

UCH-FC
MAG-F
D542
C.L

**Solución analítica aproximada del antiferromagneto de
Heisenberg bidimensional con interacción a primeros y
segundos vecinos**

Tesis

Entregada a la

Universidad de Chile

en cumplimiento parcial de los requisitos

para optar al grado de

Magister en Ciencias con Mención en Física

Facultad de Ciencias

por

José Vicente Díaz González

Junio de 1993 ✓

Director de Tesis: Dr. David Gottlieb Banner.

Facultad de Ciencias

Universidad de Chile

**INFORME DE APROBACION
TESIS DE MAGISTER**

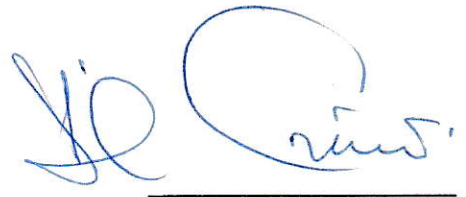
Se informa a la Escuela de Postgrado de la Facultad de Ciencias, que
la Tesis de Magister presentada por el candidato

JOSE VICENTE DIAZ GONZALEZ

ha sido aprobada por la Comisión Informante de Tesis como requisito
de Tesis para el grado de Magister en Ciencias con mención en Física.

Director de Tesis:

Dr. David Gottlieb Banner.

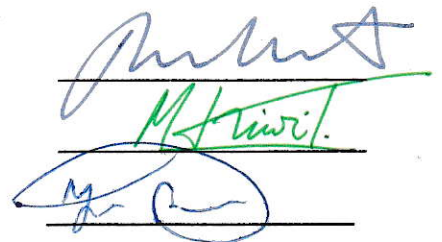


Comisión Informante de Tesis:

Dr. Miguel Lagos Infante.

Dr. Miguel Kiwi Tichauer.

Sr. Jaime Rössler Bonzi.



INDICE

	<i>pag</i>
1. Capítulo 1: Introducción.	1
2. Capítulo 2: Solución analítica aproximada del antiferromagneto de Heisenberg anisotrópico.	6
3. Capítulo 3: Solución analítica aproximada del antiferromagneto de Heisenberg bidimensional, con acoplamiento a primeros y segundos vecinos.	23
4. Capítulo 4: Hamiltoniano de Heisenberg Antiferromagnético con frustración en la interacción de intercambio en una y dos dimensiones.	32
5. Referencias	52

CAPITULO 1

INTRODUCCION

Existen algunos materiales que, en ausencia de campo magnético externo, se magnetizan espontáneamente a bajas temperaturas, a causa de la interacción entre átomos magnéticos. Este ordenamiento magnético es un ejemplo de sistemas cooperativos, en los cuales los constituyentes interactúan fuertemente, de modo que no es posible hacer alguna aproximación para considerar los átomos magnéticos independientes unos de otros.

Entre estos materiales, los ferromagnéticos son conocidos desde muy temprano en la historia, y son tecnológicamente importantes desde hace cientos de años.

Por otra parte, en 1932, Néel [1] propuso el concepto de antiferromagnetismo para explicar el hecho de que la susceptibilidad paramagnética es independiente de la temperatura en algunos metales, tales como Cr y Mn. La generalización de esta idea condujo al descubrimiento del ferrimagnetismo y helimagnetismo.

En los materiales ferromagnéticos, la interacción entre átomos magnéticos favorece un alineamiento paralelo de los momentos magnéticos atómicos. Cuando la temperatura absoluta es nula, el alineamiento es completo, obteniéndose el máximo valor de la magnetización espontánea. Cuando se aumenta la temperatura las fluctuaciones térmicas favorecen un orden aleatorio, disminuyendo el valor de la magnetización, la cual se anula a una temperatura característica T_C , conocida como temperatura de Curie.

En el caso de los materiales antiferromagnéticos, dos átomos vecinos tienen momentos magnéticos antiparalelos. Ello da lugar a un orden magnético de largo alcance, teniéndose una magnetización neta nula en la red. Esta red se puede dividir en dos sub-redes interpenetradas, exhibiendo cada una de ellas un orden ferromagnético, siendo antiparalela la magnetización neta de las dos sub-redes. A la temperatura absoluta cero, cada sub-red tiene su magnetización máxima; al aumentar la temperatura, las fluctuaciones térmicas disminuyen esta magnetización, haciéndola nula a la temperatura T_N , conocida como la temperatura de Néel. A diferencia del caso ferromagnético, el antiferromagnetismo exhibe una magnetización nula desde $T = 0$ hasta $T = T_N$, puesto que se cancela exactamente la magnetización espontánea de las dos sub-redes.

La idea de que la magnetización espontánea es debido a interacciones de átomos magnéticos, fue propuesta por Pierre Weiss [2] en 1907. Sin embargo, la explicación de los fenómenos físicos microscópicos involucrados y que dan origen a sus propiedades magnéticas, sólo comenzó a generarse a principios de 1930, con el nacimiento de la Mecánica Cuántica. Desde esa fecha hasta el presente ha habido una gran cantidad de trabajos dedicados a este tema. No obstante, hasta el momento, hay sólo solución exacta para el caso de una red unidimensional.

El Hamiltoniano más usado como punto de partida para describir ordenamientos magnéticos, es el Hamiltoniano de Heisenberg; su forma fue primero deducida por Dirac [3], y luego usada de manera más extensa por Van Vleck [4]. Este Hamiltoniano fue construido sobre la base de considerar electrones que ocupan orbitales ortogonales, por lo que es de gran utilidad en el estudio del magnetismo de aisla-

dores. Además, se considera que todos los átomos magnéticos son idénticos y que todos los sitios de la red magnética son cristalográficamente equivalentes.

Con posterioridad a la construcción de este Hamiltoniano, se han publicado muchos trabajos aplicando este modelo a sistemas magnéticos, pero a pesar de su apariencia simple, los resultados analíticos exactos son escasos. El Hamiltoniano de Heisenberg, en el caso antiferromagnético unidimensional, isotrópico, para espín $S = \frac{1}{2}$ y con interacción a primeros vecinos, fue resuelto por Bethe [5] en 1931, quien obtuvo las funciones de onda. Este resultado es uno de los más notables en la Física Matemática que envuelve problemas de muchos cuerpos. Desafortunadamente este tratamiento es extremadamente complicado y los resultados analíticos, basados en el *ansatz* de Bethe, han sido para casos particulares y dentro de esquemas aproximados. La energía del estado fundamental fue evaluada por Hulthén [6] siete años después que Bethe propuso la forma de la función de onda; ésta fue posteriormente generalizada por Orbach [7], quien discutió el Hamiltoniano anisotrópico; también por Walker [8], quien mostró las propiedades analíticas de las soluciones de Orbach. Finalmente, 32 años después de los progresos iniciales, Des Cloizeaux y Pearson [9] han calculado el espectro de un magnón y Griffiths [10], la susceptibilidad magnética.

Vamos a revisar los avances en la teoría de ondas de espín, puesto que es una de las más desarrolladas y es usada, en el presente trabajo, para comparar nuestros resultados. Esta teoría fue desarrollada por Anderson [11] en 1952, quien extendió la teoría de ondas de espín introducida por Holstein y Primakoff [12] en 1940 para el ferromagnetismo, con el fin de estudiar el estado base del antiferromagneto con

espín S grande. También en 1952 Kubo [13], usando la transformación Holstein-Primakoff y una expansión en potencias de $\frac{1}{S}$, derivó el resultado de Anderson.

La teoría de ondas de espín es una expansión en potencias de $\frac{1}{zS}$, siendo z el número de coordinación. Está basada en dos suposiciones: En primer lugar, que el orden de largo alcance antiferromagnético existe en el estado base y, en segundo lugar, que la amplitud de las fluctuaciones cuánticas alrededor del estado de Néel clásico, es pequeña. Es natural, entonces, desconfiar de la convergencia de esta expansión para espín y dimensiones pequeñas.

Anderson [14] en 1973, argumentó que las fluctuaciones cuánticas del estado base, en el caso bidimensional y espín $\frac{1}{2}$, pueden dar origen a un nuevo estado. Se especuló que dicho nuevo estado puede estar caracterizado por un orden de corto alcance, en el cual se forma un sistema de "líquido de espín", este estado sería una superposición de estados en el cual los espines estarían localmente enlazados unos a otros, formando un estado de *enlace de valencia resonante*, Anderson [15] 1987.

Nuestro objetivo en este trabajo, es resolver el Hamiltoniano de Heisenberg bidimensional con interacción a primeros y segundos vecinos y con frustración en el orden magnético. Para esto se usa una aproximación, que hemos llamado la teoría de excitaciones no magnéticas apareadas, PNME, la que fue introducida en 1988 por Miguel Lagos y Guillermo Cabrera [16] y [17], para un sistema unidimensional con interacción a primeros vecinos; ellos encuentran el espectro de energía en función del parámetro de anisotropía.

A continuación mostramos el desarrollo cronológico de esta teoría. En un trabajo del mismo año [18], M. Lagos, M. Kiwi, E. Gagliano y G. Cabrera calculan

coeficientes de correlación en términos del parámetro de anisotropía, para la cadena unidimensional. Posteriormente, G. Cabrera, M. Lagos y M. Kiwi [19] resuelven el Hamiltoniano de Heisenberg para dimensión arbitraria, usando la teoría PNME, mostrando que para redes cuadradas la teoría funciona bien hasta $\alpha = 1$. En 1989, M. Lagos, M. Kiwi, E. Gagliano y G. Cabrera [20], para el caso de la red bidimensional, calculan valores esperados de las variables dinámicas, resuelven esto en forma analítica y numérica. En 1989, D. Gottlieb y M. Lagos [22], estudian el acoplamiento espín-red para una red unidimensional. El problema de la cadena lineal con interacción a primeros y segundos vecinos, es resuelto en 1991 por D. Gottlieb, M. Lagos, K. Hallberg y C. Balseiro [21]. La teoría PNME, en 1991, es generalizada a cualquier espín S y con dimensión de la red arbitraria, por D. Gottlieb y M. Lagos [23]. En 1992, D. Gottlieb, M. Lagos y M. Montenegro [24], partiendo de la teoría PNME, aplican un método variacional para trabajar en el rango de anisotropía $1 < \alpha < \infty$.

El presente trabajo está estructurado de la siguiente manera: En el capítulo II se desarrolla la teoría PNME y se da solución al Hamiltoniano de Heisenberg Antiferromagnético (HHA), con interacción a primeros vecinos, con espín arbitrario y para cualquier dimensión del sistema. (ver D. Gottlieb y M.Lagos [23]).

En el capítulo III se resuelve el HHA para una red bidimensional con interacción a primeros y segundos vecinos. (ver D. Gottlieb, V. Díaz [34]).

Finalmente, en el capítulo IV, utilizando la teoría PNME y mediante un método variacional, se resuelve el HHA frustrado. (ver David Gottlieb, M.Montenegro, C.Millán y Vicente Díaz [25]).

CAPITULO 2

SOLUCIÓN ANALÍTICA APROXIMADA DEL ANTIFERROMAGNETO DE HEISENBERG ANISOTRÓPICO

En este capítulo se resuelve el Hamiltoniano de Heisenberg Antiferromagnético (HHA) dado en la ecuación (1), con anisotropía α , interacción a primeros vecinos, con spin arbitrario y dimensión del sistema también arbitrario [21].

Para diagonalizar este Hamiltoniano, se usa un novedoso método que consiste en usar excitaciones no magnéticas apareadas (PNME). Se definen operadores que crean excitaciones de spin-cero, invirtiendo dos espines vecinos e imponiendo una linealización apropiada. Estas excitaciones son cuasi-partículas cuya componente z de espín es nula, y obedecen la estadística bosónica en el límite de alta anisotropía (tendiendo al límite Ising).

El método permite encontrar el estado base, los primeros estados excitados, la energía del estado base y las funciones de correlación con mucha precisión, al comparar con resultados numéricos obtenidos mediante método Lanczos. Además, los resultados se obtienen como funciones analíticas cerradas del parámetro de anisotropía α . La obtención de una solución analítica, aunque sea aproximada, nos ayuda a entender los mecanismos físicos envueltos en este problema, y además se puede realizar una evaluación analítica de cualquier elemento de matriz entre estados estacionarios.

