser abordados con un formalismo similar.

Uno de los aspectos más interesantes que presentan los sistemas magnéticos con interacciones competitivas es su comportamiento como función de la temperatura. En la literatura⁽²⁵⁾⁻⁽³²⁾ podemos encontrar resultados para sistemas cuyo Hamiltoniano es el de Ising con interacciones competitivas, los cuales muestran un comportamiento no lineal de ciertas variables como función de la temperatura, como por ejemplo, estructuras fractales o "escaleras del diablo". Lo anterior es un importante estímulo para estudiar la termodinámica de los sistemas en que hemos estado interesados. Este estudio requiere la evaluación de integrales que incluyen la estadística de las excitaciones, vale decir, la función de Bose-Einstein, y la densidad de estado de los magnones. Este tipo de integrales ha sido estudiada en detalle y se demuestra que resultan divergentes para dimensionalidad baja⁽⁸⁾. La red de Bethe presenta ciertas características unidimensionales que se traducen en la imposibilidad de evaluar las integrales necesarias, lo cual ha sido la dificultad insalvable en nuestro intento de estudiar la termodinámicas para estos sistemas, a partir de los resultados

obtenidos con nuestro formalismo.

Una de las posibles extensiones de este trabajo es desarrollar un formalismo similar a partir de un ordenamiento para el estado fundamental más general que un orden helicoidal, que tenga en cuenta componentes de los espines fuera del plano perpendicular al eje de la red. Desarrollar un formalismo a partir de un ordenamiento de este tipo debería solucionar, a lo menos en parte, los problemas de predecir el ordenamiento del estado fundamental en el caso de interacciones de alcance intermedio para coordinaciones altas, estudiado en el capítulo V, y la región anómala encontrada en el estudio de la interacción de largo alcance RKKY, realizado en el capítulo VI.

En resumen, se ha presentado un formalismo simple que considera los aspectos físicos relevantes del problema, dentro de la aproximación de red Bethe, y que nos permite estudiar una gran variedad de sistemas magnéticos, descritos por el Hamiltoniano de Heisenberg y caracterizados por las diferentes formas que pueden adoptar las interacciones. Un formalismo similar puede aplicarse a otros sistemas magnéticos con Hamiltonianos de Heisenberg que incluyan términos, ya sea de campo externo o bicuadrático. Otra interesante posibilidad es estudiar el Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico, el cual tiene la ventaja de establecer una conexión continua con el caso de Ising puro, para el cual existen resultados⁽²⁵⁾⁻⁽³²⁾ con interacciones competitivas de mediano y largo alcance.

APENDICE 1

Funciones de Green.

Introducimos a continuación el formalismo de funciones de Green de dos tiempos, también llamadas del tipo Zubarev, el cual nos permitirán resolver el problema dinámico.

En un sistema con Hamiltoniano H independiente del tiempo, definimos el nuevo operador \mathcal{H}

$$\mathcal{H} = H - \mu N , \quad (\text{A1-1})$$

como nuevo Hamiltoniano, donde μ es el potencial químico y N es el operador del número total de partículas. Utilizando (A1-1) escribimos los operadores en el cuadro de Heisenberg como

$$A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t} . \quad (\text{A1-2})$$

Definimos la función de Green de dos tiempos $G(t, t')$ por

$$G(t, t') = G(t - t') \equiv \langle\langle A(t), B(t') \rangle\rangle = -i \langle \mathbf{T} A(t) B(t') \rangle . \quad (\text{A1-3})$$

El promedio en (A1-3) es sobre el ensemble gran canónico, es decir:

$$\langle \dots \rangle = Q^{-1} \text{Tr} (e^{-\mathcal{H}\beta} \dots) , \quad (\text{A1-4})$$

siendo

$$Q = \text{Tr} (e^{-\mathcal{H}\beta}) \quad \text{con } \beta = \frac{1}{kT} , \quad (\text{A1-5})$$

la función de partición gran canónica y \mathbf{T} corresponde al operador simbólico de ordenamiento temporal

$$\mathbf{T}A(t)B(t') = \theta(t - t')A(t)B(t') + \eta\theta(t' - t)B(t')A(t) , \quad (\text{A1-6})$$

donde

$$\theta(t) = \begin{cases} 1, & \text{si } t > 0, \\ 0, & \text{si } t < 0, \end{cases} \quad (\text{A1-7})$$

y

$$\eta = \begin{cases} +1, & \text{para operadores bośonicos,} \\ -1, & \text{para operadores fermi3nicos.} \end{cases} \quad (\text{A1-8})$$

Notamos que a temperatura nula los promedios t3rmicos se reducen al valor esperado en el estado fundamental.

