

# Excitaciones elementales y ruptura de simetrías en antiferromagnetos frustrados

por

Lic. Alejandro Mezio

Tesis presentada en la

*Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura*  
*Universidad Nacional de Rosario*

para optar al grado de

Doctor en Física

Director: Dr. Adolfo E. Trumper

Co-Director: Dr. Luis. O. Manuel

Realizada en el Instituto de Física Rosario

Febrero de 2014

*a Amanda y Cintia*

## AGRADECIMIENTOS

Desde luego mi mayores agradecimientos van para Adolfo y Luis, quienes son unas personas excelentes. Su preocupación estos años en nuestra formación (de Toti y mía) ha sido constante e integral, no sólo sentando una base sólida en los temas del área sino además transmitiendo siempre una forma de investigar con seriedad y honestidad intelectual. Con las correcciones de Adolfo y su implacable microfibra roja (creo que) aprendí que escribir una idea no es lo mismo que transmitirla.

Creo que poca gente tiene la suerte de transitar su doctorado en simultáneo con otra persona y compartir el día a día de esta iniciación en la investigación. Más suerte tuve yo que me tocó pasar estos cinco años con mi amiga Toti al lado. Finalmente le enseñé a hacer buenos mates y ella me enseñó buena música. También Nacho, que terminaba su doctorado y sus consejos permitieron que no me sienta tan perdido en el comienzo. Al nuevo integrante, el Colo, que arrancó con todo y cuyos aportes nutrieron esta tesis.

También agradecer a la jocosidad infinita del Flaco Gazza, Ariel siempre metiendo una pregunta filosófica, Flavio combinando informática y consejos de cocina. A la gente del CIFASIS, con quienes varios años compartimos comidas, cafés y encendidas discusiones.

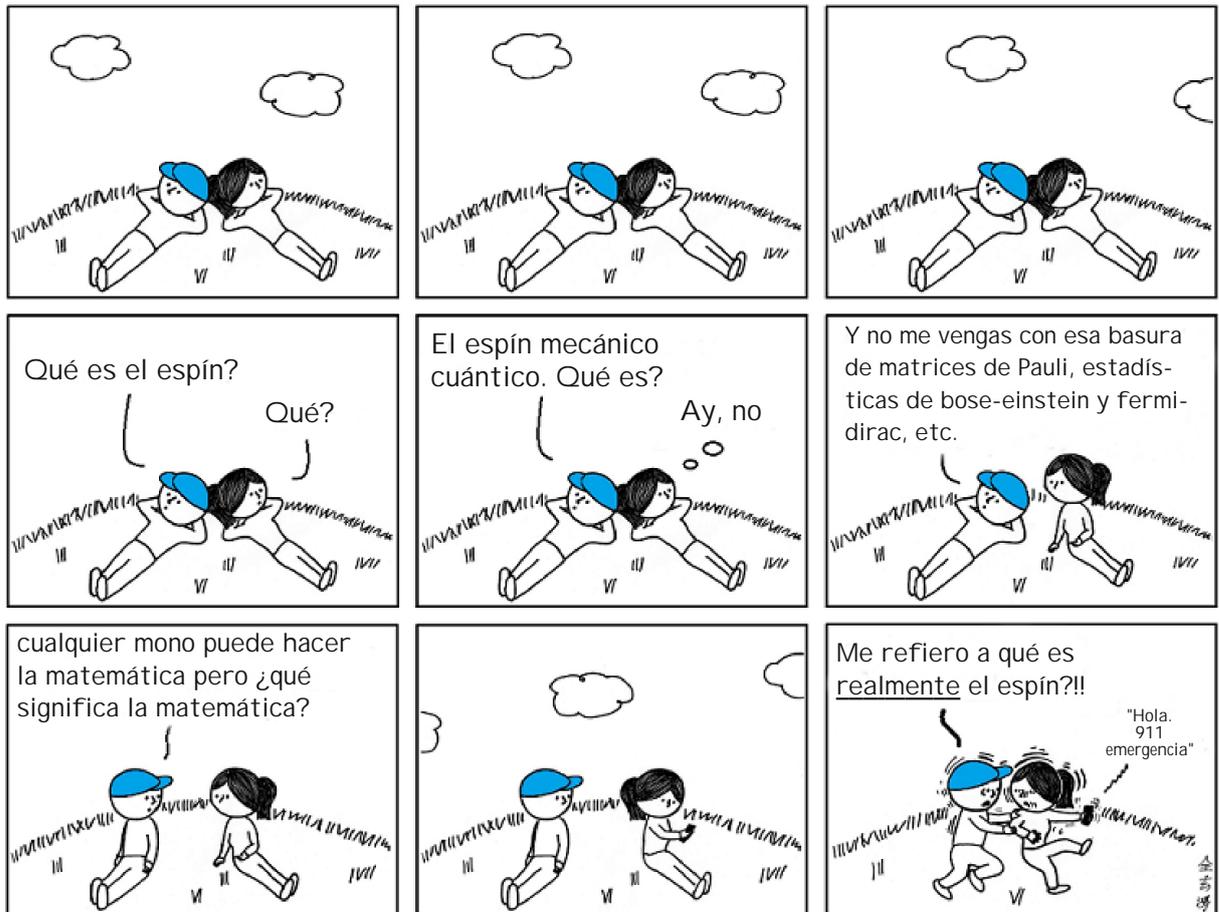
Obviamente a los borrachos y no tanto de hbirra: Lucio, Maia, Paulo, Juan×2, Barbi, Moni, Pablo, Guille×2, Flor, Ariel, Maxi, Ana, Celina, Gise, Javito, Lucas, Nati, Renata, Malau y los Sebas. A la cátedra de Ondas en la facultad. La odisea de dar clases de laboratorio siendo un obstinado teórico me abrió la cabeza.