El estado base obtenido es una superposición de estados coherentes y es semejante a un estado desordenado, similar al propuesto por Anderson [15]. No obstante, se preserva el orden de largo alcance antiferromagnético, persistiendo la estructura de dos subredes interpenetradas, i.e. $\langle S^z(m) \rangle \approx \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ para m par y m impar, respectivamente.

Esta aproximación funciona muy bien para espines altamente correlacionados, lo último es válido para α muy pequeño. También, al crecer la dimensionalidad del sistema, los resultados mejoran notablemente, puesto que al aumentar la dimensión se favorece el orden de largo alcance. Si además se consideran espines mayores que $\frac{1}{2}$, se obtiene una mayor precisión en los resultados.

En una dimensión se obtiene que la energía para el estado base es asintóticamente exacta; el error es menor que el 1% al comparar con resultados exactos de Orbach [7], siempre que $0 \leq \alpha \leq 0.5$. Para redes cuadradas funciona bien hasta $\alpha = 1$ con menos de un 0.5% de error, lo último al comparar con resultados Monte Carlo.

Aunque hay soluciones numéricas para este problema, no existen soluciones analíticas en función del parámetro de anisotropía α , excepto para el caso de una dimensión con spin $\frac{1}{2}$. Los tratamientos numéricos emplean tiempos de computación excesivamente grandes al trabajar con sistemas anisotrópicos de dimensión mayor que 1 o bien espín mayores que $\frac{1}{2}$; además ellos presuponen el uso de cúmulos finitos (aunque de tamaño relativamente grande) de modo que en rigor, no son exactos.

El Hamiltoniano a diagonalizar es el siguiente:

$$\mathcal{H} = J \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} \left\{ S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) S^z(\vec{R}) + \alpha [S^x(\vec{R} + \vec{\delta}) S^x(\vec{R}) + S^y(\vec{R} + \vec{\delta}) S^y(\vec{R})] \right\}, \quad (1)$$

acá J es la integral de intercambio, α el parámetro de anisotropía, $S^{x,y,z}(\vec{R})$ son las componentes $\{x,y,z\}$ del operador de espín en el sitio \vec{R} .

Para entender con mayor facilidad la aproximación PNME, es conveniente comenzar con el caso más sencillo, siendo éste el caso unidimensional. Pensemos en un sistema físico consistente en una cadena lineal de espines con $S = \frac{1}{2}$ (por ejemplo, iones fijos con espín $\frac{1}{2}$). Más adelante retomaremos el caso más general consistente en un sistema de cualquier dimensión y espín arbitrario.

El Hamiltoniano a diagonalizar en este caso es

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1}^N \left[S_{i+1}^z S_i^z + \alpha (S_{i+1}^x S_i^x + S_{i+1}^y S_i^y) \right], \quad (2)$$

donde la integral de intercambio J , es positiva en el caso de interés (antiferromagnetismo). S_i^x, S_i^y, S_i^z son las componentes del operador de espín en el sitio i -ésimo, que para el caso de espín $\frac{1}{2}$, son las matrices de Pauli. Los operadores S_i^y cumplen las siguientes reglas de conmutación.

$$[S_j^\nu, S_k^\lambda] = i \delta_{j,k} \epsilon_{\nu\lambda\mu} S_j^\mu. \quad (3)$$

Aquí j, k son índices de sitio y $\{\nu, \lambda, \mu\}$ toman los valores $\{x, y, z\}$.

En el límite $\alpha \rightarrow 0$ la relación (2) se convierte en el Hamiltoniano de Ising, el

límite $\alpha \rightarrow 1$ nos da el Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico y con $\alpha \gg 1$ obtenemos el modelo XY.

Es más cómodo tratar el Hamiltoniano ((2)) introduciendo los operadores de "subida" y "bajada":

$$S^{\pm} = S^x \pm iS^y \quad (4)$$

Reemplazando (4) en ((2)) se obtiene:

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1}^N \left[S_{i+1}^z S_i^z + \frac{\alpha}{2} (S_{i+1}^+ S_i^- + S_i^+ S_{i+1}^-) \right] \quad (5)$$

Lo que se pretende aquí es encontrar los estados del sistema descrito por el Hamiltoniano (5) y sus energías. Para ello trabajaremos en el límite en que α es pequeño, esto es cuando la componente z es la más importante en el Hamiltoniano, lo que equivale a trabajar en el límite Ising. Al trabajar en este límite podemos tomar el estado de Néel $|\mathcal{N}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle$ como punto de partida para resolver nuestro Hamiltoniano, pero el estado de Néel no es solución de (5), puesto que al aplicar \mathcal{H} sobre dicho estado se obtiene un estado distinto. Como primer intento hacemos una pequeña modificación a este estado. Ya que estamos interesados principalmente en el estado fundamental debemos considerar dos cosas: primero que el estado base de un sistema antiferromagnético se encuentra solamente en el subespacio con $M=0$ [26]; esto lo podemos conseguir invirtiendo un par cualquiera de espines en el estado de Néel, lo segundo es que esta alteración del estado de Néel involucre la menor energía posible de la parte Ising del Hamiltoniano, y esto lo conseguimos exigiendo que el par que se invierta, sean dos espines inmediatamente vecinos.

Con estas consideraciones estamos motivados para definir los operadores ϕ que invierten pares de espines de la siguiente forma [16]:

$$\phi_{e,l}^\dagger \equiv S_{l+1}^+ S_l^- \quad l \quad \text{par} \quad (6)$$

$$\phi_{o,l}^\dagger \equiv S_l^+ S_{l+1}^- \quad l \quad \text{impar} \quad (7)$$

Suponemos que nuestro sistema no tiene frustración del orden antiferromagnético y de este modo dividimos la red lineal de espines en dos sub-redes cristalográficamente equivalentes (esto es válido siempre que nuestro sistema exhiba orden de largo alcance ¹ por eso esperamos que para dimensión mayor, y también para interacción a vecinos más lejanos, mejoren nuestros resultados). A la sub-red compuesta de sitios pares le asociamos espines *up* \uparrow y a la sub-red de sitios impares le asociamos espines *down* \downarrow . De este modo los espines de una sub-red interactúan solamente con espines de la otra sub-red (interacción sólo a primeros vecinos). Debido a la invariancia traslacional es conveniente tomar la transformada de Fourier de (6) y (7):

$$\phi_e^\dagger(k) = \sum_{l \text{ pares}}^N e^{ikl} S_{l+1}^+ S_l^- \quad (8)$$

$$\phi_o^\dagger(k) = \sum_{l \text{ impares}}^N e^{ikl} S_l^+ S_{l+1}^- \quad (9)$$

¹Según un resultado de Landau, en dimensión 1 no existe orden de largo alcance, salvo eventualmente a temperatura estrictamente nula.

Estos operadores crean excitaciones con componente z de espín nula, y nos permitirán diagonalizar nuestro Hamiltoniano.

Ahora generalizamos el tratamiento anterior. Con un razonamiento análogo al caso de la cadena lineal, podemos tratar el caso de un sistema con dimensión arbitraria y espín S también arbitrario [16], bajo la hipótesis que la red no sea frustrada (i.e. que se pueda descomponer en dos sub-redes interpenetradas; por ejemplo, redes cúbicas o bcc en dimensión 3, redes cuadradas en dimensión 2). Entonces el Hamiltoniano (5) toma la forma:

$$\mathcal{H} = J \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} \left\{ S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) S^z(\vec{R}) + \frac{\alpha}{2} [S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) + S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta})] \right\}, \quad (10)$$

donde \vec{R} recorre todos los sitios de subred con espín \uparrow , $\vec{R} + \vec{\delta}$ corresponde a los sitios de la sub-red \downarrow . Dado que la red es no frustrada, se cumple que $\vec{R} + \vec{\delta} + \vec{\delta}'$ siempre corresponde a un sitio de la sub-red \uparrow . Los vectores $\vec{\delta}$ conectan un sitio con sus vecinos mas próximos, y la cantidad de vectores $\vec{\delta}$ nos indica el número de coordinación, que es la cantidad de primeros vecinos que tiene un sitio dado, el cual llamaremos z .

Para este caso general, los operadores (8) y (9) que crean excitaciones de con $S_{total}^z = 0$, toman la forma

$$\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(k) \equiv \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} S^{+}(\vec{R} + \vec{\delta}) S^{-}(\vec{R}), \quad (11)$$

donde \vec{k} pertenece a la zona de Brillouin de una sub-red y \vec{R} recorre la subred \uparrow .

Es conveniente considerar el término aditivo $Q \delta_{\vec{k},0}$ en (11), para simplificaciones posteriores.

$$\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(k) = \frac{1}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} S^{+}(\vec{R} + \vec{\delta}) S^{-}(\vec{R}) + Q \delta_{\vec{k},0} \quad (12)$$

Estos operadores $\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}$ transfieren espines coherentemente de la sub-red \uparrow , a la sub-red \downarrow .

Es útil recordar las siguientes relaciones de conmutación obtenidas a partir de (3) y (4).

$$[S_j^+, S_k^-] = 2\delta_{j,k} S_j^z \quad (13)$$

$$[S_j^z, S_k^{\pm}] = \pm\delta_{j,k} S_j^{\pm} \quad (14)$$

Ahora, el plan de trabajo a seguir es el siguiente: se intentará escribir el Hamiltoniano (10) en términos de operadores que cumplan las siguientes relaciones de conmutación.

$$[a_k, a_{k'}^{\dagger}] = \delta_{k,k'} \quad (15)$$

$$[a_k, a_{k'}] = 0 \quad (16)$$

$$[\mathcal{H}, a_k^+] = \mathcal{E}_k a_k^+ \quad (17)$$

aquí hay tantos \vec{k} , como grados de libertad del sistema.

Si se cumple (15)–(17), entonces, al usar el desarrollo convencional de operadores de subida y bajada concluimos (dado que el espectro de \mathcal{H} está acotado inferiormente) que existe un "estado vacío" $|0\rangle$ o estado fundamental de energía, $\mathcal{H}|0\rangle = E_0|0\rangle$. El "vacío" cumple $a_k|0\rangle = 0$, $\forall k$. A partir de este vacío es posible escribir cualquier autoestado en la forma:

$$|n_k\rangle = \prod_k \frac{(a^+)^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} |0\rangle, \quad (18)$$

mientras que el Hamiltoniano toma la forma

$$\mathcal{H} = \sum_k \mathcal{E}_k a_k^+ a_k + E_0. \quad (19)$$

Si logramos escribir \mathcal{H} en la forma (19), tenemos resuelto el problema, puesto que tendríamos la energía del estado base E_0 y de las excitaciones \mathcal{E}_k .

Comencemos ahora el desarrollo algebraico que nos permitirá obtener la relación 19. Veamos en primer lugar las relaciones de conmutación que cumplen los operadores $\vec{\phi}_{\vec{g}}(\vec{k})$, dados por (12).

$$\begin{aligned}
[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}^{\dagger}(\vec{k}')] &= \frac{1}{S^2 N} \sum_{\vec{R}} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}} \left[S^+(\vec{R} + \vec{\delta}') S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) S^z(\vec{R}) + \right. \\
&\quad \left. - e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{\delta} - \vec{\delta}')} S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) \right] \quad (20)
\end{aligned}$$

Esta expresión es algo complicada, por lo que es necesario introducir una aproximación, la que consiste en trabajar en el subespacio de estados con alto orden antiferromagnético. En tal caso, el primer término de la derecha es nulo, puesto que el operador $S^-(\vec{R} + \vec{\delta})$ actúa sobre la subred *down* \downarrow , tiene una contribución distinta de cero sólo para alteraciones del estado de Néel, las que son despreciables en el espacio en que estamos trabajando.