La ecuaci3n para la funci3n de Green viene dada por

$$i\frac{dG(t - t')}{dt} = \delta(t - t')\langle[A(t), B(t')]\rangle + \langle\langle i\frac{dA(t)}{dt}, B(t') \rangle\rangle , \quad (\text{A1-9})$$

donde la evoluci3n temporal de los operadores est3 dada por la ecuaci3n de Heisenberg,

$$i\frac{dA(t)}{dt} = [A(t), H] . \quad (\text{A1-10})$$

APENDICE 2

Condiciones de Borde.

A continuación escribimos las l ecuaciones análogas a (2-19) para el caso $N = \lambda$ con $0 \leq \lambda < l$,

$$\begin{aligned}
 (\omega - \epsilon)G_\lambda(\omega) = & \delta_{\lambda 0} - \sum_{k=1}^{\lambda} J_k \left(G_{\lambda-k}(\omega) + (c-1)^k G_{\lambda+k}(\omega) \right. \\
 & \left. + \sum_{m=1}^{k-1} (c-2)(c-1)^{k-m-1} G_{\lambda+k-2m}(\omega) \right) \\
 & - \sum_{j=\lambda+1}^l J_j \left((c-1)^{j-\lambda} G_{j-\lambda}(\omega) + (c-1)^j G_{\lambda+j}(\omega) \right. \\
 & \left. + \sum_{m=1}^{\lambda-1} (c-2)(c-1)^{j-m-1} G_{\lambda+j-2m}(\omega) \right), \tag{A2-1}
 \end{aligned}$$

donde hemos separado las sumas en dos partes, la primera de 1 a λ donde no alcanzamos a pasar por el origen, y la segunda de $\lambda + 1$ a l , en la cual si se pasa por el origen.

Escribimos ahora, las l ecuaciones usuales, es decir, iguales a (2-19) para el caso

$$N = \lambda \geq l$$

$$\begin{aligned}
 (\omega - \epsilon)G_\lambda(\omega) = & - \sum_{k=1}^{\lambda} J_k \left(G_{\lambda-k}(\omega) + (c-1)^k G_{\lambda+k}(\omega) \right. \\
 & + \sum_{m=1}^{k-1} (c-2)(c-1)^{k-m-1} G_{\lambda+k-2m}(\omega) \Big) \\
 & - \sum_{j=\lambda+1}^l J_j \left(G_{j-\lambda}(\omega) + (c-1)^j G_{\lambda+j}(\omega) \right. \\
 & \left. + \sum_{m=1}^{j-1} (c-2)(c-1)^{j-m-1} G_{\lambda+j-2m}(\omega) \right), \tag{A2-2}
 \end{aligned}$$

también hemos separado las sumas en dos partes, para facilitar la comparación.

A continuación pasamos a analizar las diferencias entre las ecuaciones (A2-1) y (A2-2). La primera, es el término $\delta_{\lambda 0}$, el cual se incluye en la ecuación formal dada en la relación (2-17), pero no aparece cuando $N \geq l$, apareciendo sólo cuando N puede ser nulo, es decir, cuando $N = \lambda$ con $0 \leq \lambda < l$. Otra diferencia es la coordinación que aparece acompañando al término $G_{j-\lambda}$, que usualmente era 1, esto se explica por que al pasar por el origen la coordinación de los *pasos* hacia él, que inicialmente era 1, pasa a ser $(c-1)$, ya que sobrepasamos el origen y los *pasos* se alejan de él por otra rama de la red. La última diferencia entre estas dos ecuaciones es el límite superior de la última suma, la cual corresponde a ir hacia el centro m *pasos* cambiar de dirección y alejarse de él $j - m - 1$ *pasos*. Fijar el límite superior como $\lambda - 1$, significa que imponemos que no se pase por el centro, debido a que si pasamos por él ya no tiene sentido esta posibilidad.

