

UCH-FC
DOC-F
M 764
C.1

Soluciones Aproximadas del Modelo de Heisenberg a partir del Estado de Néel

Profesor Patrocinante : Dr. David Gottlieb Banner
Candidato a Doctor : Maximiliano Montenegro Maggio

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

1993



Informe de Aprobación Tesis de Doctorado

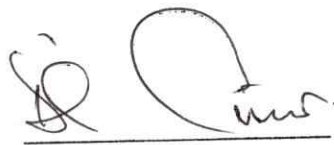
Se informa al Comité del Programa de Doctorado en Ciencias con mención en Física que la Tesis presentada por el candidato

Maximiliano Montenegro Maggio

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

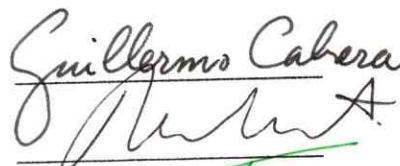
Director de Tesis

Dr. David Gottlieb



Comisión Informante de Tesis

Dr. Guillermo Cabrera



Dr. Miguel Lagos



Dr. Miguel Kiwi



Dr. Jaime Rössler



Dr. Cristián Urbina (Presidente)



Contenidos

Resumen	viii
Abstract	ix
Introducción	1
1 Excitaciones No-Magnéticas Apareadas	8
1.1 El Modelo	9
1.2 Valores Esperados	13
1.3 Validez de la Teoría	14
1.4 Un Modelo Ilustrativo	17
2 Método Variacional	24
2.1 Función de Onda Variacional	25
2.2 Límite XY	27
2.3 Campo Magnético Externo	34
2.3.1 Campo Transversal	36
2.3.2 Campo Paralelo	42
2.3.3 Análisis de las fases obtenidas en una dimensión	47
3 Sistemas Frustrados	54
3.1 Interacción a segundos vecinos	55

3.1.1	El modelo	56
3.1.2	Resultados	59
3.2	Red Triangular	63
3.2.1	El modelo	65
3.2.2	Estado Fundamental y Excitaciones	68
3.2.3	Transición de fase	71
4	Modelo t-J	75
4.1	Operadores Correlacionados	76
4.2	Desacoplamiento de los grados de libertad	77
4.3	Función de onda para los huecos	78
4.4	Función de onda para los spines	79
4.5	Resultados y conclusiones	81
	Bibliografía	86
A	Valores Esperados	92
A.1	Dimensión 1 y $S=1/2$	93
A.2	Valor Esperado S^z	96
B	Método de Lanczos	97
C	Método de Oliveira	99

Figuras

1.1	Energía Estado Fundamental para 1D y 2D	16
1.2	Energía para $S = 3/2$ y $D = 0$	21
1.3	Energía para $S = 3/2$ y $D = 1.0$	21
1.4	Energía para $S = 1$ y $D = 4$	23
1.5	Energía para $S = 1$ y $D = 8$	23
2.1	Energía para la red cuadrada en función de α	31
2.2	Mapeo entre las energía para $1/2 < \alpha < 1$ y $1 < \alpha < \infty$	33
2.3	Energía en función de h_x para $\alpha = 0.5$	39
2.4	Energía en función de h_x para $\alpha = 1.5$	40
2.5	Energía en función de h_x para $\alpha = 0.2, 1$ y 2	41
2.6	Energía en función de h_z para $\alpha = 0.5$	44
2.7	Energía en función de h_z para $\alpha = 1.5$	45
2.8	Energía en función de h_z para $\alpha = 0.2, 1$ y 2	46
2.9	Orientación promedio de los spines en cada subred en función de H_x	48
2.10	Orientación promedio de los spines en cada subred en función de H_z	49
2.11	Magnetización en la dirección del campo transversal	51
2.12	Magnetización en la dirección del campo paralelo	52
2.13	Magnetización inducida	53
3.1	Energía por spin para $\alpha = 0.5$ en una dimensión en función de J_2/J_1	59
3.2	Energía por spin para $\alpha = 0.5$ en dimensión dos en función de J_2/J_1	59

3.3	Energía por spin para $\alpha = 1.0$ en dimensión dos en función de J_2/J_1	60
3.4	Parámetros de orden para el estado de Néel, Néel Transversal y Colineal, en función de J para $\alpha = 0.5$ en una cadena lineal.	62
3.5	Parámetros de orden para el estado de Néel, Néel Transversal y Colineal, en función de J para $\alpha = 1.0$ en una cadena lineal.	62
3.6	Diagrama de fase de las configuraciones del estado fundamental en función de α y $J = J_1/J_2$ en dimensión uno.	63
3.7	Diagrama de fase de las configuraciones del estado fundamental en función de α y $J = J_1/J_2$ en dimensión dos.	63
3.8	Vectores $\vec{\delta}$ y estado de "Néel" en la red triangular	66
3.9	Representación gráfica de la acción de los operadores ϕ	67
3.10	Energías de excitación en la red triangular para ρ_c	70
4.1	Ancho de banda y ángulos para $\alpha = 0.5$ y $J = 2.0$	81
4.2	Ancho de banda y ángulos para $\alpha = 0.5$ y $J = 0.25$	81
4.3	Ancho de banda y ángulos para $\alpha = 0.9$ y $J = 2.0$	83
4.4	Ancho de banda y ángulos para $\alpha = 1.0$ y $J = 2.0$	83

Tablas

1.1	Promedios en 1D	14
1.2	Promedios en función de S y z	15
3.1	Valores para la energía de la red triangular isotrópica obtenidos a través de diferentes métodos.	72

Resumen

El propósito de esta tesis es estudiar el modelo de Heisenberg antiferromagnético a través de una teoría conocida como *excitaciones no-magnéticas apareadas* (PNME). Inicialmente restringida a redes con alto ordenamiento antiferromagnético y bipartitas, la vamos a extender a sistemas donde estas condiciones no son estrictamente cumplidas. Para ello, a partir del estado fundamental propuesto por PNME para un sistema antiferromagnético, se generó una función de onda variacional que permitió estudiar al modelo de Heisenberg para diferentes situaciones: con anisotropía tendiendo al límite XY, con campo magnético externo, y con interacción a segundos vecinos antiferromagnética, que compite con aquella a primeros vecinos. Se extendió también esta teoría para poder describir redes frustradas topológicamente, como lo es la red triangular. Los resultados obtenidos para la energía del estado fundamental y sus posibles configuraciones, dependiendo de los valores de los parámetros envueltos (valor de la anisotropía, intensidad del campo externo, valor de la interacción a segundos vecinos, etc.), concuerdan notablemente con resultados obtenidos a través de la literatura o numéricamente utilizando el método de Lanczos modificado.

Por último, todos los desarrollos anteriores permitieron abordar el modelo t-J en un sistema unidimensional, para así obtener una visión cualitativa de este modelo, íntimamente ligado a las nuevas cerámicas superconductoras. Dentro de los resultados obtuvimos la transición aislador-conductor presente en estos materiales al incrementar el dopaje, pero gatillado a través de las propiedades magnéticas. Los resultados obtenidos son fácilmente generalizable a dimensión superior, junto con el hecho de que las diferentes configuraciones posibles son directamente identificable gracias a los parámetros variacionales envuelto.

Abstract

Introducción

El descubrimiento de los nuevos superconductores de alta temperatura crítica [1-4], junto con la esperanza de que algún día podríamos tener superconductores a temperatura ambiente, ha motivado la búsqueda de nuevos mecanismos que puedan ser responsables de la superconductividad. Esto principalmente debido a que en el caso de la interacción electrón-electrón mediada por fonones [5] existe un límite superior para la temperatura crítica mucho menor a los valores actualmente logrados. La transición a un estado superconductor en estos cerámicos tiene lugar cerca de una transición metal-aislador, junto con la presencia de una inestabilidad estructural y otra antiferromagnética, dando a los diagramas de fase de estos materiales una riqueza inigualable. Anderson [6] ha propuesto que los spines presentes de los planos CuO_2 tienen grandes fluctuaciones cuánticas, lo que podría dar lugar al estado superconductor. Esta sugestión ha despertado mucho interés, dadas las evidencias experimentales obtenidas a través de *scattering* de neutrones para las propiedades magnéticas de estos cerámicos superconductores. En efecto, el $\text{La}_2\text{CuO}_{4\pm y}$ posee una anomalía en su susceptibilidad para una temperatura cercana a la transición de Néel tridimensional (3D); el valor de dicha temperatura depende fuertemente del dopaje y [7]. Aun más, las correlaciones antiferromagnéticas instantáneas de largo alcance superan los 1000 Å para temperaturas $T \sim 200^\circ \text{K}$, sin magnetización alternada promedio [8].

El modelo de Hubbard, uno de los modelos más simples que va más allá de la aproximación de electrones independientes, fue diseñado para estudiar los efectos de las correlaciones electrónicas en sistemas con un ancho de banda estrecho y en los aisladores

de Anderson-Mott. Anderson propone que este modelo es el apropiado para describir estos nuevos sistemas, en su versión bidimensional con una sola banda, en el límite de alta repulsión electrónica intrasitio. Usando teoría de perturbaciones en el límite de alta repulsión, se puede reducir el Hamiltoniano a uno efectivo [9]:

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

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

$$\mathcal{H}_J = -\frac{J}{2} \sum_{(i,j),\sigma} (c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,-\sigma}^\dagger c_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}), \quad (\text{iii})$$

donde $\langle i, j \rangle$ restringe la suma sólo a primeros vecinos; $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$, t es el factor de *hopping*, $J = 4t^2/U$ y U es la repulsión electrónica intrasitio. El primer término, \mathcal{H}_t , da cuenta del *hopping* de huecos restringido a la ocupación simple. El segundo término, \mathcal{H}_J , se obtiene a partir del modelo de Hubbard al integrar sobre procesos virtuales en los cuales el electrón salta momentáneamente a un sitio vecino donde existe un electrón de spin opuesto y luego, como estado final, regresa a la configuración inicial o a una en que los spines están intercambiados. Este Hamiltoniano efectivo en el límite de alta repulsión intrasitio se conoce como el *modelo t-J*. En el caso de banda semillena, el término (iii) se reduce al Hamiltoniano de Heisenberg para spin 1/2 sobre una red cuadrada [10]:

$$\mathcal{H} = J \sum_{(i,j)} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (\text{iv})$$

El Hamiltoniano de Heisenberg puede deducirse a través de otros métodos [11], e incluso puede utilizarse para describir la interacción cobre-cobre antiferromagnética de *superexchange* [12] mediada por la intervención de un ión de oxígeno en los procesos virtuales de *hopping* entre sitios doblemente ocupados de Cu. No obstante su simplicidad, dicho modelo posee gran interés dentro de la física matemática por su propiedad de poder describir adecuadamente correlaciones de corto y largo alcance. Lamentablemente, sólo se conoce la solución exacta para el caso de spin 1/2 y dimensión 1, gracias al *ansatz* de Bethe [13-15]. Incluso esta solución, debido a su complejidad, no ha permitido lograr

un completo entendimiento de este modelo ya que, al tratar al mismo pie los términos de distintos órdenes, no ilustra sus principales mecanismos, además del hecho que su extensión a dimensiones mayores no es directa.

Este Hamiltoniano describe correctamente el comportamiento antiferromagnético del aislador La_2CuO_4 sin dopaje, como también del YBa_2CuO_6 u otros cristales no dopados de óxido de cobre. En especial, el La_2CuO_4 puede caracterizarse por una constante de intercambio $J \approx 1540^\circ \text{K}$ para los átomos de cobre en los planos CuO_2 [16], constante que es $\sim 10^5$ veces mayor a la constante de acoplamiento J' entre planos [17], confirmando el carácter bidimensional de estos materiales. Este valor pequeño de J' no afecta importantemente a las correlaciones de spin bidimensionales sobre la temperatura de Néel tridimensional; incluso las propiedades a temperatura cero de uno de estos planos CuO_2 estudiado aisladamente no son alteradas por J' . Incluir una anisotropía en el Hamiltoniano (iv) puede explicar el alineamiento preferencial del antiferromagnetismo en la dirección perpendicular al plano CuO_2 presente en estos materiales, además que un término antisimétrico extra permitiría obtener una pequeña componente ferromagnética dentro de los planos, término que tendría asociado una constante de acoplamiento pequeña también ($J^{bc} \sim 10^{-3}J$) [18].

Debido a lo anterior, gran parte de los esfuerzos apuntan en la dirección de lograr un mejor entendimiento de la versión bidimensional, y ya se ha logrado en parte concordancia en algunos aspectos. Es así que muchos de los cálculos permiten afirmar que a $T = 0^\circ \text{K}$ el caso isotrópico bidimensional posee correlaciones de largo alcance, junto con una magnetización disminuida por fluctuaciones cuánticas en alrededor de un 60%. Se ha demostrado recientemente que existe ordenamiento antiferromagnético de largo alcance para el modelo isotrópico en la red cuadrada [19] y hexagonal [20], y para spin $S > 1$. Resultados más generales [21] permiten afirmar que en el caso de una anisotropía arbitraria α en el plano:

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

y spin $S > 1$ hay siempre correlaciones antiferromagnéticas de largo alcance; para $S = 1/2$, existirían para $0 \leq 1/\alpha < 0.13$ y $1/\alpha > 1.78$ [21]. Sin embargo, pruebas concluyentes para el caso isotrópico no existen todavía.

Una alternativa para estudiar este Hamiltoniano ha sido la teoría de ondas de spin. Desarrollada por Anderson (1952) y Kubo (1952) [22] para estudiar el estado fundamental de un antiferromagneto con spin S grande, ella finalmente se reveló como una expansión en serie de $1/(zS)$, donde z es el número de coordinación de la red. Se basa principalmente en dos suposiciones:

- (i) que el orden antiferromagnético de largo alcance existe en el estado fundamental y
- (ii) que la amplitud de fluctuaciones cuánticas alrededor del estado de Néel clásico son pequeñas.

Luego, es natural dudar sobre la convergencia de esta expansión para sistema con spin y/o número de coordinación bajo. Anderson [23] por ejemplo conjetura que el estado fundamental de el antiferromagneto bidimensional de spin $1/2$, el caso de menor spin, puede ser un estado desordenado y postula al estado de *resonating valence bond* como el de menor energía. Otra alternativa para estudiar el modelo de Heisenberg ha sido a través de teoría de grupos de renormalización aplicado al modelo σ no-lineal en dimensión dos y una dimensión temporal Euclidiana [17], obteniendo entre otras cosas el largo de correlación a bajas temperaturas utilizando la función β calculada en expansiones de un y dos *loops*. Además del desarrollo de diferentes métodos aproximados [24-30], se han usado soluciones variacionales [31,32], complejos cálculos numéricos [33,34] y también se han estudiado variaciones del modelo tradicional de Heisenberg [35,36]. Todo este esfuerzo tiene la intención de obtener posibles mecanismos responsables de la dinámica de estas nuevas cerámicas.

Dentro de los desarrollos recientes, cabe destacar una teoría desarrollada por M. Lagos, G. Cabrera, D. Gottlieb, M. Kiwi y otros [24,37-49], que introduce excitaciones elementales singletes en contraposición a los tripletes de los magnones antiferromagnéticos de la

teoría de ondas de spin. Este modelo, que llamaremos “*excitaciones no-magnéticas apareadas*” (PNME), asume ordenamiento antiferromagnético desde el inicio y ha mostrado una gran precisión incluso más allá del régimen donde esa hipótesis es válida. Es así que para el caso unidimensional, ella concuerda notablemente con la solución exacta para aquellos valores del parámetro de anisotropía cercanos al límite Ising ($\alpha = 0$), decayendo en la medida que éstos se aproximan al modelo isotrópico de Heisenberg ($\alpha = 1$); no obstante, al pasar al caso bidimensional, el rango de validez de la teoría se extiende aún más allá del límite isotrópico, mostrando una gran precisión, incluso para valores de la anisotropía que tienden al modelo XY ($\alpha = \infty$), aventajando en esto y en la precisión de los resultados a la teoría de ondas de spin.

La versatilidad de esta teoría ha sido demostrada en el hecho de que es fácilmente generalizable a dimensión y spin arbitrarios, como también en la gran cantidad de aplicaciones diferentes que ella ha tenido en los últimos años en que ha sido desarrollada. Entre las distintas generalizaciones y aplicaciones, podemos mencionar:

- (i) “*Generalización a dimensión arbitraria*”. En su inicio, la teoría fue proyectada para sistemas unidimensionales de spin $1/2$, pero luego fue rápidamente extendida a aquellos sistemas de dimensión superior que no frustren el orden antiferromagnético. [41]
- (ii) “*Generalización a spin arbitrario*”. La simplicidad del modelo permite extenderlo directamente a spines mayores que $1/2$. [24]
- (iii) “*Generalización a segundos vecinos*”. Al considerar interacciones a segundos vecinos tipo Ising como también transversales, se obtuvo una solución que coincidía excelentemente con resultados numéricos cuando la interacción a segundos vecinos era ferromagnética, tanto en el caso unidimensional como para dimensión 2; sin embargo, cuando la interacción a segundos vecinos tendía a frustrar el orden antiferromagnético, la precisión decaía. [43,44]

- (iv) “*Deformaciones en redes*”. Experimentos recientes revelaron que las interacciones de spines dentro de la red juegan un rol preponderante en la estabilidad estructural de la perovskitas laminadas [52–54]. Este efecto fue modelado para un sistema unidimensional a través de un acoplamiento lineal entre los spines y las deformaciones de la red [40]. Se concluyó que a temperatura cero existe un “suavisamiento” del modo $k = \pi$ (esto es, una longitud de onda igual a 2 parámetros de red) y que a temperatura finita el sistema se dimeriza.
- (v) “*Fuerzas de enlace de origen magnético*”. Usando un Hamiltoniano donde un hueco se mueve en una subred, Lagos concluyó la existencia de un mecanismo de intercambio entre spines y huecos tipo BCS [42]. El acoplamiento entre spin y hueco nace al variar la energía de intercambio entre 2 spines vecinos, al haber un hueco entre ellos. Es así que el mecanismo de intercambio posee spin 0 al igual que en los fonones en BCS tradicional.

El propósito de esta tesis es extender la teoría PNME para aplicarla a situaciones no contempladas anteriormente. Este es el caso de un campo magnético externo, donde las excitaciones que conservan el spin no son suficientes para describir la transición desde un estado antiferromagnético (magnetización total cero) a uno ferromagnético (magnetización total máxima). Por otro lado, queremos abordar el problema de redes que no son bipartitas (por ejemplo la red triangular) y presentan una frustración natural al antiferromagnetismo. Por último, los desarrollos anteriores nos permitirán aplicar la teoría PNME a un modelo más real, como lo es el modelo t-J, para así entender cualitativamente las diferentes fases presentes en las fases normales de las nuevas cerámicas superconductoras.

En el capítulo 1 presentaremos una imagen global del desarrollo de la teoría de excitaciones no-magnéticas apareadas, junto con un pequeño modelo demostrativo que permita ilustrar directamente el uso de esta teoría. En el capítulo 2 desarrollaremos una versión variacional de la teoría para así poder aplicarla directamente a anisotropías $\alpha > 1$ y a un modelo con campo magnético externo. En el capítulo 3 tocaremos el tema de

las redes frustradas a través de un modelo de Heisenberg con interacciones a primeros y segundos vecinos antiferromagnéticas, como también sobre una red triangular. Por último, en el capítulo 4 analizaremos el modelo t - J para bajas concentraciones de huecos dentro de la versión variacional de PNME, donde obtendremos una descripción de la transición metal-aislador presente en los superconductores de alta temperatura mediada por las propiedades magnéticas del sistema.

Los resultados obtenidos en todos los cálculos anteriores al compararlos con resultados numéricos y/o exactos concuerdan notablemente, superando con creces al antiguo PNME. Sin embargo, el método desarrollado en esta tesis posee algunas desventajas, como es el hecho de que no es capaz de destruir completamente el ordenamiento antiferromagnético impuesto desde un principio. Una consecuencia directa de este efecto es que sobreestima la magnetización de subred que, junto con aumentar la energía, puede producir efectos espúreos; tal es el caso de la discontinuidad obtenida en la magnetización al considerar un campo magnético externo.

Esta falencia, junto con otras, han generado un interés de mejorar la teoría PNME para así obtener resultados más representativos para los diferentes modelos estudiados. Dentro de estos esfuerzos podemos indicar, por ejemplo, el incluir dentro de PNME excitaciones que sí cambien el spin y con ello acceder a todo el espectro de excitaciones del espacio de Hilbert. La versatilidad de esta teoría, mostrada en esta tesis, avala cualquier tentativa en esa u otra dirección.

Esta tesis más que concluir el trabajo que podemos realizar sobre el modelo de Heisenberg, simplemente lo proyecta en nuevas direcciones insospechadas.

Capítulo 1

Excitaciones No-Magnéticas

Apareadas

Desarrollada recientemente, la teoría conocida como *excitaciones no-magnéticas apareadas* [24,37-49] (PNME con sus siglas en inglés) ha mostrado una gran flexibilidad para describir diferentes sistemas de spines. En ella se introducen excitaciones elementales que no alteran el spin total del sistema, en contraposición a la teoría de ondas de spin, con las que es posible desordenar un estado fuertemente correlacionado sin destruir su orden antiferromagnético. Sin embargo, a pesar que su hipótesis inicial impone un estado con un fuerte ordenamiento antiferromagnético, este método alternativo muestra validez incluso más allá de los límites donde realmente esta condición se satisface. Así, por ejemplo, un sistema de spines 1/2 en dimensión 1 y temperatura nula, se “ordena”¹ completamente en el límite Ising, pero se “desordena”² en la medida en que el sistema se aproxima al límite isotrópico; en la misma medida, PNME ajusta notablemente el valor de la energía para

¹Los spines poseen orientaciones bien definidas con respecto al eje de anisotropía, $+1/2$ o $-1/2$ según el sitio sea par o impar, respectivamente

²Entendemos por “desorden” la ausencia de orientaciones bien definidas de spin; no obstante, el estado del sistema es una superposición coherente de distintas configuraciones de spin, de modo que en estricto rigor no hay desorden para $\alpha = 0$ si $T = 0$ °K

valores del parámetro de anisotropía α cercanos al límite Ising ($\alpha = 0$), pero comienza a fallar en la medida que uno se aproxima a límite isotrópico ($\alpha = 1$) [24,37]. Por otro lado, en dimensión 2, el ordenamiento antiferromagnético prevalece desde el límite Ising hasta el isotrópico ($0 \leq \alpha \leq 1$), obteniéndose que PNME aproxima notablemente bien los valores de la energía, aún mejor que teoría de ondas de spin, para todos los valores de α en ese intervalo.

En este capítulo vamos a estudiar cómo PNME permite obtener a partir de aproximaciones sencillas, una función de onda para el estado fundamental que puede ser extendida a una función de onda variacional. Analizaremos las diferentes correlaciones obtenidas y las compararemos con resultados exactos y numéricos; también mostraremos cómo obtener los valores esperados de diferentes operadores.

1.1 El Modelo

Consideremos un sistema antiferromagnético compuesto de dos subredes cristalográficamente equivalentes. Denotemos por $\{\vec{r}\}$ al conjunto de vectores que describen los sitios de una de las subredes y $\{\vec{\delta}\}$ al conjunto de vectores que une un sitio en una de la subredes con aquellos z primeros vecinos en la otra subred. Describimos tal sistema con el Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico:

$$\mathcal{H} = \frac{\alpha J}{2} \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} [S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r})] + J \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} S^z(\vec{r})S^z(\vec{r} + \vec{\delta}), \quad (1.1)$$

donde $S^\pm = (S^x \pm iS^y)/2$ y S^x, S^y, S^z son las componentes del operador \vec{S} ; α es un parámetro de anisotropía que conecta continuamente el límite Ising ($\alpha = 0$) con el límite XY ($\alpha = \infty$), pasando por el modelo isotrópico ($\alpha = 1$).