En el segundo término de la suma, al conmutar los operadores S^+ y S^- , la relación (20) nos queda:

$$\begin{aligned}
[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}^{\dagger}(\vec{k}')] &= -\frac{1}{S^2 N} \sum_{\vec{R}} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{\delta} - \vec{\delta}')} \\
&\quad \left[S^-(\vec{R} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') S^+(\vec{R}) + 2\delta_{\vec{\delta}', \vec{\delta}} S^z(\vec{R}) \right] S^z(\vec{R} + \vec{\delta}). \quad (21)
\end{aligned}$$

Aquí, mediante un razonamiento análogo al anterior, es inmediato ver que el primer término dentro del paréntesis cuadrado es aproximadamente cero. En el límite de alta correlación se cumple:

$$S^z(\vec{R}) |\mathcal{N}\rangle = S |\mathcal{N}\rangle$$

$$S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) |\mathcal{N}\rangle = -S |\mathcal{N}\rangle$$

$$S^+(\vec{R} + \vec{\delta}')S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) | \mathcal{N} \rangle = \delta_{\vec{\delta}', \vec{\delta}} (S(S+1) - S^2 - S) | \mathcal{N} \rangle \quad (22)$$

$$S^+(\vec{R})S^-(\vec{R} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') | \mathcal{N} \rangle = \delta_{\vec{\delta}', \vec{\delta}} (S(S+1) - S^2 + S) | \mathcal{N} \rangle,$$

donde S es el espín total de los iones.

Entonces la relación (21) la podemos escribir como:

$$[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}^{\dagger}(\vec{k}')] = \delta_{\vec{\delta}', \vec{\delta}} \delta_{\vec{k}', \vec{k}}, \quad (23)$$

la que es válida para $\alpha \rightarrow 0$.

En este punto, la teoría PNME extiende la relación de conmutación (aproximada) (23) más allá de su rango original de validez; esto es, para valores de α y temperatura finitos.

Por otra parte, en forma directa se obtiene :

$$[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}(\vec{k}')] = 0 \quad (24)$$

Las relaciones (23) y (24) nos indican que estos nuevos operadores $\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})$, que hemos definido en (12), cumplen las leyes de conmutación bosónicas en el subespacio de estados donde hay un alto orden antiferromagnético.

Ahora corresponde encontrar la relación de conmutación entre \mathcal{H} y $\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})$. Para esto separamos el Hamiltoniano en dos partes: Hamiltoniano Ising y Hamiltoniano XY, los cuales respectivamente son:

$$\mathcal{H}_I = J \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) S^z(\vec{R}), \quad (25)$$

$$\mathcal{H}_{xy} = J \frac{\alpha}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} \left(S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) + S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) \right). \quad (26)$$

Después de un poco de álgebra se llega a la siguiente relación para el conmutador de \mathcal{H}_I con $\phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k})$

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_I, \phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k})] &= \frac{J}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) \\ &\quad \times \left(\sum_{\vec{\delta}'} S^z(\vec{R} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') - \sum_{\vec{\delta}'} S^z(\vec{R} + \vec{\delta}') - 1 \right) \end{aligned} \quad (27)$$

Nuevamente, para simplificar esta expresión, trabajamos en el límite de alta anisotropía ($\alpha \rightarrow 0$). El primer término entre paréntesis es la proyección sobre el eje z , del espín perteneciente a la subred \uparrow , y sumando sobre todos los vecinos se obtiene zS . Del mismo modo el segundo término nos da $-zS$. Con estas consideraciones la relación anterior nos queda:

$$[\mathcal{H}_I, \phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k})] = \frac{J}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) (2zs - 1) + O(\frac{1}{N}). \quad (28)$$

Despreciando la contribución de la desviación del orden antiferromagnético, obtenemos:

$$[\mathcal{H}_I, \phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k})] = \frac{J}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) (2zs - 1) \quad (29)$$

Ahora, el miembro derecho de (29) lo podemos escribir en términos del operador $\phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k})$ definido en (12)

$$\left[\mathcal{H}_I, \phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k}) \right] = J(2zs - 1) \left(\phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k}) - Q\delta_{\vec{\delta},\vec{0}} \right) \quad (30)$$

Hemos obtenido así la diagonalización de la parte Ising del Hamiltoniano, y sólo resta diagonalizar la parte XY. Pero, \mathcal{H}_{xy} se puede escribir inmediatamente en términos de los operadores $\phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k})$

$$\mathcal{H}_{xy} = J\frac{\alpha}{2}\sqrt{2s^2N} \sum_{\vec{\delta}} \left(\phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{0}) + \phi_{\vec{\delta}}(\vec{0}) - 2Q \right) \quad (31)$$

Cabe hacer notar que la relación (31) es exacta, ya que no se ha usado ninguna aproximación para llegar a esta expresión. Sumando sobre el tercer término de la derecha nos queda:

$$\mathcal{H}_{xy} = J\frac{\alpha}{2}\sqrt{2s^2N} \sum_{\vec{\delta}} \left(\phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{0}) + \phi_{\vec{\delta}}(\vec{0}) \right) - z\alpha J\sqrt{2s^2N} Q \quad (32)$$

Es inmediato ver que de (23), (25) y (31), se obtiene:

$$\left[\mathcal{H}_{xy}, \phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k}) \right] = J\frac{\alpha}{2}\sqrt{2S^2N} \delta_{\vec{k},\vec{\delta}}. \quad (33)$$

Ahora estamos en condiciones de escribir el conmutador de \mathcal{H} con $\phi_{\vec{\delta}}^+(\vec{k})$. De (30) y (33) se obtiene:

$$\begin{aligned} [\mathcal{H} , \phi_{\vec{\delta}}^{\pm}(\vec{k})] &= J(2zs - 1) (\phi_{\vec{\delta}}^{\pm}(\vec{k}) - Q\delta_{\vec{\delta},\vec{0}}) \\ &\quad + J\frac{\alpha}{2}\sqrt{2S^2N} \delta_{\vec{\delta},\vec{0}} \end{aligned} \quad (34)$$

Definiendo adecuadamente Q , como

$$Q \equiv \frac{\alpha}{2(2zs - 1)}\sqrt{2S^2N}, \quad (35)$$

obtenemos

$$[\mathcal{H} , \phi_{\vec{\delta}}^{\pm}(\vec{k})] = J(2zs - 1) \phi_{\vec{\delta}}^{\pm}(\vec{k}) \quad (36)$$

y también,

$$\phi_{\vec{\delta}}^{\pm}(k) = \frac{1}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) + \frac{\alpha S}{(2zs - 1)} \sqrt{N/2} \delta_{\vec{k},0}. \quad (37)$$

Como ya habíamos visto, las relaciones (23), (25) y (36) nos permiten escribir el Hamiltoniano de la siguiente forma (restringiendo el espacio de Hilbert a estados con componente z de espín nula)

$$\mathcal{H} = J(2zs - 1) \sum_{\vec{k},\vec{\delta}} \phi_{\vec{\delta}}^{\pm}(\vec{k}) \phi_{\vec{\delta}}^{\mp}(\vec{k}) + E_g. \quad (38)$$

Este Hamiltoniano es bien conocido, siendo del tipo oscilador armónico. E_g es la energía del estado base, la cual está indeterminada por ahora y para obtenerla se aprovecha el hecho de que la energía del estado base del Hamiltoniano de Ising

es conocida.

Para encontrar E_g escribamos el Hamiltoniano directamente en términos de los operadores $\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})$. Escribir \mathcal{H}_{xy} en términos de $\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})$ es directo de (32). La obtención de \mathcal{H}_I en función de los operadores $\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})$ es un poco más larga. Para esto definimos

$$\psi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) \equiv \phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) - Q\delta_{\vec{\delta},\vec{0}}, \quad (39)$$

y de (30) tenemos que $\psi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k})$ satisface

$$\left[\mathcal{H}_I, \psi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) \right] = J(2zs - 1)\psi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}). \quad (40)$$

Obviamente, los $\psi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k})$ cumplen las relaciones de conmutación bosónicas, luego

$$\mathcal{H}_I = \sum_{\vec{k},\vec{\delta}} J(2zs - 1)\psi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k})\psi_{\vec{\delta}}(\vec{k}) + E_g^I, \quad (41)$$

pero, E_g^I es la energía del estado base para el modelo de Ising, la cual es conocida

$$E_g^I = -zJS^2\frac{N}{2}, \quad (42)$$

y de este modo obtenemos

$$\mathcal{H}_I = J(2zs - 1)\sum_{\vec{k},\vec{\delta}} \psi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k})\psi_{\vec{\delta}}(\vec{k}) - NJS^2\frac{z}{2}. \quad (43)$$

Volviendo a los antiguos operadores $\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})$, de (43) y (32), obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_I + \mathcal{H}_{xy} \\ &= J(2zS - 1) \sum_{\vec{k}, \vec{\delta}} \phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) \phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}) - NJS^2 \frac{z}{2} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2zS - 1} \right). \end{aligned} \quad (44)$$

Comparando las relaciones (38) y (44) se obtiene directamente E_g , como

$$E_g = -NJS^2 \frac{z}{2} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2zS - 1} \right). \quad (45)$$

Para obtener el estado base $|g\rangle$, necesitamos que se cumpla:

$$\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}) |g\rangle = 0, \quad \forall \vec{k}, \vec{\delta}. \quad (46)$$

Un camino posible a seguir es darnos un estado de prueba y mostrar que se cumple (46). Para esto es útil la siguiente relación:

$$\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}) |\mathcal{N}\rangle = \frac{\alpha S}{(2zS - 1)} \sqrt{N/2} \delta_{\vec{k}, 0} |\mathcal{N}\rangle, \quad (47)$$

Esta relación indica que $(\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}) - cte.)$ es un operador de destrucción si $|\mathcal{N}\rangle$ es el vacío. Aplicando el operador "de traslación" $e^{-cte. \sum_{\vec{\delta}} (\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(0) - \phi_{\vec{\delta}}(0))}$ se obtiene

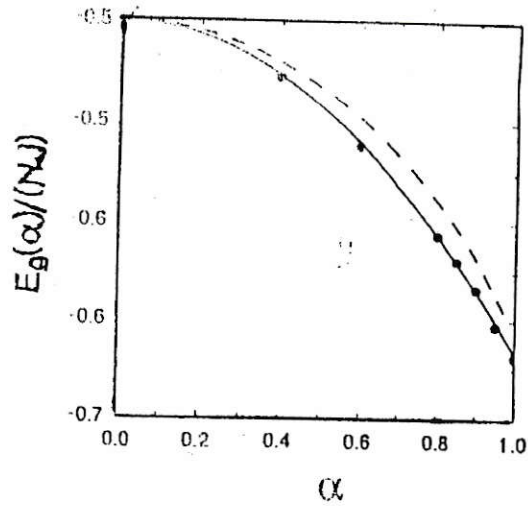
$$|g\rangle = e^{-\frac{\alpha S}{2zS - 1} \sqrt{N/2} \sum_{\vec{\delta}} (\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(0) - \phi_{\vec{\delta}}(0))} |\mathcal{N}\rangle \quad (48)$$

satisface (46), para cualquier \vec{k} . Notemos que el estado fundamental es una transformación unitaria del estado de Néel. Además, de (47) se tiene que el estado de Néel es un estado coherente de los operadores $\phi_\delta(k)$.

En el gráfico de la página siguiente, se muestra la energía del estado base para una red cuadrada dada por la ecuación (45) y corresponde a la línea continua. Se compara con la teoría de ondas de espín y cálculos numéricos mediante Monte Carlo, representados por la línea discontinua y de puntos, respectivamente.

La figura 1 muestra que la teoría, en el caso bidimensional, es asintóticamente exacta en el límite Ising ($\alpha \rightarrow 0$) y se mantiene muy buena hasta $\alpha = 1$.

figura 1



En la referencia [21] se estudia la exactitud de esta aproximación (PNME), y se muestra que el error es proporcional a α^4 .

CAPITULO 3

SOLUCIÓN ANALÍTICA APROXIMADA DEL ANTIFERROMAGNETO DE HEISENBERG CON ACOPLAMIENTO A PRIMEROS Y SEGUNDOS VECINOS

El HHA, a pesar de su apariencia simple, permanece como un gran desafío hasta el presente y ha sido resuelto exactamente en forma analítica sólo para el caso isotrópico, unidimensional, con interacción entre espines primeros vecinos y $S = 1/2$, por Bethe [27] en 1931. No obstante, para estudiar el caso bidimensional se han usado varias técnicas, tales como cálculo variacional [28], diagonalización exacta para sistemas pequeños [29] y método de simulación Monte Carlo [30]. Por otra parte, con el descubrimiento de los materiales superconductores de alta T_c , se ha agregado otra fuerte motivación para estudiar el HHA bidimensional, puesto que los experimentos, mediante *scattering* de neutrones [31] sobre La_2CuO_4 y otros materiales de este tipo, han mostrado que existe un orden antiferromagnético en los planos CuO_2 y es en estos planos donde tendría lugar el fenómeno de la superconductividad.