Las condiciones de borde consisten en imponer que el sitio central de la red de Bethe sea equivalente a cualquier otro, vale decir, que las ecuaciones (A2-1) y (A2-2) sean iguales. Para esto restamos las dos ecuaciones e igualamos a cero el resultado,

obteniendo:

$$\begin{aligned}
 - \sum_{j=\lambda+1}^l J_j \left(G_{\lambda-j}(\omega) - (c-1)^{j-\lambda} G_{j-\lambda}(\omega) \right. \\
 \left. + \sum_{m=1}^{j-1} (c-2)(c-1)^{j-m-1} G_{\lambda+j-2m}(\omega) \right) = \delta_{\lambda 0} .
 \end{aligned} \tag{A2-3}$$

Haciendo los cambios de índices $m = n + \lambda$ y $k = j - \lambda$, y reescribiendo la ecuación (A2-3) de la siguiente forma

$$- \sum_{k=1}^{l-\lambda} J_{k+\lambda} M_k = \delta_{\lambda 0} , \tag{A2-4}$$

donde hemos definido

$$M_k = G_{-k}(\omega) - (c-1)^k G_k(\omega) + \sum_{n=0}^{k-1} (c-2)(c-1)^{k-n-1} G_{k-2n}(\omega) . \tag{A2-5}$$

Evaluamos (A2-3) para $\lambda = l-1, l-2, \dots, 0$, y obtenemos la forma explícita

$$M_{l-\lambda} = -\frac{\delta_{\lambda 0}}{J_l} \quad \text{para } \lambda = 0, 1, 2, \dots, l-1. \tag{A2-6}$$

Combinando (A2-5) y (A2-6) obtenemos las condiciones de borde buscadas:

$$G_{\lambda-l}(\omega) - (c-1)^{l-\lambda} G_k(\omega) + \sum_{m=\lambda}^{l-1} (c-2)(c-1)^{l-m-1} G_{k-2n}(\omega) = -\frac{\delta_{\lambda 0}}{J_l} . \tag{A2-7}$$

Las anteriores son l ecuaciones, ya que debemos reemplazar todos los posible valores de λ , es decir, $\lambda = 0, 1, 2, \dots, l-1$. Usando la función de prueba de Trias e Ynduráin, relación (2-21), y las definiciones dadas en (2-22), podemos expresar las l ecuaciones anteriores como

$$\sum_{i=1}^l \tilde{A}_i (y_i^{\lambda-l} - y_i^{l-\lambda}) = \frac{\delta_{\lambda 0}}{W_l} , \tag{A2-8}$$

donde

$$\tilde{A}_i = A_i \left(\frac{1 - \frac{y_i^2}{(c-1)}}{1 - y_i^2} \right) . \tag{A2-9}$$

Las l constantes A_i quedan determinadas por el sistema de l ecuaciones dado en (A2-8). Este sistema es soluble, y el método utilizado para resolverlo está ampliamente explicado en el trabajo original de Trias e Yndurain⁽³⁶⁾. Las soluciones obtenidas para las A_i son:

$$A_i = \frac{1 - y_i^2}{1 - \frac{y_i^2}{(c-1)}} \frac{1}{(-y_i W'(y_i))}, \quad (2-26)$$

donde $W'(y_i)$ es la derivada de $W(y)$, definido en (2-23), con respecto a y evaluada en la raíz correspondiente, y_i .