En el presente modelo antiferromagnético ($J > 0$), la solución de la parte Ising de (1.1) no es solución en el caso $\alpha \neq 0$, en contraste a lo que ocurre con el modelo ferromagnético ($J < 0$). En efecto, el estado de Néel $|\mathcal{N}\rangle = |\dots + - + - + - \dots\rangle$, que asigna spines “Up” (+) a una subred y spines “Down” (-) a la otra, es sólo autoestado del término Ising

del Hamiltoniano. El otro término, al actuar sobre el estado de Néel, lo relaciona con aquellos estados que difieren de él por el intercambio de dos pares de spines vecinos. Esto sugiere que en el límite de baja anisotropía, el estado fundamental de (1.1) va a diferir del estado de Néel sólo en un pequeño porcentaje de estados con pares de spines no alineados antiferromagnéticamente. Luego, si aplicamos un operador al estado de Néel que invierta pares de spin vecinos a primer orden, la combinación de lineal de estados obtenidos sería un buen candidato al estado fundamental. Lo anterior nos induce a considerar los siguientes operadores:

$$\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\{\vec{r}\}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} S^{+}(\vec{r} + \vec{\delta}) S^{-}(\vec{r}) + Q \delta_{\vec{k}, \vec{\delta}} \quad (1.2)$$

con

$$Q = \left(\frac{N}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\alpha S}{(2zS - 1)}, \quad (1.3)$$

donde el vector \vec{k} es un vector que pertenece a la primera zona de Brillouin de una de las dos subredes. Estos operadores ϕ transfieren coherentemente spin desde un sitio \vec{r} a su vecino $\vec{r} + \vec{\delta}$. Sin embargo, sus conmutadores dan lugar a un álgebra mas bien complicada

$$\begin{aligned} [\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}^{\dagger}(\vec{k}')] &= \frac{1}{S^2N} \sum_{\{\vec{r}\}} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} \left(S^{+}(\vec{r} + \vec{\delta}) S^{-}(\vec{r} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') S^z(\vec{r}) \right. \\ &\quad \left. - e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{\delta} - \vec{\delta}')} S^{+}(\vec{r}) S^{-}(\vec{r} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) \right), \end{aligned} \quad (1.4)$$

$$[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}(\vec{k}')] = 0. \quad (1.5)$$

También son complicados los conmutadores de estos operadores y la parte Ising del Hamiltoniano

$$\begin{aligned} \left[J \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} S^z(\vec{r}) S^z(\vec{r} + \vec{\delta}), \phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) \right] &= \frac{1}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\{\vec{r}\}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} S^{+}(\vec{r} + \vec{\delta}) S^{-}(\vec{r}) \\ &\quad \times \left(\sum_{\vec{\delta}'} S^z(\vec{r} + \vec{\delta} - \vec{\delta}') + \sum_{\vec{\delta}'} S^z(\vec{r} - \vec{\delta}') - 1 \right). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Sin embargo, la parte transversal del Hamiltoniano se puede escribir directamente en

función de nuestros operadores ϕ

$$\begin{aligned} \frac{\alpha J}{2} \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} (S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r})) = \\ J \frac{\alpha}{2} \sqrt{2S^2 N} \sum_{\vec{\delta}} (\phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{0}) + \phi_{\vec{\delta}}(\vec{0})) - NJ \frac{\alpha^2 z^2 S^2}{2zS - 1}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Las expresiones (1.4) y (1.6) no son simples, pero si nos restringimos al subespacio formado por el Néel y todos aquellos estados que difieren de él por un par de spines vecinos invertidos, las podemos aproximar por sus proyecciones en este espacio; las relaciones de conmutación así obtenidas nos indicarán el comportamiento de estos operadores en el régimen de alta correlación antiferromagnética, régimen donde estamos resolviendo nuestro Hamiltoniano:

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

y

$$\left[J \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} S^z(\vec{r}) S^z(\vec{r} + \vec{\delta}), \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) \right] = (2zS - 1) J (\phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) - Q \delta_{\vec{k}\vec{0}}). \quad (1.9)$$

La relación (1.8) nos indica que nuestros operadores en el límite de alta correlación antiferromagnética se comportan como operadores bosónicos y, por otro lado, la relación (1.9) junto con (1.7) nos indica que estos operadores son buenas excitaciones bosónicas de nuestro hamiltoniano:

$$[\mathcal{H}, \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k})] = (2zS - 1) J \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}), \quad (1.10)$$

con lo que hemos logrado diagonalizar nuestro Hamiltoniano. El se puede expresar como una forma diagonal en las excitaciones ϕ

$$\mathcal{H} = (2zS - 1) J \sum_{\vec{\delta}, \vec{k}} \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) \phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}) + E_g \quad (1.11)$$

Acá sólo falta determinar la constante aditiva E_g ; ella se puede obtener encontrando el estado fundamental $|g\rangle$ y luego promediar sobre él nuestro Hamiltoniano. Sin embargo,

una forma más directa de obtenerla es considerando la propiedad

$$\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})|\mathcal{N}\rangle = Q\delta_{\vec{k}\vec{0}}|\mathcal{N}\rangle. \quad (1.12)$$

Esta propiedad es exacta e indica que el estado de Néel es un autoestado de nuestros operadores ϕ . Al promediar ambos lados de (1.11) sobre el estado de Néel, al lado izquierdo se obtiene su energía, mientras que del lado derecho podemos despejar y obtener la energía del estado fundamental

$$\frac{E_g}{NJ} = -\frac{zS^2}{2} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2zS-1}\right). \quad (1.13)$$

El estado fundamental de nuestro sistema corresponde al vacío de nuestras excitaciones

$$\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})|g\rangle = 0, \quad (1.14)$$

estado que se puede obtener directamente a través de la propiedad (1.12). En efecto, si consideramos la conocida propiedad $[\phi, f(\phi^\dagger)] = f'(\phi^\dagger)$ de un operador bosónico ϕ y alguna función analítica $f(x)$, no es difícil concluir que el estado

$$|g\rangle = \exp \left[-Q \sum_{\vec{\delta}} (\phi^\dagger(0) - \phi(0)) \right] |\mathcal{N}\rangle \quad (1.15)$$

satisface (1.14). Hacemos notar que el operador exponencial es análogo a una translación del origen de un oscilador armónico.

Al expresar nuestro estado fundamental en función de los operadores espinoriales:

$$\begin{aligned} |g\rangle &= \exp \left[-Q \sum_{\vec{\delta}} (\phi^\dagger(0) - \phi(0)) \right] |\mathcal{N}\rangle \\ &= \exp \left[-\frac{\alpha}{2(2zS-1)} \sum_{\vec{r}, \vec{\delta}} (S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r}) - S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta})) \right] |\mathcal{N}\rangle \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$= V_\alpha |\mathcal{N}\rangle, \quad (1.17)$$

se observa que él corresponde a una transformación unitaria sobre el Néel, transfiriendo coherentemente spin de una de las subredes a la otra.

En esta última expresión se reconoce una de las grandes diferencias de nuestro modelo con respecto a la teoría de ondas de spin [55]. En ella, se obtiene un estado fundamental similar al nuestro, que también transfiere spin coherentemente de un sitio de la red a otro, pero, sin embargo, con un factor de forma que permite transferir spin no necesariamente sólo entre subredes pero también en sitios espacialmente alejados entre sí. Esto se puede explicar intuitivamente al considerar los procesos envueltos en los diferentes regímenes. Cuando el régimen es de alta anisotropía (α pequeño), los procesos más comunes serán aquellos que provienen de la inversión de spines vecinos; en la medida en que nos acercamos al límite isotrópico, una deslocalización de pares ocurre y, por lo tanto, procesos que envuelvan pares lejanos de spines comienzan a ser importantes. Esto claramente da una idea de los regímenes en los que ambas teorías son válidas.

1.2 Valores Esperados

Poco relevante es obtener una función de onda si no es posible encontrar los valores esperados de ella sobre algún operador. A pesar de la forma analítica obtenida para el estado fundamental en nuestra aproximación, sólo es posible obtener exactamente los valores esperados de un operador en el caso de $S = 1/2$ y dimensión 1 [38]. En el Apéndice A se presenta el método desarrollado para calcular los valores esperados de algún operador para este caso, mientras que un resumen de algunos valores esperados se muestran en la tabla 1.1, en la cual $J_n(x)$ corresponden a las funciones de Bessel de orden entero.

Sin embargo, como nuestra teoría es válida hasta $\mathcal{O}(\alpha^2)$, es posible obtener expansiones para los promedios hasta ese orden, cuando uno considera spines y/o dimensiones mayores. En la tabla 1.2 se presenta un resumen de las expansiones hasta segundo orden en α para algunos valores esperados.

Además nuestro estado fundamental posee la siguiente propiedad útil:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \langle g(\alpha) | \mathcal{A} | g(\alpha) \rangle = \frac{\langle g(\alpha) | [U, \mathcal{A}] | g(\alpha) \rangle}{2(2zS - 1)}, \quad (1.18)$$

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

Tabla 1.1: Algunos promedios para dimensión 1 y spin 1/2.

donde

$$U = \sum_{\vec{r}, \vec{\delta}} \left(S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r}) - S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) \right) \quad (1.19)$$

y \mathcal{A} un operador; ella facilita en algunos casos los cálculos de promedios. En especial, es posible obtener una relación entre la magnetización de subred y el término XY del Hamiltoniano (1.1):

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \langle g(\alpha) | S^z(\vec{r}) | g(\alpha) \rangle = \frac{1}{2(2zS - 1)} \sum_{\vec{\delta}} \langle g(\alpha) | S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r}) + S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) | g(\alpha) \rangle, \quad (1.20)$$

1.3 Validez de la Teoría

En la figura 1.1(a) se grafica la expresión (1.13) para una cadena lineal y spin 1/2, comparándola con la solución exacta [13-15] y el resultado de la teoría de ondas de spin. En ella se observa que en la medida que nos alejamos del límite Ising ($\alpha = 0$), la discrepancia

Promedio	Expansión
$\langle g S^z(\vec{r}) g\rangle$	$(-1)^{\vec{r}}S \left(1 - Sz \frac{\alpha^2}{(2zS-1)^2} + \frac{zS + 6z^2S^2 - 4z^3S^3}{12(2zS-1)^4} \alpha^4 \right)$
$\langle g S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) g\rangle$	$-\frac{2zS\alpha}{2zS-1} (2S - \frac{zS + 6z^2S^2 - 4z^3S^3}{3(2zS-1)^2} \alpha^2)$
$\langle g S^z(\vec{r})S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) g\rangle$	$-zS^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2zS-1} + \frac{2-7zS+10z^2S^2-2z^3S^3}{6(2zS-1)^4} \alpha^4 \right)$
$\langle g S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta} + \vec{\delta}') g\rangle$	$\frac{\alpha^2}{(2zS-1)^2}$
$\langle g S^z(\vec{r})S^z(\vec{r} + \vec{\delta} + \vec{\delta}') g\rangle$	$S^2 \left(1 - 2zS^2 \frac{\alpha^2}{(2zS-1)^2} \right)$

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

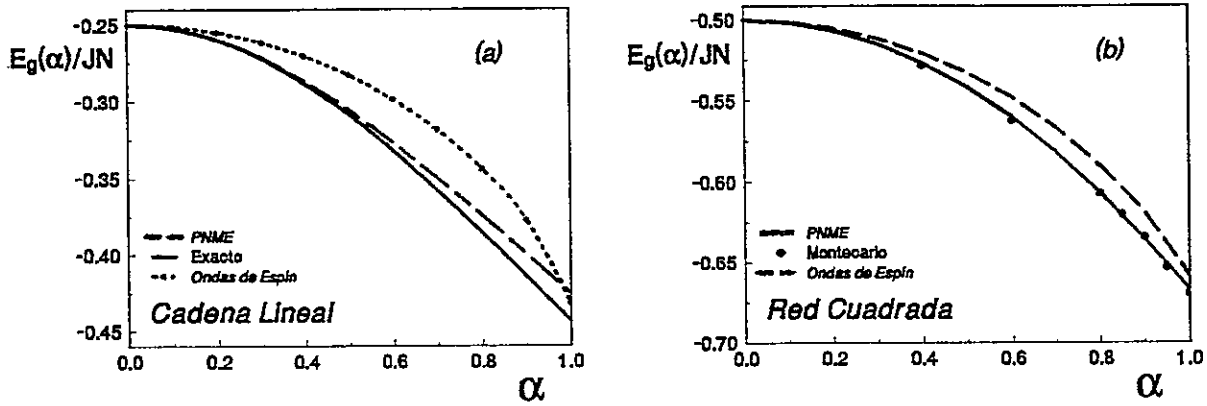


Figura 1.1: Energía del estado fundamental en función del parámetro de anisotropía α , correspondiendo $\alpha = 0$ al límite Ising y $\alpha = 1$ al límite isotrópico. (a) Cadena Lineal. (b) Red Cuadrada

va aumentando llegando a su valor máximo para el límite isotrópico. Sin embargo, para valores de α comprendidos en $0 \leq \alpha \leq 0.5$, nuestra teoría presenta un error menor que el 0.5%, superando incluso con creces a teoría de ondas de spin. El valor máximo de error se obtiene en $\alpha = 1$, llegando al 4%. Esto último corresponde a las condiciones más exigentes para la teoría, pues junto al hecho de tenerse el menor spin ($S = 1/2$) y el menor número de vecinos, además se pierden las correlaciones antiferromagnéticas de largo alcance justamente cuando α alcanza el valor 1; de este modo es natural este máximo error para $\alpha = 1$.

La presente aproximación encuentra condiciones más favorables para dimensión 2 y spin 1/2. Como observamos en la figura 1.1(b), la teoría ajusta notablemente los valores numéricos [56] en todo el rango del intervalo $0 \leq \alpha \leq 1$, llegando el error sólo a un 0.5% en el caso más desfavorable, nuevamente para $\alpha = 1$. Esto debido al hecho que en la red cuadrada las correlaciones antiferromagnéticas son importantes.

Como se desprende de los resultados anteriores, nuestra teoría es asintóticamente

exacta en el límite $\alpha \rightarrow 0$. Por lo tanto es necesario determinar hasta qué orden en α la teoría es exacta y, en lo posible, determinar el error cometido para un cierto valor de α en función del spin S y el número de coordinación z . Una expresión que da una luz al respecto es la siguiente:

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

En el caso de que $|g\rangle$ fuera el estado fundamental exacto, el lado derecho de la expresión (1.21) se haría idénticamente cero. Como no es el caso nuestro, el valor de la diferencia entre ambas expresiones del lado izquierdo daría cuenta del error natural presente en esta teoría. De esta manera, si definimos

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

y expandimos en función de α , al retener el orden más bajo en α , obtendremos una expresión que refleja el error cometido en nuestras hipótesis. Reemplazando las expansiones de la tabla 1.2, obtenemos:

$$\Delta(\alpha) = -\frac{zS^2\alpha^2}{3(2zS-1)^3} (7 - 2zS - 8z^2S^2 + 16z^3S^3) + \mathcal{O}(\alpha^4) \quad (1.23)$$

De esta manera hemos obtenido que la teoría es exacta hasta α^2 , con un error proporcional a α^3 . Además se observa que claramente el error disminuye en la medida que aumente el spin o la dimensión.

1.4 Un Modelo Ilustrativo

En esta sección mostraremos lo sencillo que es aplicar nuestra teoría a otros modelos. En efecto, su versatilidad es muy grande y se puede extender fácilmente para incluir interacciones con otros grados de libertad, interacciones a vecinos más lejanos o simplemente algún tipo de campo cristalino como en el caso que vamos a tratar.

Algunos compuestos, de los cuales el TMMC y el $K_3Fe(CN)_6$ [57,58] son ejemplos típicos, pueden ser descritos a través de un Hamiltoniano de Heisenberg con Anisotropía Uniaxial:

$$\mathcal{H} = J \frac{\alpha}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{\delta}} [S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r})] + J \sum_{\vec{r}, \vec{\delta}} S^z(\vec{r})S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) - D \sum_{\vec{r}} S^z(\vec{r})S^z(\vec{r}), \quad (1.24)$$

donde $\vec{S}(\vec{r})$ es el spin en el sitio \vec{r} ; $\vec{\delta}$ es un vector que conecta un punto en una subred con sus primeros vecinos en la otra subred; J es la integral de intercambio; α el parámetro de anisotropía y, D mide la anisotropía uniaxial.

Un valor de D positivo favorecerá la orientación del orden magnético en la dirección z , disminuyendo entonces las fluctuaciones asociadas al término transversal XY del Hamiltoniano. De esta manera, tendremos que en la medida que D crezca, se incrementará las regiones del espacio donde nuestra teoría es válida. Un valor de D negativo favorecería un alineamiento antiferromagnético dentro del plano xy , situación que está más allá de este ejemplo ilustrativo.

Para resolver este modelo, redefinimos nuestros operadores de spin cero como:

$$\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2S^2N}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r}) + Q\delta_{\vec{k}, \vec{\delta}} \quad (1.25)$$

con

$$Q = \left(\frac{N}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\alpha JS}{(2zS - 1)J + 2(2S - 1)D}. \quad (1.26)$$

Aquí \vec{r} es el conjunto de vectores que corresponden a la subred con spin "up" (máximo valor); \vec{k} es un vector de la primera zona de Brillouin de una de las subredes; z es el número de primeros vecinos y, N es el número de átomos con spin S en la red.

Al igual que en el caso tratado anteriormente, las relaciones de conmutación entre estos operadores y nuestro Hamiltoniano son complejas. Pero, siguiendo el espíritu de la sección 2, al reemplazar sus expresiones exactas por sus proyecciones sobre el estado de

Néel $|\mathcal{N}\rangle$, ellas se simplifican notablemente:

$$[\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}(\vec{k}')] = 0 \quad [\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{\vec{\delta}'}^\dagger(\vec{k}')] = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\vec{\delta}, \vec{\delta}'}. \quad (1.27)$$

Esta relaciones de conmutación bosónicas son válidas mientras exista un alto ordenamiento antiferromagnético, i.e., mientras se cumpla que α sea pequeño o D grande, o ambas. Sin embargo, a pesar de que hemos obtenido que nuestros operadores ϕ son operadores bosónicos, aún nos falta mostrar que son excitaciones de nuestro sistema. Para ello, simplemente hay que evaluar las relaciones de conmutación entre nuestros operadores y el Hamiltoniano.

El término XY se puede escribir directamente en función de nuestros operadores:

$$\mathcal{H}_{XY} = J\alpha S \left(\frac{N}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\vec{\delta}} (\phi_{\vec{\delta}}^\dagger(0) + \phi_{\vec{\delta}}(0) - 2Q\delta_{\vec{\delta}, \vec{0}}); \quad (1.28)$$

de (1.27) se obtiene directamente:

$$[\mathcal{H}_{XY}, \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k})] = \frac{J\alpha S}{2} \left(\frac{N}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \delta_{\vec{\delta}, \vec{0}}. \quad (1.29)$$

Los otros dos términos implican un poco de más trabajo, pero aún así no es difícil obtener:

$$[\mathcal{H}_I + \mathcal{H}_A, \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k})] = ((2zS - 1)J + 2(2S - 1)D) (\phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) - Q\delta_{\vec{\delta}, \vec{0}}). \quad (1.30)$$

De esta manera, hemos obtenido que nuestros operadores son excitaciones bosónicas del sistema:

$$[\mathcal{H}, \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k})] = ((2zS - 1)J + 2(2S - 1)D) \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) \equiv \varepsilon \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}). \quad (1.31)$$

Estas consideraciones nos permiten escribir el Hamiltoniano, restringido al espacio de spin total cero, como sigue:

$$\mathcal{H} = \varepsilon \sum_{\vec{k}, \vec{\delta}} \phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) \phi_{\vec{\delta}}(\vec{k}) + E_g, \quad (1.32)$$

donde E_g corresponde a la energía del estado fundamental. Para obtenerla, recurramos a la propiedad de los operadores ϕ de tener como autoestado al estado de Néel:

$$\phi_{\vec{\delta}}(\vec{k})|\mathcal{N}\rangle = Q\delta_{\vec{k}, \vec{0}}|\mathcal{N}\rangle \quad (1.33)$$

Promediando en el estado de Néel ambos lados de 1.32, utilizando la propiedad anterior y el valor exacto de la energía para este estado, podemos despejar la energía del estado fundamental E_g y obtener:

$$E_g = -\frac{N}{2}J_z S^2 - NDS^2 - \frac{NJ_z S^2 \alpha^2}{2((2zS - 1)J + 2(2S - 1)D)} \quad (1.34)$$

Esta expresión confirma nuestra afirmación inicial de que el término de anisotropía no afecta al sistema con spin $\frac{1}{2}$, ya que al reemplazar ese valor del spin se obtiene que el término uniaxial no contribuye a la energía salvo por un valor constante de NDS^2 . Para spines mayores ya hay un efecto neto en la configuración del estado fundamental y en la energía de él, como también en las excitaciones.

El estado fundamental se obtiene directamente:

$$|g\rangle = \exp \left[-Q \sum_{\delta} (\phi_{\delta}^{\dagger}(0) - \phi_{\delta}(0)) \right] |\mathcal{N}\rangle \quad (1.35)$$

Para comprobar nuestros resultados para la energía del estado fundamental, los comparamos con valores obtenidos numéricamente a través del método de Lanczos [59,60] en una cadena lineal de 12 sitios para spin $3/2$ [61]. Figuras 1.2 y 1.3 muestran cómo la expresión (1.34) para la energía del estado fundamental ajusta los resultados numéricos obtenidos para diferentes valores de los parámetros. Como se esperaba, un valor alto para D favorece el ordenamiento antiferromagnético y permite aplicar (1.34) en un amplio rango para α . Lo sorprendente es la magnitud del efecto, ya que un cambio en D de 0.0 a 1.0 aumenta el intervalo de validez de nuestra aproximación al doble. Un resultado similar se obtuvo cuando se incluyó interacción a segundos vecinos ferromagnética $J_2 < 0$ a un modelo de Heisenberg con interacción a primeros vecinos antiferromagnética $J_1 > 0$ [43]; allí, un cambio del cociente J_2/J_1 de 0 a -0.2 producía el mismo efecto.

Otro método de verificación se obtiene al considerar el límite $D \rightarrow \infty$. Supongamos una cadena lineal de spin $S = 1$ descrita por el hamiltoniano (1.24). En el límite $D \rightarrow \infty$, el sistema preferirá aquellos estados con componente S_i^z máximo, ya que cualquier otro estado tendrá una energía mucho mayor. Así, en el caso de spin 1, sólo sobrevivirán

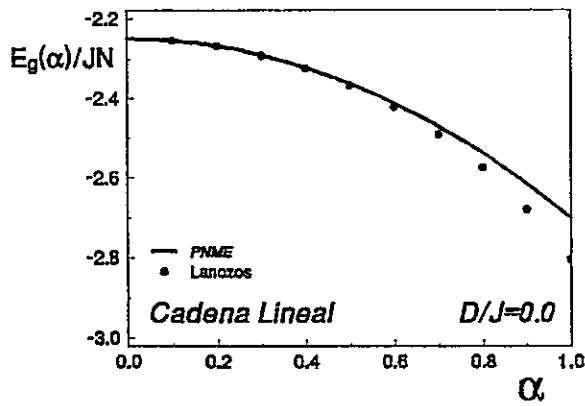


Figura 1.2: Valores para la energía para una cadena lineal y spin 3/2 con $D = 0$. La línea continua representa la ecuación (1.34), mientras que los círculos corresponde a valores obtenidos a través del método de Lanczos en una cadena de 12 sitios.

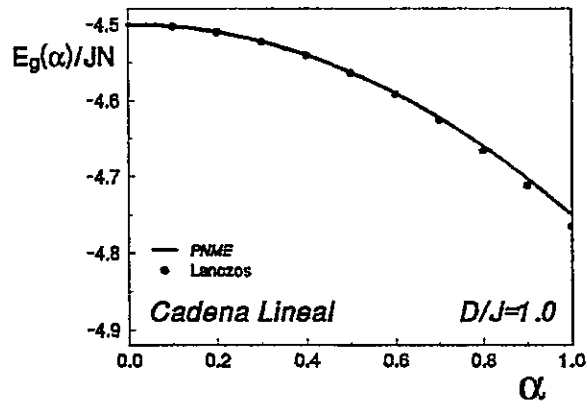


Figura 1.3: Al igual que en la figura 1.2 pero con $D = 1.0$.

aquellos estados con $S_i^z = 1$ y -1 . Luego, en este límite se puede obtener un modelo con spin $S = 1/2$ efectivo a través de teoría de perturbaciones en $1/D$. Esto fue hecho por Sólyom y Ziman [62], obteniendo el siguiente Hamiltoniano efectivo:

$$\mathcal{H}_{eff} = -N \frac{\alpha^2 J^2}{4D} - ND + (4J + \frac{\alpha^2 J^2}{D}) \sum_i \tilde{S}_i^z \tilde{S}_{i+1}^z - \frac{\alpha^2 J^2}{2D} \sum_i (\tilde{S}_i^+ \tilde{S}_{i+1}^- - \tilde{S}_{i+1}^+ \tilde{S}_i^-) \quad (1.36)$$

donde \tilde{S}^z , \tilde{S}^+ y \tilde{S}^- son operadores efectivos de spin $1/2$, que obedecen

$$\tilde{S}^z |\pm 1\rangle = \pm \frac{1}{2} |\pm 1\rangle \quad \tilde{S}^\pm |\mp 1\rangle = |\pm 1\rangle \quad (1.37)$$

El espectro del Hamiltoniano efectivo (1.36) coincide con aquel obtenido en un Hamiltoniano Antiferromagnético para spin $1/2$ y que fue resuelto por Orbach [14]. Luego, simplemente tenemos que comparar los resultados obtenidos por nosotros para spin 1 con aquellos de Orbach en el límite $D \gg J$. En las figuras 1.4 y 1.5 se comparan ambos resultados tomando $D/J = 4$ y $D/J = 8$, respectivamente. Como se observa, ambos resultados concuerdan notablemente, habiendo sólo un error menor al 0.1% incluso en $\alpha = 1$ (o 1% si no consideramos el término constante $-D$).

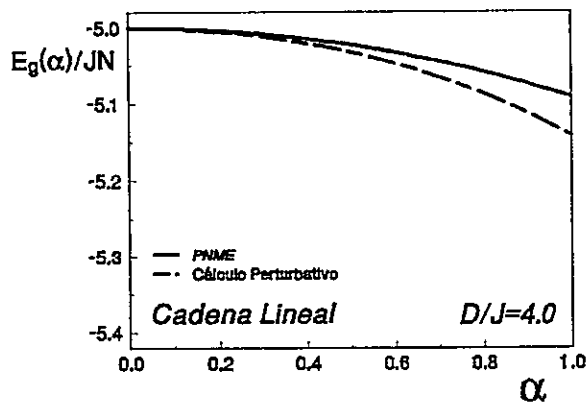


Figura 1.4: Comparación entre la expansión asintótica para D grande y spin 1, y la expresión obtenida para la energía, tomando $D = 4$.

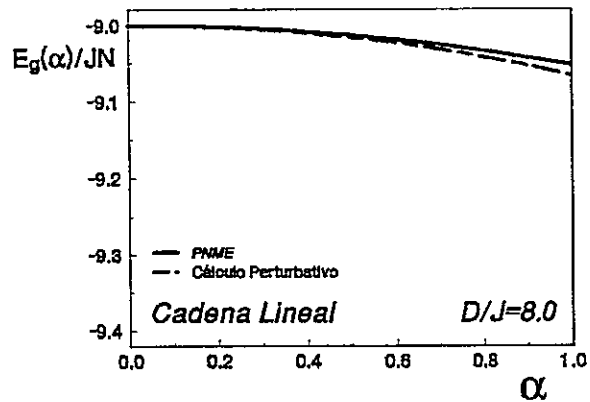


Figura 1.5: Al igual que en la figura 1.4 pero con $D = 8.0$.

Capítulo 2

Método Variacional

La gran versatilidad de PNME ha sido demostrada en el hecho de que, dentro de los pocos años en que ella ha sido desarrollada, ha logrado describir una serie de modelos donde se cumple que existe un ordenamiento antiferromagnético sobre una red bipartita. No sólo el modelo de Heisenberg con antiferromagnetismo a primeros vecinos fue descrito por esta teoría, sino también fue posible incluir interacciones a segundos vecinos, tanto ferro como antiferromagnéticas. Además ha sido fácilmente generalizable para spin y dimensión arbitrarios, junto con permitir describir modelos donde se incluye interacciones con otros grados de libertad e, incluso, introducir fuerzas de enlace de origen magnético.

No obstante lo anterior, existen algunos modelos donde no es aplicable directamente PNME. Un ejemplo corresponde al modelo de Heisenberg con interacciones a primeros vecinos y anisotropía mayor que 1. En el capítulo anterior obtuvimos que nuestra teoría lo describe notablemente bien en el límite Ising ($\alpha = 0$), decayendo en la medida en que nos aproximamos al límite isotrópico ($\alpha = 1$). Pero existe evidencia de que a partir de $\alpha = 1$ la naturaleza del estado fundamental cambia, dando una relevancia máxima a éste punto. Nuestra teoría, en la forma en que la hemos presentado, no es válida para valores $\alpha > 1$, tanto en el caso unidimensional como en el bidimensional, por lo que no puede dar cuenta de esa transición.