La teoría desarrollada en el capítulo anterior, funciona bien para redes bipartitas, donde los espines de una sub-red interactúan sólo con los de la otra sub-red, y para redes con espines altamente correlacionados.

Es interesante analizar qué pasa cuando el orden antiferromagnético tiende a desaparecer. Esta frustración se puede estudiar introduciendo una interacción a segundos vecinos J_2 antiferromagnético, que compite con la interacción a primeros vecinos J_1 , también antiferromagnética.

En este capítulo se generaliza la teoría, para interacción a segundos vecinos J_2 en una red bidimensional, en este caso es más complicado dividir la red en dos sub-redes, puesto que hay interacción entre espines de una misma sub-red.

No obstante, nuestros resultados para la energía del estado base en función del parámetro J_2 , no son buenos en el límite $J_2 \rightarrow J_1$, con J_2 antiferromagnético. Esto se debe a que en nuestro análisis partimos de un estado que exhibe alto orden antiferromagnético. Estos resultados fueron publicados en **Physical Review B** [34].

Nuestro sistema físico es una red cuadrada de iones con espín $\frac{1}{2}$; consideramos interacción a primeros y segundos vecinos con anisotropía α a primeros vecinos y β a segundos vecinos. El sistema está modelado por el siguiente Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{I_1} + \mathcal{H}_{I_2} + \mathcal{H}_{xy_1} + \mathcal{H}_{xy_2}, \quad (49)$$

donde $\mathcal{H}_{I_{1,2}}$ y $\mathcal{H}_{xy_{1,2}}$ representa la parte Ising y transversal del Hamiltoniano, respectivamente. Los subíndices 1 y 2 representan interacciones a primeros y segundos vecinos, respectivamente.

$$\mathcal{H}_{I_1} = J_1 \sum_{\vec{R}, i} [S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^z(\vec{R})] \quad (50)$$

$$\mathcal{H}_{I_2} = \frac{J_2}{2} \sum_{\vec{R},i} [S^z(\vec{R} + \vec{\lambda}_i)S^z(\vec{R})] + \frac{J_2}{2} \sum_{\vec{R}',i} [S^z(\vec{R}' + \vec{\lambda}_i)S^z(\vec{R}')] \quad (51)$$

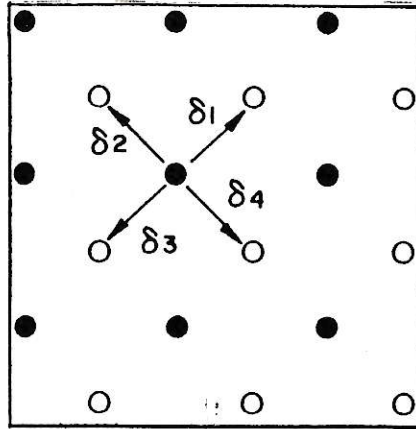
$$\mathcal{H}_{xy_1} = \frac{J_1\alpha}{2} \sum_{\vec{R},i} [S^+(\vec{R} + \vec{\delta}_i)S^-(\vec{R}) + S^+(\vec{R})S^-(\vec{R} + \vec{\delta}_i)] \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{xy_2} = & \frac{J_2\beta}{4} \sum_{\vec{R},i} [S^+(\vec{R} + \vec{\lambda}_i)S^-(\vec{R}) + S^+(\vec{R})S^-(\vec{R} + \vec{\lambda}_i)] \\ & + \frac{J_2\beta}{4} \sum_{\vec{R}',i} [S^+(\vec{R}' + \vec{\lambda}_i)S^-(\vec{R}') + S^+(\vec{R}')S^-(\vec{R}' + \vec{\lambda}_i)] \end{aligned} \quad (53)$$

$$\vec{\lambda}_i = \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_{i+1}. \quad (54)$$

Aquí J_1 y J_2 son las constantes de acoplamiento a primeros y segundos vecinos; α y β determinan las anisotropías correspondientes, \vec{R} representa los nodos de una sub-red, \vec{R}' los de la otra sub-red, $\vec{\delta}_i$ con $i = 1, 2, 3, 4$ son los vectores que conectan las dos sub-redes entre sí a primeros vecinos, como se muestra en la fig.2. $S(\vec{R})$ es el espín en el sitio \vec{R} y $S^\pm = S^x \pm iS^y$.

figura 2.



Definimos los operadores de excitación de espín-cero como sigue:

$$\phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R}) = S^+(\vec{R} + \vec{\delta}_i)S^-(\vec{R}). \quad (55)$$

Los operadores $\phi_{\vec{\delta}_i}$ obedecen un álgebra complicada,

$$\left[\phi_{\vec{\delta}_i}(\vec{R}_1), \phi_{\vec{\delta}_j}^\dagger(\vec{R}_2) \right] = \left(S^z(\vec{R}_1) - S^z(\vec{R}_1 + \vec{\delta}_i) \right) \delta_{\vec{R}_1, \vec{R}_2} \delta_{\vec{\delta}_i, \vec{\delta}_j} \quad (56)$$

$$\left[\phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R}_1), \phi_{\vec{\delta}_j}^\dagger(\vec{R}_2) \right] = 0, \quad (57)$$

sin embargo, si uno sustituye el lado derecho de la ecuación (56) por su proyección sobre el estado de Néel $|\mathcal{N}\rangle$, el cual asigna espín up a la sub-red \vec{R} , el conmutador se reduce a

$$\left[\phi_{\vec{\delta}_i}(\vec{R}_1), \phi_{\vec{\delta}_j}^\dagger(\vec{R}_2) \right] = \delta_{\vec{R}_1, \vec{R}_2} \delta_{\vec{\delta}_i, \vec{\delta}_j}. \quad (58)$$

Es razonable reemplazar la relación de conmutación (56) por la relación (58) que es mucho más simple, cuando trabajamos en el subespacio de estados con alto orden antiferromagnético. En la referencia [32] se da un criterio preciso para la exactitud de tal procedimiento. Con esta sustitución \mathcal{H}_{xy1} y \mathcal{H}_{xy2} pueden escribirse en términos de los operadores $\phi_{\vec{\delta}_i}$ en una forma muy simple.

$$\mathcal{H}_{xy1} = \frac{J_1 \alpha}{2} \sum_{\vec{R}, i} \left(\phi_{\vec{\delta}_i}(\vec{R}) + \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R}) \right) \quad (59)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{xy2} = \frac{J_2 \beta}{4} \sum_{\vec{R}, i} \{ & \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R}) \phi_{-\vec{\delta}_{i+1}}(\vec{R} + \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_{i+1}) + \phi_{-\vec{\delta}_{i+1}}(\vec{R} + \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_{i+1}) \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R}) \\ & + \phi_{\vec{\delta}_{i+1}}^\dagger(\vec{R} + \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_1) \phi_{-\vec{\delta}_i}(\vec{R} + \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_1) \\ & + \phi_{\vec{\delta}_{i+1}}(\vec{R} + \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_1) \phi_{-\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R} + \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_1) + H.C. \} \quad (60) \end{aligned}$$

Las ecuaciones (58), (59) y (60) permiten obtener las relaciones de conmutación de los operadores $\phi_{\vec{\delta}_i}$ con la parte transversal del Hamiltoniano. El conmutador con la parte Ising es dado por

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{I_1}, \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R})] &= +J_1 S^+(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^-(\vec{R}) \sum_j \{ S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i - \vec{\delta}_j) - S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_j) \} \\
&\quad - J_1 S^+(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^-(\vec{R}), \tag{61}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{I_2}, \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R})] &= \frac{J_2}{2} S^+(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^-(\vec{R}) \sum_j \{ S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i - \vec{\delta}_j - \vec{\delta}_{j+1}) - \\
&\quad S^z(\vec{R} - \vec{\delta}_j - \vec{\delta}_{j+1}) + S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_j + \vec{\delta}_{j+1}) \\
&\quad - S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_j + \vec{\delta}_{j+1}) \}. \tag{62}
\end{aligned}$$

En el límite de alta anisotropía (α pequeño), en donde el orden antiferromagnético prevalece, los operadores S^z del lado derecho de estas expresiones pueden ser reemplazados por sus valores medios $\langle S^z \rangle = \pm \frac{1}{2}$. La relación de conmutación entre los operadores $\phi_{\vec{\delta}_i}$ y el Hamiltoniano finalmente queda

$$\begin{aligned}
[\mathcal{H}, \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R})] &= (3J_1 - 4J_2) \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R}) + \frac{J_2 \beta}{2} \left\{ \phi_{\vec{\delta}_{i+1}}^\dagger(\vec{R} + \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_{i+3}) + \phi_{\vec{\delta}_{i+1}}^\dagger(\vec{R}) \right. \\
&\quad \left. + \phi_{\vec{\delta}_{i+3}}^\dagger(\vec{R} + \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_{i+1}) + \phi_{\vec{\delta}_{i+3}}^\dagger(\vec{R}) \right\} + \frac{J_1 \alpha}{2}. \tag{63}
\end{aligned}$$

La relación (63) muestra que los operadores $\phi_{\vec{\delta}_i}(\vec{R})$ y el Hamiltoniano \mathcal{H} obedecen un álgebra cerrada, y entonces una combinación lineal de ellos puede diagonalizar el Hamiltoniano. La invariancia translacional del sistema nos lleva a tomar la transformada de Fourier de los operadores $\phi_{\vec{\delta}_i}(\vec{R})$

$$\phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{k}) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{R}), \tag{64}$$

donde \vec{k} denota un punto de la zona de Brillouin de una de las sub-redes ferromagnéticas, digamos $\{\vec{R}\}$. Reemplazando la ecuación anterior en la relación (63) obtenemos que el Hamiltoniano sólo mezcla aquellos operadores $\phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{k})$ con $i = 1, 2, 3, 4$ para cada \vec{k} . Uno obtiene

$$[\mathcal{H}, \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{k})] = \varepsilon_0 \phi_{\vec{\delta}_i}^\dagger(\vec{k}) + d \left\{ (1 + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{\delta}_i + \vec{\delta}_{i+3})}) \phi_{\vec{\delta}_{i+1}}^\dagger(\vec{k}) + (1 + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{\delta}_i + \vec{\delta}_{i+1})}) \phi_{\vec{\delta}_{i+3}}^\dagger(\vec{k}) \right\} + a \delta_{\vec{k},0}, \quad (65)$$

donde $\varepsilon_0 = 3J_1 - 4J_2$, $a = \frac{J_1 \alpha}{2} \sqrt{\frac{N}{2}}$, y $d = \frac{J_2 \beta}{2}$. Esta última ecuación puede escribirse en forma matricial

$$[\mathcal{H}, \vec{\mathcal{V}}(\vec{k})] = \begin{bmatrix} \varepsilon_0 & 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{14}} & 0 & 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{12}} \\ 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{23}} & \varepsilon_0 & 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{12}} & 0 \\ 0 & 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{34}} & \varepsilon_0 & 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{23}} \\ 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{34}} & 0 & 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_{14}} & \varepsilon_0 \end{bmatrix} \vec{\mathcal{V}}(\vec{k}) + \vec{\mathcal{A}} \delta_{\vec{k},0}, \quad (66)$$

donde

$$\vec{\mathcal{V}}(\vec{k}) = \begin{bmatrix} \phi_{\vec{\delta}_1}^\dagger(\vec{k}) \\ \phi_{\vec{\delta}_2}^\dagger(\vec{k}) \\ \phi_{\vec{\delta}_3}^\dagger(\vec{k}) \\ \phi_{\vec{\delta}_4}^\dagger(\vec{k}) \end{bmatrix}, \quad \vec{\mathcal{A}} = \begin{bmatrix} a \\ a \\ a \\ a \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \vec{\delta}_{ij} = \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_j. \quad (67)$$

Diagonalizando la matriz de 4×4 dada en la ecuación (66) encontramos un conjunto de $2N$ operadores $\psi_i(\vec{k})$, $i = 1, 2, 3, 4$, operadores que obedecen la estadística

de Bose, los cuales son excitaciones elementales del Hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético en el límite de espines altamente correlacionados .