APENDICE 3

1. Determinación de $G_0(\omega)$.

Nos interesa determinar $G_0(\omega)$ eliminando la dependencia en σ , definido en (3-22). Para esto combinamos las soluciones para las funciones auxiliares $\Gamma_0(\omega)$ y $\Lambda_0(\omega)$, ecuaciones (3-25), de acuerdo a las relaciones dadas en (3-14), obteniendo:

$$G_0(\omega) = \frac{2(c-1)}{c\pi} \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2(\phi)}{1 - \frac{4(c-1)\cos^2(\phi)}{c^2}} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tilde{\omega}_1 - \tilde{W}_1} + \frac{1}{\tilde{\omega}_2 - \tilde{W}_2} \right) d\phi. \quad (\text{A3-1})$$

Sin embargo, debemos eliminar la dependencia en σ que presenta $G_0(\omega)$ a través de $\tilde{\omega}_{1,2}$ y $\tilde{W}_{1,2}$. Para esto reescribimos las ecuaciones (3-24) utilizando las definiciones dadas en (3-23):

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_1 &= \omega - \frac{\epsilon(\theta)}{\sigma} = \tilde{W}_1(\phi, \theta) \equiv -\frac{1}{\sigma} \Omega_1(\phi, \theta), \\ \tilde{\omega}_2 &= \omega - \epsilon(\theta)\sigma = \tilde{W}_2(\phi, \theta) \equiv -\sigma \Omega_2(\phi, \theta), \end{aligned} \quad (\text{A3-2})$$

donde

$$\begin{aligned} \Omega_1(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^l V_n \cos(n\theta) (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2}{c-1} \frac{\text{sen}((n-1)\phi)}{\text{sen}(\phi)} \right), \\ \Omega_2(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^l V_n (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2}{c-1} \frac{\text{sen}((n-1)\phi)}{\text{sen}(\phi)} \right). \end{aligned} \quad (\text{A3-3})$$

Determinamos σ despejando ω en cada una de las ecuaciones (A3-2) y comparandolas, obteniendo

$$\sigma = \sqrt{\frac{\epsilon(\theta) - \Omega_1(\phi, \theta)}{\epsilon(\theta) - \Omega_2(\phi, \theta)}}. \quad (\text{A3-4})$$

Para evaluar $G_0(\omega)$ debemos calcular

$$\Xi \equiv \frac{1}{\tilde{\omega}_1 - \tilde{W}_1} + \frac{1}{\tilde{\omega}_2 - \tilde{W}_2} = \frac{\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_2 - \tilde{W}_1 - \tilde{W}_2}{\tilde{\omega}_1 \tilde{\omega}_2 - \tilde{\omega}_1 \tilde{W}_2 - \tilde{\omega}_2 \tilde{W}_1 + \tilde{W}_1 \tilde{W}_2} . \quad (\text{A3-5})$$

Usando las relaciones (A3-2) tenemos

$$\Xi = \frac{2\omega - [(\epsilon(\theta) - \Omega_1)\sigma^{-1} + (\epsilon(\theta) - \Omega_2)\sigma]}{(\omega - \epsilon(\theta)\sigma^{-1})(\omega - \epsilon(\theta)\sigma) + (\omega\sigma - \epsilon(\theta))\Omega_2 + (\omega\sigma^{-1} - \epsilon(\theta))\Omega_1 + \Omega_1\Omega_2} , \quad (\text{A3-6})$$

lo cual puede ser reagrupado de la siguiente forma:

$$\Xi = \frac{2\omega - [(\epsilon(\theta) - \Omega_1)\sigma^{-1} + (\epsilon(\theta) - \Omega_2)\sigma]}{(\omega^2 - \omega[(\epsilon(\theta) - \Omega_1)\sigma^{-1} + (\epsilon(\theta) - \Omega_2)\sigma] + (\epsilon(\theta) - \Omega_1)(\epsilon(\theta) - \Omega_2))} . \quad (\text{A3-7})$$

Utilizando (A3-3) tenemos que

$$[(\epsilon(\theta) - \Omega_1)\sigma^{-1} + (\epsilon(\theta) - \Omega_2)\sigma] = 2\sqrt{(\epsilon(\theta) - \Omega_1)(\epsilon(\theta) - \Omega_2)} , \quad (\text{A3-8})$$

reemplazando en la ecuación (A3-7), obtenemos

$$\Xi = \frac{2\omega - 2\sqrt{(\epsilon(\theta) - \Omega_1)(\epsilon(\theta) - \Omega_2)}}{(\omega - \sqrt{(\epsilon(\theta) - \Omega_1)(\epsilon(\theta) - \Omega_2)})^2} = \frac{2}{\omega - \sqrt{W_1(\phi, \theta)W_2(\phi, \theta)}} , \quad (\text{A3-9})$$

donde

$$W_i(\phi, \theta) = \epsilon(\theta) - \Omega_i(\phi, \theta) . \quad (\text{A3-10})$$