Otro ejemplo de estas falencias, corresponde el incluir al modelo anterior un campo magnético externo. La característica principal de PNME es que sus excitaciones no cambian el spin del estado donde se aplican, en contraste a ondas de spin que sí la afectan. Esto significa una ventaja cuando se está estudiando el estado fundamental de un sistema antiferro, que está restringido al subespacio con magnetización total nula, pero se transforma en desventaja cuando se introduce un campo magnético externo, donde los estados con diferentes magnetizaciones se mezclan entre sí. Las excitaciones que introduce PNME no permiten por sí solas obtener estados con magnetización diferente de cero, por lo que describir la transición desde un estado antiferromagnético a uno ferromagnético inducida por un campo magnético externo está más allá de sus posibilidades.

En este capítulo, vamos a introducir una variante variacional a la teoría presentada anteriormente. A partir del estado fundamental obtenido a través de PNME, vamos a generar una función de onda variacional que permita describir exitosamente situaciones como las descritas anteriormente.

2.1 Función de Onda Variacional

En general, PNME propone como estado fundamental a:

$$|g(\alpha)\rangle = \exp \left[-\frac{\alpha S}{(2zS - 1)} \sqrt{\frac{N}{2}} \sum_{\vec{\delta}} (\phi^\dagger(0) - \phi(0)) \right] |\mathcal{N}\rangle, \quad (2.1)$$

donde α es el parámetro de anisotropía del Hamiltoniano (1.1); S es el valor del spin; z el número de primeros vecinos de la red; $|\mathcal{N}\rangle$, el estado de Néel y ϕ , los operadores introducidos por PNME (ecuación (1.2)). A partir de el estado fundamental se construyen los estados excitados:

$$|\{n_{\vec{\delta}\vec{k}}\}\rangle = \prod_{\vec{\delta}\vec{k}} \frac{(\phi_{\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}))^{n_{\vec{\delta}\vec{k}}}}{\sqrt{n_{\vec{\delta}\vec{k}}!}} |g(\alpha)\rangle. \quad (2.2)$$

Como los operadores ϕ por construcción no alteran el valor del spin total, ambos estados (2.1) y (2.2) pertenecen al subespacio con magnetización total S nula y junto con los

operadores ϕ dan cuenta de todos los elementos de ese subespacio. En efecto, todos estos estados pueden escribirse como la suma de diferentes términos de la forma:

$$\left(\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k})\right)^n \left(\phi_{\vec{\delta}'}(\vec{k}')\right)^m |\mathcal{N}\rangle \quad (2.3)$$

y si definimos como el operador magnetización total $S_{\mathbb{T}}^z$ a

$$S_{\mathbb{T}}^z = \sum_{\vec{r}} \left(S^z(\vec{r}) + S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) \right), \quad (2.4)$$

se obtiene directamente que

$$S_{\mathbb{T}}^z \left(\phi_{\vec{\delta}}^{\dagger}(\vec{k}) \right)^n \left(\phi_{\vec{\delta}'}(\vec{k}') \right)^m |\mathcal{N}\rangle = 0, \quad (2.5)$$

ya que los operadores ϕ sólo pueden intercambiar pares de spines que estén antialineados. De esta manera, nuestro estado fundamental (2.1) y estados excitados (2.2) no sólo permiten obtener $\langle S_{\mathbb{T}}^z \rangle = 0$ sino, aún más, están completamente contenidos en el subespacio $\mathcal{S}(0)$ definido por los autovectores de $S_{\mathbb{T}}^z$ con autovalor nulo, lo que los hace completamente ortogonales a cualquier estado perteneciente a cualquier otro subespacio $\mathcal{S}(m)$ con magnetización total m no nula. En particular, nuestro estado fundamental (2.1) cumple que

$$\langle g(\alpha) | S^+(\vec{r}) S^+(\vec{r} + \vec{\delta}) | g(\alpha) \rangle = 0 \quad (2.6)$$

y

$$\langle g(\alpha) | S^z(\vec{r}) S^{\pm}(\vec{r} + \vec{\delta}) | g(\alpha) \rangle = \langle g(\alpha) | S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) S^{\pm}(\vec{r}) | g(\alpha) \rangle = 0. \quad (2.7)$$

Las consideraciones anteriores nos permiten introducir la función de prueba

$$|g(\alpha', \{\theta_{\vec{r}}\})\rangle = \mathcal{R}_y(\{\theta_{\vec{r}}\}) |g(\alpha')\rangle, \quad (2.8)$$

donde el operador unitario

$$\mathcal{R}_y(\{\theta_{\vec{r}}\}) = \prod_{\vec{r}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \theta_{\vec{r}} S^y(\vec{r}) \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \theta_{\vec{r}\vec{\delta}} S^y(\vec{r} + \vec{\delta}) \right] \quad (2.9)$$

es simplemente una rotación en $\theta_{\vec{r}}$ alrededor del eje y sobre el spin en el sitio \vec{r} , con $\vec{\delta}$ arbitrario pero fijo. Los parámetros $\{\theta_{\vec{r}}\}$ y α' son los parámetros variacionales de nuestra función de prueba.

Al escribir el funcional para la energía

$$F(\alpha', \{\theta_{\vec{r}}\}) = \langle g(\alpha') | \mathcal{R}_y(\{\theta_{\vec{r}}\})^\dagger \mathcal{H} \mathcal{R}_y(\{\theta_{\vec{r}}\}) | g(\alpha') \rangle, \quad (2.10)$$

que corresponde simplemente al promedio del Hamiltoniano \mathcal{H} arbitrario sobre nuestra función de prueba, podemos reinterpretarlo como el valor de expectación del operador rotado $\mathcal{H}' = \mathcal{R}_y^\dagger \mathcal{H} \mathcal{R}_y$ sobre el estado $|g(\alpha')\rangle$. Luego, basta simplemente hacer la sustitución

$$S^x \longrightarrow \cos \theta S^x - \sin \theta S^z \quad (2.11)$$

$$S^y \longrightarrow S^y \quad (2.12)$$

$$S^z \longrightarrow \sin \theta S^x + \cos \theta S^z \quad (2.13)$$

en \mathcal{H} para obtener el nuevo operador transformado $\mathcal{H}'(\{\theta_{\vec{r}}\})$ sobre el que promediamos la función de onda $|g(\alpha')\rangle$:

$$F(\alpha', \{\theta_{\vec{r}}\}) = \langle g(\alpha') | \mathcal{H}'(\{\theta_{\vec{r}}\}) | g(\alpha') \rangle. \quad (2.14)$$

Nuestro funcional se simplifica notablemente haciendo uso de las propiedades (2.6) y (2.7). Una vez obtenida la expresión final para él, el problema se reduce a encontrar y resolver las ecuaciones minimales para los parámetros envueltos.

2.2 Límite XY

Incluir anisotropía en el Hamiltoniano de Heisenberg posee la ventaja de poder comparar en forma más exigente los resultados aproximados con aquellos exactos. Incluso en los nuevos superconductores se ha encontrado una cierta anisotropía que favorece el orden antiferromagnético en la dirección perpendicular a los planos CuO_2 . A lo anterior se le

agrega el hecho de que a través de la variación continua de un parámetro α se puede conectar continuamente al modelo de Ising con el XY, pasando por el Heisenberg isotrópico. Esto permite estudiar el cambio de régimen en el punto $\alpha = 1$, cambio que se manifiesta claramente en dimensión uno gracias al anzatz de Bethe, pero que no ha podido ser estudiado ampliamente en dimensiones mayores.

Luego, consideremos la función de onda variacional propuesta, pero con sólo un ángulo variacional por simplicidad:

$$|g(\alpha', \theta_{\vec{r}})\rangle = \mathcal{R}_y(\theta)|g(\alpha')\rangle \quad (2.15)$$

y el hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico

$$\mathcal{H} = \frac{\alpha J}{2} \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} [S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r})] + J \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} S^z(\vec{r})S^z(\vec{r} + \vec{\delta}). \quad (2.16)$$

Por las consideraciones planteadas en la sección anterior, debemos evaluar el hamiltoniano transformado $\mathcal{H}'(\theta)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'(\theta) = J \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} & \left\{ \frac{1}{4} (\sin^2 \theta + \alpha \cos^2 \theta + \alpha) [S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r})] \right. \\ & + (\cos^2 \theta + \alpha \sin^2 \theta) S^z(\vec{r})S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) + \frac{1}{4} (\sin^2 \theta + \alpha \cos^2 \theta - \alpha) \\ & \times [S^+(\vec{r})S^+(\vec{r} + \vec{\delta}) + S^-(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r})] + \frac{1}{2} (1 - \alpha) \sin \theta \cos \theta [S^+(\vec{r})S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) \\ & \left. + S^-(\vec{r})S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^z(\vec{r}) + S^-(\vec{r} + \vec{\delta})S^z(\vec{r})] \right\}. \quad (2.17) \end{aligned}$$

Pero al aplicar (2.6) y (2.7) al calcular el valor esperado del Hamiltoniano transformado, nuestro funcional se simplifica notablemente:

$$\begin{aligned} F(\alpha', \theta) = \frac{\tilde{\alpha} \tilde{J}}{2} \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} & \langle g(\alpha') | S^+(\vec{r})S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{r} + \vec{\delta})S^-(\vec{r}) | g(\alpha') \rangle \\ & + \tilde{J} \sum_{\{\vec{r}\}, \vec{\delta}} \langle g(\alpha') | S^z(\vec{r})S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) | g(\alpha') \rangle, \quad (2.18) \end{aligned}$$

donde

$$\tilde{J} = J(\cos^2 \theta + \alpha \sin^2 \theta) \quad (2.19)$$

$$\tilde{\alpha} = \frac{1 \operatorname{sen}^2 \theta + \alpha \cos^2 \theta + \alpha}{2 \cos^2 \theta + \alpha \operatorname{sen}^2 \theta}. \quad (2.20)$$

Luego, nuestro problema se redujo a evaluar el valor de expectación de un nuevo Hamiltoniano de Heisenberg con valores modificados para la constante de acoplamiento y el parámetro de anisotropía. Definiendo

$$H_I(\alpha') = \langle g(\alpha') | S^z(\vec{r}) S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) | g(\alpha') \rangle \quad (2.21)$$

y

$$H_{XY}(\alpha') = \langle g(\alpha') | S^+(\vec{r}) S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) + S^+(\vec{r} + \vec{\delta}) S^-(\vec{r}) | g(\alpha') \rangle, \quad (2.22)$$

nuestro funcional (2.18) se transforma en

$$F(\alpha', \theta) = \frac{zNJ}{4} (1 + \alpha + (1 - \alpha) \cos 2\theta) H_I(\alpha') + \frac{zNJ}{4} (1 + 3\alpha + (\alpha - 1) \cos 2\theta) H_{XY}(\alpha'). \quad (2.23)$$

Para un α' fijo, los extremos de $F(\alpha', \theta)$ vienen dados por la ecuación

$$\frac{\partial F}{\partial \theta} = (1 - \alpha) (H_I(\alpha') - H_{XY}(\alpha')) \operatorname{sen} 2\theta = 0, \quad (2.24)$$

cuyas soluciones principales son

$$\theta = 0, \frac{\pi}{2} \quad (2.25)$$

independientemente del valor del otro parámetro variacional. El signo de la segunda derivada

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} = (1 - \alpha) (H_I(\alpha') - H_{XY}(\alpha')) \cos 2\theta, \quad (2.26)$$

determina cuál de estas dos soluciones corresponde a un mínimo y cuál a un máximo. Lo importante a esta altura del desarrollo es observar que el signo de la segunda derivada cambia en $\alpha = 1$, transformando los máximos en mínimos y *vice versa*. No es difícil obtener que $F(\alpha', \theta)$ es mínimo para

$$\theta = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq \alpha < 1 \\ \frac{\pi}{2} & \text{si } 1 < \alpha < \infty \end{cases}, \quad (2.27)$$

obteniéndose una transición paramétrica para $\alpha = 1$.

Al reemplazar para $1 < \alpha < \infty$ el valor $\theta = \pi/2$ en las ecuaciones (2.19) y (2.20), obtenemos los valores equivalentes para la constante de acoplamiento y la anisotropía

$$\tilde{J} = \alpha J, \quad \tilde{\alpha} = \frac{1 + \alpha}{2\alpha}; \quad (2.28)$$

observemos que si $1 < \alpha < \infty$ entonces $1/2 < \tilde{\alpha} < 1$. El funcional $F(\alpha', \pi/2)$ corresponde al valor medio de un Hamiltoniano de Heisenberg con anisotropía $\tilde{\alpha} < 1$ con respecto al estado $|g(\alpha')\rangle$, situación que sabemos está bien descrita por el estado $|g(\tilde{\alpha})\rangle$, por lo que el mínimo en α' del funcional vendría dado por

$$\alpha' = \tilde{\alpha}. \quad (2.29)$$

Luego, identificamos la energía del estado fundamental $E_G(\alpha)$, para $\alpha > 1$, con el valor mínimo del funcional, obteniéndose

$$\frac{E_G(\alpha)}{NJ} = \alpha \frac{E_g(\alpha')}{NJ}, \quad \alpha > 1 \quad (2.30)$$

donde $E_g(\alpha')$ denota la energía del estado fundamental para $\alpha' = (1 + 2\alpha)/(2\alpha)$. Reemplazando en la expresión obtenida en el capítulo anterior para la energía del estado $|g\rangle$, encontramos la expresión generalizada de la energía del estado fundamental para todo valor de α :

$$\frac{E_G(\alpha)}{NJ} = \begin{cases} -\frac{zS^2}{2} \left(1 + \frac{\alpha^2}{2zS-1} \right), & 0 \leq \alpha < 1 \\ -\frac{zS^2}{2} \left(1 + \frac{(1+\alpha)^2}{4(2zS-1)\alpha^2} \right), & 1 < \alpha < \infty \end{cases}, \quad (2.31)$$

además del estado fundamental

$$|G(\alpha)\rangle = \begin{cases} |g(\alpha)\rangle & \text{si } 0 \leq \alpha < 1 \\ \mathcal{R}_y(\pi/2)|g(\alpha')\rangle & \text{si } 1 < \alpha < \infty \end{cases}. \quad (2.32)$$

En la figura 2.1 se compara la expresión para la energía dada por (2.31) y resultados obtenido a través del método Monte Carlo cuántico por Barnes, Kotchan y Swanson [56] para una red cuadrada de spines $1/2$. La concordancia es notable: a todo lo largo de

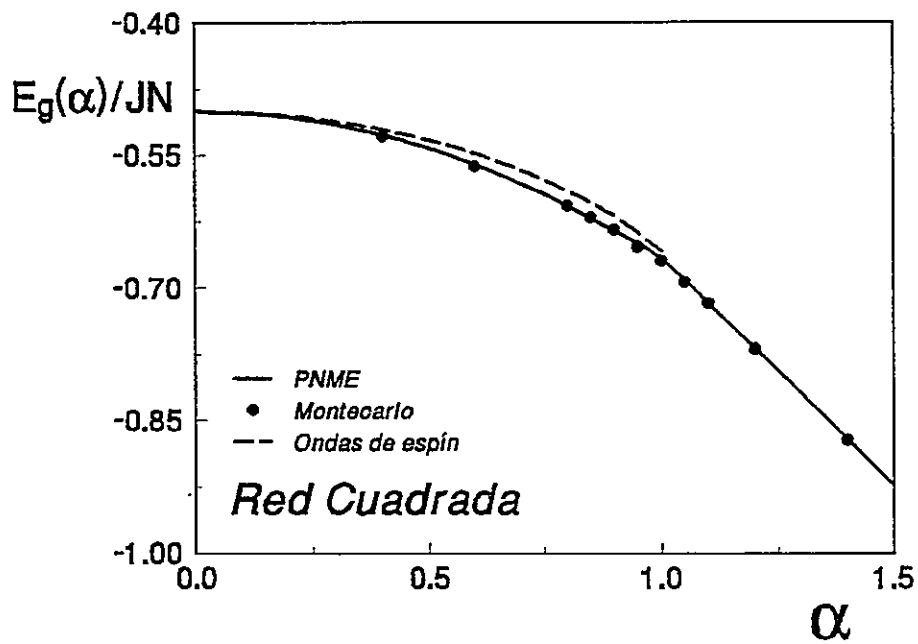


Figura 2.1: Energía por sitio para el estado fundamental en la red cuadrada en función del parámetro de anisotropía α . La línea continua representa la expresión (2.31); la de puntos, aquella obtenida por ondas de spin y los círculos, valores obtenidos a través de un complejo cálculo Monte Carlo. El error máximo entre los resultados numéricos y los nuestros ocurre en $\alpha = 1$ y es de un sólo 0.5%.

intervalo $0 < \alpha < 1.4$ el error máximo alcanzado es de un sólo un 0.5%, lo que significa que (2.32) describe en forma precisa al estado fundamental en dimensión dos [46]. En la misma figura se observa el resultado obtenida a través de ondas de spin como una línea discontinua; claramente queda de manifiesto que nuestro método para obtener el estado fundamental para este caso supera en forma categórica a ondas de spin. Es razonable considerar que el ajuste en dimensión tres será tan bueno como en dimensión dos, ya que sabemos que el ordenamiento antiferro aumento en la medida que crece la dimensión o el spin.

En dimensión uno la situación es totalmente diferente, ya que en este caso no hay correlaciones de largo alcance. Los valores para la energía y correlaciones obtenidas a través de PNME solamente describen en forma correcta el comportamiento de la cadena lineal hasta el valor $\alpha = 1/2$ para la anisotropía, valor a partir del cual las correlaciones antiferro comienzan a disminuir drásticamente. No es de extrañar que el valor de un 10% de error máximo obtenido en el límite $\alpha \rightarrow \infty$ supere en más de 20 veces el error obtenido para dimensión 2, pues el intervalo $1/2 < \alpha < 1$ a partir del cual se obtiene la energía para valores de $\alpha > 1$ corresponde a aquel donde las suposiciones de nuestra teoría comienzan a fallar. Esto es lamentable dado el hecho que solamente en este caso se posee una solución exacta con qué comparar, pero que podemos utilizar en nuestro favor. En efecto, el mapeo (2.30) que relaciona los valores de la energía en el intervalo $1/2 < \alpha < 1$ con aquellos valores de α entre 1 e ∞ , no depende de la naturaleza del estado fundamental obtenido, y puede ser testeado a través de los valores exactos para la energía. Esto se muestra en la figura 2.2, donde la línea continua corresponde al valor exacto para la energía calculado a través del ansatz de Bethe [15] y los puntos, a aquél obtenidos a través del mapeo (2.30). El error máximo de un 3% obtenido en el límite $\alpha \rightarrow \infty$ no es tan categórico como el valor de un 0.5% obtenido en la red cuadrada, pero justifica la validez de la aproximación.

Por último hay que observar que el estado fundamental obtenido por nosotros para $\alpha > 1$ posee ordenamiento antiferromagnético en el plano XY, especialmente para valo-

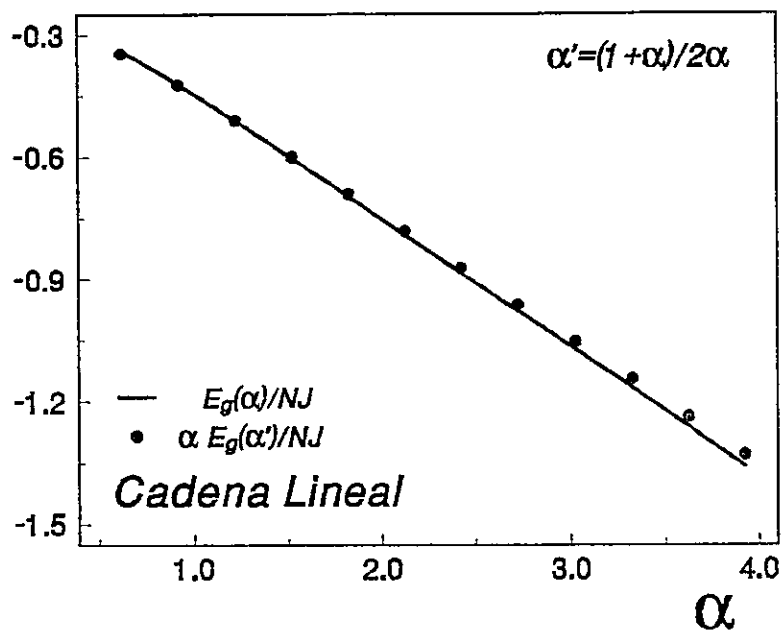


Figura 2.2: Chequeo del mapeo que relaciona valores de la energía para valores de α entre $1/2$ y 1 con valores entre 1 e ∞ , utilizando los valores exactos de la energía para la cadena lineal. La línea continua representa el cálculo exacto, mientras los puntos representan la expresión (mapeo).

res de grandes de α . Esto no quiere decir que existan correlaciones antiferromagnéticas infinitas en la red cuadrada en el plano, sino simplemente un ordenamiento antiferro de largo alcance, al igual que el resultado obtenido por Kubo [21], dadas las aproximaciones introducidas en nuestra teoría. Sin embargo, una comprobación experimental sobre este hecho aún está ausente.

2.3 Campo Magnético Externo

El modelo de Heisenberg con campo magnético externo sólo posee solución exacta en dimensión uno y para el caso isotrópico [63] aunque, sin embargo, se han logrado obtener expresiones asintóticas para las curvas de magnetización en el caso anisotrópico [64], junto con complejos estudios numéricos [65]. Impulsados por esto, en esta sección vamos a aplicar nuestro método variacional a un modelo de Heisenberg anisotrópico de spin 1/2 bajo la acción de un campo magnético externo tanto longitudinal, en la dirección de la anisotropía, como transversal, perpendicular a ella. Los cálculos están hechos para dimensión uno, pero son fácilmente generalizables a dimensiones mayores utilizando los resultados del capítulo anterior. Vamos a obtener la energía del estado fundamental, la magnetización total y de subred, así como la susceptibilidad. Para testear nuestros resultados, utilizaremos cálculos numéricos basados en el método de Lanczos [59,60] para una cadena de 12 sitios. Como veremos más adelante, la concordancia es muy buena e incluso nuestra función de onda permite describir notablemente bien diferentes fases antiferromagnéticas como ferromagnéticas que se presentan en el estado fundamental en la medida que el campo magnético externo varía [47].

Comencemos suponiendo una cadena lineal bipartita de spin 1/2 sobre la que actúa un campo magnético externo \vec{H} , y que podemos describir a través de un Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico:

$$\mathcal{H} = J \sum_l \left[S^z(l)S^z(l+1) + \frac{\alpha}{2} \left(S^+(l)S^-(l+1) + S^+(l+1)S^-(l) \right) \right]$$

$$-g \mu_B \sum_l [H_x S^x(l) + H_z S^z(l)] . \quad (2.33)$$

Ante la presencia de un pequeño campo magnético en la dirección x , nuestra función de onda, que posee correlaciones antiferromagnéticas en la dirección z , va a comenzar a generar una pequeña magnetización neta en la dirección del campo. Esto nos induce a considerar la siguiente función de onda variacional:

$$|g(\alpha', \theta_1, \theta_2)\rangle = \mathcal{R}_y(\theta_1, \theta_2) |g(\alpha')\rangle, \quad (2.34)$$

donde el operador unitario

$$\mathcal{R}_y(\theta_1, \theta_2) = \prod_l \exp \left[\frac{i}{\hbar} \theta_2 S^y(2l) \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \theta_1 S^y(2l+1) \right] \quad (2.35)$$

es simplemente una rotación en que cada subred posee un ángulo independiente de rotación θ_i , con $i = 1, 2$, medido a partir del ordenamiento antiferromagnético. El funcional para la energía es directamente calculable al utilizar las consideraciones de la primera sección de este capítulo, resultando

$$\begin{aligned} \frac{F(\theta_1, \theta_2, \alpha')}{NJ} = & (\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \alpha \sin \theta_1 \sin \theta_2) H_I(\alpha') + \frac{1}{4} (\alpha + \alpha \cos \theta_1 \cos \theta_2 \\ & + \sin \theta_1 \sin \theta_2) H_{xy}(\alpha') + \frac{1}{2} [(\sin \theta_1 - \sin \theta_2) h_x + (\cos \theta_1 - \cos \theta_2) h_z] M_z(\alpha'), \end{aligned} \quad (2.36)$$

donde $h_z \equiv g\hbar\mu_b H_z/J$ y $h_x \equiv g\hbar\mu_b H_x/J$ son las componentes del campo magnético reducido. Los coeficientes

$$H_I(\alpha') = \langle g(\alpha') | S_z(l) S_z(l+1) | g(\alpha') \rangle, \quad (2.37)$$

$$H_{xy}(\alpha') = \langle g(\alpha') | (S_+(l) S_-(l+1) + S_+(l+1) S_-(l)) | g(\alpha') \rangle \quad (2.38)$$

y

$$M_z(\alpha') = \langle g(\alpha') | S_z(l) | g(\alpha') \rangle \quad (2.39)$$

dependen solamente del parámetro variacional α' , y sus valores para dimensión uno se encuentran tabulados en la tabla 1.1. Si introducimos las nuevas variables

$$\xi = \frac{1}{2} (\theta_1 + \theta_2) \quad y \quad \eta = \frac{1}{2} (\theta_1 - \theta_2), \quad (2.40)$$

nuestro funcional se simplifica a

$$\begin{aligned} \frac{F(\alpha', \eta, \xi)}{NJ} = & \frac{\alpha}{2}(A(\alpha') - B(\alpha')) + \frac{1}{2}(1 + \alpha)A(\alpha') \cos(2\eta) \\ & + \frac{1}{2}(1 - \alpha)B(\alpha') \cos(2\xi) + h_x M_z(\alpha') \operatorname{sen} \eta \cos \xi - h_z M_z(\alpha') \operatorname{sen} \eta \operatorname{sen} \xi \end{aligned} \quad (2.41)$$

con

$$A(\alpha') = H_I(\alpha') + \frac{1}{4}H_{xy}(\alpha') \quad \text{y} \quad B(\alpha') = H_I(\alpha') - \frac{1}{4}H_{xy}(\alpha'). \quad (2.42)$$

Estudiaremos las ecuaciones minimales de (2.41) para cada componente del campo en forma separada.