$$\vec{\mathcal{W}}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & e^{-\frac{i}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_{14}} & e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1} & e^{-\frac{i}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_{12}} \\ 1 & e^{-\frac{i}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_{14}} & -e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1} & -e^{-\frac{i}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_{12}} \\ 1 & -e^{-\frac{i}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_{14}} & e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1} & -e^{-\frac{i}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_{12}} \\ 1 & -e^{-\frac{i}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_{14}} & -e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1} & e^{-\frac{i}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_{12}} \end{bmatrix} \vec{\mathcal{V}}(\vec{k}) + \begin{bmatrix} \frac{2a}{\epsilon_1} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \delta_{\vec{k},0}, \quad (68)$$

donde

$$\vec{\mathcal{W}}(\vec{k}) = \begin{bmatrix} \psi_1^\dagger(\vec{k}) \\ \psi_2^\dagger(\vec{k}) \\ \psi_3^\dagger(\vec{k}) \\ \psi_4^\dagger(\vec{k}) \end{bmatrix}. \quad (69)$$

La energía de las excitaciones asociadas a $\psi_i(\vec{k})$ vienen dadas por $\epsilon_i(\vec{k})$ y son

$$\epsilon_1(\vec{k}) = \epsilon_0 + 4d \cos\left(\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1\right) \cos\left(\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2\right) \quad (70)$$

$$\epsilon_2(\vec{k}) = \epsilon_0 + 4d \sin\left(\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1\right) \sin\left(\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2\right) \quad (71)$$

$$\epsilon_3(\vec{k}) = \epsilon_0 - 4d \cos\left(\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1\right) \cos\left(\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2\right) \quad (72)$$

$$\epsilon_4(\vec{k}) = \epsilon_0 - 4d \sin\left(\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1\right) \sin\left(\frac{1}{2}\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2\right) \quad (73)$$

El Hamiltoniano de Heisenberg, de este modo, toma la forma de un conjunto de $2N$ osciladores armónicos

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},i} \epsilon_i(\vec{k}) \psi_i^\dagger(\vec{k}) \psi_i(\vec{k}) + E_g, \quad (74)$$

donde la energía del estado base viene dada por

$$E_g = -\frac{N}{2} (J_1 - J_2) - \frac{N\alpha^2 J_1^2}{2(3J_1 - 4J_2 + 2\beta J_2)}. \quad (75)$$

Notando que

$$\psi_1(\vec{k})|\mathcal{N}\rangle = \frac{2a}{\epsilon_1} \delta_{\vec{k},0} |\mathcal{N}\rangle, \quad (76)$$

donde $|\mathcal{N}\rangle$ es el estado de Néel que asigna spin *up* a la sub-red \vec{R} , uno puede fácilmente encontrar que el ket

$$|g\rangle = \exp\left\{-\frac{2a}{\epsilon_1} (\psi_1^\dagger(0) - \psi_1(0))\right\} |\mathcal{N}\rangle \quad (77)$$

satisface

$$\psi_i(\vec{k})|g\rangle = 0 \quad (78)$$

para cualquier \vec{k} y $\vec{\delta}$, siendo así el estado base.

No existen muchos resultados numéricos bidimensionales. La energía del estado base dada por la relación (75) se compara con cálculos numéricos de la referencia [23] para la red unidimensional con interacción primeros y segundos vecinos. Las figuras 3–5 muestran la energía del estado base como función del parámetro de anisotropía, para el caso de la red unidimensional. Estos valores se comparan con cálculos numéricos (círculos).

En la figura 3, se muestra el caso en que el parámetro de anisotropía, a segundos vecinos, es nulo. En el caso $J_2 < 0$, si $|J_2/J_1|$ crece, mejora el rango de validez de

la aproximación PNME, por lo que esta teoría mejora cuando J_2 es ferromagnético y con valores grandes.

La figura 5 es semejante a la figura 3, salvo que en este caso $\beta = 0.2$, se ve que la teoría se quiebra dramáticamente cuando J_2 es antiferromagnético y cercano a $\frac{J_1}{2}$, ($J_2 = 0.4J_1$).

figura 3

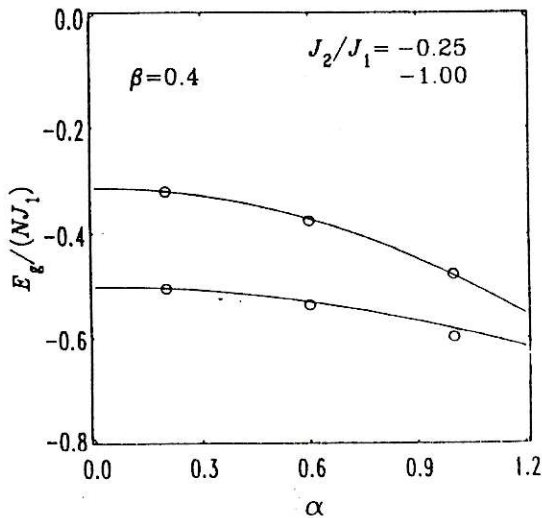
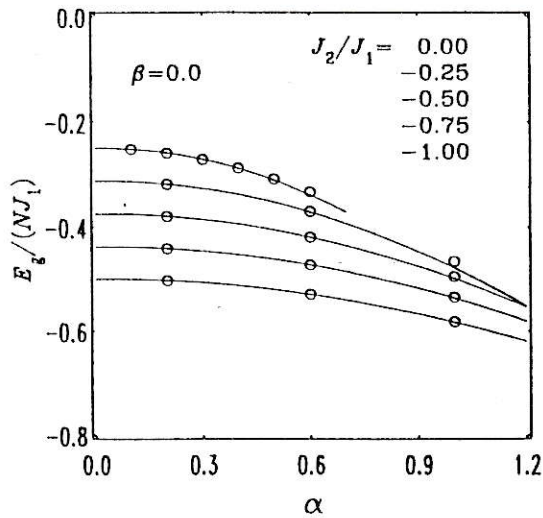


figura 4

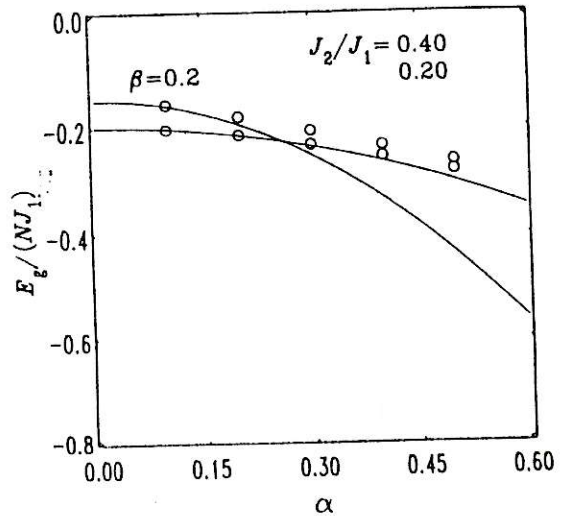


figura 5

CAPITULO 4

HAMILTONIANO DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICO CON FRUSTRACIÓN EN LA INTERACCIÓN DE INTERCAMBIO EN UNA Y DOS DIMENSIONES

En este capítulo desarrollaremos un método para resolver sistemas magnéticos con frustración en la interacción de intercambio, en una y dos dimensiones.

Como se mostró en el capítulo anterior, el estado base obtenido por el método PNME (excitaciones no magnéticas apareadas) es un estado coherente y tiene una estructura con cierto grado de desorden, pero presenta orden de largo alcance antiferromagnético. Esto explica porqué en el capítulo anterior la teoría no funciona bien en el caso "sobre frustrado", esto es, para $J_2 > J_1$ (la condición de frustración para el caso unidimensional con $\alpha = 1$ es $J_2 = \frac{1}{2}J_1$). En el caso frustrado unidimensional se espera una solución tipo 2-2 ($|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\dots\rangle$).

En el presente capítulo se presenta una versión variacional de la teoría PNME en una y dos dimensiones. Se obtiene la energía del estado base, la que es comparada con la obtenida por método Lanczos para *clusters* de 12 átomos y con el método variacional de Oliveira; se comparan, además, los parámetros de orden. Finalmente se muestra el espacio de fase de las distintas soluciones en función de las interacciones de intercambio (J_2/J_1). Este método variacional fue recientemente

introducido [24] para resolver el HHA.

Esta versión variacional de la teoría PNME permite resolver el HHA para cualquier valor del parámetro de anisotropía α y cualquier valor de las interacciones de intercambio J_1 y J_2 , en una y dos dimensiones. Se parte tomando el estado base $|g\rangle$ obtenido por la aproximación PNME para el caso de alto orden antiferromagnético ($\alpha \rightarrow 0$) y se le aplica una rotación en torno al eje y . Con este estado base rotado, $|g'\rangle$, se construye el funcional de la energía $\langle g' | \mathcal{H} | g' \rangle$ y a continuación se buscan los mínimos de este funcional para los distintos valores de los parámetros.

El Hamiltoniano a resolver es semejante al del capítulo 3, salvo que a segundos vecinos consideraremos, por el momento, solamente la parte Ising.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{I_1} + \mathcal{H}_{I_2} + \mathcal{H}_{xy_1} \quad (79)$$

Donde $\mathcal{H}_{I_{1,2}}$ y \mathcal{H}_{xy_1} representa la parte Ising y transversal del Hamiltoniano, respectivamente.

$$\mathcal{H}_{I_1} = J_1 \sum_{\vec{R},i} [S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^z(\vec{R})] \quad (80)$$

$$\mathcal{H}_{xy_1} = \frac{J_1 \alpha}{2} \sum_{\vec{R},i} [S^+(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^-(\vec{R}) + S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta}_i)] \quad (81)$$

$$\mathcal{H}_{I_2} = \frac{J_2}{2} \sum_{\vec{R},i} [S^z(\vec{R} + \vec{\lambda}_i) S^z(\vec{R})] + \frac{J_2}{2} \sum_{\vec{R}',i} [S^z(\vec{R}' + \vec{\lambda}_i) S^z(\vec{R}')] \quad (82)$$

$$\vec{\lambda}_i = \vec{\delta}_i + \vec{\delta}_{i+1}. \quad (83)$$

Aquí J_1 y J_2 son las constantes de acoplamiento a primeros y segundos vecinos

respectivamente, α determina la anisotropía a primeros vecinos, \vec{R} representa los puntos de red de la sub-red \uparrow , \vec{R}' los de la otra sub-red, $\vec{\delta}_i$ con $i = 1, 2, 3, 4$ son los vectores que conectan las dos sub-redes entre sí a primeros vecinos y $\vec{\lambda}_i$ conecta los sitios más próximos de una misma sub-red.

A continuación tomamos el estado base obtenido en el capítulo 2 para el caso $\alpha < 1$, el que viene dado por

$$|g\rangle = e^{-\frac{\alpha s}{2zs-1}} \sqrt{\frac{N}{2}} \sum_{\vec{\delta}} (\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(0) - \phi_{\vec{\delta}}(0)) |\mathcal{N}\rangle \quad (84)$$

aquí $\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(0)$ son las excitaciones bosónicas empleadas al usar el método PNME para diagonalizar el Hamiltoniano, y vienen dadas por

$$\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(0) = \frac{1}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\vec{R}} S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) + cte. \quad (85)$$

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

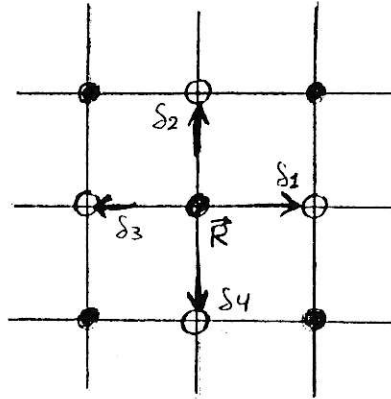
En nuestro cálculo variacional tomamos una rotación del estado base (84) y lo usamos como estado de prueba. De este modo el estado de prueba viene dado por

$$|g(\theta, \alpha')\rangle = R_y(\theta) |g(\alpha')\rangle, \quad (86)$$

con $R_y(\theta)$ operador de rotación unitario y $\theta \equiv (\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4)$, α' , son parámetros variacionales. La rotación es a partir del orden antiferromagnético, mediante la cual los cuatro espines de una plaqueta rotan en los ángulos $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$, respectivamente, alrededor del eje Y .