A los compañeros de la comisión interna de la facultad, ADFI. A la agrupación La Unidad, que lucha por una universidad y mundo más justo. A mis compañeros de la Juventud Guevarista y de la biblioteca popular El Che (y ya que estamos ¡viva Chávez!). A la amistad de Oski y Ceci.

Uno muy grande para mis viejos. Todo lo que soy nace de ellos. A mis hermanos y mi hermosa sobrina Itahí.

Y los mas especiales: a Cinti, por quererme y por el aguante de ser madre y padre durante estos últimos meses; y a Amanda, por venir en el momento justo y con amor bajo el brazo.

## Momento de claridad



# Índice general

<b>1.. Introducción</b>	8
1.1. Motivaciones de la presente tesis	9
1.1.1. Motivación General: los antiferromagnetos cuánticos	9
1.1.2. Estudios realizados y resultados más relevantes de esta tesis	18
1.2. Ruptura espontánea de simetría	20
1.2.1. Singletes	21
1.2.2. Orden de largo alcance	23
1.2.3. Torre de estados de Anderson	26
1.2.4. Teorema de Mermin-Wagner: efecto de la temperatura	28
<b>2.. Teoría de bosones de Schwinger para sistemas frustrados</b>	30
2.1. Introducción	31
2.1.1. Modelo de Heisenberg AF frustrado: teorías semiclásicas	31
2.1.2. Teoría de bosones de Schwinger: un poco de historia	33
2.2. Representación de bosones de Schwinger	36
2.2.1. Interacción espín-espín	40
2.2.2. Aproximación de campo medio	42
2.2.3. Diagonalización	44
2.2.4. Ecuaciones autoconsistentes a $T$ finita	46
2.2.5. Orden de largo alcance y Factor de Estructura Estático	47
2.2.6. Estado fundamental en redes finitas	50
2.2.7. Ruptura de simetría	51
2.2.8. Excitaciones de espín sobre $ \text{GS}\rangle$	54
2.3. Factor de Estructura Dinámico	55
2.3.1. Cálculo de $G^{(R)}(\mathbf{k}, \omega)$ en campo medio	56
2.3.2. Espectro de excitaciones del estado fundamental	58
2.3.3. Regla de suma	60