2.3.1 Campo Transversal

Las ecuaciones minimales para el funcional de la energía son:

$$\operatorname{sen} \xi \left[(1 - \alpha)B(\alpha') \cos \xi + \frac{M_z(\alpha')h_x}{2} \operatorname{sen} \eta \right] = 0, \quad (2.43)$$

$$\operatorname{cos} \eta \left[(1 + \alpha)A(\alpha') \operatorname{sen} \eta - \frac{M_z(\alpha')h_x}{2} \operatorname{cos} \xi \right] = 0, \quad (2.44)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{2} \left(\frac{\partial A(\alpha')}{\partial \alpha'} - \frac{\partial B(\alpha')}{\partial \alpha'} \right) + \frac{1}{2}(1 + \alpha) \frac{\partial A(\alpha')}{\partial \alpha'} \cos(2\eta) + \frac{1}{2}(1 - \alpha) \frac{\partial B(\alpha')}{\partial \alpha'} \cos(2\xi) \\ + h_x \frac{\partial M_z(\alpha')}{\partial \alpha'} \operatorname{sen} \eta \cos \xi = 0. \end{aligned} \quad (2.45)$$

A partir de las ecuaciones (2.43) y (2.44) se pueden obtener cuatro tipos diferentes de soluciones para los ángulos η y ξ ; sin embargo, sólo una de ellas va a corresponder al mínimo absoluto de la energía, la única con relevancia física. En la medida que el valor del campo y la anisotropía varíe, el rol de cada solución puede variar, posibilitando que la solución que minimice la energía difiera y con ello generar un cambio de régimen para el estado fundamental. Los diferentes tipos de solución son:

(a) *Solución Spin-flip.* Esta solución viene caracterizada por

$$\xi = 0, \quad \text{sen } \eta = \frac{M_z h_x}{2(1 + \alpha)A}. \quad (2.46)$$

Para valores pequeños de h_x , esta solución representa un estado levemente desviado en la dirección del campo de la configuración antiferromagnética en la dirección z . Por lo tanto, esta solución será un mínimo para la energía para valores pequeños del campo h_x y de la anisotropía α . En el límite $h_x \ll 1$, $\alpha' \approx \alpha$ y los ángulos de rotación vendrían dados por

$$\theta_1 \approx \frac{M_z(\alpha)h_x}{2(1 + \alpha)A(\alpha)} \quad (2.47)$$

$$\theta_2 \approx \frac{-M_z(\alpha)h_x}{2(1 + \alpha)A(\alpha)}. \quad (2.48)$$

(b) *Solución Ferromagnética.* Caracterizada por

$$\xi = 0, \quad \eta = \pi/2, \quad (2.49)$$

esta solución se manifiesta como un mínimo absoluto de la energía para valores altos del campo magnético. Corresponde a girar completamente los spines de ambas subredes de manera que coincidan con la dirección del campo; como en este límite hay pocas fluctuaciones cuánticas, se tiene que $\alpha' \rightarrow 0$ en la medida que el campo crezca.

(c) *Solución Antiferromagnética Transversal.* Esta solución corresponde a aquella obtenida en la sección anterior para valores $\alpha > 1$. El valor de

$$\xi = \pi/2 \quad \text{y} \quad \eta = 0, \quad (2.50)$$

permite girar rígidamente ambas subredes de manera que las correlaciones ferromagnéticas se trasladen al plano $x - y$. Esta solución surge como mínimo absoluto para valores pequeños del campo y $\alpha > 1$.

(d) Por último, considerar

$$\xi \neq 0, \quad \eta = \pi/2, \quad (2.51)$$

no afecta la configuración del estado fundamental, ya que este tipo de solución nunca interviene como mínimo absoluto para la energía.

Los valores analíticos para los ángulos η y ξ determinado por cada tipo de solución se reemplazan en la ecuación (2.45) para obtener el valor óptimo para α' . Esta última ecuación se resuelve numéricamente, y una vez completado el conjunto de parámetros que minimiza la energía para cada solución, se procede a compararlos entre sí para así obtener el mínimo absoluto para la energía.

En la figura (2.3) se observa cómo cada tipo de solución interviene para definir la configuración del estado fundamental para $\alpha = 0.5$ en función de la intensidad del campo transversal. En ella, cada tipo de solución está etiquetada (a), (b) (c) y (d), al igual que en la clasificación en el texto anterior, mientras que los círculos corresponden a cálculos numéricos obtenidos a través del método de Lanczos. La curva inferior, que representa el valor de la energía del estado fundamental, está compuesta por solamente dos tipos de soluciones diferentes, determinadas por el cruzamiento en $h_x \approx 1.3$ de la solución *spin-flip* y la ferromagnético. Se observa una transición continua desde un estado antiferromagnético a uno ferromagnético, adquiriendo paulatinamente los ángulos θ_1 y θ_2 los valores $\pi/2$ y $-\pi/2$, respectivamente, en la misma medida en que $\alpha' \rightarrow 0$.

Las soluciones que participan para definir el estado fundamental para $\alpha = 1.5$ son tres, como se puede desprender de la figura 2.4. Al igual que en la figura 2.3, cada solución está etiquetada con la letra correspondiente y además está graficado el valor de la energía calculado numéricamente con círculos. Inicialmente, la solución antiferromagnética transversal se presenta como un mínimo absoluto, hasta que comienza a competir la solución *spin-flip*. Una vez adquirida esta configuración, paulatinamente va transformándose en un estado ferromagnético. La transición de un estado parcialmente antiferromagnético a uno completamente ferromagnético, el cruce entre la solución (a) y (b), se desplazó a un valor más alto para el campo magnético que en el caso $\alpha = 0.5$.

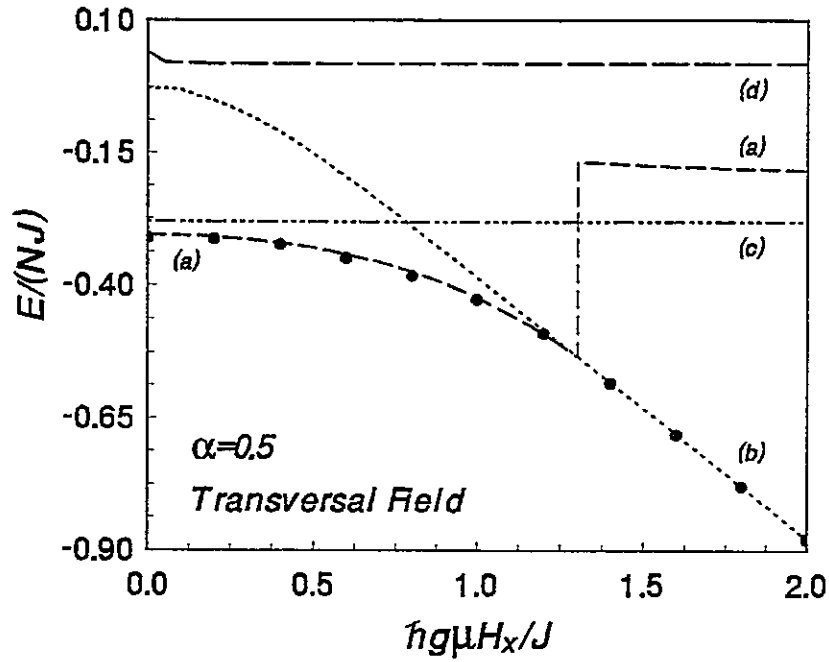


Figura 2.3: Energía del estado fundamental en función del campo magnético transversal H_x , cuya dirección es perpendicular a la definida por la anisotropía, la dirección z en este caso. El valor $\alpha = 0.5$ corresponde a un caso intermedio entre el modelo de Ising ($\alpha = 0$) y el Heisenberg anisotrópico ($\alpha = 1$). Las curvas (a), (b), (c) y (d) corresponden a cuatro tipos diferentes de soluciones obtenidas variacionalmente, mientras que los círculos representan los resultados de simulaciones numéricas en una cadena de 12 sitios. Se observa que solamente 2 de las soluciones participan en la energía con significado físico, esto es, a $T = 0$ existen 2 tipos diferentes de fases dependientes del campo.

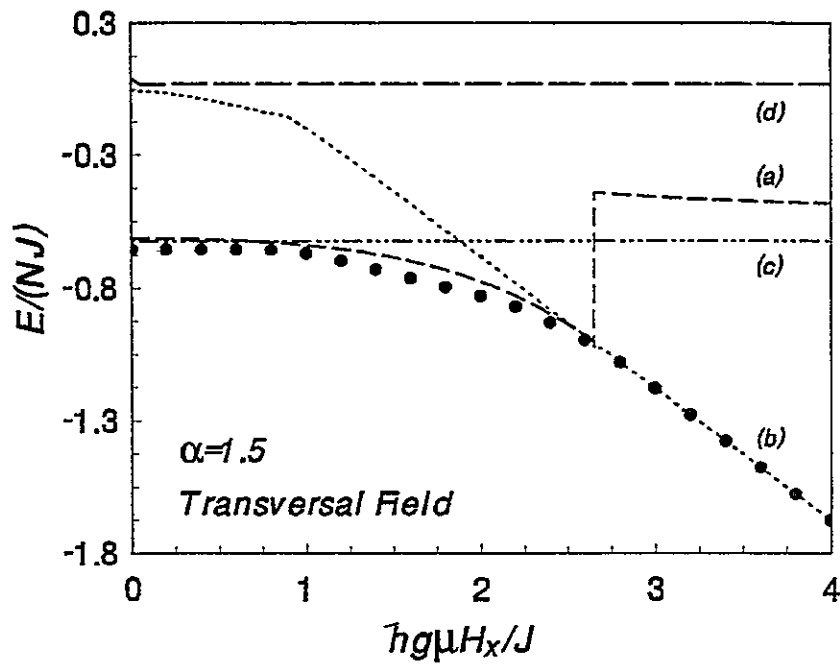


Figura 2.4: Al igual que en la figura 2.3, se muestra la energía para el estado fundamental pero en este caso con $\alpha = 1.5$, situación inclinada hacia el modelo XY. En este caso el sistema presenta tres fases diferentes a $T = 0$, ya que intervienen tres tipos diferentes de solución en la energía.

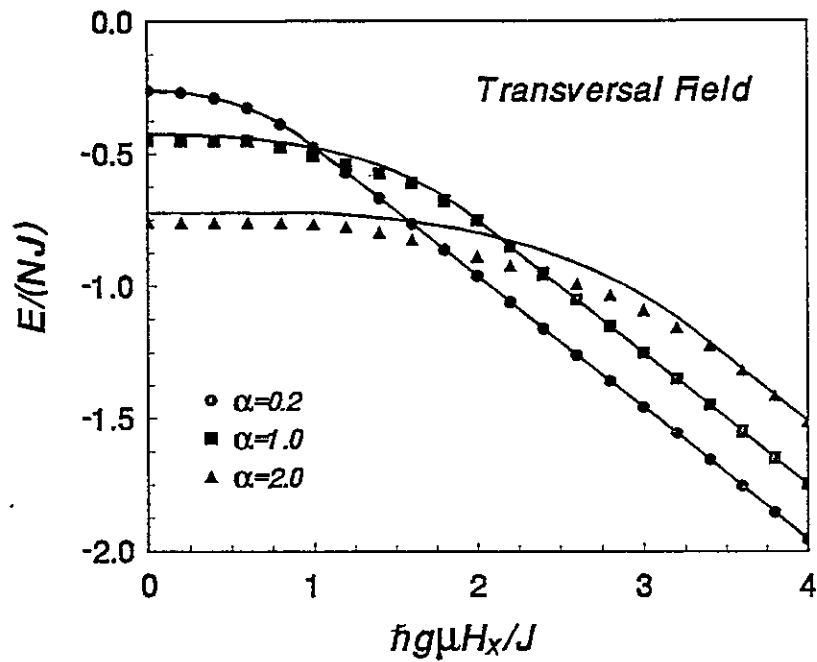


Figura 2.5: Energía del estado fundamental en función del campo transversal externo para algunos valores de la anisotropía α . Las curvas continuas representan los valores obtenidos a través de nuestro método variacional, mientras que los círculo, triángulos y cuadrados respresentan simulaciones numéricas en una cadena de 12 sitios. Las magnitudes presentadas no poseen dimensión.

En la figura 2.5 se presenta la curva final para la energía del estado fundamental obtenida a través de nuestra función variacional para algunos valores de α , comparada con resultados numéricos generados a partir del método de Lanczos (ver apéndice B) en una cadena lineal de 12 sitios. La correspondencia entre nuestros valores y aquellos obtenidos numéricamente es notable, especialmente para valores pequeños de α .

Por último, la magnetización total, susceptibilidad y correlaciones se pueden obtener directamente una vez que se conocen los valores de los parámetros variacionales, a través de

$$\langle S_z(l) S_z(l+1) \rangle = -\frac{1}{2}B(\alpha') \cos(2\xi) - \frac{1}{2}A(\alpha') \cos(2\eta) \quad (2.52)$$

$$\langle S_x \rangle = -\mu g M_z(\alpha') \text{ sen } \eta \cos \xi \quad (2.53)$$

$$\chi = \frac{\partial}{\partial h_x} (M_z(\alpha') \text{ sen } \eta \cos \xi) . \quad (2.54)$$

2.3.2 Campo Paralelo

En este caso $h_x = 0$, con lo que las ecuaciones minimales se reducen a

$$\cos \xi \left[(1 - \alpha)b(\alpha') \text{ sen } \xi + \frac{M_z(\alpha')h_z}{2} \text{ sen } \eta \right] = 0, \quad (2.55)$$

$$\cos \eta \left[(1 + \alpha)A(\alpha') \text{ sen } \eta + \frac{M_z(\alpha')h_z}{2} \text{ sen } \xi \right] = 0, \quad (2.56)$$

y

$$\frac{\alpha}{2} \left(\frac{\partial A(\alpha')}{\partial \alpha'} - \frac{\partial B(\alpha')}{\partial \alpha'} \right) + \frac{1}{2}(1 + \alpha) \frac{\partial A(\alpha')}{\partial \alpha'} \cos(2\eta) + \frac{1}{2}(1 - \alpha) \frac{\partial B(\alpha')}{\partial \alpha'} \cos(2\xi) - h_z \frac{\partial M_z(\alpha')}{\partial \alpha'} \text{ sen } \eta \text{ sen } \xi = 0. \quad (2.57)$$

Nuevamente sólo existen cuatro tipo de soluciones:

(a) *Solución Ferromagnética*. Determinada por

$$\xi = \eta = 0, \quad (2.58)$$

en ella los spines conservan su alineamiento antiferromagnético en la dirección z . Corresponde a aquella solución del Hamiltoniano de Heisenberg libre de campo magnético externo.

(b) *Solución Maximal*. Este tipo de solución, definido por

$$\eta = \frac{\pi}{2}, \quad \text{sen } \xi = \frac{M_z(\alpha')h_z}{2(1-\alpha)B(\alpha')}, \quad (2.59)$$

corresponde a un ordenamiento ferromagnético a lo largo del eje x , situación completamente desfavorable para la disposición del campo y por lo tanto, nunca representa un mínimo absoluto para la energía.

(c) *Solución Spin-flip*. Nuevamente se haya presente este tipo de solución donde los spines, conservando su alineamiento antiferromagnético, generan un pequeño momento magnético en la dirección del campo para disminuir su energía. En este caso el ordenamiento antiferromagnético es a lo largo del eje x y el momento magnético es generado en la dirección z . Las variables η y ξ vienen dadas por

$$\xi = \frac{\pi}{2}, \quad \text{sen } \eta = \frac{-M_z(\alpha')h_z}{2(1+\alpha)A(\alpha')}. \quad (2.60)$$

Esta solución se presenta favorable energéticamente en especial para campos h_z pequeños y $\alpha > 1$; en este caso, los ángulos de rotación por subred son aproximadamente:

$$\theta_1 \approx \frac{\pi}{2} - \frac{M_z(\alpha')h_z}{2(1+\alpha)A(\alpha')} \quad (2.61)$$

$$\theta_2 \approx \frac{\pi}{2} + \frac{M_z(\alpha')h_z}{2(1+\alpha)A(\alpha')}. \quad (2.62)$$

(d) *Solución Ferromagnética*. Este caso corresponde a tomar

$$\eta = \xi = \pi/2, \quad (2.63)$$

valores para los cuales los spines se alinean ferromagnéticamente en la dirección z . Esta situación es favorable energéticamente en el límite de campo h_z grande.

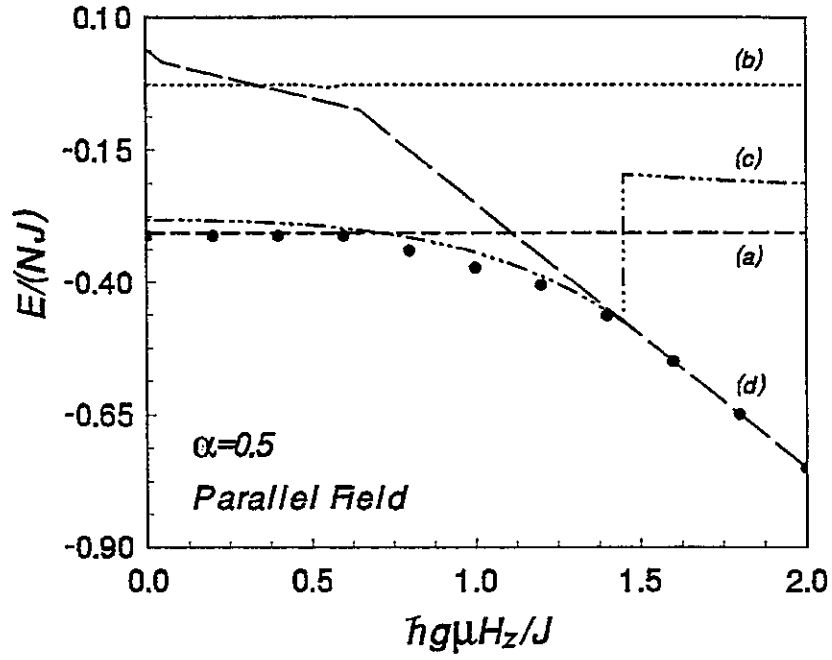


Figura 2.6: Energía del estado fundamental en función del campo magnético H_z paralelo a la dirección definida por la anisotropía, cuyo valor es $\alpha = 0.5$. Los círculos representan los resultados de simulaciones numéricas en una cadena de 12 sitios. Se observa que hay 3 tipos de solución que participan en la energía, esto es, a $T = 0$ existen 3 tipos diferentes de fases.

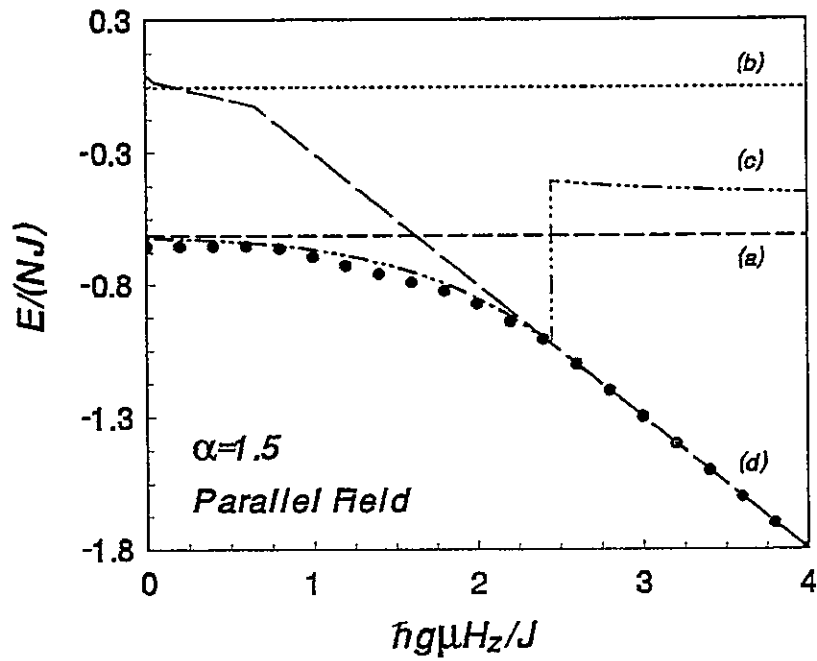


Figura 2.7: Al igual que en la figura 2.6, pero tomando $\alpha = 1.5$, situación inclinada hacia el modelo XY.

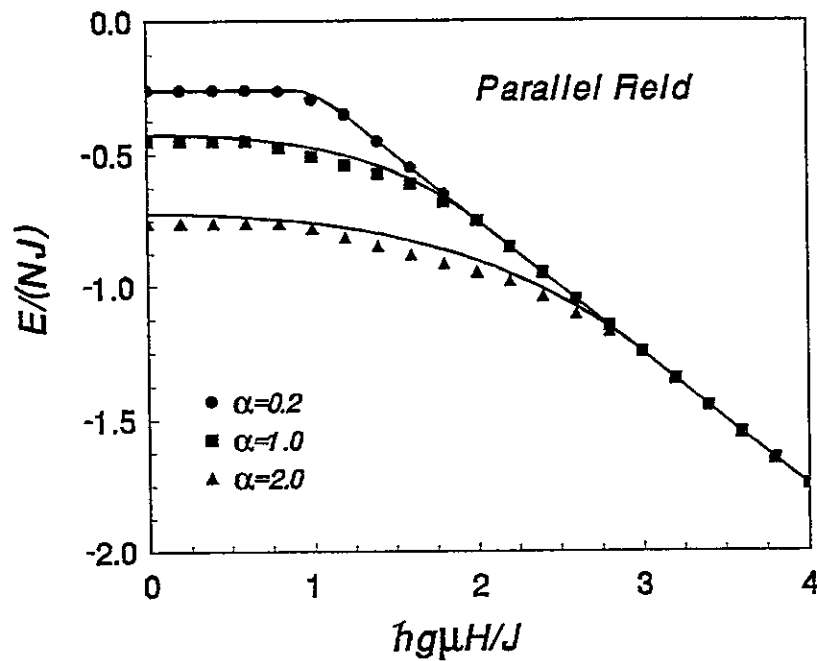


Figura 2.8: Energía del estado fundamental en función del campo paralelo externo para algunos valores de la anisotropía α , comparada con resultados numéricos., a igual que en la figura 2.5.

Evaluamos el funcional (2.41) para cada solución, como se observa en la figura 2.6, para obtener la configuración del estado fundamental para $\alpha = 0.5$ en función del campo h_z . En esa figura se observa que se suceden tres fases diferentes relacionadas con las soluciones (a), (c) y (d), en ese orden, en la medida que aumenta el campo h_z . En la figura 2.7 se muestran los valores energéticos asociados a cada solución, pero ahora tomando $\alpha = 1.5$; es importante subrayar que, como se desprende de la figura, este caso es equivalente al del campo transversal pero con $\alpha < 1$, mientras que el anterior corresponde a tomar $\alpha > 1$ en la situación con campo transversal. Por último, en la figura 2.8 se compara la energía del estado fundamental para algunos valores del parámetro de anisotropía α con aquella obtenida numéricamente mediante el método de Lanczos en una cadena de 12 sitios.

2.3.3 Análisis de las fases obtenidas en una dimensión

Una forma de describir las diferentes fases presente a $T = 0$ en el modelo descrito en esta sección, es a través de los ángulos de rotación de subred θ_1 y θ_2 . Ellos corresponde a los ángulos promedio subtendido por los spines en cada una de las dos subredes con respecto al perfecto alineamiento antiferromagnético en la dirección z que posee inicialmente. Si la rotación es rígida, manteniendo $\theta_1 = \theta_2$, el sistema mantiene su alineamiento antiferromagnético inicial aunque en una nueva dirección; por otro lado, si se cumple que $\theta_1 - \theta_2 = \pm\pi$, el sistema adquiere una configuración ferromagnética.

La orientación promedio θ_1 y θ_2 de los spines de cada subred es mostrada en la figura 2.9 en función de la intensidad del campo transversal H_x . Rápidamente se desprende que el comportamiento desarrollado por el sistema depende fuertemente del valor de anisotropía que se considere. En el caso de un valor de anisotropía cercano al límite Ising como corresponde al valor $\alpha = 0.5$, el sistema conserva su alineamiento antiferromagnético en la dirección z aunque paulatinamente va generando una componente ferromagnética en la dirección del campo. Esto corresponde a una transición continua de un estado antiferromagnético a uno ferromagnético, pero no suave.

El caso de $\alpha = 1.5$ representa al comportamiento del modelo tendiendo al límite XY. En él, se tiene inicialmente una configuración antiferromagnética dentro del plano $x - y$, situación que perdura imperturbablemente hasta un valor crítico del campo magnético, $h_x \approx 0.8$ para $\alpha = 1.5$, donde adquiere bruscamente un ordenamiento antiferromagnético en la dirección z junto con una magnetización neta en la dirección del campo. De allí se desarrolla paulatinamente, al igual que en el caso anterior, hasta adquirir una configuración ferromagnética real en la dirección x .

Figura 2.10 representa el comportamiento de θ_1 y θ_2 en función de la intensidad del campo paralelo H_z . Nuevamente diferentes valores para la anisotropía dan origen a diferentes comportamientos. En el caso de una anisotropía tipo Ising, como es el caso de $\alpha = 0.5$, el sistema sufre dos transiciones diferentes, una de ellas discontinua, que conectan tres fases diferentes. Inicialmente el sistema mantiene su ordenamiento antiferromagnético

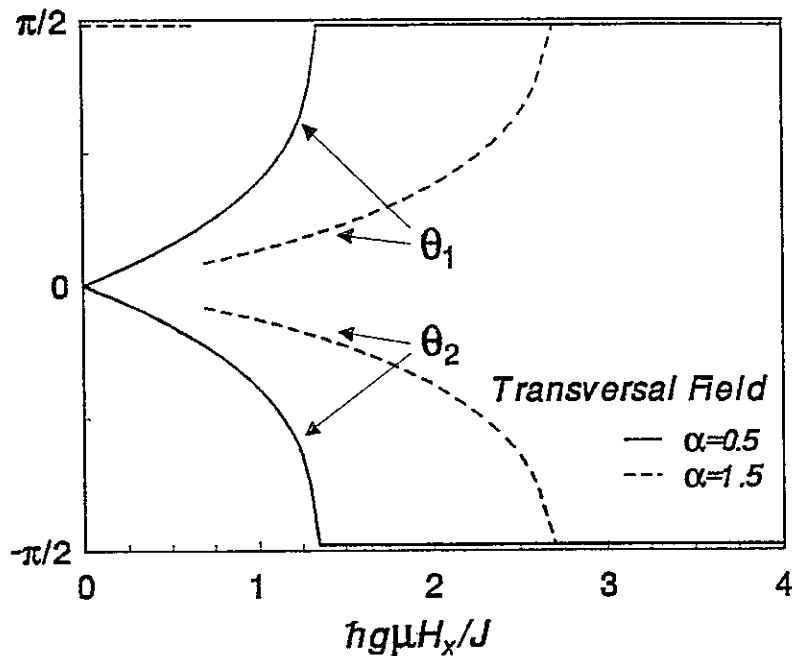


Figura 2.9: Orientación promedio de los spines en cada subred en función del campo transversal H_x . Los ángulos están medidos con respecto a una configuración antiferromagnética en la dirección z . Para una anisotropía cercana al límite Ising, $\alpha = 0.5$, a partir de una situación antiferromagnética $\theta_i = 0$ los spines desarrollan paulatinamente una componente ferromagnética en la dirección del campo, hasta que finalmente adquieren una verdadera configuración ferromagnética, $\theta_i = \pm \pi/2$. En el caso de anisotropía hacia el límite XY, $\alpha = 1.5$, los spines inicialmente poseen ordenamiento antiferromagnético en el plano $x - y$. Esta configuración se mantiene hasta un valor crítico del campo, desde el cual su comportamiento es similar al caso anterior.