Para el caso bidimensional tomamos una plaqueta de cuatro sitios, con θ_1 y θ_2 los ángulos de abajo, derecha e izquierda respectivamente (θ_1 en $(\vec{R} + \vec{\delta}_1)$ y θ_2 en el sitio (\vec{R})). Además, θ_4 y θ_3 son los ángulos de arriba, derecha e izquierda respectivamente (θ_3 en el sitio $(\vec{R} + \vec{\delta}_2)$) y θ_4 en $(\vec{R} + \vec{\delta}_1 + \vec{\delta}_2)$.

figura 6:



$$R_y(\theta) = \prod_{\vec{R}} \exp \left[\frac{i}{2} \left(\theta_1 S_y(\vec{R} + \vec{\delta}_1) + \theta_2 S_y(\vec{R}) + \theta_3 S_y(\vec{R} + \vec{\delta}_2) + \theta_4 S_y(\vec{R} + \vec{\delta}_1 + \vec{\delta}_2) \right) \right] \quad (87)$$

Ahora evaluamos la energía para estos estados rotados. Para ello se calcula el valor medio de \mathcal{H} en los nuevos estados,

$$F(\theta, \alpha') = \langle g(\theta, \alpha') | \mathcal{H} | g(\theta, \alpha') \rangle \quad (88)$$

También podemos escribir el funcional de la energía como

$$F(\theta, \alpha') = \langle g(\alpha') | R_y^\dagger(\theta) \mathcal{H} R_y(\theta) | g(\alpha') \rangle. \quad (89)$$

El trabajo que sigue es encontrar para qué valores de los parámetros θ y α' se obtiene un mínimo del funcional $F(\theta, \alpha')$ y de este modo sabremos la orientación

que tienen los espines en la plaqueta para este estado fundamental. Mediante el parámetro α' , conocemos el grado de apartamiento que presenta este estado respecto al estado de Néel.

Para obtener $F(\theta, \alpha')$, comenzamos por rotar el operador \mathcal{H} para luego promediar con el estado base dado en (84). Para simplificar el trabajo algebraico es cómodo notar que la rotación de los operadores de espín es

$$R_y^\dagger(\theta) S^z R_y(\theta) = \sin(\theta)S^x + \cos(\theta)S^z \quad (90)$$

$$R_y^\dagger(\theta) S^+ R_y(\theta) = \frac{1}{2}(1 + \cos(\theta))S^+ - \frac{1}{2}(1 - \cos(\theta))S^- - \sin(\theta)S^z \quad (91)$$

$$R_y^\dagger(\theta) S^- R_y(\theta) = \frac{1}{2}(1 + \cos(\theta))S^- - \frac{1}{2}(1 - \cos(\theta))S^+ - \sin(\theta)S^z. \quad (92)$$

Ocupamos estas relaciones para evaluar $R_y^\dagger(\theta) \mathcal{H} R_y(\theta)$, esto es la rotación del Hamiltoniano dado en (79).

Para la parte Ising a primeros vecinos, en 1D y 2D, obtenemos

$$\begin{aligned} \langle g | R_y^\dagger \mathcal{H}_{I_1} R_y | g \rangle &= J_1 N \frac{z}{4} \langle g(\alpha') | S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \left(\sin \theta_1 \sin \theta_2 + \right. \\ &\quad \left. + \sin \theta_2 \sin \theta_3 + \sin \theta_3 \sin \theta_4 + \sin \theta_4 \sin \theta_1 \right) \\ &\quad + \frac{z}{8} \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \left(\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \right. \\ &\quad \left. + \cos \theta_2 \cos \theta_3 + \cos \theta_3 \cos \theta_4 + \cos \theta_4 \cos \theta_1 \right) \end{aligned} \quad (93)$$

De forma análoga, para la parte XY a primeros vecinos, obtenemos

$$\begin{aligned}
\langle g | R_y^\dagger \mathcal{H}_{xy_1} R_y | g \rangle &= J_1 N \frac{z}{4} \alpha \left[\left(\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \cos \theta_2 \cos \theta_3 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \cos \theta_3 \cos \theta_4 + \cos \theta_4 \cos \theta_1 + 4 \right) \langle g(\alpha') | \right. \\
&\quad \left. S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle + \frac{1}{2} \left(\sin \theta_1 \sin \theta_2 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \sin \theta_2 \sin \theta_3 + \sin \theta_3 \sin \theta_4 + \sin \theta_4 \sin \theta_1 \right) \times \right. \\
&\quad \left. \times \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \right]. \tag{94}
\end{aligned}$$

Finalmente, la parte Ising a segundos vecinos queda

$$\begin{aligned}
\langle g | R_y^\dagger \mathcal{H}_{I_2} R_y | g \rangle &= J_2 N \frac{z}{2} \left[\left(\cos \theta_1 \cos \theta_3 + \cos \theta_2 \cos \theta_4 \right) \langle g(\alpha') | \right. \\
&\quad \left. S^z(\vec{R} + \vec{\lambda}) S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle + \frac{1}{4} \left(\sin \theta_1 \sin \theta_3 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \sin \theta_2 \sin \theta_4 \right) \langle g(\alpha') | S^+(\vec{R} + \vec{\lambda}) S^-(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \right]. \tag{95}
\end{aligned}$$

Ahora podemos escribir el funcional de la energía, reemplazando (93)–(95) en (89) obtenemos

$$\begin{aligned}
\frac{F(\theta, \alpha')}{J_1 N} &= \frac{z}{8} \left[H_I^{(1)}(\alpha') + \alpha H_{xy}^{(1)}(\alpha') \right] (\cos \theta_1 + \cos \theta_3)(\cos \theta_2 + \cos \theta_4) + \\
&\quad \frac{z}{8} \left[\alpha H_I^{(1)}(\alpha') + H_{xy}^{(1)}(\alpha') \right] (\sin \theta_1 + \sin \theta_3)(\sin \theta_2 + \sin \theta_4) + \\
&\quad \frac{z}{4} \frac{J_2}{J_1} H_I^{(2)}(\alpha') (\cos \theta_1 \cos \theta_3 + \cos \theta_2 \cos \theta_4) + \\
&\quad \frac{z}{16} \frac{J_2}{J_1} H_{xy}^{(2)}(\alpha') (\sin \theta_1 \sin \theta_3 + \sin \theta_2 \sin \theta_4) + \frac{z}{2} \alpha H_{xy}^{(1)}(\alpha') \tag{96}
\end{aligned}$$

donde:

$$H_I^{(1)}(\alpha') \equiv \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle, \quad (97)$$

$$H_{xy}^{(1)}(\alpha') \equiv \langle g(\alpha') | S^x(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^x(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle. \quad (98)$$

$$H_I^{(2)}(\alpha') \equiv \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R} + \vec{\lambda}_i) S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \quad (99)$$

$$H_{xy}^{(2)}(\alpha') \equiv \langle g(\alpha') | S^x(\vec{R} + \vec{\lambda}_i) S^x(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \quad (100)$$

Estos valores medios dan resultados distintos al ser evaluados para el caso unidimensional o bidimensional.

Acá hacemos un alto para ver en detalle como obtener una de las relaciones (93)–(95), por ejemplo la relación (93)

$$\langle g(\alpha') | R_y^\dagger(\theta) \mathcal{H}_{I_1} R_y(\theta) | g(\alpha') \rangle = J_1 \sum_{\vec{R}, i} \langle g(\alpha') | R_y^\dagger(\theta) S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^z(\vec{R}) R_y(\theta) | g(\alpha') \rangle, \quad (101)$$

y de la ecuación (90) tenemos que

$$R_y^\dagger(\theta) S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^z(\vec{R}) R_y(\theta) = \sin(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}) \sin(\theta_{\vec{R}}) S^x(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^x(\vec{R}) + \cos(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}) \cos(\theta_{\vec{R}}) S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^z(\vec{R}), \quad (102)$$

donde se usó que $\langle S^x S^z \rangle = 0$, ya que S^x crea un estado cuya componente z de espín es no nula, mientras que $|g\rangle$ posee $S_{total}^z = 0$; de acá la ortogonalidad de ambos estados.

Entonces (101) nos queda

$$\langle g(\alpha') | R_y^\dagger \mathcal{H}_{I_1} R_y | g(\alpha') \rangle = J_1 \sum_{\vec{R},i} \left[\sin(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}) \sin(\theta_{\vec{R}}) \langle S^x(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^x(\vec{R}) \rangle + \cos(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}) \cos(\theta_{\vec{R}}) \langle S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^z(\vec{R}) \rangle \right]. \quad (103)$$

Los valores medios $\langle S^x(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^x(\vec{R}) \rangle$ y $\langle S^z(\vec{R} + \vec{\delta}_i) S^z(\vec{R}) \rangle$ no dependen de los ángulos θ_i ni de los nodos de la red.

Reemplazando (97) y (98) en (103) obtenemos

$$\langle g(\alpha') | R_y^\dagger \mathcal{H}_{I_1} R_y | g(\alpha') \rangle = J_1 H_{xy}^{(1)} \sum_{\vec{R},i}^{N/2} \sin(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}) \sin(\theta_{\vec{R}}) + J_1 H_I^{(1)} \sum_{\vec{R},i}^{N/2} \cos(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}) \cos(\theta_{\vec{R}}). \quad (104)$$

La suma es hasta $N/2$ puesto que estamos sumando sólo sobre la subred $\uparrow \{\vec{R}\}$.

Ahora, es conveniente evaluar la relación (104) en forma separada para una (1D) y dos (2D) dimensiones.

En una dimensión, tomamos una plaqueta lineal de cuatro sitios

$$\sum_{1\text{plaqueta}} \sin(\theta_{R+\delta_i}) \sin(\theta_R) = \sin(\theta_{R-1}) \sin(\theta_R) + \sin(\theta_{R+1}) \sin(\theta_R) + \sin(\theta_{R+1}) \sin(\theta_{R+2}) + \sin(\theta_{R+3}) \sin(\theta_{R+2}) \quad (105)$$

Tomando en cuenta que los ángulos se repiten cada cuatro sitios, $\theta_{4+i} = \theta_i$, la relación (105) nos queda

$$\sum_{1\text{plaqueta}} \sin(\theta_{R+\delta_i}) \sin(\theta_R) = \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) + \sin(\theta_2) \sin(\theta_3) + \sin(\theta_3) \sin(\theta_4) + \sin(\theta_4) \sin(\theta_1). \quad (106)$$

Considerando que hay $N/4$ plaquetas lineales, obtenemos

$$\sum_{\vec{R},i}^{N/2} \sin(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}) \sin(\theta_{\vec{R}}) = \frac{N}{4} [\sin(\theta_1) \sin(\theta_2) + \sin(\theta_2) \sin(\theta_3) + \sin(\theta_3) \sin(\theta_4) + \sin(\theta_4) \sin(\theta_1)]. \quad (107)$$

Con un razonamiento análogo se obtiene

$$\sum_{\vec{R},i}^{N/2} \cos(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}) \cos(\theta_{\vec{R}}) = \frac{N}{4} [\cos(\theta_1) \cos(\theta_2) + \cos(\theta_2) \cos(\theta_3) + \cos(\theta_3) \cos(\theta_4) + \cos(\theta_4) \cos(\theta_1)]. \quad (108)$$

Reemplazando (107) y (108) en (104)

$$\langle g(\alpha') | R_y^\dagger \mathcal{H}_{I_1} R_y | g(\alpha') \rangle = J_1 \frac{zN}{8} H_{xy}^{(1)} \left[\sin(\theta_1) \sin(\theta_2) + \sin(\theta_2) \sin(\theta_3) + \right.$$

$$\begin{aligned}
& \left. \sin(\theta_3) \sin(\theta_4) + \sin(\theta_4) \sin(\theta_1) \right] + \\
& J_1 \frac{zN}{8} H_I^{(1)} \left[\cos(\theta_1) \cos(\theta_2) + \cos(\theta_2) \cos(\theta_3) + \right. \\
& \left. \cos(\theta_3) \cos(\theta_4) + \cos(\theta_4) \cos(\theta_1) \right] \quad (109)
\end{aligned}$$

donde z es el número de coordinación, que en este caso vale 2. Con esto hemos mostrado que (93) es válida para 1D.