Usando el resultado (A3-9) en (A3-1) obtenemos la función de Green deseada:

$$G_0(\omega) = \frac{2(c-1)}{c\pi} \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2(\phi)}{1 - \frac{4(c-1)\cos^2(\phi)}{c^2}} \frac{1}{\omega - \sqrt{W_1(\phi, \theta)W_2(\phi, \theta)}} d\phi , \quad (\text{A3-11})$$

donde al utilizar (A3-10), (A3-3) y (3-19) podemos escribir $W_1(\phi, \theta)$ y $W_2(\phi, \theta)$ de

la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 W_1(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^l V_n \cos(n\theta) \left(c(c-1)^{n-1} \right. \\
 &\quad \left. - (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2 \operatorname{sen}((n-1)\phi)}{c-1 \operatorname{sen}(\phi)} \right) \right), \\
 W_2(\phi, \theta) &= \sum_{n=1}^l V_n \left(\cos(n\theta) c(c-1)^{n-1} \right. \\
 &\quad \left. - (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2 \operatorname{sen}((n-1)\phi)}{c-1 \operatorname{sen}(\phi)} \right) \right).
 \end{aligned}
 \tag{A 3-12}$$

APENDICE 4

1. Determinación de $X_N^{\text{crítico}}$.

Nos interesa determinar la dependencia de $X_N^{\text{crítico}}$ como función de N . El valor de X_N definido en la ecuación (4-3), para el cual el ferromagnetismo o el antiferromagnetismo, según sea el caso, deja de ser el ordenamiento del estado fundamental, es aquel que hemos definido como $X_N^{\text{crítico}}$. Analizamos a continuación y por separado, los casos en que el estado fundamental deja de ser ferromagnético o antiferromagnético.

2. Caso Ferromagnético.

Consideramos el caso en que el $\text{sgn}(J_1) = +1$ y tomemos un valor de X_N negativo, pero pequeño; es decir, incluimos una interacción antiferromagnética con los N -ésimos vecinos mucho menor que la interacción ferromagnética con los primeros vecinos. Mientras el sistema adopte el ordenamiento ferromagnético el ángulo entre espines consecutivos (θ), es cero. Sin embargo, al aumentar la interacción competitiva con los N -ésimos vecinos, el ordenamiento ferromagnético deja de ser el estado fundamental del sistema y éste adopta un orden helicoidal, para el cual $\theta \neq 0$. Nos interesa determinar el X_N para el cual esto sucede, es decir, aquel valor crítico de X_N para el que el ángulo que minimiza la energía por sitio es distinto de cero. Esperamos, por lo ilustrado en las figuras 2 y 3, que θ como función de X_N sea continua; por lo tanto, buscamos el $X_N^{\text{crítico}}$ que tiene un $\theta \neq 0$, pero muy pequeño.

Para evaluar el θ mínimo derivamos la energía por sitio, dada en la relación (4-2), considerando $\text{sgn}(J_1) = 1$, e igualamos a cero, resultando

$$\frac{\partial \mathcal{E}(\theta, k=0)}{\partial \theta} = -\frac{1}{2}|J_1|S(-\text{sen}(\theta) - NX_N \text{sen}(N\theta)) , \quad (\text{A4-1})$$

y simplificando tenemos

$$\text{sen}(\theta) + NX_N \text{sen}(N\theta) = 0 . \quad (\text{A4-2})$$

Teniendo en cuenta que $N\theta \ll 1$, usamos en la relación (A4-2) que $\text{sen}(\alpha) \simeq \alpha$ cuando $\alpha \ll 1$, obteniendo

$$\theta + N^2 X_N \theta = 0 , \quad (\text{A4-3})$$

pero como $\theta \neq 0$, podemos simplificar para determinar el $X_N^{\text{crítico}}$, lo que da:

$$X_N^{\text{crítico}} = -\frac{1}{N^2} , \quad \text{si } \text{sgn}(J_1) = +1. \quad (\text{A4-4})$$

3. Caso Antiferromagnético.

El razonamiento para obtener el $X_N^{\text{crítico}}$ como función de N es análogo al caso anterior, sólo que en éste, el $\text{sgn}(J_1) = -1$ y el ángulo entre espines consecutivos para el ordenamiento antiferromagnético es π . Por lo tanto, buscamos el $X_N^{\text{crítico}}$ que tiene un $\theta \neq \pi$, pero con $\theta \sim \pi$.