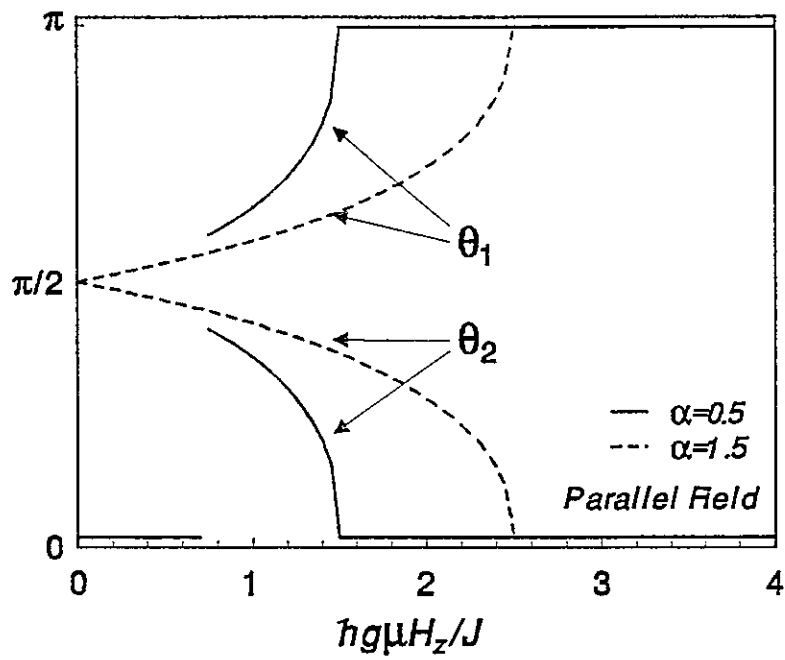


Figura 2.10: Al igual que en la figura 2.9, se presenta la orientación promedio de los spines en cada subred pero para el caso de un campo paralelo H_z . Salvo por una rotación en $\pi/2$, el comportamiento es similar al desarrollado en el caso de un campo transversal.

tico a lo largo del eje z , hasta un valor del campo $h_z = 0.7$ donde bruscamente adquiere magnetización neta a lo largo del eje z , junto con un ordenamiento antiferromagnético en el plano $x - y$. A partir de allí comienza a aumentar su momento magnético y disminuir sus correlaciones antiferromagnéticas en la medida que crece la intensidad del campo, hasta que para $h_z = 1.5$ ya es un estado ferromagnético.

Tomar una anisotropía tendiendo al límite XY para el campo paralelo, como lo es el valor $\alpha = 1.5$, permite obtener solamente dos fases diferentes que se conectan continuamente. Esto es, inicialmente el sistema posee correlaciones de largo alcance en el plano $x - y$, perpendicular al campo aplicado, y va adquiriendo momento magnético continuamente al aumentar la intensidad del campo. Al llegar al valor de saturación para el momento, el sistema se torna inmediatamente ferromagnético, perdiendo todas sus correlaciones antiferromagnéticas.

Las transiciones anteriores se reflejan abiertamente al graficar la magnetización en la dirección del campo. Como se puede observar directamente de las figuras 2.11 y 2.12, que corresponden al campo transversal y paralelo respectivamente, las transiciones discontinuas de fase se ven reflejadas con un salto en el momento magnético en la dirección del campo.

Por último, en la figura 2.13 se comparó el valor obtenido para la magnetización para un campo transversal con aquellos valores obtenidos a través del método de Lanczos, para tres valores diferentes para el parámetro de anisotropía. Los cálculos numéricos se realizaron sobre una cadena lineal de 12 sitios, lo que explica los escalones presentes en la magnetización para este caso.

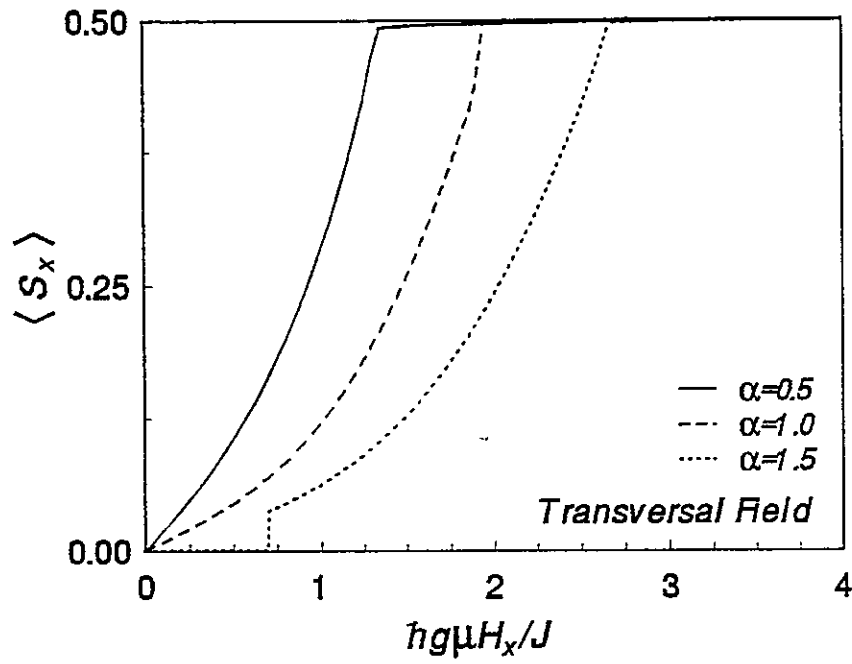


Figura 2.11: Magnetización por sitio en la dirección del eje x para un campo transversal, medida en unidades de $\hbar\mu$, para algunos valores de la anisotropía. Obsérvese la discontinuidad presente para $\alpha = 0.5$.

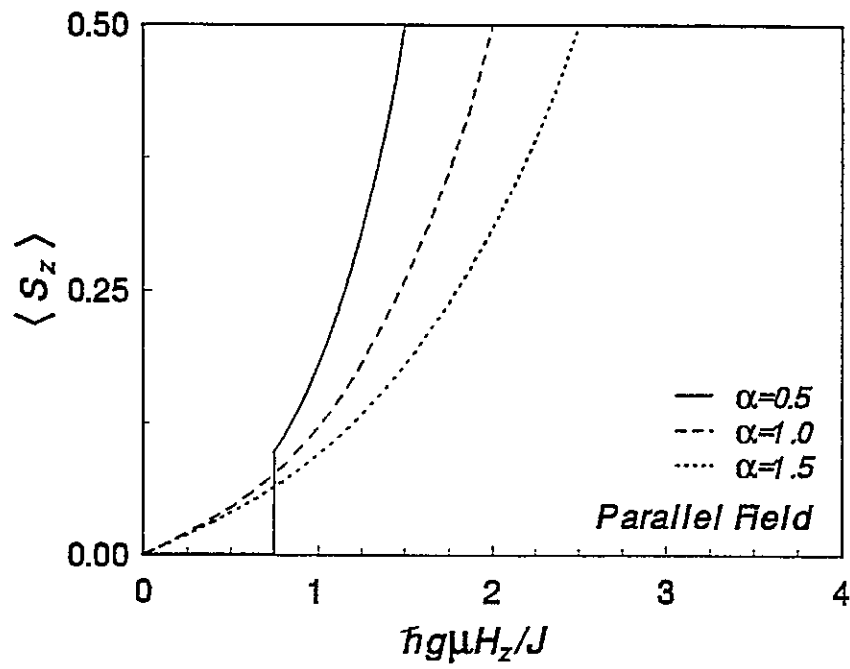


Figura 2.12: Magnetización por sitio en la dirección del campo, en este caso a lo largo del eje z , medida en unidades de $\hbar\mu$, para algunos valores de la anisotropía. Obsérvese la discontinuidad presente para $\alpha = 1.5$.

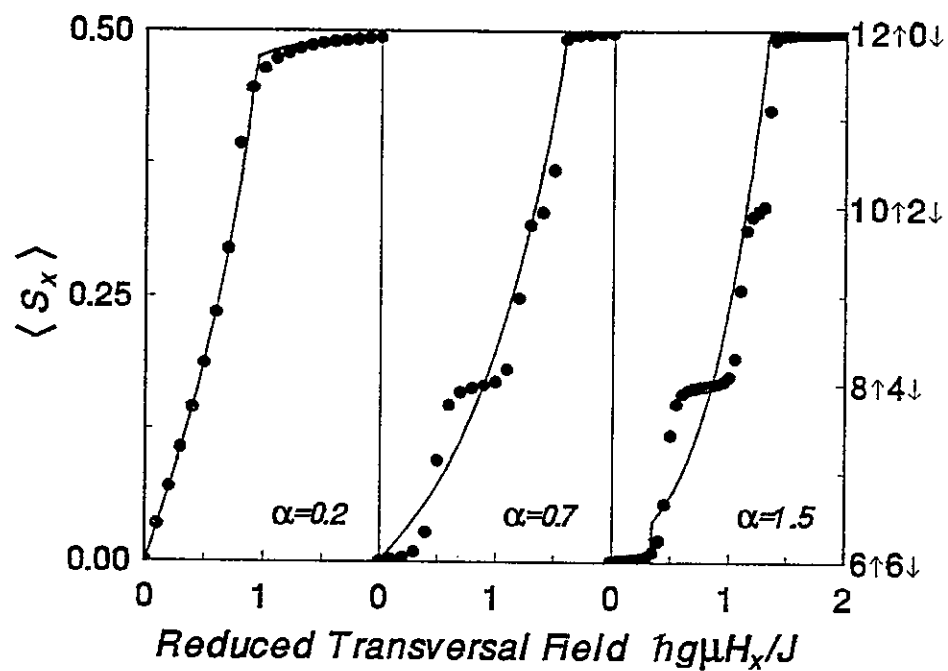


Figura 2.13: Comparación para el momento inducido por un campo transversal entre los valores obtenidos mediante nuestra función de onda variacional y resultados numéricos en una cadena de 12 sitios. El eje de la derecha está graduado en unidades de spines “up”(↑) y spines “down” (↓) para la muestra de 12 sitios.

Capítulo 3

Sistemas Frustrados

La versatilidad del método variacional aplicado a PNME, radica en el hecho de que puede extenderse incluso a sistema donde ya no es válida la bipartición del sistema en dos subredes. De hecho, PNME fue aplicado con éxito sobre un sistema de Heisenberg con interacción a primeros y segundos vecinos, pero la teoría discrepaba en la medida en que la interacción a segundos vecinos pasaba de una condición ferromagnética, que favorece un orden antiferromagnético, a una antiferromagnética, que lo frustra [43,44].

Por otro lado, existen redes que por su topología frustran el ordenamiento antiferromagnético, donde es posible encontrar transiciones entre estados ordenados antiferromagnéticamente y estados desordenados [25,66,67] Un ejemplo de este tipo de redes es la triangular, donde una interacción tipo Ising impone un estado infinitamente degenerado y, sin embargo, en la cual es posible encontrar una solución clásica al sistema al considerar una interacción isotrópica.

En este capítulo, aplicaremos el método variacional a un sistema con interacción a primeros y segundos vecinos, ambas antiferromagnéticas, que competirán para definir el ordenamiento del sistema, en una cadena lineal y una red cuadrada [48]. Se obtendrán diferentes ordenamientos, dependiendo de los valores de los parámetros, y diferentes diagramas de fase. Además extenderemos PNME a sistemas no bipartitos, a través del caso

específico de la red triangular [49]. En este sistema seremos capaces de obtener una transición de fase de primer orden desde un sistema ordenado a uno desordenado.

3.1 Interacción a segundos vecinos

Al considerar un sistema con interacciones a primeros (J_1) y segundos vecinos (J_2), se obtienen diferentes regímenes dependiendo de los valores de los parámetros. En el caso de que la interacción a primeros vecinos sea antiferromagnético ($J_1 > 0$) y la de segundos vecinos, ferro ($J_2 < 0$), esta interacción a vecinos más lejanos favorece un ordenamiento antiferromagnético en el sistema y, por lo tanto, una teoría como PNME puede describirlo correctamente [43,44,68]. Sin embargo, al contraponer a la interacción a primeros vecinos un $J_2 > 0$, el ordenamiento antiferromagnético se frustra; ya no es posible satisfacer simultáneamente ambas condiciones y el sistema elige alguna configuración que minimice el aumento de energía [32]. Esto lo logra para J_2 pequeño disminuyendo la magnetización por subred y para J_2 grande, tomando una configuración tipo 2-2 (+ + - - + + - - ...), donde se satisface sólo el ordenamiento antiferromagnético a segundos vecinos.

El objetivo de esta sección es lograr describir una transición entre ambos regímenes a través de una función variacional construida a partir del estado fundamental de PNME. Vamos a aplicarla a una cadena lineal y a una red cuadrada, aunque se puede extender a dimensiones mayores a través del método presentado en capítulos anteriores. La solución fue testeada comparándola con cálculos numéricos obtenidos mediante el método de Lanczos en cadenas de 12-16 sitios [68], y un método variacional desarrollado por Oliveira [32], que fue generalizado para incluir el modelo anisotrópico ($\alpha \neq 1$) en una y dos dimensiones.

3.1.1 El modelo

El Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico con interacciones a primeros y segundos vecinos es

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\vec{r}, \vec{\delta}} \left[S^z(\vec{r} + \vec{\delta}) S^z(\vec{r}) + \frac{\alpha}{2} \left(S^+(\vec{r} + \vec{\delta}) S^-(\vec{r}) + S^+(\vec{r}) S^-(\vec{r} + \vec{\delta}) \right) \right] \\ + \frac{J_2}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{\lambda}} \left[S^z(\vec{r} + \vec{\lambda}) S^z(\vec{r}) \right] + \frac{J_2}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{\lambda}} \left[S^z(\vec{r} + \vec{\delta}_0 + \vec{\lambda}) S^z(\vec{r} + \vec{\delta}_0) \right], \quad (3.1)$$

donde $S^z(\vec{r})$, $S^\pm(\vec{r})$ son los operadores de spin 1/2; los vectores \vec{r} describen los sitios de una de las dos subredes en que hemos supuesto se divide la red; $\vec{\delta}$ son vectores que conectan un sitio en una subred con sus primeros vecinos, que pertenecen a la otra subred; por último, $\vec{\lambda}$ es un conjunto de vectores que conecta un sitio con sus segundos vecinos.

Consideremos la siguiente función de prueba

$$|g(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \alpha')\rangle = R_y(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4) |g(\alpha')\rangle \quad (3.2)$$

donde el operador unitario

$$R_y(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4) = \prod_{\vec{R}} \exp \left[\frac{i}{2} \left(\theta_1 S_y(\vec{R} + \vec{\delta}_1) + \theta_2 S_y(\vec{R}) \right. \right. \\ \left. \left. + \theta_3 S_y(\vec{R} + \vec{\delta}_2) + \theta_4 S_y(\vec{R} + \vec{\delta}_1 + \vec{\delta}_2) \right) \right] \quad (3.3)$$

es simplemente una rotación en torno al eje y , con θ_i medido a partir del estado antiferromagnético a lo largo del eje z . Estos cuatro ángulos variacionales corresponden a las posibles rotaciones de cuatro spines en fila en la cadena lineal, o aquellos cuatro que formen una plaqueta con la que se pueda recubrir toda la red cuadrada sin yuxtaposiciones. El estado $|g(\alpha')\rangle$ corresponde a la solución de PNME para el estado fundamental

$$|g(\alpha')\rangle = \exp \left[-\frac{\alpha'}{(2zS-1)} \sum_{\vec{R}, \vec{\delta}} \left(S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) - S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) \right) \right] |\mathcal{N}\rangle. \quad (3.4)$$

En él, denotamos por $|\mathcal{N}\rangle$ al estado de Néel que asigna un spin "up" a la subred \vec{r} y un spin "down" a la subred $\vec{r} + \vec{\delta}$; α' es un parámetro variacional que indica el grado de

desorden a partir del estado de Néel; finalmente, S indica el valor del spin considerado, $1/2$ en este caso, y z al número de primeros vecinos.

Al tomar todos los ángulos un valor nulo, reobtenemos el estado fundamental de PNME. En cambio, al tomar $\theta_1 = \theta_4 = 0$, $\theta_2 = \theta_3 = \pi$ y $\alpha' = 0$, la solución tipo 22 o colineal es obtenida; esta solución es válida en el límite $J_2 \rightarrow \infty$ para nuestro modelo.

El funcional para la energía es simplemente el promedio del Hamiltoniano sobre nuestra función de onda:

$$F(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \alpha') = \langle g(\alpha') | R_y^\dagger(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4) \mathcal{H} R_y(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4) | g(\alpha') \rangle. \quad (3.5)$$

Ya que $R_y(\theta)$ es un operador unitario, se puede reinterpretar la expresión (3.5) como el valor esperado del operador $R_y^\dagger \mathcal{H} R_y$ sobre el estado $|g(\alpha')\rangle$. Para llevar a cabo esto, simplemente hay que sustituir en (3.1)

$$S^x \rightarrow \cos \theta S^x - \sin \theta S^z \quad (3.6)$$

$$S^y \rightarrow S^y \quad (3.7)$$

$$S^z \rightarrow \sin \theta S^x + \cos \theta S^z \quad (3.8)$$

y luego reemplazar la expresión así obtenida en (3.5), en lugar del operador $R_y^\dagger \mathcal{H} R_y$. Recordando que $S^x = (S^+ + S^-)/2$ y $S^y = (S^+ - S^-)/(2i)$, uno puede reescribir la expresión final como:

$$\begin{aligned} F(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \alpha')/NJ_1 = & \frac{z}{2} (\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \cos \theta_2 \cos \theta_3 + \cos \theta_3 \cos \theta_4 + \cos \theta_4 \cos \theta_1 \\ & + \alpha(\sin \theta_1 \sin \theta_2 + \sin \theta_2 \sin \theta_3 + \sin \theta_3 \sin \theta_4 + \sin \theta_4 \sin \theta_1)) H_I^{(1)} \\ & + \frac{z}{8} (\alpha + \alpha(\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \cos \theta_2 \cos \theta_3 + \cos \theta_3 \cos \theta_4 + \cos \theta_4 \cos \theta_1) \\ & + \sin \theta_1 \sin \theta_2 + \sin \theta_2 \sin \theta_3 + \sin \theta_3 \sin \theta_4 + \sin \theta_4 \sin \theta_1)) H_{xy}^{(1)} \\ & + \frac{z}{2} (\cos \theta_1 \cos \theta_3 + \cos \theta_2 \cos \theta_4 + \alpha(\sin \theta_1 \sin \theta_3 + \sin \theta_2 \sin \theta_4)) H_I^{(2)} \\ & + \frac{z}{8} (\alpha + \alpha(\cos \theta_1 \cos \theta_3 + \cos \theta_2 \cos \theta_4) + \sin \theta_1 \sin \theta_3 + \sin \theta_2 \sin \theta_4) H_{xy}^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Los coeficientes

$$H_I^{(1)} = \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R} + \vec{\delta}) S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \quad (3.10)$$

$$H_{xy}^{(1)} = 2 \langle g(\alpha') | S^+(\vec{R} + \vec{\delta}) S^-(\vec{R}) + S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\delta}) | g(\alpha') \rangle \quad (3.11)$$

$$H_I^{(2)} = \langle g(\alpha') | S^z(\vec{R} + \vec{\lambda}) S^z(\vec{R}) | g(\alpha') \rangle \quad (3.12)$$

$$H_{xy}^{(2)} = 2 \langle g(\alpha') | S^+(\vec{R} + \vec{\lambda}) S^-(\vec{R}) + S^+(\vec{R}) S^-(\vec{R} + \vec{\lambda}) | g(\alpha') \rangle \quad (3.13)$$

no dependen de los ángulos θ_i , sino solamente de α' . Ellos son conocidos exactamente en una dimensión:

$$H_I^{(1)} = -\frac{1}{4} [J_0^2(2\alpha') + J_1^2(2\alpha')] \quad H_{xy}^{(1)} = -J_1(2\alpha') \quad (3.14)$$

$$H_I^{(2)} = \frac{1}{4} [J_0^2(2\alpha') - J_2^2(2\alpha')] \quad H_{xy}^{(2)} = J_1^2(2\alpha') - J_0(2\alpha') J_2(2\alpha'), \quad (3.15)$$

donde $J_n(x)$ son las funciones de Bessel de orden entero, y solamente aproximadamente en dos dimensiones

$$H_I^{(1)} = -\frac{1}{4} \left[1 - \frac{\alpha'^2}{3} \right] \quad H_{xy}^{(1)} = -\frac{\alpha'}{3} \quad (3.16)$$

$$H_I^{(2)} = \frac{1}{4} [1 - 2\alpha'^2] \quad H_{xy}^{(2)} = \frac{\alpha'^2}{2}. \quad (3.17)$$

Nuestro problema se reduce ahora a minimizar nuestro funcional (3.9) con respecto a los cuatro ángulos θ_i , $1 \leq i \leq 4$, y al parámetro α' . A pesar de que el sistema de ecuaciones obtenidos permite obtener un gran número de soluciones diversas, solamente tres tipos aparecen como mínimos absolutos de la energía en el espacio de parámetros definidos por α y $J = J_2/J_1$. Ellas son

i *Solución Néel Generalizada*. Este tipo de solución viene determinada por $\theta_i = 0$, $1 \leq i \leq 4$, y $\alpha' < 1$. Su característica principal es que posee magnetización alternada en la dirección z , y corresponde a la solución obtenida directamente por PNME, y que es válida para $J \ll 1$, donde el antiferromagnetismo a primeros vecinos predomina.

ii *Solución Néel Transversal*, determinada por $\theta_i = \pi/2$ para $1 \leq i \leq 4$, esta solución surge como un compromiso intermedio entre el antiferromagnetismo a primeros vecinos y aquél a segundos vecinos. Corresponde a una magnetización alternada en la dirección z .

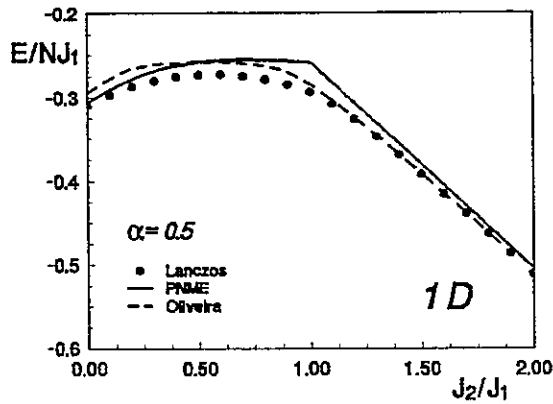


Figura 3.1: Energía por spin para $\alpha = 0.5$ en una dimensión en función de J_2/J_1 .

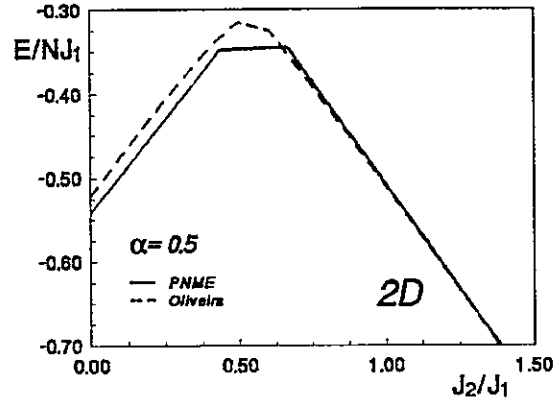


Figura 3.2: Energía por spin para $\alpha = 0.5$ en dimensión dos en función de J_2/J_1 .

iii *Solución Colineal o 2-2*. Solución natural cuando predomina el antiferromagnetismo a segundos vecino, $J \gg 1$, viene determinada por $\theta_1 = \theta_4 = 0$ y $\theta_2 = \theta_3 = \pi$.

3.1.2 Resultados

Las figuras 3.1, 3.2 y 3.3 muestran la energía por spin en función de J para algunos valores de α . Como se observa nuestra solución ajusta notablemente bien los resultados para la energía del estado fundamental, obtenidos numéricamente a través del método de Lanczos, superando a la solución generalizada de Oliveira. Los quiebres en la curva de la energía para PNME corresponden a cambios en el tipo de solución.