---

2.3.4. Ligadura de espinones . . . . .	62
2.4. Caso Anisotrópico . . . . .	64
<b>3. Ruptura de simetrías continuas y discretas en el modelo <math>J_1 - J_3</math>.</b> . . . .	<b>67</b>
3.1. Introducción . . . . .	68
3.2. Descripción de órdenes semiclásicos en campo medio . . . . .	71
3.3. Cálculo numérico a temperatura cero . . . . .	72
3.4. Resultados . . . . .	74
3.4.1. Diagrama de fases cuántico a temperatura cero . . . . .	74
3.4.1.1. Regímenes con orden de largo alcance . . . . .	74
3.4.1.2. Regímenes con orden de corto alcance . . . . .	75
3.4.1.3. Caso espín $S = 1/2$ . . . . .	76
3.4.2. El límite semiclásico de la relación de dispersión . . . . .	78
3.4.3. Diagrama de fases a temperatura finita . . . . .	79
3.5. Conclusiones . . . . .	84
<b>4. Espectro del antiferromagneto triangular</b> . . . . .	<b>86</b>
4.1. Introducción . . . . .	87
4.2. Resultados . . . . .	89
4.2.1. Magnetización y energía . . . . .	89
4.2.2. Factor de Estructura Dinámico . . . . .	91
4.2.3. Funciones de correlación densidad-densidad . . . . .	96
4.2.4. Ligadura de espinones . . . . .	98
4.2.5. Comparación con el esquema de un singlete . . . . .	100
4.3. Conclusiones . . . . .	101
<b>5. Propiedades termodinámicas del antiferromagneto triangular</b> . . . . .	<b>103</b>
5.1. Introducción . . . . .	104
5.2. Resultados . . . . .	105
5.2.1. Entropía . . . . .	107
5.2.2. Caso exacto de dos espines . . . . .	110
5.2.3. Susceptibilidad uniforme . . . . .	112
5.3. Conclusiones . . . . .	114

---

<b>6.. Modelo <math>XXZ</math> antiferromagnético sobre la red triangular . . . . .</b>	<b>116</b>
6.1. Introducción . . . . .	117
6.2. Esquema de cuatro operadores de <i>link</i> . . . . .	118
6.2.1. Ecuaciones de autoconsistencia . . . . .	120
6.2.2. Expresiones para los factores de estructura estático y dinámico . . .	121
6.3. Resultados . . . . .	122
6.3.1. Factor de estructura estático y magnetización . . . . .	122
6.3.2. Factor de estructura dinámico $zz$ . . . . .	123
6.3.3. Transferencia de peso espectral . . . . .	125
6.3.4. Factor de estructura dinámico total . . . . .	127
6.3.5. Ligadura de espinones . . . . .	129
6.4. Conclusiones . . . . .	130
<b>7.. Conclusiones generales y perspectivas . . . . .</b>	<b>132</b>
<b>A.. Diagonalización paraunitaria del hamiltoniano bosónico . . . . .</b>	<b>135</b>
<b>B.. Formulación de la integral funcional y solución de punto de ensilladura</b>	<b>139</b>
B.1. Bosones de Schwinger en la formulación de la integral funcional . . . . .	139
B.1.1. Aproximación de punto de ensilladura . . . . .	142
<i>Índice de figuras</i> . . . . .	146
<i>Bibliografía</i> . . . . .	148

# 1. INTRODUCCIÓN

## Índice

---

<b>1.1. Motivaciones de la presente tesis . . . . .</b>	<b>9</b>
1.1.1. Motivación General: los antiferromagnetos cuánticos . . . . .	9
1.1.2. Estudios realizados y resultados más relevantes de esta tesis . .	18
<b>1.2. Ruptura espontánea de simetría . . . . .</b>	<b>20</b>
1.2.1. Singletes . . . . .	21
1.2.2. Orden de largo alcance . . . . .	23
1.2.3. Torre de estados de Anderson . . . . .	26
1.2.4. Teorema de Mermin-Wagner: efecto de la temperatura . . . . .	28

---

## 1.1. Motivaciones de la presente tesis

### 1.1.1. Motivación General: los antiferromagnetos cuánticos

Dentro del área de materia condensada la comprensión de los sistemas electrónicos fuertemente correlacionados representa un gran desafío, ya que se trata de verdaderos “sistemas de muchos cuerpos”. En éstos la interacción coulombiana entre electrones es importante y la aproximación de electrones independientes ya no es más válida, por lo tanto el tratamiento teórico requiere de la utilización de modelos efectivos para poder manejar el número exponencial de grados de libertad que hay en juego. Además la competencia existente entre la tendencia a la deslocalización propia de la energía cinética (comportamiento metálico) y la tendencia a la localización debida a la interacción coulombiana (comportamiento aislante), combinada con el principio de exclusión de Pauli, conducen a una gran riqueza de comportamientos [1, 2]. En particular, una física muy interesante se encuentra en el caso de los llamados *aisladores de Mott*, en los cuales –estando a medio llenado– al sistema le conviene dejar sus electrones de conducción fijos, y por lo tanto el grado de libertad relevante resulta ser el espín del electrón. Estos sistemas, entonces, pertenecen al área del magnetismo cuántico ya que son descritos por hamiltonianos efectivos de tipo Heisenberg (1.1), es decir de espines interactuantes.