Ahora evaluamos 104 para el caso bidimensional, para esto es conveniente definir, $\vec{R}' \equiv \vec{R} + \vec{\delta}_1 + \vec{\delta}_2$, y recordando que en una plaqueta recorreremos dos sitios de la sub-red \uparrow , obtenemos

$$\begin{aligned}
\sum_{1\text{plaqueta}} \sin(\theta_{R+\delta_i}) \sin(\theta_R) &= \sin(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_1}) \sin(\theta_{\vec{R}}) + \sin(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_2}) \sin(\theta_{\vec{R}}) + \\
&\sin(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_3}) \sin(\theta_{\vec{R}}) + \sin(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_4}) \sin(\theta_{\vec{R}}) + \\
&\sin(\theta_{\vec{R}'+\vec{\delta}_1}) \sin(\theta_{\vec{R}'}) + \sin(\theta_{\vec{R}'+\vec{\delta}_2}) \sin(\theta_{\vec{R}'}) + \\
&\sin(\theta_{\vec{R}'+\vec{\delta}_3}) \sin(\theta_{\vec{R}'}) + \sin(\theta_{\vec{R}'+\vec{\delta}_4}) \sin(\theta_{\vec{R}'}) \quad (110)
\end{aligned}$$

Considerando que hay $N/4$ plaquetas, obtenemos

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{R},i}^{N/2} \sin(\theta_{\vec{R}+\delta_i}) \sin(\theta_{\vec{R}}) &= \frac{N}{2} [\sin(\theta_1) \sin(\theta_2) + \sin(\theta_2) \sin(\theta_3) + \\
&\sin(\theta_3) \sin(\theta_4) + \sin(\theta_4) \sin(\theta_1)] \quad (111)
\end{aligned}$$

De igual modo obtenemos

$$\sum_{\vec{R},i}^{N/2} \cos(\theta_{\vec{R}+\vec{\delta}_i}) \cos(\theta_{\vec{R}}) = \frac{N}{2} [\cos(\theta_1) \cos(\theta_2) + \cos(\theta_2) \cos(\theta_3) + \cos(\theta_3) \cos(\theta_4) + \cos(\theta_4) \cos(\theta_1)]. \quad (112)$$

Reemplazando (111) y (112) en (104), se obtiene

$$\begin{aligned} \langle g(\alpha') | R_y^\dagger \mathcal{H}_{I_1} R_y | g(\alpha') \rangle &= J_1 \frac{zN}{8} H_{xy}^{(1)} \left[\sin(\theta_1) \sin(\theta_2) + \sin(\theta_2) \sin(\theta_3) + \right. \\ &\quad \left. \sin(\theta_3) \sin(\theta_4) + \sin(\theta_4) \sin(\theta_1) \right] + \\ &\quad J_1 \frac{zN}{8} H_I^{(1)} \left[\cos(\theta_1) \cos(\theta_2) + \cos(\theta_2) \cos(\theta_3) + \right. \\ &\quad \left. \cos(\theta_3) \cos(\theta_4) + \cos(\theta_4) \cos(\theta_1) \right], \quad (113) \end{aligned}$$

donde z es el número de coordinación, que en este caso vale 4. Con esto hemos mostrado que (93) es válida para 2D.

De (109) y (113) queda demostrada la relación (93), donde hay que considerar la definiciones (97)– (100).

Habiendo mostrado como obtener $\langle g | R_y^\dagger \mathcal{H}_{I_1} R_y | g \rangle$. Podemos ahora minimizar el funcional de la energía dado en (96)

$$\begin{aligned} \frac{F(\theta, \alpha')}{J_1 N} &= \frac{z}{8} \left[H_I^{(1)}(\alpha') + \alpha H_{xy}^{(1)}(\alpha') \right] (\cos \theta_1 + \cos \theta_3)(\cos \theta_2 + \cos \theta_4) + \\ &\quad \frac{z}{8} \left[\alpha H_I^{(1)}(\alpha') + H_{xy}^{(1)}(\alpha') \right] (\sin \theta_1 + \sin \theta_3)(\sin \theta_2 + \sin \theta_4) + \\ &\quad \frac{z}{4} \frac{J_2}{J_1} H_I^{(2)}(\alpha') (\cos \theta_1 \cos \theta_3 + \cos \theta_2 \cos \theta_4) + \\ &\quad \frac{z}{16} \frac{J_2}{J_1} H_{xy}^{(2)}(\alpha') (\sin \theta_1 \sin \theta_3 + \sin \theta_2 \sin \theta_4) + \frac{z}{2} \alpha H_{xy}^{(1)}(\alpha') \quad (114) \end{aligned}$$

Los valores medios dados en (97)–(100) fueron calculados exactamente en 1D [23] para $S = \frac{1}{2}$. Para el caso 2D se pueden evaluar en forma aproximada.

Los valores medios para el caso 1D (ver [23]) vienen dados por

$$\langle g(\alpha') | S_{l+n}^z S_l^z | g(\alpha') \rangle = \frac{1}{4} [\delta_{n,0} + (-1)^n J_0^2(2\alpha) - J_n^2(2\alpha)], \quad (115)$$

$$\langle g(\alpha') | S_{l+n}^+ S_l^- | g(\alpha') \rangle = \frac{1}{2} (-1)^{n(l+1)} (-1)^{\frac{n}{2}(n+1)} [\delta_{n,0} + (-1)^{l+n} J_n(2\alpha)]. \quad (116)$$

donde l y $l+n$ son números enteros que caracterizan dos sitios de la cadena y J_n son las funciones de Bessel de orden n .

A partir de las relaciones (115) y (116) evaluamos los valores medios de interés, obteniendo

$$H_I^{(1)}(\alpha') = -\frac{1}{4} (J_0^2(2\alpha') + J_1^2(2\alpha')) \quad (117)$$

$$H_{xy}^{(1)}(\alpha') = -J_1(2\alpha') \quad (118)$$

$$H_I^{(2)}(\alpha') = \frac{1}{4} (J_0^2(2\alpha') - J_2^2(2\alpha')) \quad (119)$$

$$H_{xy}^{(2)}(\alpha') = J_1^2(2\alpha') - J_2(2\alpha')J_0(2\alpha'). \quad (120)$$

Para el caso 2D se obtienen los siguientes valores aproximados [33]:

$$H_I^{(1)}(\alpha') = -\frac{1}{4} \left(1 - \frac{\alpha'^2}{3} \right) + O(\alpha'^4) \quad (121)$$

$$H_{xy}^{(1)}(\alpha') = -\frac{\alpha'}{3} + O(\alpha'^3) \quad (122)$$

$$H_I^{(2)}(\alpha') = \frac{1}{4} (1 - 2\alpha'^2) + O(\alpha'^4) \quad (123)$$

$$H_{xy}^{(2)}(\alpha') = \frac{\alpha'^2}{2} + O(\alpha'^4). \quad (124)$$

Ahora sólo falta encontrar los valores de $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ y α' que minimizan $F(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \alpha')$, con α y J_1/J_2 parámetros libres. Esto se hace numéricamente y se encuentran las soluciones que se describen a continuación.

De los 23 conjuntos de parámetros que minimizan $F(\theta, \alpha')$, sólo 3 corresponden a mínimos absolutos de este funcional. Estos son

- A) $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = 0$ y $\alpha' < 1$,
- B) $\theta_1 = \theta_4 = 0, \theta_2 = \theta_3 = \pi$,
- C) $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = \frac{\pi}{2}$.

La solución A) corresponde al *estado de Néel generalizado*, que en el caso unidimensional lo podemos representar por, $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle$. La solución B) es un *estado longitudinal o 2-2*, con la siguiente representación en el caso unidimensional, $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\dots\rangle$. Finalmente, la solución C) es el *estado de Néel transversal*.

En las figuras 7-9 se muestra la energía del estado base en función de J_2/J_1 ,

en ellas se compara dicha energía con las obtenida por los métodos Lanczos y variacional de Oliveira. Las figuras 7 y 9 corresponden al caso bidimensional, mientras que la figura 8 describe un sistema unidimensional.

En 1D y con $\alpha = 0.5$, la solución PNME es mejor que la obtenida por Oliveira para valores de J_2/J_1 menores que 0.5. En 2D el método PNME funciona mejor aún.

figura 7

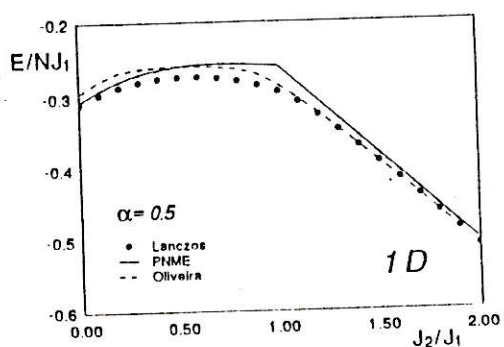
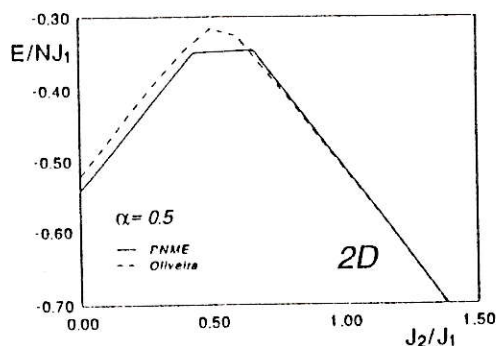


figura 8

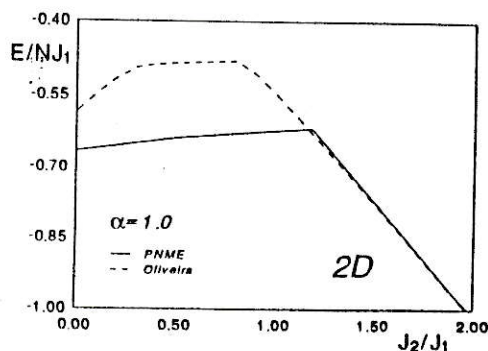


figura 9

Puesto que las soluciones tienen orden de largo alcance, es posible definir cuatro sub-redes; usando la relación (90) y el hecho que $\langle g(\alpha) | S^z(\vec{R}) | g(\alpha) \rangle = 0$ se tiene

$$m_1^z = \cos(\theta_1) \langle g(\alpha) | S^z(\vec{R}_1) | g(\alpha) \rangle \quad (125)$$

$$m_2^z = \cos(\theta_2) \langle g(\alpha) | S^z(\vec{R}_2) | g(\alpha) \rangle \quad (126)$$

$$m_3^z = \cos(\theta_3) \langle g(\alpha) | S^z(\vec{R}_3) | g(\alpha) \rangle \quad (127)$$

$$m_4^z = \cos(\theta_4) \langle g(\alpha) | S^z(\vec{R}_4) | g(\alpha) \rangle. \quad (128)$$

$$(129)$$

En 2D; m_1, m_2, m_3 y m_4 son las magnetizaciones correspondiente a los sitios $\vec{R} + \vec{\delta}_1, \vec{R}, \vec{R} + \vec{\delta}_2$ y $\vec{R} + \vec{\delta}_1 + \vec{\delta}_2$, respectivamente (ver figura 1). En 1D, la magnetización m_i corresponde al sitio i -ésimo en un arreglo de cuatro espines.

En términos de la magnetización, los tres estados descritos anteriormente se pueden expresar como

- 1) El estado de Neél (NS) correspondiente a, $m_1^z = m_3^z = -m_2^z = -m_4^z$.
- 2) El estado longitudinal (LS) 2-2 correspondiente a, $m_1^z = m_2^z = -m_3^z = -m_4^z$.
- 3) La solución de Neél transversal (TN) está representada por el estado de Neél en la dirección x .

Se definen los parámetros de orden para NS, LS y TN como sigue

$$m_{Nz} = \frac{1}{4}(m_1^z - m_2^z + m_3^z - m_4^z) \quad (130)$$

$$m_C = \frac{1}{4}(m_1^z + m_2^z - m_3^z - m_4^z) \quad (131)$$

$$m_{Nx} = \frac{1}{4}(m_1^x - m_2^x + m_3^x - m_4^x). \quad (132)$$

En las figuras 10-12 se muestran los gráficos de los parámetros de orden correspondientes a los estados LS, TN y NS, respectivamente, como función de J_2/J_1 para el caso unidimensional y $\alpha = 0.5$. A continuación en las figuras 13-15 se muestra el gráfico de los parámetros de orden para $\alpha = 1.0$.