No es sorprendente que los resultados de PNME sean mejores en 2D, ya que en este caso, al contrario de 1D, se espera un estado ordenado para el estado fundamental y PNME presupone un estado ordenado de partida. Esta propiedad de nuestra solución nos permite definir una magnetización por cada una de las cuatro subredes definidas por los ángulos variacionales θ . En 2D las magnetizaciones m_1, m_2, m_3 y m_4 corresponden al spin superior

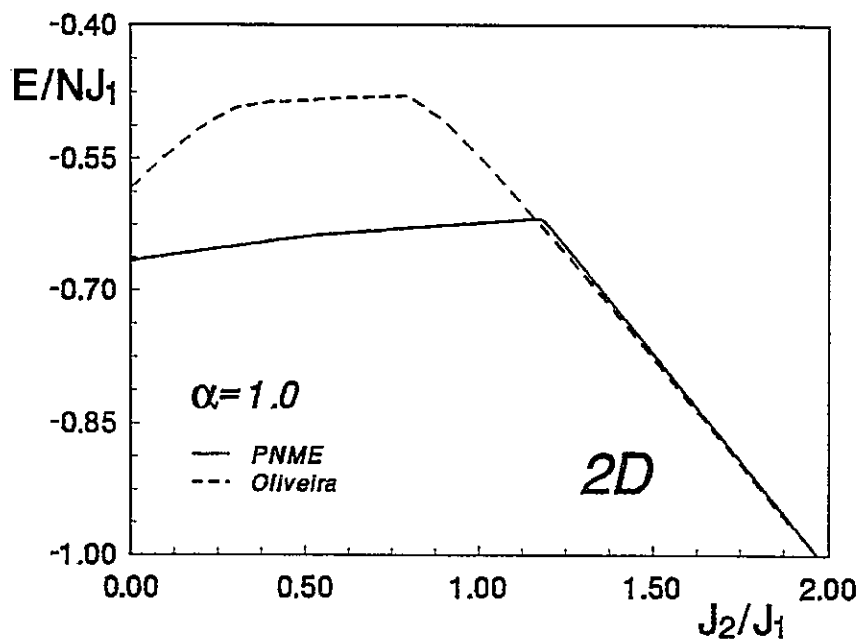


Figura 3.3: Energía por spin para $\alpha = 1.0$ en dimensión dos en función de J_2/J_1 .

izquierdo, superior derecho, inferior izquierdo e inferior derecho, respectivamente; para 1D, corresponden simplemente a 4 spines en línea. Estas magnetizaciones son directamente expresables en función de los parámetros variacionales envueltos:

$$m_i^z = \cos \theta_i \langle g(\alpha) | S_{R_i}^z | g(\alpha) \rangle \quad (3.18)$$

$$m_i^x = \sin \theta_i \langle g(\alpha) | S_{R_i}^x | g(\alpha) \rangle \quad (3.19)$$

con $1 \leq i \leq 4$.

El estado de Néel (N) puede caracterizarse por la propiedad $m_1^z = m_3^z = -m_2^z = -m_4^z$ y $m_i^x = 0, \forall i$. Similarmente, al cumplirse $m_1^z = m_2^z = -m_3^z = -m_4^z$ y $m_i^x = 0, \forall i$, recuperamos el estado colineal (C). El estado Néel transversal (NT) está representado por un estado con orden de largo alcance en la dirección transversal, luego, tenemos que se cumple $m_1^x = m_3^x = -m_2^x = -m_4^x$ y $m_i^z = 0, \forall i$. Lo anterior nos permite definir tres parámetros de orden que van a corresponder a los tres tipos de estados anterior caracterizados:

$$m_N = \frac{1}{4}(m_1^z - m_2^z + m_3^z - m_4^z) \quad (3.20)$$

$$m_C = \frac{1}{4}(m_1^z + m_2^z - m_3^z - m_4^z) \quad (3.21)$$

$$m_{NT} = \frac{1}{4}(m_1^x - m_2^x + m_3^x - m_4^x). \quad (3.22)$$

En la figura 3.4 graficamos los tres parámetros anteriormente definidos tomando $\alpha = 0.5$ en la cadena lineal. Como se observa, para J pequeño el sistema prefiere un estado tipo Néel a lo largo del eje z ; sin embargo, cuando J crece, el sistema adopta una configuración tipo Néel transversal para disminuir el aumento de energía en el término Ising a primeros vecinos. No obstante, si incrementamos aún más J , el sistema retoma su configuración inicial tipo Néel durante un intervalo antes de adquirir definitivamente una configuración tipo colineal, más conveniente en el límite J grande. En el mismo gráfico, se presenta los valores obtenidos a través del modelo de Oliveira para los parámetros de orden; claramente se observan tres regímenes diferentes: el estado de Néel en la dirección z , luego un estado paramagnético (magnetización nula) y finalmente, el estado Colineal.

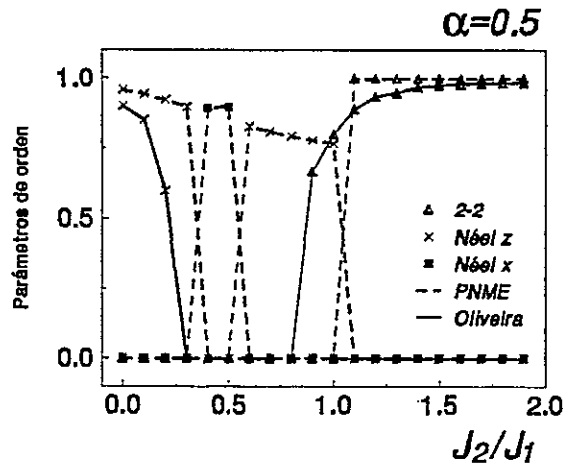


Figura 3.4: Parámetros de orden para el estado de Néel, Néel Transversal y Colineal, en función de J para $\alpha = 0.5$ en una cadena lineal.

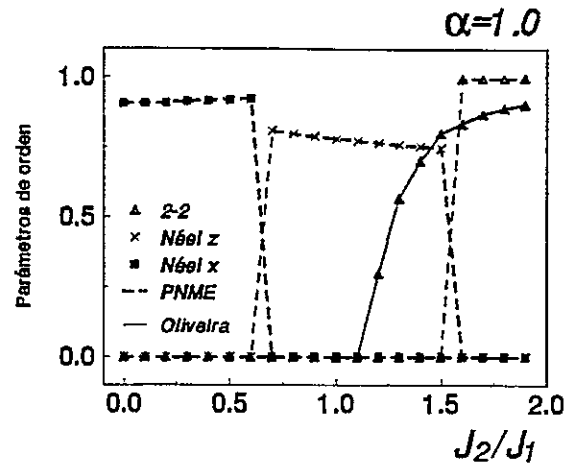


Figura 3.5: Parámetros de orden para el estado de Néel, Néel Transversal y Colineal, en función de J para $\alpha = 1.0$ en una cadena lineal.

Para la figura 3.5, α toma el valor 1.0. En este caso, el sistema adquiere ya desde $J = 0$ una configuración tipo Néel Transversal y sólo la transforma en un Néel para $J \approx 1$; nuevamente aparece el estado Colineal para J grande. Oliveira sólo muestra dos estados diferentes: el paramagnético para $J < 0.6$ y el colineal a partir de allí. Es posible que nuevas fases puedan obtenerse dentro del esquema de Oliveira si una plaqueta mayor es usada o si la restricción $S_z = 0$ es relajada.

Cabe destacar que nuestra solución variacional permite desordenar al sistema en la medida que α' sea lo suficientemente grande. A pesar de lo anterior, ninguna fase desordenada es obtenida como un mínimo absoluto de la energía; a lo más, se obtiene una pequeña reducción del momento magnético en la configuración Néel Transversal.

Por último, en las figuras 3.6 y 3.7 presentamos un diagrama de fase en función del parámetro de anisotropía α y la razón entre el acoplamiento a primeros y segundos vecinos J , para una y dos dimensiones. Ambos diagramas coinciden en que para α pequeño, sólo

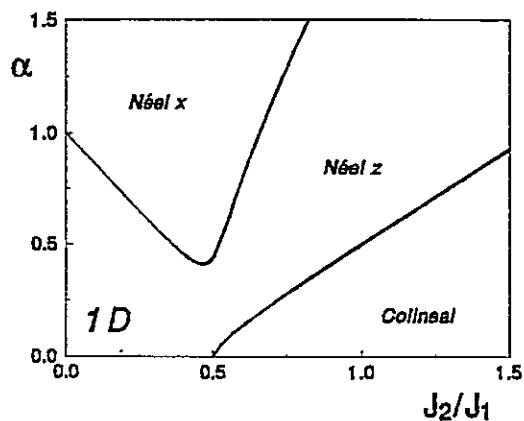


Figura 3.6: Diagrama de fase de las configuraciones del estado fundamental en función de α y $J = J_1/J_2$ en dimensión uno.

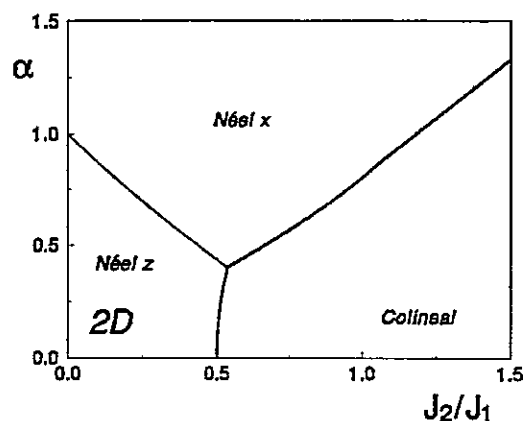


Figura 3.7: Diagrama de fase de las configuraciones del estado fundamental en función de α y $J = J_1/J_2$ en dimensión dos.

dos tipos de configuraciones son posibles: un estado tipo Néel y luego un estado tipo Colineal. A partir de un cierto valor de α , 0.40 en una dimensión y 0.41 en dos dimensiones, surge el tercer tipo de configuración: el Néel Transversal. A partir de este punto, para la cadena lineal los tres tipos están presente, aunque desde $\alpha = 1$ la configuración inicial en $J = 0$ es el estado de Néel Transversal. En dimensión dos, la configuración tipo Néel desaparece a partir de $\alpha = 1$.

3.2 Red Triangular

Una de las múltiples aplicaciones del modelo de Heisenberg a sistema bidimensionales corresponde al estudio de redes frustradas topológicamente [25,67,69,70]. Ellas poseen el atractivo de presentar para algunos de los valores de sus parámetros estados fundamentales cuánticamente desordenados, con interesantes propiedades como tener un valor muy alto

para su entropía, poseer nuevos tipos de orden o excitaciones con inusuales números cuánticos. Incluso es posible que a través de fluctuaciones cuánticas, en las fases ordenadas de estos magnetos, degeneraciones accidentales presentes en límite clásico sean removidas (“orden por el desorden”) [71]. Todo lo anterior hacen de estas redes un rico campo de investigación, que se ve aún más favorecida con las posibles realizaciones experimentales de algunas de ellas. Tal es el caso de la red de Kagomé, a la que recientemente se le atribuye a la configuración de la segunda capa de los átomos de He^3 sobre un substrato de grafito [72], con spin $S = 1/2$, y a las posiciones de los momentos del Cr, $S = 3/2$, en $\text{SrCr}_{8-x}\text{Ga}_{4+x}\text{O}_{19}$ [73].

En la red triangular, la frustración es introducida naturalmente a primeros vecinos a través de la topología de la red: no es posible satisfacer simultáneamente para cada sitio en la red que cada uno de sus primeros vecinos posea un spin antiparalelo con respecto al propio. No obstante, para resolver este sistema para spin $1/2$, se ha recurrido a diferentes técnicas aproximadas como funciones de onda variacionales, funciones tipo *resonance valence bond* (RVB) [66] o técnicas de expansión para N grande [67], obteniéndose un rango de valores para la energía del estado fundamental E_g que va desde su valor clásico, -0.125 , hasta un -0.1789 , que corresponde a la mejor cota variacional. Incluso, a través de la técnica de expansión para N grande, se obtuvo dos tipos distintos de estado fundamental: un estado fundamental con orden antiferromagnético de largo alcance para valores grandes del “spin”, y otro cuánticamente desordenado en el límite opuesto.¹ Es este orden antiferromagnético para S grande lo que permite aplicar PNME a este sistema, ya que una de sus hipótesis es exactamente ésta. Aquella que exige que el sistema sea bipartito, es la que vamos a extender en esta sección.

¹Cuando nos referimos al “spin” en esta técnica, hablamos del parámetro $\kappa = 2S/N$ que no posee una equivalencia directa con el spin real del sistema.

3.2.1 El modelo

El hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico sobre la red triangular puede escribirse como:

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{j, \{\vec{r}_j\}, \vec{\delta}} \left[S^+(\vec{r}_j) S^-(\vec{r}_j + \vec{\delta}) + S^+(\vec{r}_j + \vec{\delta}) S^-(\vec{r}_j) \right] + J\rho \sum_{j, \{\vec{r}_j\}, \vec{\delta}} S^z(\vec{r}_j) S^z(\vec{r}_j + \vec{\delta}), \quad (3.23)$$

donde S^x , S^y y S^z denotan las componentes del operador de spin \vec{S} asociado al lugar de la red que se indica en su argumento (en cada sitio se ha definido un sistema de coordenadas tal que el eje z es perpendicular al plano de la red). ρ es el parámetro de anisotropía que barre el límite XY , el caso isotrópico y el límite Ising en la medida que toma los valores 0, 1 e ∞ . El subíndice j denota cada una de las tres subredes que se han introducido para simplificar la notación y \vec{r}_j , a los sitios pertenecientes a la subred j . Cada subred se conectan solamente con otra única a través de tres vectores como se muestra en la figura 3.8. Así, la subred 1 se conecta solamente con la subred 2; la 2, con la 3 y la 3, con la 1. Por último, la distancia entre segundos vecinos es $\sqrt{3}$ veces la distancia entre primeros vecinos y cada primer vecino de un sitio en una subred pertenece a cualquiera de las otras dos subredes.

El estado fundamental clásico para la red triangular corresponde a una configuración en donde la red se haya dividida en las tres subredes anteriores, cada una de ellas con spines formando un ángulo de $2\pi/3$ con respecto a cualquier otro de las otras subredes. Si el spin S es suficientemente grande y/o la anisotropía ρ es baja, el estado fundamental cuántico no debería diferir en gran medida de aquél clásico, de manera que en ese límite considerar un estado fundamental que corresponda a su contraparte clásica, con pequeñas fluctuaciones, sería una buena aproximación. En especial, consideremos el siguiente estado:

$$|\mathcal{N}_\Delta\rangle = \prod_j \exp \left(i\theta_j \sum_{\{\vec{r}_j\}} S^z(\vec{r}_j) \right) | \dots \downarrow \downarrow \downarrow \dots \rangle, \quad (3.24)$$

donde $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = 2\pi/3$ y $\theta_3 = 4\pi/3$ son los ángulos en que se rota cada subred; $|\downarrow\rangle$ corresponde a un estado de spin cuantizado a lo largo del eje x y con valor $-S$. Este

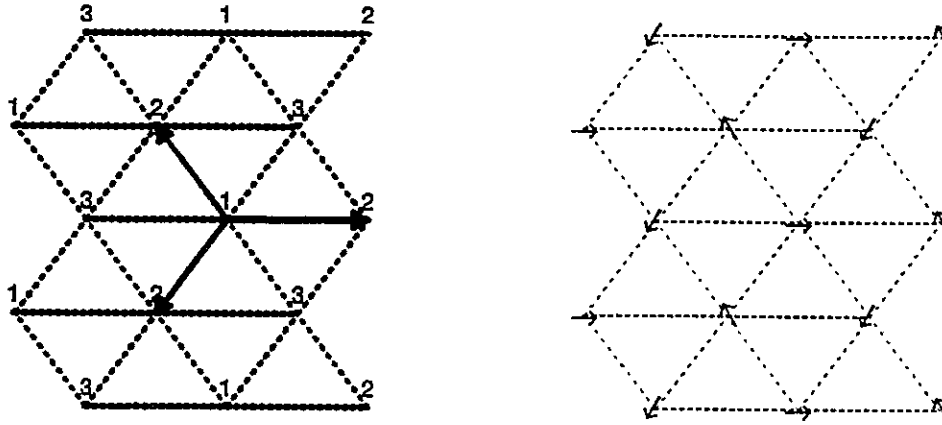


Figura 3.8: (a) Los vectores $\vec{\delta}$ son tres vectores que conectan un sitio en una subred con aquellos primeros vecinos pertenecientes a otra subred. (b) Ordenamiento de los spines para el “estado de Néel” $|\mathcal{N}_\Delta\rangle$ en la red triangular.

estado corresponde al estado fundamental de la red triangular para $S \rightarrow \infty$ y posee un eje de cuantización diferente para cada subred, cada uno formando un ángulo de $2\pi/3$ con respecto al eje de cuantización de cualquier otra subred.

Nos interesa extender el estado (3.24) a aquellas regiones del espacio de fase donde las fluctuaciones cuánticas son importantes. Para lograr esto, introducimos los siguientes $9N$ operadores:

$$\phi_{j\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) = \frac{\sqrt{3}}{2s\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}_j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \tilde{S}^+(\vec{r}_j + \vec{\delta}) \tilde{S}^+(\vec{r}_j) + Q \delta_{\vec{k},\vec{\delta}} \quad (3.25)$$

donde

$$Q = -\frac{S(2\rho + 1)}{2(12S - 1 + 2S(2\rho - 1))} \sqrt{\frac{N}{3}}; \quad (3.26)$$

además \vec{k} corresponde a un vector de la primera zona de Brillouin para una de las subredes. Acá los operadores $\tilde{S}^x, \tilde{S}^\pm$, corresponden a operadores actuando en las nuevas direcciones de cuantización definidas por (3.24) y están relacionados directamente con aquellos operadores iniciales S^x, S^\pm a través de una simple rotación; en particular, se tiene que

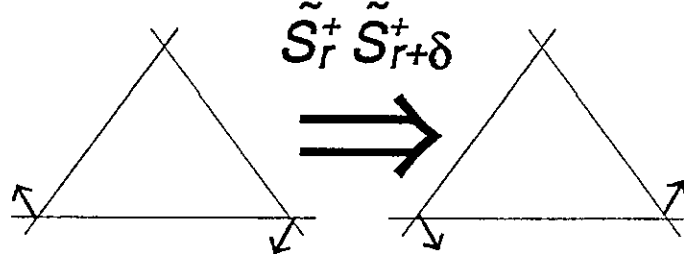


Figura 3.9: Representación gráfica de la acción de los operadores ϕ .

$\tilde{S}^x(\vec{r}_j)|\mathcal{N}_\Delta\rangle = -S|\mathcal{N}_\Delta\rangle$. Al igual que en el capítulo 2, estos operadores remueven el ordenamiento antiferromagnético tipo Néel intercambiando dos spines vecinos conectados por el vector $\vec{\delta}$ (ver figura 3.9), con la diferencia que en este caso hay tantos operadores como subredes junto con el hecho de que estas excitaciones aumentan el spin del estado al que se le aplica.

Nuevamente las relaciones de conmutación entre estos operadores no son exactamente bosónicas, pero si nos restringimos al espacio de los estados que difieren de (3.24) por pocas excitaciones (en el límite $\rho \ll 1$), tenemos que ellas se reducen a relaciones de conmutación bosónica:

$$[\phi_{i\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{j\vec{\delta}'}(\vec{k}')] = 0 \quad [\phi_{i\vec{\delta}}(\vec{k}), \phi_{j\vec{\delta}'}^\dagger(\vec{k}')] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\vec{\delta},\vec{\delta}'} \delta_{i,j} \quad (3.27)$$

En este límite, las relaciones de conmutación de estos operadores con nuestro Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico sobre esta red se simplifican notablemente, obteniéndose que el álgebra de nuestros operadores es cerrada:

$$[\mathcal{H}, \phi_{j\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k})] = \varepsilon_0 \phi_{j\vec{\delta}}^\dagger(\vec{k}) + \Delta \sum_{\vec{\delta}' \neq \vec{\delta}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} \phi_{j+1 \vec{\delta}'}^\dagger(\vec{k}) + \Delta \sum_{\vec{\delta}' \neq \vec{\delta}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} \phi_{j-1 \vec{\delta}'}^\dagger(\vec{k}) \quad (3.28)$$

donde

$$\varepsilon_0 = (12S - 1)\frac{J}{2} \quad \Delta = S\left(\rho - \frac{1}{2}\right)\frac{J}{2} \quad (3.29)$$

Luego, nuevamente hemos obtenido un conjunto de operadores ϕ que representan excitaciones bosónicas de nuestro modelo de Heisenberg.

3.2.2 Estado Fundamental y Excitaciones

No es difícil desacoplar el sistema anterior de 9 ecuaciones y con ello obtener los autovectores que diagonalizan nuestro hamiltoniano (3.23) y además el espectro de excitación:

$$\begin{aligned} \psi_{lm}^\dagger(\vec{k}) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{j=1}^3 e^{i2\pi(l-1)(j-1)/3} N_{l\vec{k}} \left[(z_{12l}z_{23l} - z_{13l}u_{lm})\phi_{j\delta_1}^\dagger(\vec{k}) \right. \\ &\quad \left. + (z_{21l}z_{13l} - z_{23l}u_{lm})\phi_{j\delta_2}^\dagger(\vec{k}) + (u_{lm}^2 - z_{12l}z_{21l})\phi_{j\delta_3}^\dagger(\vec{k}) \right] \end{aligned} \quad (3.30)$$

con

$$z_{lmn} = \exp\left(-i(\vec{k} \cdot \vec{\delta}_m + 2\pi l/3)\right) + \exp\left(i(\vec{k} \cdot \vec{\delta}_n + 2\pi l/3)\right) \quad (3.31)$$

$$u_{lm} = (\varepsilon_0 - \varepsilon_{lm})/\Delta \quad (3.32)$$

y $N_{l\vec{k}}$ una constante de normalización.

Estos nuevos operadores ψ obedecen una estadística bosónica y corresponden a las excitaciones elementales de nuestro Hamiltoniano en el límite de spines altamente correlacionados. Para cada valor de \vec{k} hay 9 operadores definidos por (3.30) en la medida que los índices l y m toman los valores 1, 2 y 3. El espectro de excitaciones viene dado por:

$$\varepsilon_{11}(\vec{k}) = \varepsilon_0 + \Delta \left(1 + \sqrt{3 + 2\Gamma_l(\vec{k})}\right) \quad (3.33)$$

$$\varepsilon_{12}(\vec{k}) = \varepsilon_0 + \Delta \left(1 - \sqrt{3 + 2\Gamma_l(\vec{k})}\right) \quad (3.34)$$

$$\varepsilon_{13}(\vec{k}) = \varepsilon_0 - 2\Delta \quad (3.35)$$

donde

$$\Gamma_l(\vec{k}) = \sum_{j=1}^3 \cos\left(\vec{k} \cdot \vec{\delta} + \frac{2\pi}{3}(l-1)\right) \quad (3.36)$$

Sin embargo, el cambio de variable (3.30) es válido mientras ninguno de los autovalores sea degenerado. Si se obtiene $\Gamma_{l_0}(\vec{k}_0) = 3$ para algún l_0 y \vec{k}_0 , el sistema se degenera y hay que considerar un nuevo cambio de base; en este caso las energías de excitación se reducen solamente a tres para todo el espectro de excitación: $\varepsilon_0 + 4\delta$, no degenerada, y $\varepsilon_0 \pm \delta$ y $\varepsilon_0 - 2\delta$ con degeneración 4 cada una. Los vectores dentro de la primera zona de Brillouin para lo cuales se cumple la condición anterior son $\vec{k}_0 = (0, 0)$, y aquellos vectores recíprocos de la subred como se puede apreciar en la figura 3.10. Esto es, para $l_0 \neq 1$ se obtiene que la mínima energía de excitación corresponde a los vectores en los vértices de la primera zona de Brillouin para una subred y tiene un valor de $\varepsilon_0 - 2\Delta$.

Una elección cómoda para el cambio de base cuando el sistema deviene degenerado corresponde a tomar los siguientes operadores:

$$\psi_{lm}^\dagger(\vec{k}_0) = \frac{1}{3} \sum_{r,s=1}^3 e^{i\frac{2\pi}{3}(l-l_0)(r-1)} e^{i\frac{2\pi}{3}(m-1)(s-1)} \phi_{r\delta_s}^\dagger(\vec{k}_0), \quad (3.37)$$

donde l_0 es el valor para el cual se obtiene $\Gamma_{l_0}(\vec{k}_0) = 3$; las energías de excitación para esta base son:

$$\varepsilon_{lm}(\vec{k}) = \varepsilon_0 + 4\Delta \cos\left(\frac{2\pi}{3}(l-l_0)\right) \cos\left(\frac{2\pi}{3}(m-1)\right). \quad (3.38)$$

A partir de lo anterior, hemos logrado encontrar todos los operadores independientes que diagonalizan nuestro hamiltoniano inicial (3.23) junto con sus respectivas energías de excitación. Sin pérdida de generalidad podemos escribirlo como:

$$\mathcal{H} = \sum_{k,l,m} \varepsilon_{lm}(\vec{k}) \psi_{lm}^\dagger(\vec{k}) \psi_{lm}(\vec{k}) + E_g. \quad (3.39)$$

Para encontrar el estado fundamental y su energía, procedemos en forma similar a aquella presentada en el segundo capítulo. Por construcción los operadores ϕ poseen al estado $|\mathcal{N}_\Delta\rangle$ como autoestado:

$$\phi_{r\delta_s}(\vec{k}) |\mathcal{N}_\Delta\rangle = Q\delta_{\vec{k}_0, \vec{k}} |\mathcal{N}_\Delta\rangle \quad (3.40)$$

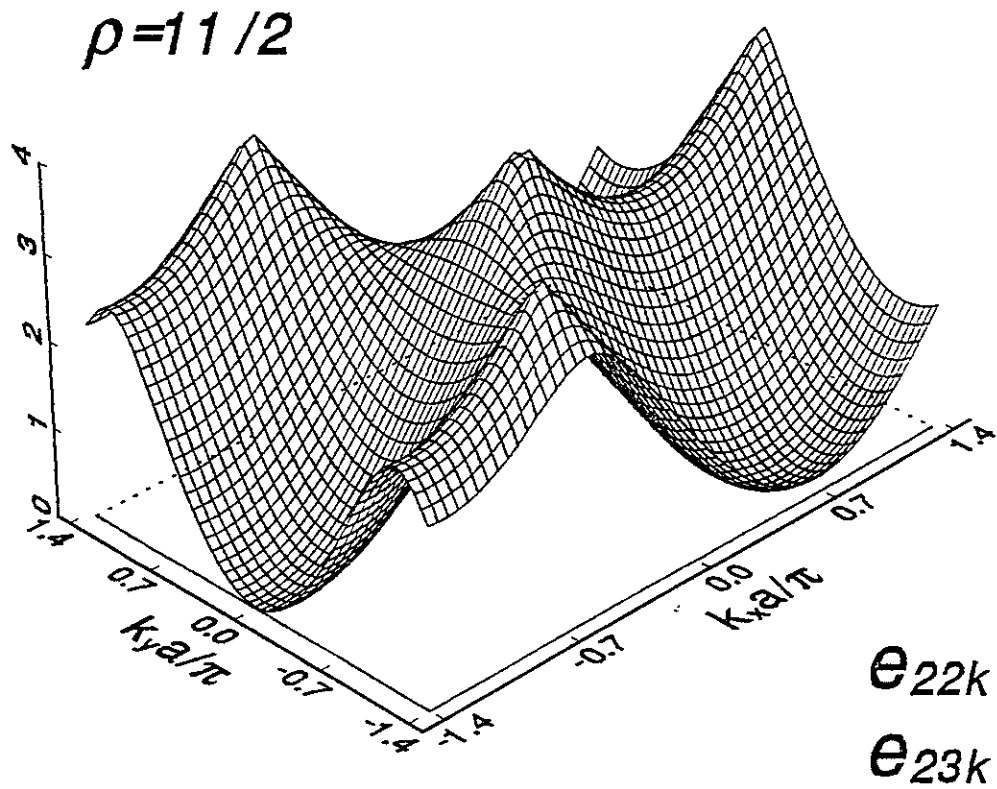


Figura 3.10: Gráfico donde se muestra la energía de excitación $\epsilon_{22}(\vec{k})$ y aquella constante $\epsilon_{23}(\vec{k})$ para el valor de la anisotropía $\rho = 11/2$, que corresponde al valor crítico. Observemos que la rama que posee dispersión se anula exactamente en los vectores recíprocos de la red, simultáneamente con la rama no dispersiva.

y por lo tanto nuestros nuevos operadores ψ deben tenerlo como autoestado o simplemente aniquilarlo. En efecto, al aplicar los operadores ψ al estado $|\mathcal{N}_\Delta\rangle$, se obtiene:

$$\psi_{lm}(\vec{k}) |\mathcal{N}_\Delta\rangle = 3Q \delta_{l1} \delta_{m1} \delta_{\vec{k}0}, |\mathcal{N}_\Delta\rangle. \quad (3.41)$$

Para obtener la energía del estado fundamental E_g promediamos el hamiltoniano (3.39) sobre el estado $|\mathcal{N}_\Delta\rangle$. La energía del estado $|\mathcal{N}_\Delta\rangle$ es directamente calculable, mientras que al lado derecho de (3.39) le aplicamos la propiedad (3.40). Al despejar la energía del estado fundamental, se obtiene:

$$\frac{E_g}{3NJ} = -\frac{S^2}{2} - \frac{S^2(2\rho + 1)^2}{8(12S - 1 + 2S(2\rho - 1))}. \quad (3.42)$$

Satisfactoriamente, en el límite $S \rightarrow \infty$ se obtiene el resultado clásico. Su valor para el caso $S = 1/2$ y $\rho = 1$ (red triangular isotrópica) es -0.172 , que difiere en un 6% solamente del valor -0.183 ± 0.003 obtenido numéricamente a través de diagonalización de pequeños cúmulos [74,75]. En la tabla 3.1 se indica los valores para la energía del estado fundamental obtenidas a través de diferentes métodos, comparadas con aquel valor obtenido por nosotros.