De manera general, la complicación que existe en el tratamiento analítico de estos sistemas fuertemente correlacionados reside en que no poseen de manera natural un parámetro pequeño a partir del cual realizar un desarrollo perturbativo controlado, y la resolución exacta sólo es posible para contados casos. Por lo tanto el desarrollo de nuevos métodos analíticos y numéricos es indispensable para su tratamiento. Pero además del desafío intelectual que representa la resolución de estos modelos, existe una gran variedad de compuestos que se comportan como aisladores de Mott. Los óxidos de metales de transición son el ejemplo más conocido, en ellos se observó originalmente este comportamiento y dieron lugar al concepto de aislador de Mott [3, 4]. En particular, nuestro interés se centra en los antiferromagnetos (AF) cuánticos en dos dimensiones. Un buen ejemplo de éstos son los compuestos “padres” de los cupratos superconductores no convencionales de alta temperatura crítica, [5, 6] cuyo descubrimiento en 1986 por Bednorz y Müller renovó el interés en los sistemas magnéticos 2D. Éstos compuestos poseen una estructura de planos magnéticos de  $CuO_2$  en una red cuadrada con orden AF que al doparlos se desordena rápidamente, dando lugar a una fase superconductora no convencional. Un comporta-

miento similar tienen los denominados cobaltatos  $Na_xCoO_2$ , [7, 8] los cuales se componen de redes triangulares con orden AF y, estando hidratados, sufren una transformación superconductor cuando son dopados con  $Na$ . También existen diferentes compuestos de sales orgánicas de transferencia de carga con un diagrama de fases muy similar al de los cupratos superconductores, si se reemplaza el dopaje por la presión [9]. Durante los últimos años se ha sintetizado una gran cantidad de compuestos considerados realizaciones físicas de antiferromagnetos 2D, que han mostrado una amplia variedad de propiedades no convencionales [10, 11].

El modelo efectivo más simple para los sistemas fuertemente correlacionados, que expresa la competencia entre el comportamiento metálico de electrones en movimiento y la interacción coulombiana, es el hamiltoniano de Hubbard, introducido en 1963 simultáneamente por Gutzwiller, Hubbard y Kanamori [12, 13, 14]. En el mismo la energía cinética está asociada a un parámetro de salto  $t$  entre sitios vecinos y la interacción entre dos electrones se modeliza con un parámetro  $U$  de repulsión cuando ambos se encuentran en un mismo sitio. En el caso de los aisladores de Mott la repulsión es muy grande ( $U \gg t$ ) y, a medio llenado, el modelo se mapea al llamado hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (1.1)$$

donde  $i$  recorre sobre todos los sitios de la red y  $j$  sobre todos los vecinos del sitio  $i$  para los que existe la constante de intercambio magnético  $J_{ij}$ . El sistema más simple que exhibe una constante de intercambio antiferromagnética ( $J$  positivo) es el de la molécula  $H_2$ , resuelto por Heitler y London en 1927 [15]. Desde el punto de vista histórico éste fue uno de los primeros problemas en que se consideró explícitamente la correlación electrónica fuerte demostrándose una estrecha relación entre el enlace covalente y el magnetismo, ya que el estado singlete liga la molécula mientras que el triplete corresponde al estado disociado<sup>1</sup>. En el caso de los sistemas magnéticos en general no existe un solapamiento directo entre los orbitales electrónicos de los átomos magnéticos, pero igualmente existe una interacción indirecta de intercambio mediada por un ion no magnético ubicado entre ambos. Esta interacción se llama *superintercambio* y fue descrita microscópicamente por Anderson en 1950 [16].