Al igualar a cero la derivada de la energía por sitio, considerando $\text{sgn}(J_1) = -1$, tenemos:

$$\frac{\partial \mathcal{E}(\theta, k=0)}{\partial \theta} = -\frac{1}{2}|J_1|S(\text{sen}(\theta) - NX_N \text{sen}(N\theta)) , \quad (\text{A4-5})$$

y simplificando,

$$\text{sen}(\theta) - NX_N \text{sen}(N\theta) = 0 . \quad (\text{A4-6})$$

Podemos definir

$$\theta = \pi - \alpha , \quad (\text{A4-7})$$

y como

$$\theta \sim \pi \Rightarrow \alpha \sim 0 , \quad (\text{A4-8})$$

Reemplazamos la definición dada en (A4-7) en la ecuación (A4-6), obteniendo

$$\text{sen}(\pi - \alpha) - NX_N \text{sen}(N(\pi - \alpha)) = 0 , \quad (\text{A4-9})$$

desarrollando,

$$\text{sen}(\alpha) - NX_N \text{sen}(N\alpha) \cos(N\pi) = 0 . \quad (\text{A4-10})$$

Usamos la condición dada en la relación (A4-8), es decir, $N\alpha \ll 1$, con lo cual (A4-10) adopta la forma:

$$\alpha + N^2 X_N (-1)^N \alpha = 0 , \quad (\text{A4-11})$$

pero $\alpha \neq 0$, ya que $\theta \neq \pi$, por lo tanto, podemos simplificar para obtener el $X_N^{\text{crítico}}$, éste nos queda:

$$X_N^{\text{crítico}} = (-1)^N \frac{1}{N^2} , \quad \text{si } \text{sgn}(J_1) = -1. \quad (\text{A4-12})$$

El signo de $X_N^{\text{crítico}}$ dependiente de N se entiende de la siguiente manera: si N es par, una interacción antiferromagnética con los N ésimos vecinos es competitiva con la interacción antiferromagnética a primeros vecinos, por lo tanto, $X_N^{\text{crítico}}$ es negativo. Sin embargo, si N es impar, una interacción ferromagnética con los N ésimos vecinos es la competitiva con la interacción antiferromagnética a primeros vecinos, esta vez, por lo tanto, $X_N^{\text{crítico}}$ debe ser positivo. Aclaremos que se establece un orden helicoidal después que la interacción competitiva sobrepasa el valor límite $X_N^{\text{crítico}}$.

APENDICE 5

Valor nulo en la relación de dispersión.

Minimizamos la energía por sitio, obteniendo θ^* para el ángulo que minimiza $\mathcal{E}(\theta)$. Escribimos a continuación la relación de dispersión, a partir de la ecuación (3-29), de la siguiente manera:

$$\omega_{\theta^*}(\phi) = \sqrt{W_1(\phi, \theta^*)W_2(\phi, \theta^*)}, \quad \text{con } \phi = ka, \quad (\text{A5-1})$$

donde $W_1(\phi, \theta^*)$ y $W_2(\phi, \theta^*)$ están dados por

$$W_1(\phi, \theta^*) = \sum_{n=1}^{\infty} V_n \cos(n\theta^*) \left(c(c-1)^{n-1} - (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2 \operatorname{sen}((n-1)\phi)}{c-1} \frac{\operatorname{sen}(\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)} \right) \right), \quad (\text{A5-2})$$

$$W_2(\phi, \theta^*) = \sum_{n=1}^{\infty} V_n \left(\cos(n\theta^*) c(c-1)^{n-1} - (c-1)^{\frac{n}{2}} \left(2 \cos(n\phi) + \frac{c-2 \operatorname{sen}((n-1)\phi)}{c-1} \frac{\operatorname{sen}(\phi)}{\operatorname{sen}(\phi)} \right) \right).$$