Para obtener el estado fundamental, aplicamos directamente la propiedad bosónica de nuestros operadores y la propiedad (3.41), al igual que en el capítulo 2:

$$|g\rangle = \exp \left[3Q \left(\psi_{11}^\dagger(0) - \psi_{11}(0) \right) \right] |\mathcal{N}_\Delta\rangle \quad (3.43)$$

3.2.3 Transición de fase

Uno de los aspectos más interesante de la red triangular corresponde a la existencia para algunos valores de sus parámetros de un estado fundamental desordenado. Una forma de caracterizarla es a través de la magnetización por subred, que se anula una vez que el estado se vuelve desordenado. Sin embargo una forma alternativa de obtener un diagrama de fase para la transición es a través de la excitaciones que obtuvimos; cuando la menor energía de excitación se anula para algún vector de onda, es posible crear esas excitaciones

Método	$E_g/3NJ$
Clásico	-0.125
RVB[66]	-0.158 ± 0.005
Función variacional [25] de un parámetro	-0.169
Función variacional [25] de dos parámetros	-0.176
Función variacional [25] de dos parámetros	-0.179
PNME	-0.172
Valor exacto [74]	-0.183 ± 0.003

Tabla 3.1: Valores para la energía de la red triangular isotrópica obtenidos a través de diferentes métodos.

sobre el estado fundamental sin con ello cambiar su energía [67,76-78] y por lo tanto el estado fundamental se transforma en un estado infinitamente degenerado. Como se puede observar de la ecuación (3.35), la rama de energía menor no es dispersiva, por lo que cualquier momento \vec{k} va a poseer energía de excitación nula, al igual como obtuvieron métodos semiclásicos de expansión [76,77]. Sin embargo, como se puede observar de la figura 3.10, la primera y segunda rama de las energías de excitación pueden anularse también, aunque sólo para vectores de onda específicos: $4\pi/3(\pm 1, 0)$, $4\pi/3(\pm 1/2, \pm\sqrt{3}/2)$ y $(0, 0)$. Ellas se anulan para los mismos valores de los parámetros en que se anula la rama de menor energía. En contraste, para la cadena lineal con interacción a primeros y segundos vecinos, PNME obtiene que todas las ramas son dispersivas y que el surgimiento de un estado desordenado ocurre para vectores de onda específicos: $(0, 0)$ y los vectores de la red recíproca [44].

Si exigimos que el menor valor de nuestras excitaciones se anule, obtenemos la siguiente ecuación que relaciona a el spin S con nuestro parámetro de anisotropía ρ :

$$(13 - 2\rho)S - 1 = 0. \quad (3.44)$$

Esta expresión da un valor crítico para $S = 1/2$ de $\rho_c = 11/2$. Para valores de la anisotropía menores que ρ_c , un estado ordenado prevalece, mientras que uno desordenado se obtiene en el límite contrario. Luego, no es sorprendente la precisión de el método PNME para el caso isotrópico ($\rho = 1$). Sin embargo, como esta es una teoría aproximada es posible que los vectores recíprocos de una subred, que también disminuyen las energías de excitación al mismo valor anterior, sean privilegiados al considerar una expansión a ordenes superiores [67].

Finalmente, usando la expresión (3.43) para la función de onda del estado fundamental, la magnetización de subred puede calcularse como una expansión en serie de potencias:

$$\langle g | S^x(\vec{r}_j) | g \rangle = -S(1 - 24S\alpha^2 + 8(S + 36S^2 - 144S^3)\alpha^4 + \dots) \quad (3.45)$$

donde

$$\alpha = -\frac{2\rho + 1}{4(2S(2\rho + 5) - 1)}. \quad (3.46)$$

Para spin $1/2$ y $\rho = \rho_c$ la magnetización se reduce a un 41% de su valor de saturación, despreciando órdenes superiores a α^4 . Para este caso, $\alpha = 1/5$ lo que permite el uso de la serie de potencias. Luego, nuestra solución aproximada da una transición de primer orden desde un estado ordenado a uno desordenado en función del parámetro ρ . En el caso isotrópico, la magnetización de subred es alrededor de un 80% de su valor máximo, coincidiendo con el resultado obtenido por Miyashita (85%) [78].

Capítulo 4

Modelo t-J

La mayoría de los materiales que se transforman en superconductores al doparlos [8], poseen inicialmente una fase aisladora con correlaciones antiferromagnéticas. Esta fase puede ser descrita muy bien por el modelo de Heisenberg para spin $1/2$, donde las fluctuaciones cuánticas juegan un rol predominante al reducir notablemente el momento magnético de subred. Si embargo, cuando al sistema se le dopa, sufre una transición de fase desde este estado aislador a un estado conductor, con nuevas propiedades magnéticas. Es esta transición la que vamos a estudiar en este capítulo, aplicando al sistema el modelo t-J [9], modelo que describe estos estados con correlaciones fuertes y pequeñas desviaciones con respecto a una banda semillena.

En el modelo t-J, la doble ocupación está prohibida, suponiendo una gran repulsión intrasitio. De esta manera, los portadores se mueven altamente correlacionados sobre un fondo antiferromagnético afectando el orden magnético. Esta distorsión ha sido analizada utilizando métodos semiclásicos [79], encontrando que un campo dipolar de largo alcance se acopla a la magnetización alternada, inducido por las vacancias en la banda. Sin embargo, aún queda por resolver si frente a este campo se localizan preservando el ordenamiento antiferromagnético, o simplemente crearán estados de Bloch desordenando los spines.

Como pequeñas concentraciones de huecos pueden destruir el antiferromagnetismo, llevando el sistema eventualmente a la superconductividad, es importante considerar un método que permita obtener fácilmente diferentes fases y que permita correlacionarlas directamente con el ancho de banda de los portadores. En los capítulos anteriores hemos mostrado cómo PNME puede desarrollar diferentes fases a través de su versión variacional, con lo que su aplicación a este modelo sería casi inmediata. Sin embargo, para mejorar aún más los resultados, en este capítulo introduciremos otra versión de función de onda variacional, inspirada en PNME [51].

4.1 Operadores Correlacionados

Al igual que en [80], desacoplaremos los grados de libertad asociados a la carga y al spin, pero generalizado para obtener diferentes fases magnéticas. En este punto se introduce dos subredes magnéticas, donde la dirección del eje de cuantización de los spines es arbitraria para cada una. Luego, dependiendo de la dirección de cuantización obtenida a través de dos ángulos variacionales, al igual que en la sección 2.2, podemos obtener un ordenamiento antiferromagnético tipo Néel, configuraciones ferromagnéticas en una dirección arbitraria, fases spin-flip o simplemente paramagnéticas. En relación a cada uno de esos estados, se definen variables asociadas a huecos sin spin (*holones*) y operadores de inversión de spin (*espinones*) en cada subred.

El Hamiltoniano que vamos a estudiar en la cadena lineal, corresponde a:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\tilde{C}_{i,\sigma}^\dagger \tilde{C}_{j,\sigma} + h.c.) + J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{\alpha}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] \quad (4.1)$$

donde i, j corresponden representan los sitios de la cadena que son primeros vecinos entre si; σ indica la componente del spin asociada; los S^\pm, S^z son operadores espinoriales y, $\tilde{C}_{i,\sigma}^\dagger$ y $\tilde{C}_{i,\sigma}$ son operadores fermiónicos correlacionados:

$$\tilde{C}_{i,\sigma} = C_{i,\sigma} (1 - n_{i,-\sigma}). \quad (4.2)$$

que impiden la doble ocupación por sitio.

4.2 Desacoplamiento de los grados de libertad

Como nos interesa describir nuevas fases magnéticas en nuestro sistema, introducimos unos nuevos operadores $C_{i\pm}$ que permiten crear o destruir electrones con el spin cuantizado en una dirección arbitraria. Esto lo logramos a través de rotaciones locales de los operadores alrededor de la dirección de la cadena:

$$\begin{aligned} C_{i+} &= C_{\uparrow} \cos \frac{\theta_i}{2} + C_{\downarrow} \sin \frac{\theta_i}{2}, \\ C_{i-} &= -C_{\uparrow} \sin \frac{\theta_i}{2} + C_{\downarrow} \cos \frac{\theta_i}{2}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

donde $i = 1, 2$ etiqueta la subred. Los ángulos θ_1 y θ_2 se miden a partir del estado de Néel a lo largo del eje z , perpendicular al eje de la cadena. Nuestro estado fundamental $|G\rangle$ siempre va estar configurado de manera que solamente haya ocupación simple de estados, con estados espinoriales $(+, \theta_1)$ en la subred 1 y $(-, \theta_2)$, en la subred 2, independientemente de la fase adquirida. Esto permite definir los operadores de huecos h_i^\dagger , carentes de spin, como los operadores C_{1+} para la subred 1 y C_{2-} para la subred 2. Similarmente, los operadores de inversión de spin b_i , los definimos como $C_{1+}^\dagger(i)C_{1-}(i)$ para la subred 1 y $C_{2-}^\dagger(i)C_{2+}(i)$ para la otra subred. Estos operadores se construyeron de tal forma que aniquilarán al estado fundamental.

Reemplazando estos operadores en el término de *hopping* de nuestro Hamiltoniano, obtenemos:

$$\mathcal{H}_t = -2t \cos \Delta\theta \sum_{\langle ij \rangle} h_i^\dagger (b_i + b_j^\dagger) h_j - 2t \sin \Delta\theta \sum_{\langle ij \rangle} h_i^\dagger h_j, \quad (4.4)$$

donde se han despreciado términos de orden superior a aquellos bilineales en los b 's. Acá $\Delta = (\theta_1 - \theta_2)/2$. Similarmente, la parte del Hamiltoniano relacionada con los spines se reduce a:

$$\mathcal{H}_J = J \sum_{\langle ij \rangle} (1 - h_i^\dagger h_i) \left[S_i^z S_j^z + \frac{\alpha}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] (1 - h_j^\dagger h_j), \quad (4.5)$$

con desacoplamiento sencillo de los spines y los huecos. Cabe destacar que al considerar ambos grados de libertad independientes entre sí, nuestro espacio de Hilbert asociado al

nuevo Hamiltoniano es mayor que aquél que inicialmente los describía. Para salvar esta dificultad hay que introducir una ligadura que impida a un hueco y a un spin ocupar el mismo sitio de la cadena; ante la dificultad de introducir un multiplicador de Lagrange para imponer esta condición, nosotros sencillamente reducimos la constante de intercambio J en un factor $(1 - \delta)^2$, como se desprende naturalmente de (4.5), así como también reducimos la magnetización de subred $M_z(\alpha)$ en un factor $(1 - \delta)$, donde δ es la densidad promedio de los huecos.

Como consecuencia del desacoplamiento entre spines y huecos, la función de onda para el estado fundamental puede factorizarse como en dos: un factor que describe a los huecos y el otro, a lo spines. Esto simplifica notablemente el cálculo, en especial de los promedios, donde cada operador actúa sólo en aquél factor de la función de onda que le corresponde, y por lo tanto podemos considerar un estado fundamental para cada grado de libertad, cuyos parámetros dependen en forma autoconsistentes de los promedios de algunos operadores sobre el otro grado de libertad. Luego, escribimos

$$|G\rangle = |f\rangle \otimes |g\rangle \quad (4.6)$$

donde $|f\rangle$ corresponde a la función de onda para los huecos y $|g\rangle$ a la de los spines.

4.3 Función de onda para los huecos

Por ejemplo, luego de promediar todas las variables espinoriales, el Hamiltoniano obtenido para los huecos es simplemente un modelo *tigh-binding*, en que el centro de la banda y su ancho dependen directamente de los promedios magnéticos. Así, los huecos se localizan cuando el ancho de banda es cero, hecho que ocurre cuando el sistema de spines se ordena antiferromagnéticamente. Por otro lado, aparte de esta transición metal-aislador que acabamos de describir, podemos incluso obtener un cambio en la naturaleza de los portadores, lo que ocurre cuando el signo de la constante de *hopping* efectiva. De esta

manera, escribimos para la función de onda de los huecos a:

$$|f\rangle = \prod_{k < k_f} h_k^\dagger |0\rangle \quad (4.7)$$

donde $k_f = \pi\delta$ es el vector de onda para el nivel de fermi.

Los promedios que son relevantes para la contraparte espinorial son:

$$\langle h_i^\dagger h_i \rangle = \delta, \quad \langle h_{i+1}^\dagger h_i \rangle = \tau, \quad (4.8)$$

donde δ es la concentración de huecos y τ , la carga transferida. En base al modelo de *tigh-binding*, podemos escribir directamente la carga transferida en función de la densidad de huecos:

$$\tau = \frac{\sin(\pi\delta)}{\pi} \quad (4.9)$$

que posee un máximo en $\delta = 0.5$. Sin embargo, estamos restringidos a valores pequeños de δ , pues hemos despreciado las interacciones entre huecos.

4.4 Función de onda para los spines

Para obtener una función de onda para los spines, recurrimos a aquella que desarrollamos en la primera sección del capítulo 2, para tratar el modelo de Heisenberg con campo externo [47]. En el espíritu de esa sección escribimos

$$|g(\theta_1, \theta_2, \alpha)\rangle = \mathcal{R}_y(\theta_1, \theta_2) |g(\alpha)\rangle, \quad (4.10)$$

donde \mathcal{R}_y representa una rotación en θ_i en torno al eje y , y $|g(\alpha')\rangle$ corresponde a la solución exacta de Bethe para el modelo de Heisenberg con anisotropía α . Se ha reemplazado la función de onda propuesta por PNME por aquella exacta para mejorar los resultados obtenidos como aquella. Esto es posible gracias a que en general los promedios de cualquier operador \mathcal{O} bajo la función de onda $|g(\alpha, \{\theta_\tau\})\rangle$, ecuación (2.8), se podía interpretar como el promedio del operador transformado $\mathcal{O}' = \mathcal{R}_y^\dagger \mathcal{O} \mathcal{R}_y$ sobre la función de onda $|g(\alpha)\rangle$. De esta manera, el funcional para la energía quedaba directamente expresado como una

combinación lineal de promedios de diversos operadores sobre $|g\rangle$, función solamente de α , cuyos coeficientes son funciones solamente de los ángulos. Luego no es necesario conocer exactamente la dependencia de la función de onda sobre el parámetro α , sino solamente algunos promedios. De esta manera, al considerar la solución exacta, obtenemos la ventaja que ante la ausencia de dopaje, recuperamos exactamente los resultados del Hamiltoniano de Heisenberg.

Al promediar sobre nuestra función de onda para los huecos, obtenemos que el Hamiltoniano efectivo así obtenido corresponde a un Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico bajo la acción de un campo magnético transversal, cuya intensidad depende de la densidad de huecos, sobre el que hay que aplicar nuestra función de onda variacional y obtener θ_1 , θ_2 en función de la densidad de huecos δ y la anisotropía α . El efecto neto de introducir dopaje con hueco es doble:

- i El orden antiferromagnético es perturbado y otro orden magnético puede aparecer. Esto se logra describir a través de los ángulos variacionales θ_1 y θ_2 .
- ii El momento magnético decrece por la presencia de los huecos. Esto se toma en cuenta a través del reemplazo:

$$M_z(\alpha) \longrightarrow (1 - \delta)M_z(\alpha), \quad (4.11)$$

donde $M_z(\alpha)$ es la magnetización de subred exacta obtenida por Baxter [81] para el modelo de Heisenberg anisotrópico en ausencia de un campo externa. El parámetro α introduce además una disminución del momento de subred por fluctuaciones cuánticas.

Una vez resuelto el Hamiltoniano efectivo para los spines, los valores obtenidos para los parámetros variacionales permiten calcular las propiedades de los huecos. En efecto, el ancho de banda para los huecos depende directamente del ordenamiento magnético presente:

$$W = 2t [\sin \Delta\theta - M_z(\alpha)(1 - \delta) \cos \Delta\theta (\sin 2\theta_1 - \sin 2\theta_2)] . \quad (4.12)$$

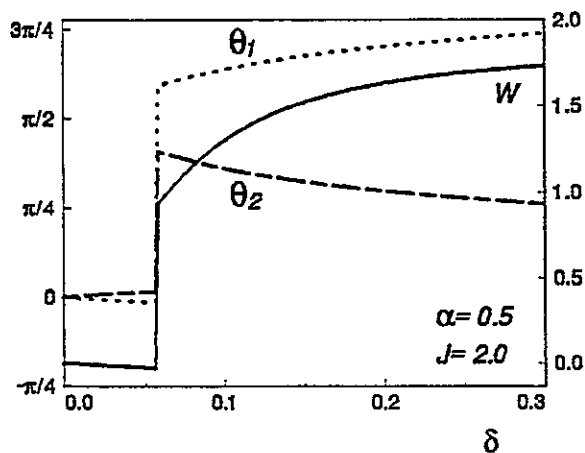


Figura 4.1: ángulos θ_1 y θ_2 (escala de la izquierda), junto con el ancho de banda efectivo W (escala de la derecha, en función de la densidad de huecos δ para $\alpha = 0.25$ y $J = 2.0$. Una transición discontinua tiene lugar en $\delta = 0.0580$, con el consiguiente cambio de signo en W .

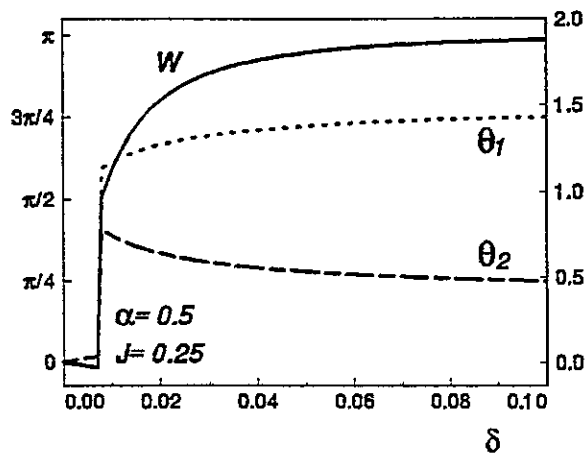


Figura 4.2: Al disminuir J a 0.25, el punto de la transición discontinua decrece. Al igual que en el caso anterior, esta discontinuidad ocurre al cambiar de un régimen de baja movilidad, ancho de banda pequeño, a uno de alta, i.e., ancho de banda grande.

Cambio de signo en W indica un cambio en la naturaleza de los portadores,¹ donde $\Delta = (\theta_1 - \theta_2)/2$.

4.5 Resultados y conclusiones

Para ilustrar los resultados obtenidos, en las figuras 4.1 a 4.4 se muestra el ancho de banda efectivo W , en unidades de t , para mostrar las propiedades conductoras del sistema y los ángulos variacionales θ_1 y θ_2 , que muestran las propiedades magnéticas del sistema.

¹Para observar el efecto del signo a través del efecto Hall, es necesario por lo menos considerar dos dimensiones.

Como se desprende de la figuras, el antiferromagnetismo es inestable ante dopaje y la propagación de los huecos produce una transición, suave o abrupta dependiendo de α , hacia un estado ferromagnético. Para bajos valores de δ , el sistema posee un ordenamiento antiferromagnético que va perdiendo al generar una pequeña componente magnética en la dirección transversal. De allí sufre una transición discontinua a otro estado *spin-flip*, o directamente a un estado ferromagnético, dependiendo de α .

Para el ancho de banda, la transición puede aparecer cuasi-continua si el momento de subred es pequeño. Un cambio de signo en W es visible en las figuras 4.1 y 4.2. Esto implica un cambio en la naturaleza de los portadores inducido por cambio en las correlaciones magnéticas del sistema, con una masa efectiva dependiendo fuertemente del fondo magnético. Se ha observado experimentalmente un cambio en la constante Hall en los cerámicos superconductores [82], que ha sido atribuido a un intercambio desde un comportamiento descrito por el modelo de Mott-Hubbard a uno llamado de líquidos de Fermi. El ancho de banda es máximo cuando el momento magnético es lo suficientemente pequeño como para permitir la existencia de correlaciones ferromagnéticas.

La figura 4.4 requiere una especial atención. Ella corresponde al caso límite $\alpha = 1$, donde el momento de subred se anula, por lo que las correlaciones ferromagnéticas son de corto alcance. Esta situación gatilla una transición discontinua desde un estado antiferromagnético a uno ferromagnético, junto con una transición metal-aislador. Esto contrasta con el resultado exacto, que no predice transición alguna [83].² Esto se debe al hecho de que para $\alpha = 1$ no existe un estado intermedio entre ambas configuraciones, como lo sería un estado *spin-flop*, lo que lleva inmediatamente a pensar que posiblemente incluir estructuras más complejas para el spin (ordenamientos espirales) suavizaría la transición.

Los diagramas de fase para el caso unidimensional [84], extrapolados de cálculos sobre sistemas finitos, muestran separaciones de fase para valores alto de J y estados ligados de dos partículas para valores intermedios. Estas fases no surgen de nuestro modelo, ya

²El punto $\alpha = 1$ y $J = 2t$ se conoce como el punto supersimétrico, y es el único punto que posee solución exacta.

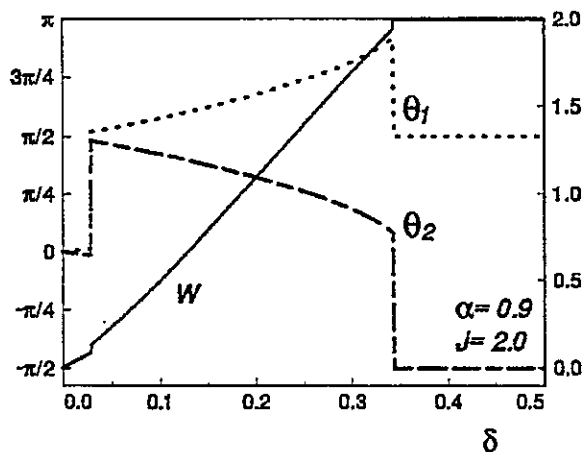


Figura 4.3: Al aumentar α , el valor inicial decrece rápidamente, dando origen a otros tipos de transiciones. En este caso, su valor inicial es sólo de un 6.6% de su valor saturación, dando origen a una transición cuasi-continua desde un aislador aun metal, en despecho de los cambios discontinuos en los ángulos.

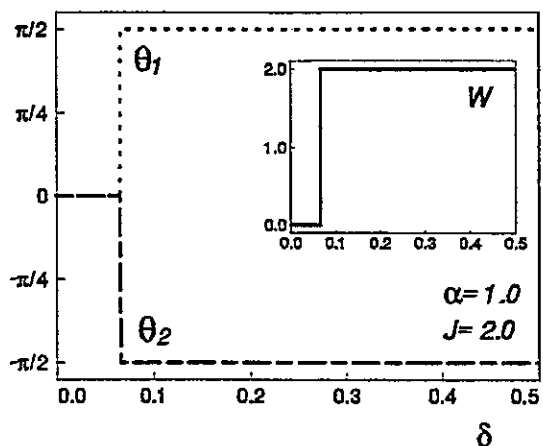


Figura 4.4: El punto $J = 2.0$ y $\alpha = 1.0$ es un punto de gran interés para el modelo t-J. Conocido como punto supersimétrico, el modelo posee solución exacta en él. El valor de la magnetización de subred inicial es cero, dando origen a una transición abrupta de un sistema antiferro a uno ferromagnético para el valor $\delta = 0.0650$.

que hemos despreciado la interacción hueco-hueco y tratamos a los holones mediante un campo medio, aunque trabajo en esa dirección está en desarrollo. Como se desprende de 4.5, la interacción entre huecos puede ser atractiva si el ordenamiento es del tipo antiferromagnético. Sin embargo, un fuerte ordenamiento antiferromagnético lleva a la localización de los spines, con el consiguiente división de fase. Luego, nuestros estado spin-flip son un buen candidato para dirigir una transición a un estado superconductor. Mediciones de *scattering* de neutrones sobre muestras de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, con dopaje en el rango en que son superconductores, muestra los sorprendentes resultados de que los momentos magnéticos asociados a los iones Cu^{2+} vecinos no son exactamente paralelos, sino forman un ángulo $\approx 150^\circ - 160^\circ$ [18,85], mostrando un doble pico en la función de *scattering* de Van Hove.