<sup>1</sup> Experimentalmente se encuentra para el  $H_2$  que la energía de ionización es  $E^{ion.} = 4.476 \text{ eV}$  y la distancia entre núcleos  $R = 0.714 \text{ \AA}$ . Heitler y London obtuvieron valores muy cercanos de estas cantidades:  $J = 3.15 \text{ eV}$  y  $R = 0.87 \text{ \AA}$

Una característica importante del AF de Heisenberg es que el estado de Néel clásico no es autoestado del hamiltoniano cuántico y entonces el estado fundamental puede no tener una representación puramente clásica, siendo el efecto de las *fluctuaciones cuánticas* crucial. Éstas pueden ser lo suficientemente fuertes de manera tal que, incluso a temperatura cero, se establezca un estado fundamental que no rompa ninguna simetría. Así como en el  ${}^4\text{He}$  las fluctuaciones cuánticas de punto cero no permiten que se rompa la simetría traslacional para formar un sólido, de la misma manera también se espera que en ciertos antiferromagnetos no se rompa ni la simetría  $SU(2)$  del hamiltoniano de Heisenberg ni la traslacional, dando lugar a los llamados *líquidos de espines*<sup>2</sup>. Vemos entonces que los efectos cuánticos juegan un papel importante en las propiedades del modelo de Heisenberg a temperatura cero y pueden conducir a estados fundamentales inusuales, con correlaciones magnéticas y simetrías muy diferentes al caso clásico. También se puede mostrar que el efecto de las fluctuaciones cuánticas se refuerza a medida que disminuye la dimensionalidad, el valor de espín o mediante la incorporación de frustración magnética. Estos aspectos del modelo se pueden combinar de diversas formas para dar lugar a una variedad muy rica tanto de fases magnéticamente ordenadas como de nuevas fases cuánticas no convencionales.

La frustración magnética puede definirse como *la imposibilidad de minimizar energéticamente todos los pares de interacciones magnéticas simultáneamente*, y puede deberse a la geometría de la red o por presencia de interacciones que compiten. Como resultado general de la frustración en un AF encontramos una competencia entre las correlaciones ferromagnéticas y antiferromagnéticas, por lo que la configuración clásica de mínima energía es menos estable, y resulta más probable que sea desestabilizada por las fluctuaciones de punto cero. El AF en la red triangular es un caso típico de frustración geométrica. Debido a esta frustración, la configuración de energía clásica mínima no es el estado usual AF con espines antiparalelos entre sitios vecinos. De hecho, si dos espines de un elemento triangular minimizan su energía de intercambio alineándose antiparalelos, entonces al tercer espín le es imposible realizar lo mismo y ordenarse simultáneamente antiparalelo a ambos (figura 1.1.a). Resulta entonces que la configuración clásica de mínima energía consiste en el orden de Néel triangular de  $120^\circ$ , como se muestra en la figura 1.1.b.

Una perspectiva histórica de los distintos conceptos e ideas que rodean a los AF 2D resulta

---

<sup>2</sup> Siguiendo esta analogía a una fase ordenada de Néel, que rompe la simetría  $SU(2)$  y traslacional de la red, se la suele llamar un “sólido de espines”.

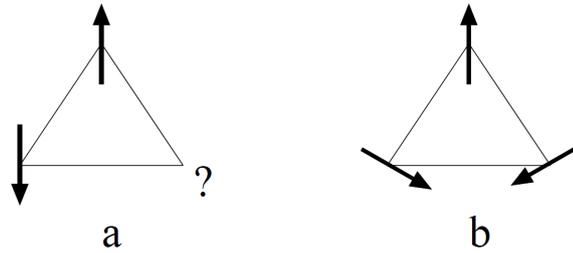


Fig. 1.1: Efecto de la competencia de las interacciones AF en una plaqueta triangular. **a)** Si dos espines minimizan su energía de intercambio el tercer espín está imposibilitado de hacerlo. **b)** Configuración clásica de Néel de  $120^\circ$ .