La información entregada por estos seis gráficos aparece también en el diagrama de fase de la figura 16.

figura 10

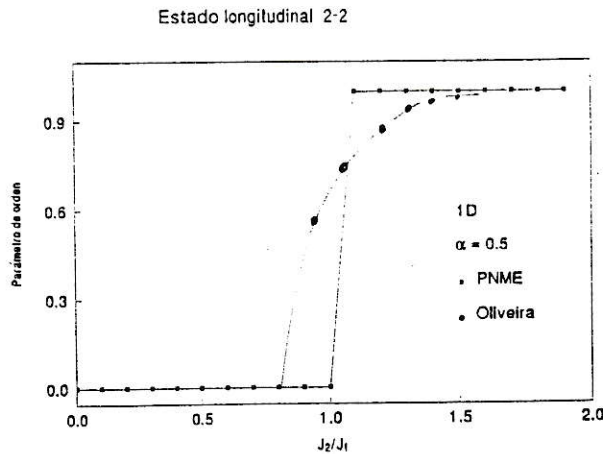


figura 11

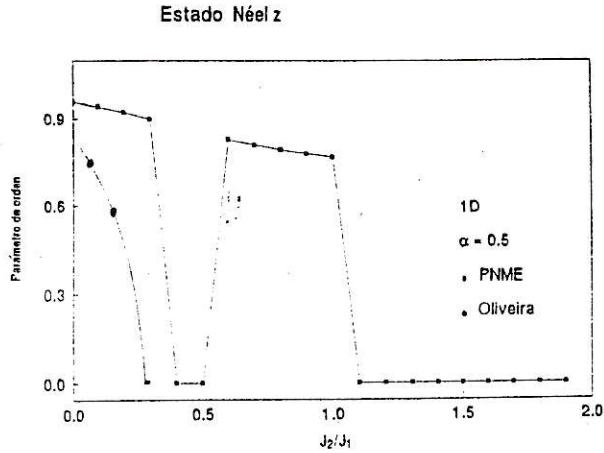
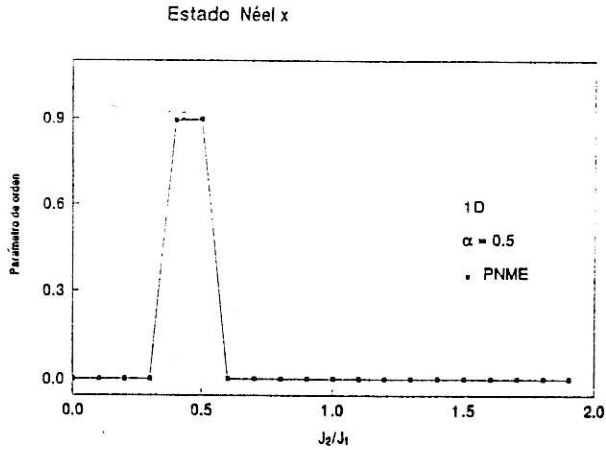


figura 12



De estos gráficos se distinguen claramente cuatro regiones definidas por el parámetro J_2/J_1 para el método PNME, siendo éstas $[0.0, 0.4]$, $[0.4, 0.6]$, $[0.6, 1.0]$ y $[1.0, 2.0]$. Los tres tipos de orden, NS, LS y TN, son mutuamente excluyentes, para un determinado valor de J_2/J_1 sólo un orden está presente. Por el método Oliveira se encuentran sólo dos regiones.

Las figuras 13-15 muestran el caso $\alpha = 1.0$. Para valores de anisotropía mas grandes, el comportamiento del sistema es notablemente distinto, ahora se tiene el estado NT desde un comienzo, $0 < J_2/J_1 < 0.7$.

figura 13

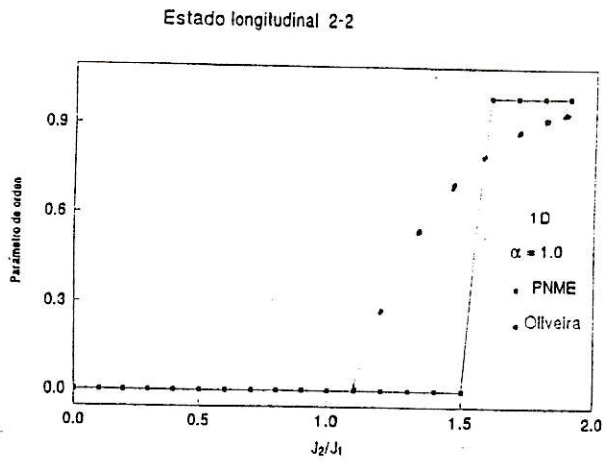


figura 14

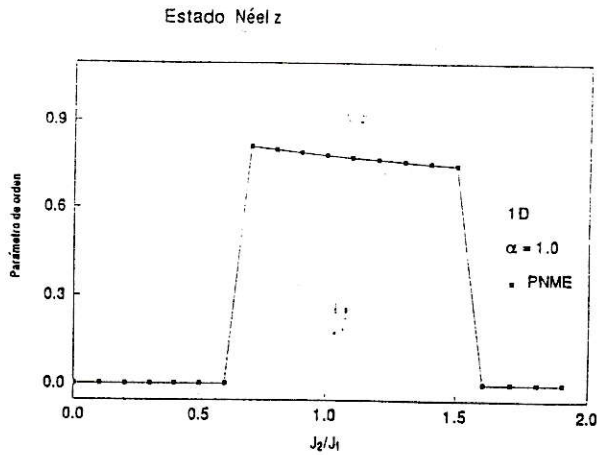
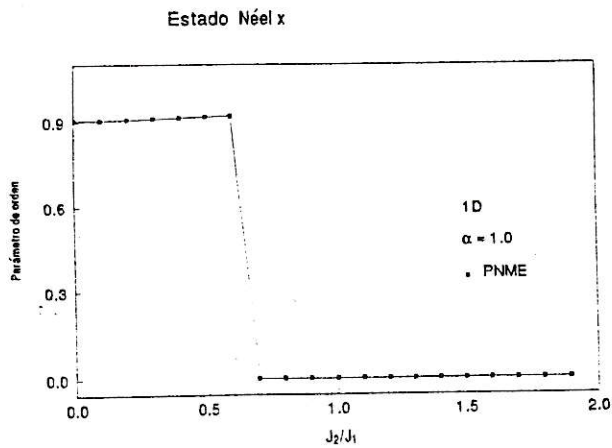


figura 15



Con el método PNME se obtienen tres regiones: el estado Neel x para J_2/J_1 pequeño, una segunda región determinada por una solución del tipo Neel z y la última región correspondiente a una solución $2 - 2$ o colineal. El gráfico muestra que con el método Oliveira se obtienen sólo dos regiones: un estado paramagnético para J_2/J_1 pequeño y un estado colineal para J_2/J_1 grande. El método Oliveira trabaja con la restricción $S^z = 0$.

El diagrama de fase como función de α y J_2/J_1 para los casos 1D y 2D, se muestra a continuación:

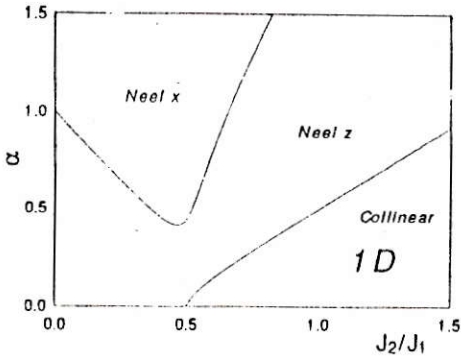


fig.16, diagrama de fase 1D

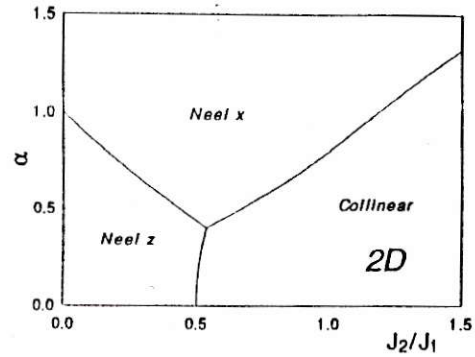


fig.17, diagrama de fase 2D

Para valores de $\alpha < 0.5$, hay sólo dos tipos de soluciones; un estado NS para $J_2/J_1 < 0.5$ y un estado LS para $J_2/J_1 > 0.5$. En el caso unidimensional la solución NS es posible aún para valores de $J_2 \approx J_1$, en contraste con el caso bidimensional.

Para obtener el estado Neél x con el mínimo valor posible de α ($\alpha = 0.41056$ en 1D y $\alpha = 0.4$ en 2D), se requiere $J_2/J_1 \approx \frac{1}{2}$.

Para $\alpha > 1.0$ y J_2/J_1 pequeño, se presenta una solución del tipo Neél x para la red 1D y 2D. En el caso unidimensional y tomando valores más grandes de J_2/J_1 , el sistema se ordena tipo Neél z ; un ulterior aumento de J_2/J_1 , lleva a la solución 2-2 o longitudinal (LS).

Referencias

- [1] L.Néel, *Ann. Phys.Paris*,**17**:64(1932), *J.Phys.Radium*, **3**:160(1932)
- [2] P.Weiss, *J. de Phys.Radium***4**, 661(1907)
- [3] P.A.M.Dirac, *Proc.Roy.Soc.(London)***A123**, 714(1929)
- [4] J.H.Van Vleck, *the theory of Electric and Magnetic Susceptibilities*, Oxford,1932
- [5] H.Bethe,*Z.Physik*,**71**:205(1931)
- [6] L.Hulthén,*Arkiv Met.Astron. Fysik*, **26A:Na.11**(1938)
- [7] R. Orbach, *Phys. Rev.* **112**, 309(1958)
- [8] L.R.Walker, *Phys.Rev.*,**116**: 1289(1959)
- [9] J.Des Cloizeaux and J.J.Pearson, *Phys.Rev.*,**128**,2131(1962)
- [10] R.B.Griffiths, *Phys. Rev.*,**133**:A768(1964)
- [11] P.W.Anderson, *Phys.Rev.***86**, 694(1952)
- [12] T.Holstein and H.Primakoff, *Phys.Rev.***58**, 1098(1940)
- [13] R.Kubo, *Phys.Rev***87**,568(1952)
- [14] P.W.Anderson, *Mater.Res.Bull.***8**, 153(1973)
- [15] P.W.Anderson, *Science*,**235**, 1196(1987)

- [16] M.Lagos and G.G.Cabrera; *Solid State Comm.* **67**,221(1988).
- [17] M.Lagos and G.G.Cabrera; *Phys. Rev.***B 38**,659(1988).
- [18] M.Lagos, M.Kiwi, E.R.Gagliano and G.G.Cabrera; *Solid State Comm.***67**,225(1988).
- [19] G.G.Cabrera, M.Lagos, M.Kiwi; *Solid State Comm.***68**,743(1988).
- [20] M.Lagos, M.Kiwi, E.R.Gagliano and G.G.Cabrera; *Solid State Comm.***70**,431(1989).
- [21] D. Gottlieb and M. Lagos; *Solid State Comm.***79**,551(1991).
- [22] D.Gottlieb and M.Lagos; *Phys. Rev.***B 39**,2960(1989).
- [23] D.Gottlieb, M.Lagos, K.Hallberg and C. Balseiro;*Phys. Rev.***B 43**,13668(1991).
- [24] D. Gottlieb, M. Lagos and M.Montenegro; *Solid State Comm.***81**,729(1992).
- [25] D.Gottlieb,M.Montenegro,C.Millán and Vicente Díaz;*Solid State Comm.***84**,585(1992).
- [26] E. Lieb and Mattis, *J.Math. Phys.*3:749(1962)
- [27] H. Bethe, *Z. Phys.*, **71**, 205 (1931)
- [28] S. Liang, B. Doucot, and P.W.Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 365 (1988)
- [29] J. Oitma and D.D. Betts,*Can.J. Phys.* **56**, 897 (1978)

- [30] E. Manousakis and R. Salvador. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 840 (1988)
- [31] G. Shirane *et. al.* *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 1613(1987)
- [32] D. Gottlieb and M. Lagos, *Solid State Commun.***79**, 551(1991)
- [33] Maximiliano Montenegro, Tesis de Doctorado (1993)
- [34] David Gottlieb and **Vicente Díaz**; *Phys.Rev. B* **44**,2803(1991).