Si nos restringimos al caso en que la coordinación es dos, $W_1(\phi, \theta^*)$ y $W_2(\phi, \theta^*)$ adoptan la forma:

$$W_1(\phi, \theta^*) = \sum_{n=1}^{\infty} 2V_n \cos(n\theta^*) (1 - \cos(n\phi)), \quad (\text{A5-3})$$

$$W_2(\phi, \theta^*) = \sum_{n=1}^{\infty} 2V_n (\cos(n\theta^*) - \cos(n\phi)).$$

Claramente $W_2(\phi, \theta^*)$ se anula cuando $\phi = \theta^*$, y dado la forma que tiene la relación de dispersión, dada en (A5-1), tenemos

$$\omega_{\theta^*}(\phi = \theta^*) = 0. \quad (\text{A5-4})$$

Es importante hacer notar que este resultado es independiente del tipo de interacciones consideradas y válido para cualquier sistema con coordinación dos.

REFERENCIAS

1. K. W. H. Stevens, en *Magnetism*, Vol. I. Ed. G. Rado y H. Suhl (Academic, New York, 1963).
 2. J. Pierre, en *Magnetic of Metals and Alloys*, Ed. M. Cyrot, (North-Holland, 1982).
 3. P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. A***112**, 661 (1926).
 4. P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. A***123**, 714 (1929).
 5. W. Heisenberg, *Z. Phys.* **38**, 411 (1926).
 6. W. Heisenberg, *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
 7. J. H. Van Vleck, *The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities*, (Oxford, 1932).
 8. D. C. Mattis, *The theory of Magnetism II*, (Springer-Verlag, 1985).
 9. F. Bloch, *Zeit. Phys.* **61**, 206 (1930).
 10. J. C. Slater, *Phys. Rev.* **35**, 509 (1930).
 11. H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
 12. L. Hulthén, *Ark. Met. Astron. Fysik A***26**, Na. 11 (1938).
 13. R. Orbach, *Phys. Rev.* **128**, 309 (1958).
 14. L. R. Walker, *Phys. Rev.* **116**, 1289 (1959).
 15. J. Des Cloizeaux y J. J. Pearson, *Phys. Rev.* **128**, 2131 (1962).
- M. Fowler y M. Puga, *Phys. Rev. B***18**, 421 (1978).
- A. Ovchinnikov, *Sov. Phys. JETP* **29**, 727 (1969).

16. R. B. Griffiths, *Phys. Rev.* **133**, A768 (1964).
17. G. Shirane, Y. Endoh, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. Hidaka, M. Oda, M. Suzuki, T. Murakami, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1613 (1987).
Y. Endoh, K. Yamada, R. J. Birgeneau, D. R. Gabbe, H. P. Jenssen, M. A. Kastner, J. Tranquada, G. Shirane, Y. Hidaka, M. Oda, Y. Enomoto, M. Suzuki, T. Murakami, *Preprint*.
18. M. A. Ruderman y C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954).
19. T. Kasuya, *Progr. Theor.* **16**, 45 (1956).
20. K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957).
21. A. Yoshimori, *J. Phys. Soc. Japan* **17**, 807 (1959).
22. A. Herpin, P. Mériel, y J. Villain, *Compt. Rend.* **249**, 1334 (1959).
23. J. Villain, *Chem. Phys. Solids* **11**, 303 (1959).
24. T. A. Kaplan, *Phys. Rev.* **116**, 888 (1959).
25. R. J. Elliot, *Phys. Rev.* **124**, 346 (1961).
26. R. M. Hornreich, M. Luban, y S. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1678 (1975).
27. S. Redner y H. E. Stanley, *Phys. Rev.* **B16**, 4901 (1977).
28. W. Selke, *Z. Phys.* **B29**, 133 (1978); W. Selke y M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **B20**, 257 (1979).
29. P. Bak y J. von Boehm, *Phys. Rev.* **B21**, 5297 (1980).
30. M. E. Fisher y W. Selke, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1502 (1980).
31. J. Vannimenus, *Z. Phys.* **B43**, 141 (1981).
32. M. E. Fisher, *Physica* **106A**, 28 (1981).
33. P. Bak y R. Bruinsma, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 249 (1982); *Phys. Rev.* **B27**, 5824 (1983).