muy útil para su comprensión. Desde los años '30 se conoce que el estado fundamental del hamiltoniano de Heisenberg AF en una red finita bipartita<sup>3</sup> es un singlete [17, 18, 19]. Pero, ¿qué sucede en el límite termodinámico, en redes infinitas? Por ejemplo, en el caso  $1D$  de la cadena infinita de Heisenberg de espín- $\frac{1}{2}$  la solución exacta, calculada por Bethe en 1931, [20] muestra que si bien hay correlaciones espín-espín que decaen como una ley de potencias (cuasi orden de largo alcance), no se establece un orden magnético semiclásico que rompa la simetría  $SU(2)$ , resultando el estado fundamental un singlete. La dimensión dos resulta ser una dimensión crítica y existen muy pocos resultados teóricos que establezcan fehacientemente la existencia, o no, de orden de largo alcance (LRO) magnético en los distintos modelos. Por ejemplo, la prueba rigurosa de que el AF en la red cuadrada con  $S \geq 1$  posee un estado con LRO magnético fue dada recién en 1986, [21] y no ha podido ser extendida al caso  $S = \frac{1}{2}$ . Originalmente, en 1949 Shull [22] realizó experimentos de dispersión de neutrones en  $M_nO$  y observó que por debajo de una cierta temperatura  $T_N$  (temperatura de Néel) aparecían picos extra de Bragg, los cuales estaban relacionados con la presencia de dos subredes magnéticas correspondientes a un LRO antiferromagnético, propuesto por Néel en 1932 [23]. La aparente contradicción entre el estado singlete y un orden magnético fue resuelta en 1952 por Anderson, [24] quien por primera vez aplicó la teoría de ondas de espín (SWT) sobre el AF de espín- $\frac{1}{2}$  en la red cuadrada, obteniendo como estado fundamental un estado de Néel con una magnetización local reducida  $m = 0.303$  debido a las fluctuaciones cuánticas. Sin embargo, la contribución más importante de Anderson consistió en demostrar que en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  este estado de Néel *cuántico* se encuentra cuasi degenerado con el estado singlete que proviene de la solución en redes finitas. Si bien el estado de Néel

<sup>3</sup> Una red bipartita es aquella que puede ser particionada en dos subredes tales que un espín dado sólo tiene interacción de intercambio con espines pertenecientes a la otra subred.

no es autoestado del hamiltoniano, mostró que su evolución hacia un estado singlete es tan lenta que dicho estado AF puede ser observado en los tiempos tales como los de un experimento [24]. Estos conceptos se enmarcan en un fenómeno más general denominado *ruptura espontánea de simetría*, en el cual la simetría del estado fundamental es menor que la del hamiltoniano de un sistema con interacciones de rango finito. En particular, cuando la simetría que se rompe es la  $SU(2)$ , se establece un LRO magnético, donde por cada simetría continua rota aparece un modo cero de energía, de acuerdo al teorema de Goldstone [25]. En un AF estos modos cero de Goldstone equivalen a rotaciones globales infinitesimales de los espines que, al no costar energía, cumplen la función de restaurar la simetría original del hamiltoniano. En la próxima sección veremos con más detalle el mecanismo de ruptura espontánea de simetría.

Además, en 1966 Mermin y Wagner [26] demostraron que para modelos de espín con interacciones de corto alcance y dimensión  $D \leq 2$  no puede haber ruptura espontánea de una simetría continua a temperatura finita, es decir, en  $2D$  el orden magnético sólo es posible a  $T = 0$ . De todas formas, experimentalmente se encuentran estados ordenados a  $T$  finita los cuales se estabilizan gracias a interacciones residuales  $3D$  que acoplan levemente los planos bidimensionales.

Como dijimos previamente, la presencia de frustración en un sistema implica fluctuaciones cuánticas más violentas y la posibilidad de una transición de fase hacia un estado tipo líquido de espín. Luego de haber desarrollado la teoría de la ruptura espontánea de simetría Anderson conjeturó en 1973 sobre la posibilidad de estados fundamentales tipo líquido de espín [27]. En particular propuso como posible estado fundamental en la red triangular un estado de “enlaces de valencia resonantes” (RVB), el cual está compuesto por una combinación lineal de distintas colecciones de singletes de diferente alcance que resuenan entre sí. Esta teoría de los estados RVB tuvo un resurgimiento en 1987 cuando Anderson propuso estos estados como posibles precursores de la superconductividad en los cupratos dopados [28]. En la figura 1.2 mostramos esquemáticamente un estado RVB en una red cuadrada.

En las siguientes décadas se desarrollaron y aplicaron distintos métodos teóricos y numéricos para investigar los estados fundamentales y excitaciones elementales de baja energía de los diversos modelos de AF frustrados. El principal objetivo durante esta época consistió en dilucidar la naturaleza del estado fundamental de diferentes modelos. Un repaso muy completo sobre los distintos métodos analíticos y numéricos aplicados sobre el mo-

$$|\text{RVB}\rangle = \left| \begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \end{array} \right\rangle + \dots$$

Fig. 1.2: Estado RVB representado esquemáticamente como una combinación lineal de distintas colecciones de enlaces singletes.

delo de Heisenberg en distintas redes puede encontrarse en los *reviews* de Manousakis [29] (red cuadrada), Balents [11], Sachdev [30] y Misguich y Lhuillier [10].