Estructuras más complejas para los spines está más allá del propósito de este trabajo, sin embargo las fases espirales encontradas a través de métodos semiclásicos [79,86] pueden identificarse sin lugar a dudas, con nuestra fase spin-flop si consideramos las correlaciones de corto alcance solamente, caso en que varias situaciones pueden ser energéticamente equivalentes.

Técnicas de rotación de spines de muones se han utilizado para medir localmente el comportamiento de los antiferromagnetos dopados [87]. En ellas se encontró que el momento magnético no cambia notablemente, pero si se disminuye drásticamente la temperatura de Néel. Esto sugiere que el mecanismo que desencadena la desaparición del antiferromagnetismo actúa principalmente reduciendo la constante de intercambio entre spines, y no disminuyendo su momento magnético. En este trabajo, mostramos que el desplazamiento de los huecos tiene un efecto dinámico sobre el ordenamiento de los spines.

En conclusión, nuestro simple tratamiento del modelo t-J permite una descripción unificada de la carga y el spin, mostrando que muchas de las propiedades inusuales del estado normal de los superconductores puede ser entendida a través de correlaciones magnéticas. Una forma directa de ilustrar estas propiedades se manifiesta útil y directamente a través de los valores que θ_1 y θ_2 adquieren. Esta forma directa de reconocer las diferentes fases

algunas veces está ausente en las soluciones analíticas exactas.

Bibliografía

- [1] J.G. Bednorz y K.A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 188 (1986).
- [2] C.W. Chu, P.H. Hor, R.L. Meng, L. Gao, Z.J. Huang y Y.Q. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 405 (1987).
- [3] H. Maeda, Y. Tanaka, M. Fukutomi y T. Asano, *Jpn. J. Appl. Phys.* **27**, 574 (1988).
- [4] Z.Z. Sheng y A.M. Herman, *Nature (London)* **332**, 138 (1988).
- [5] J. Bardeen, L. Cooper y J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [6] P.W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [7] K. Yamada. *et al.*, *Phys. Rev. B* **40**, 4557 (1989).
- [8] G. Shirane, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **B59**, 1613 (1987)
- [9] A. B. Harris y R. V. Lange, *Phys. Rev.* **157**, 295 (1967); W. F. Brinkman y T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **2**, 1324 (1970); C. Gros, R. Joint y T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **36** 381 (1987).
- [10] J. Spalek, A. Olés y K. Chao, *Physica Stat. Sol. B* **108**, 329 (1981).
- [11] D. Mattis, "*The Theory of Magnetism*", Harper & Row, New York (1982).
- [12] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **115**, 2 (1959)

- [13] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931)
- [14] R. Orbach, *Phys. Rev.* **112**, 309 (1958)
- [15] J. des Cloiseaux y M. Gaudin, *J. Math. Phys.* **7**, 1384, (1966)
- [16] G.S. Aeppli *et all.*, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2052 (1989).
- [17] S. Chakravarty, B.I. Halperin, y D. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1057 (1988). S. Chakravarty, B.I. Halperin, y D. Nelson, *Phys. Rev. B* **39**, 2344 (1989)
- [18] T. Thio *et all*, *Phys. Rev. B* **38**, 905 (1988)
- [19] E.J. Neves y J.F. Pérez, *Phys. Rev. Lett.* **114A**, 331 (1986).
- [20] I. Affleck , T. Kennedy, E.H. Lieb y H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.* **115**, 447 (1988).
- [21] K. Kubo y T. Kishi, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2585 (1988). K. Kubo, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 110 (1988).
- [22] P.W.Anderson, *Phys. Rev. B* **86**, 694 (1952); R.Kubo, *ibid.* **87**, 568 (1952)
- [23] P.W. Anderson, *Mat. Res. Bull.* **8**, 153 (1973)
- [24] D. Gottlieb y M. Lagos, *Solid State Commun.* **79**, 551 (1991)
- [25] D.A. Huse y V. Elser, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2531 (1988).
- [26] D. Huse, *Phys. Rev. B* **37**, 2380 (1988).
- [27] H.Yokoyama y H.Shiba, *J. Phys. Soc. Jap.* **56**, 1940 (1987).
- [28] E. Manousakis *Phys. Rev. B* **40**, 4904 (1988)
- [29] A. Auerbach y D.P. Arobas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 617 (1988).

- [30] D.C. Mattis y C.Y. Pan, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 463 (1988).
- [31] R. Wang, *Phys. Rev. B* **40**, 3786 (1991)
- [32] M.J. de Oliveira, *Phys. Rev. B* **43**, 6181 (1991)
- [33] H-Q Ding, *J. Phys. C* **2**, 7979 (1990)
- [34] E.Manousakis y R.Salvador, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 840 (1988); *Phys. Rev. B* **39**, 575 (1989)
- [35] T. Pang, *Phys. Rev. B* **40**, 3362 (1991)
- [36] G. Gómez-Santos; *Phys. Rev. B* **41**, 6788 (1990)
- [37] M. Lagos y G.G. Cabrera; *Solid State Comm.* **67**, 221 (1988).
- [38] M. Lagos, M. Kiwi, E.R. Gagliano y G.G. Cabrera; *Solid State Comm.* **67**, 225 (1988).
- [39] M. Lagos y G.G. Cabrera; *Phys. Rev. B* **38**, 659 (1988).
- [40] D. Gottlieb y M.Lagos, *Phys. Rev. B* **39**, 2960 (1989).
- [41] G.G.Cabrera, M.Lagos, y M.Kiwi, *Solid State Comm.* **68**, 225 (1988).
- [42] M.Lagos, *Solid Sate Comm.* **77**, 597 (1991).
- [43] D. Gottlieb, M. Lagos, K. Hallberg y C. Balseiro *Phys. Rev. B* **43**, 13668 (1991).
- [44] D.Gottlieb, y V.Diaz, *Phys. Rev. B* **44**, (1991).
- [45] M.Montenegro, y D.Gottlieb, *J. Phys. C* **3**, 8641 (1991)
- [46] D.Gottlieb, M.Lagos, y M.Montenegro, *Solid State Comm.* **81**, 729 (1992).
- [47] D.Gottlieb, M.Montenegro, M.Lagos y K.Hallberg, *Phys. Rev. B* **46**, 3427 (1992).

- [48] D.Gottlieb, M.Montenegro, C.Millán, V. Díaz y K.Hallberg, *Solid State Comm.* **84**, 585 (1992).
- [49] M. Montenegro and D. Gottlieb. *Solid State Comm.* **86**, 553 (1992)
- [50] "Interplay of Holon and Spinon Dynamics in Doped Anisotropic Heisenberg Chains". G. Cabrera, M.Montenegro, C. Millán and D. Gottlieb, aceptado en *Solid State Communications* (1993).
- [51] "A variational Bethe-Ansatz approach to the Heisenberg antiferromagnet at non zero field". M. Montenegro, D. Gottlieb, D. Medeiros and G.G. Cabrera. por aparecer en *Int. J. Mod. Phys. B* **8** (1994)
- [52] T. Freltof *et al.*, *Phys. Rev. B* **36**, 826 (1987).
- [53] G.H. Lander *et al.*, *Phys. Rev. B* **43**, 448 (1991).
- [54] T.M. Brill *et al.*, *Phys. Rev. B* **43**, 10548 (1991).
- [55] G.G. Cabrera, *Phys. Rev. B* **43**, 13476 (1991).
- [56] T. Barnes, D. Kotchan, y E.S. Swanson, *Phys. Rev. B* **39**, 4357 (1989).
- [57] M. Steiner, J. Villain, C.G. Windsor, *Adv. in Phys.* **25**, N2,87 (1976)
- [58] L. P. Regnault, J. P. Boucher, J. Rossat-Mignon y J. P. Renard, *J. Phys. C* **15**, 1261 (1982).
- [59] E. Dagotto. y A. Moreo, *Phys. Rev. D.* **31**, 865 (1985).
- [60] E. Gagliano, E. Dagotto, A. Moreo y F. Alcaraz, *Phys. Rev. B* **34**, 1677 (1986).
- [61] C. Millán y D. Gottlieb, por publicarse.
- [62] J. Sólyom y T. A. L. Ziman, *Phys. Rev. B* **30**, 3980 (1984).

- [63] R. B. Griffiths, *Phys. Rev.* **133**, A768 (1964).
- [64] C.N. Yang y C.P. Yang, *Phys. Rev.* **151**, 258 (1966).
- [65] J.C. Bonner y M. Fisher, *Phys. Rev.* **135**, A640 (1964).
- [66] V. Kalmeyer y R.B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2095 (1987).
- [67] S. Sachdev, *Phys. Rev.* **B45**, 12377 (1992).
- [68] K. Hallberg, E.R. Gagliano, y C. Balseiro, *Phys. Rev. B* **41**, 9474 (1990).
- [69] E. Dagotto y A. Moreo, *Phys. Rev. B* **39**, 4744 (1989).
- [70] P. Chandra y P.Coleman, *Phys. Rev. Lett* **66**, 100 (1991).
- [71] J.Villain, R.Bidaux, J.P.Carton y R.Conte, *J. Phys. (Paris)* **41**, 1263 (1980).
- [72] D.S.Greywall , *Phys. Rev. B***41**, 1842 (1990).
- [73] X.Obradors, A. Labarta, A. Isalgué, J. Tejada, J Rodriguez y M.Pernet, *Solid State Comm.* **65**, 189 (1988).
- [74] H.Nishimori y H.Nakanishi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 626 (1988).
- [75] S. Fujiki, *Can. J. Phys.* **65**, 489 (1987).
- [76] C. Zeng y V.Elser, *Phys. Rev. B***42**, 8436 (1990).
- [77] A.B. Harris, C. Kallin y A.J. Berlinsky, *Phys. Rev. B* **45**, 2899 (1992).
- [78] S. Miyashita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 44 (1984)
- [79] B. I. Shraiman y E. D. Siggia, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 467 (1988).
- [80] S. Schmitt-Rink, C. M. Varma y A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2793 (1988).
- [81] R. J. Baxter, *J. Stat. Phys.* **9**, 145 (1973).

- [82] H. Takagi *et al.*, *Phys. Rev. B* **40**, 2254 (1989).
- [83] P. Schlottmann, *Phys. Rev. B* **40**, 2254 (1987).
- [84] M. Ogata, M.U. Luchini, S. Sorella y F.F. Assad, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2388 (1991);
K. Hallberg y C.A. Balseiro, *Solid State Commun.***82**, 523 (1992).
- [85] R.J. Birgeneau, *Am. J. Phys.* **58**, 28 (1990),
- [86] C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy y S. Sarker, *Phys. Rev. B* **40**, 2610 (1989).
- [87] J. I. Budnick *et al.*, *Europhys. Lett.* **5**, 651 (1988); G. M. Luke *et al.*, *Physica C*
153-155, 759 (1988).

Apéndice A

Valores Esperados

Para simplificar el proceso, es útil reescribir el estado fundamental. Consideremos la siguiente rotación

$$\mathcal{R}_0 = \exp \left(i\pi \sum_{\{\vec{r}\}} S_{\vec{r}}^y \right); \quad (\text{A.1})$$

ella transforma al Néel en el estado ferromagnético $|\mathcal{F}\rangle = |\dots - - - \dots\rangle$. Al intercalarla en la expresión de nuestro estado fundamental, obtenemos una expresión equivalente para escribirlo

$$\begin{aligned} |g\rangle &= \mathcal{R}_0 \mathcal{R}_0^\dagger V_\alpha \mathcal{R}_0 \mathcal{R}_0^\dagger |\mathcal{N}\rangle \\ &= \mathcal{R}_0 V'_\alpha |\mathcal{F}\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$= \mathcal{R}_0 |f\rangle, \quad (\text{A.3})$$

donde

$$\begin{aligned} V'_\alpha &= \mathcal{R}_0^\dagger V_\alpha \mathcal{R}_0 \\ &= \exp \left[\frac{\alpha}{2(2zS-1)} \sum_{\vec{r}, \vec{\delta}} (S^+(\vec{r} + \vec{\delta}) S^+(\vec{r}) - S^-(\vec{r}) S^-(\vec{r} + \vec{\delta})) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$|f\rangle$ se diferencia de $|g\rangle$ en que sí posee magnetización total, aunque la magnetización de subred de ambos coincide. La ventaja de $|f\rangle$ sobre $|g\rangle$ radica que en ese estado

no es necesaria la división en dos subredes y cualquier sitio de la red es equivalente a cualquier otro, además sumado al hecho de que los promedios de ambos estados están relacionados directamente. En efecto, si consideramos un operador \mathcal{A} función de los operadores espinoriales $\vec{S}_{\vec{r}}$, tenemos:

$$\begin{aligned} \langle g | \mathcal{A}(\vec{S}_{\vec{r}}) | g \rangle &= \langle f | \mathcal{R}_0^\dagger \mathcal{A}(\vec{S}_{\vec{r}}) \mathcal{R}_0 | f \rangle \\ &= \langle f | \mathcal{A}(\mathcal{R}_0^\dagger \vec{S}_{\vec{r}} \mathcal{R}_0) | f \rangle \\ &= \langle f | \mathcal{A}(\vec{S}'_{\vec{r}}) | f \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

donde $\vec{S}'_{\vec{r}}$ corresponde al vector rotado; de esta manera, el valor esperado de cualquier operador \mathcal{A} sobre nuestro estado fundamental está relacionado con aquellos en $|f\rangle$ simplemente rotando en π todos los operadores de spin correspondiente a un sitio en la red par.

Por otro lado, observemos que el valor esperado de un operador \mathcal{A} sobre el estado $|f\rangle$ es equivalente a evaluar el promedio sobre el estado $|\mathcal{F}\rangle$ del operador $\mathcal{A}' = V_\alpha'^\dagger \mathcal{A} V_\alpha'$. Luego, si obtenemos cómo transforman los operadores bajo la transformación unitaria V_α' , podremos fácilmente evaluar los promedios de estos operadores. Para ello hay que evaluar la sumatoria:

$$V_\alpha'^\dagger \mathcal{A} V_\alpha' = \mathcal{A} + \frac{Q'}{1!} [\mathcal{A}, U'] + \frac{Q'^2}{2!} [[\mathcal{A}, U'], U'] + \dots \quad (\text{A.6})$$

donde

$$U' = \sum_{\vec{r}, \vec{\delta}} (S^+(\vec{r} + \vec{\delta}) S^+(\vec{r}) - S^-(\vec{r}) S^-(\vec{r} + \vec{\delta})) \quad (\text{A.7})$$

$$Q' = \frac{\alpha}{2(2zS - 1)} \quad (\text{A.8})$$

A.1 Dimensión 1 y $S=1/2$

Para obtener los promedios de cualquier operador en dimensión 1 y spin $1/2$ sobre nuestra función de onda, hay que recurrir a la transformación *Wigner-Jordan* que permite escribir

los operadores espinoriales S^\pm en función de operadores fermiónicos ψ^\pm :

$$S_l^\pm = 2^{l-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{l-1}^z \psi_l^\pm \quad (\text{A.9})$$

$$2S_l^z = \psi_l^+ \psi_l^- - \psi_l^- \psi_l^+ \quad (\text{A.10})$$

Escribamos el generador de nuestra transformación unitaria en función de estos operadores fermiónicos:

$$\begin{aligned} U' &= \sum_{l,\delta=\pm 1} (S^+(2l+\delta)S^+(2l) - S^-(2l)S^-(2l+\delta)) \\ &= \sum_{l,\delta=\pm 1} (\psi^\dagger(2l+\delta)\psi^\dagger(2l) - \psi^-(2l)\psi^-(2l+\delta)) \\ &= \sum (\psi^\dagger(l+1)\psi^\dagger(l) - \psi^-(l)\psi^-(l+1)) \end{aligned}$$

Gracias a la transformación de Wigner-Jordan, las relaciones de conmutación entre U' y los operadores ψ se simplifican notablemente:

$$[\psi_l^\dagger, U'] = \psi_{l-1}^- - \psi_{l+1}^-, \quad (\text{A.11})$$

con lo que es posible encontrar una expresión general para el conmutador ene-ésimo:

$$\left[\cdots \left[[\psi_l^\dagger, U']_1, U' \right]_2, \cdots, U' \right]_n = \begin{cases} \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} (-1)^i \psi_{2i+l-n}^\dagger & n \text{ par} \\ \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} (-1)^i \psi_{2i+l-n}^- & n \text{ impar} \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

Si introducimos un operador de traslación τ tal que $\tau \psi_l^\pm = \psi_{l+1}^\pm$, se tiene que $\tau^{\pm i} \psi_l^\pm = \psi_{l\pm i}^\pm$; luego, la serie (A.6) la podemos escribir:

$$\psi_l^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{2n} (-1)^m \frac{Q^{2n}}{m!(2n-m)!} \tau^{2m-2n} \psi_l^\dagger + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{2n+1} (-1)^m \frac{Q^{2n}}{m!(2n+1-m)!} \tau^{2m-2n-1} \psi_l^-. \quad (\text{A.13})$$

Para sumar la serie par, la separamos en dos partes:

$$\text{Serie par} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{2n} (-1)^m \frac{Q^{2n}}{m!(2n-m)!} \tau^{2m-2n}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{n-1} (-1)^m \frac{Q^{2n}}{m!(2n-m)!} \tau^{2m-2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=n}^{2n} (-1)^m \frac{Q^{2n}}{m!(2n-m)!} \tau^{2m-2n} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{n-1} (-1)^m \frac{Q^{2n}}{m!(2n-m)!} \tau^{2m-2n} \\
&\quad + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n (-1)^{n+m} \frac{Q^{2n}}{(n+m)!(n-m)!} \tau^{2m} \quad (\text{A.14})
\end{aligned}$$

Definiendo un nuevo índice de suma $u = l - n$ para la primera sumatoria, y intercambiando el orden de las sumatorias en la segunda, se obtiene:

$$\begin{aligned}
\text{Serie par} &= \sum_{u=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{Q^{2u+2m}}{m!(2u+m)!} \tau^{-2u} + \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} (-1)^{n+m} \frac{Q^{2n}}{(n+m)!(n-m)!} \tau^{2m} \\
&= \sum_{u=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{Q^{2m+2u}}{m!(2u+m)!} \tau^{-2u} + \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n+2m} \frac{Q^{2n+2m}}{n!(2n+m)!} \tau^{2m} \\
&= \sum_{u=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{Q^{2m+2u}}{m!(2u+m)!} \tau^{-2u} + \sum_{u=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{Q^{2n+2u}}{n!(2u+n)!} \tau^{2u} \\
&= \sum_{u=-\infty}^{\infty} \left(Q^{2|u|} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{Q^{2m}}{m!(2|u|+m)!} \right) \tau^{2u} \quad (\text{A.15})
\end{aligned}$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{2n}(2Q) \tau^{2n}, \quad (\text{A.16})$$

donde se utilizó la expresión para la expansión en serie de las funciones de Bessel de orden entero $J_n(z)$:

$$J_n(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!(n+m)!} \left(\frac{z}{2}\right)^m \quad (\text{A.17})$$

y la propiedad $J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z)$.

Al proceder en forma similar con la serie impar, obtenemos una expresión analítica de cómo transforman los operadores ψ s bajo la acción de V'_α :

$$V'_\alpha \psi_l^\dagger V'_\alpha = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(J_{2n}(\alpha) \psi_{l+2n}^\dagger - J_{2n+1}(\alpha) \psi_{l+2n+1}^- \right). \quad (\text{A.18})$$

Esta expresión, junto con las relaciones (A.9) y (A.10), podemos obtener los valores de cualquier operador.

A.2 Valor Esperado S^z

Consideremos por ejemplo el operador S_i^z . Lo podemos escribir directamente en función de los operadores ψ_i^\pm a través de (A.10), de manera que el valor esperado de este operador sobre nuestra función de onda se reduce a:

$$\begin{aligned}
 \langle g|S_i^z|g\rangle &= \langle f|\mathcal{R}_0 S_i^z \mathcal{R}_0^\dagger|f\rangle \\
 &= (-1)^{l+1} \langle f|S_i^z|f\rangle \\
 &= (-1)^{l+1} \langle f|\psi_i^\dagger \psi_i^- - \frac{1}{2}|f\rangle \\
 &= (-1)^{l+1} \langle \mathcal{F}|V_\alpha'^\dagger \psi_i^\dagger \psi_i^- V_\alpha'|\mathcal{F}\rangle + \frac{(-1)^l}{2}. \tag{A.19}
 \end{aligned}$$

Pero nosotros calculamos explícitamente cómo transforman los operadores ψ ante V_α :

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{F}|V_\alpha'^\dagger \psi_i^\dagger \psi_i^- V_\alpha'|\mathcal{F}\rangle &= \langle \mathcal{F}|\sum_{n=-\infty}^{\infty} (J_{2n}(\alpha)\psi_{i+2n}^\dagger - J_{2n+1}(\alpha)\psi_{i+2n+1}^-) \\
 &\quad \times \sum_{m=-\infty}^{\infty} (J_{2m}(\alpha)\psi_{i+2m}^- - J_{2m+1}(\alpha)\psi_{i+2m+1}^\dagger)|\mathcal{F}\rangle \\
 &= \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} J_{2n+1}(\alpha)J_{2m+1}(\alpha)\langle \mathcal{F}|\psi_{i+2n+1}^- \psi_{i+2m+1}^\dagger|\mathcal{F}\rangle \\
 &= \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} J_{2n+1}(\alpha)J_{2m+1}(\alpha)\delta_{nm} \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{2n+1}(\alpha)J_{2n+1}(\alpha) \tag{A.20}
 \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}(1 - J_0(2\alpha)), \tag{A.21}$$

donde se utilizó la propiedad $\psi_i^-|\mathcal{F}\rangle = 0$. Al reemplazar esta expresión en nuestro valor esperado, obtenemos finalmente cómo varía la magnetización de subred en nuestro estado fundamental:

$$\langle g|S_i^z|g\rangle = \frac{(-1)^l}{2} J_0(2\alpha). \tag{A.22}$$

Apéndice B

Método de Lanczos

Cuando nos referimos en el texto al método de Lanczos, en realidad nos referimos al método de Lanczos modificado, desarrollado por E. Dagotto y A. Moreo recientemente [59, 60]. Basado en el método de Lanczos estándar, este procedimiento permite a través de un proceso iterativo obtener una muy buena aproximación a la función de onda real asociada al estado fundamental o a un estado excitado de un hamiltoniano. Esto permite calcular tanto la energía asociada al estado como también los valores esperados de cualquier operador.

En él se considera inicialmente un estado de prueba ψ_0 normalizado. La condición que debe tener este estado es que debe tener una proyección no nula sobre el verdadero estado fundamental Φ_0 del Hamiltoniano, sino simplemente el estado de prueba convergerá a un estado excitado. La elección de este estado inicial sólo afectará la velocidad de convergencia.

A partir de este estado, se construye uno ortonormal a él, ψ_1 , aplicando el Hamiltoniano de interés \mathcal{H} sobre nuestro estado inicial ψ_0 :

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

donde $\langle \mathcal{H}^n \rangle = \langle \psi_0 | \mathcal{H}^n | \psi_0 \rangle$. La representación de 2×2 del Hamiltoniano en esta base es fácilmente diagonalizable, de manera que es posible obtener una mejor aproximación a la

energía exacta E_0 a través del menor autovalor de ella, así como también al autoestado Φ_0 .

En efecto, el valor para la energía así obtenido

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

y la nueva función de onda generada

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

donde

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

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

y

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

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

El proceso de iteración consiste en reemplazar la función de prueba inicial ψ_0 por $\tilde{\psi}_0$ y repetir el proceso de (B.1) a (B.6). En cada iteración es suficiente conservar tres vectores, ψ_0 , $\mathcal{H}\psi_0$ y $\mathcal{H}^2\psi_0$ expandidos, en alguna base completa conocida del espacio de Hilbert asociado al Hamiltoniano. La velocidad de acceso a cada una de las componentes de estos vectores se puede optimizar utilizando una técnica llamada de *hashing* [60], un algoritmo muy efectivo para propósitos de búsqueda y almacenamiento.

Apéndice C

Método de Oliveira

El método de Oliveira [32] consiste en una función de onda de prueba $\Pi_l|\phi_l\rangle$ para el estado fundamental. Cada estado $|\phi_l\rangle$ corresponde a la función de onda de una plaqueta compuesta de cuatro spines, en que cada plaqueta no se superpone a ninguna otra. En el caso de una dimensión, la plaqueta representa 4 spines en línea, mientras que en dimensión dos corresponde a 4 spines en los vértices de un cuadrado. Seis parámetros variacionales son introducidos:

$$\begin{aligned} |\phi_l\rangle = & a \begin{bmatrix} + & - \\ - & + \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} - & + \\ + & - \end{bmatrix} + c \begin{bmatrix} + & + \\ - & - \end{bmatrix} + d \begin{bmatrix} - & + \\ - & + \end{bmatrix} \\ & + e \begin{bmatrix} - & - \\ + & + \end{bmatrix} + f \begin{bmatrix} + & - \\ + & - \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

obedeciendo la condición de normalización. La energía por spin en función de los parámetros variacionales viene dada por:

$$\begin{aligned} \frac{E}{NJ_1} = & \frac{1}{16} [-3(a^2 + b^2) + c^2 + e^2 - d^2 - f^2 - (a^2 - b^2 + c^2 - e^2)^2 + (d^2 - f^2)] \\ & + \frac{\alpha}{4} [(a+b)(d+f) + be + ac] + \frac{J_2}{8J_1} [-1 + 2(a^2 + b^2) + (a^2 - b^2)^2 \\ & - (c^2 - e^2)^2 - (d^2 - f^2)^2] \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{E}{NJ_1} = -\frac{1}{4} [a^2 + b^2 + (a^2 - b^2)^2] + \frac{\alpha}{4} (a + b)(c + d + e + f) + \frac{J_2}{8J_1} [-1 + 2(a^2 + b^2) + 3(a^2 - b^2)^2 - 3(c^2 - e^2)^2 - 3(f^2 - d^2)], \quad (C.3)$$

para la cadena lineal y la red cuadrada, respectivamente. Las ecuaciones extremales fueron resueltas y las soluciones así obtenidas, comparadas con la que obtuvimos nosotros.