34. C. S. O. Yokoi, M. J. de Oliveira y S. R. Salinas, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 163 (1985).
35. S. Inawashiro y C. J. Thompson, *Phys. Lett.* **97A**, 245 (1983).
36. A. Trias y F. Yndurain, *Phys. Rev.* **B28**, 2839 (1983).
37. Ejemplos del uso de la red de Bethe en diferentes contextos de la física del sólido se encuentran, por ejemplo en: M. F. Thorpe, D. Weaire, y R. Alben, *Phys. Rev.* **B7**, 3777 (1973); D. Joannopoulos y F. Yndurain, *Phys. Rev.* **B10**, 5164 (1974); D. Joannopoulos y M. L. Cohen, en *Solid State Physics*, Ed. por H. Ehrenreich, F. Seitz, y D. Turnbull (Academic, N. Y., 1976), Vol. 31; F. Yndurain y P. N. Sen, *Phys. Rev.* **B14**, 531 (1976); B. Salzberg, C. E. T. Gonçalves de Silva, y L. M. Falicov, *Phys. Rev.* **B14**, 1314 (1976); D. Joannopoulos, *Phys. Rev.* **B16**, 2764 (1976); V. T. Rajan y F. Yndurain, *Solid State Commun.* **20**, 309 (1976); P. Kleinnert, *Phys. Status Solidi (b)* **114**, 459 (1982); M. F. Thorpe, en *Excitations in Disorder Systems*, NATO Advanced Studies Institute Series (Plenum, N. Y., 1982); P. Kleinnert, *Phys. Status Solidi (b)* **119**, K37 (1983); J. J. Sinai y S. Y. Wu, *Phys. Rev.* **B29**, 6991 (1984).
38. D. N. Zubarev, *Sov. Phys.-Usp.* **3**, 320 (1960).
39. T. Holstein y H. Primakoff, *Phys. Rev.* **58**, 1098 (1940).
40. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 4^a ed. (Wiley, 1971).
41. M. Kiwi, Tsung-han Lin, y L. Falicov, *Phys. Rev.* **B25**, 432 (1982).
42. M. Kardar, *Phys. Rev.* **B27**, 6869 (1983).
43. H. Cheng y T. T. Wu, *Phys. Rev.* **164**, 719 (1967).
44. G. F. Newell, *Phys. Rev.* **78**, 444 (1950).
45. I. Ono, *Phys. Lett.* **38A**, 327 (1972).

46. G. Ananthakrishna, L. F. Weiss D. C. Foyt, y D. J. Klein, *Physica* **81B**, 275 (1976).
47. H. P. Bader y R. Schilling, *Phys. Rev.* **B19**, 3556 (1979).
48. F. Melo y D. Gottlieb. Aceptado para publicación en *Nuovo Cimento*.
49. J. M. Mesías y E. E. Vogel, *Phys. Rev.* **B34**, 8015 (1986).
50. P. Bak, *Physics Today*, Diciembre 1986, y referencias citadas en él.
51. W. C. Koehler, en *Magnetic properties of the rare earth metals*, Ed. R. J. Elliott, (Plenum Press, 1972).
52. J. J. Rhyne, en *Magnetic properties of the rare earth metals*, Ed. R. J. Elliott, (Plenum Press, 1972).
53. R. J. Elliot, en *Magnetic properties of the rare earth metals*, (Plenum Press, 1972).
54. C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, 3^a Ed. (Wiley, 1966).
55. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952).
56. R. Kubo, *Phys. Rev.* **87**, 568 (1952).
57. T. A. Kaplan, *Phys. Rev.* **124**, 329 (1961)
58. A. R. Mackintosh y H. Bjerrum Møller, en *Magnetic properties of the rare earth metals*, Ed. R. J. Elliott, (Plenum Press, 1972).