A diferencia de los estados semiclásicos ordenados, donde las excitaciones magnéticas naturales son los magnones de espín  $S = 1$ , los estados RVB pueden dar lugar a excitaciones fraccionarias tales como los espinones, los cuales poseen espín- $\frac{1}{2}$ . La existencia de espinones ha sido demostrada en el modelo de Heisenberg unidimensional [31] y observado experimentalmente en, por ejemplo, el compuesto  $KCuF_3$  [32] y en el sulfato de cobre  $CuSO_4 \cdot 5D_2O$  [33]. En este último la teoría reproduce muy bien el espectro de excitaciones medido, como puede verse en la parte derecha de la figura 1.3. En este modelo

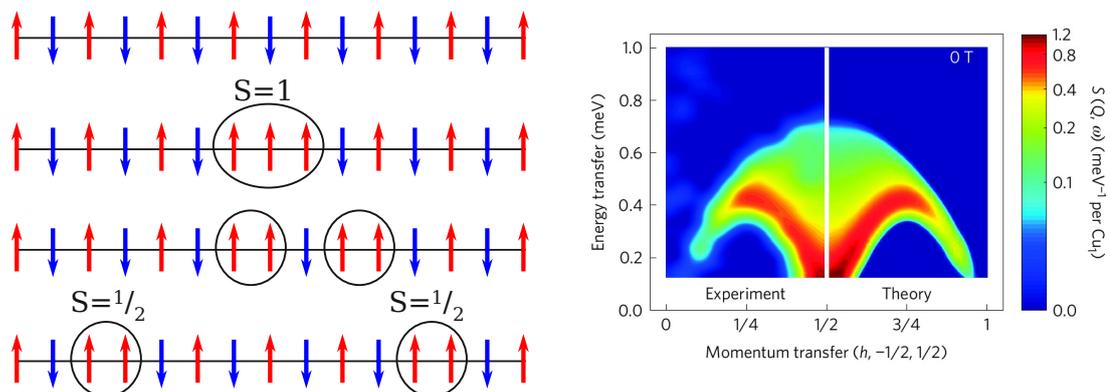
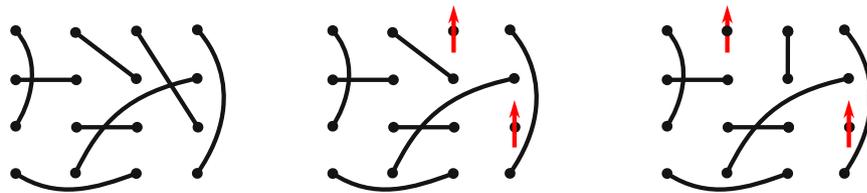


Fig. 1.3: **Izquierda:** La creación de una excitación magnética triplete de  $S = 1$  sobre el singlete de la cadena AF puede imaginarse como un espín *flip* rodeado de dos paredes de dominio, cada una de las cuales corresponde a un espinón con espín- $\frac{1}{2}$ . Estas paredes de dominio se deslocalizan y propagan independientemente. **Derecha:** La deslocalización de las excitaciones espinónicas da lugar a una señal continua en el espectro de excitaciones magnéticas. Aquí puede verse la excelente concordancia entre experimentos y teoría que se encuentra en estos modelos. Gráfica tomada de [33].

los espinoes están asociados a la creación de paredes de dominio, creándose un par de ellos por cada *flip* de espín local, los cuales se moverán independientes el uno del otro y por lo tanto se dice que están “desconfinados”. Una imagen pictórica de la creación y propagación de espinoes puede verse en la parte izquierda de la figura 1.3. Una señal clara de estas excitaciones fraccionarias desconfinadas se observa en el factor de estructura dinámico  $S(\mathbf{k}, \omega)$ , que se mide directamente en los experimentos de dispersión inelástica de neutrones (INS), donde aparece un extenso continuo de estados excitados (parte derecha de la figura 1.3) en vez de una sola señal bien definida que concentre todo el peso espectral, como es de esperar cuando solamente existen excitaciones magnónicas. Si bien el concepto de espinoes en  $2D$  está ligado a propiedades topológicas, en las fases RVB pueden describirse esquemáticamente como los dos espines- $\frac{1}{2}$  en los extremos de un enlace singlete roto. Estos espines pueden propagarse lejos de manera independiente a través del reacomodamiento de los enlaces singletes propio de un estado RVB (figura 1.4). Como esta



*Fig. 1.4:* De izquierda a derecha: Una posible configuración resonante de un estado RVB donde se ha creado una excitación mediante la destrucción de un enlace singlete. Los dos espines resultantes de esta excitación pueden propagarse mediante el reacomodamiento de los enlaces singletes.

separación implica mover singletes entre configuraciones resonantes la energía que cuesta separar los espinoes a partir de cierta distancia se vuelve despreciable y los espinoes estarán desconfinados. Pero también existen sistemas en los que los espinoes se encuentran ligados. Un ejemplo sencillo de esto es el estado *sólido de enlaces de valencia* (VBS), que es un estado donde los enlaces singletes se acomodan de acuerdo a una estructura ordenada. Por ejemplo, en la figura 1.5.a vemos un estado VBS en la red cuadrada donde los singletes se acomodan en columnas. Este estado no rompe la simetría  $SU(2)$  pero posee un LRO singlete, ya que rompe la simetría traslacional de la red. Aquí al romper un enlace singlete y separar uno de los espines la energía del sistema se incrementa proporcionalmente con la longitud de la cadena de enlaces que resultan desalineados. Esto genera un potencial lineal restaurador entre los dos espines que los mantiene ligados (figuras 1.5.b

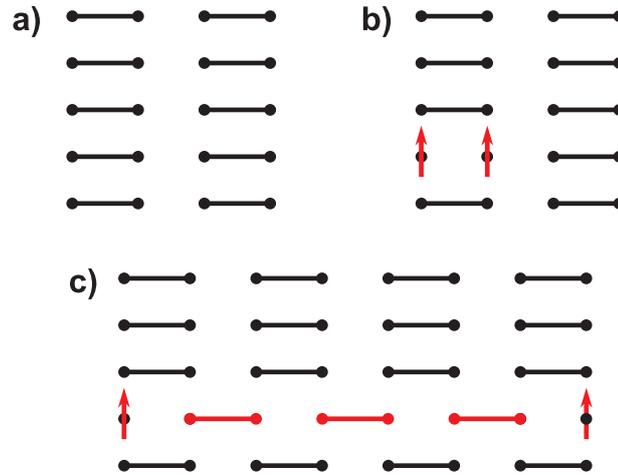


Fig. 1.5: a) Estado tipo Sólido de enlaces de valencia (VBS). b) Creación de una excitación  $S = 1$  rompiendo un enlace singlete en el estado VBS. c) Separar los dos espines resultantes de la excitación triplete genera un camino de enlaces singlete desalineados con el orden del VBS.

y c). En este sistema la excitación elemental es lo que se conoce como *triplón*, un estado triplete de dos espines ligados [34].

Una conjetura muy importante en cuanto a la cuestión del confinamiento o no de los espines en AF frustrados bidimensionales es la que aportaron en 1991 Read y Sachdev [35, 36]. Utilizando argumentos de teoría de campos de *gauge* estos autores conjeturaron que si existen correlaciones de espín conmensuradas (colineales) de corto alcance las excitaciones espinónicas estarán confinadas, mientras que correlaciones inconmensuradas (espirales) dan lugar a espines desconfiados. Si bien la naturaleza de los espines  $1D$  y  $2D$  es diferente, se espera que sus consecuencias observables sean similares y que entonces la existencia de espines desconfiados  $2D$  se manifieste como un extenso continuo en el espectro de excitaciones.

Tanto la idea de un estado RVB, que supone un fuerte entrelazamiento cuántico, como la existencia de excitaciones espinónicas desconfiadas en  $2D$  resultan ser propuestas muy interesantes, pero existían pocos indicios de estos comportamientos en los materiales reales. Sin embargo, en estos últimos años, gracias al avance en las técnicas experimentales de INS, se han logrado mediciones más precisas y detalladas, encontrando resultados bastante novedosos en donde todos estos aspectos, convencionales y no convencionales, coexisten.

Por un lado, se ha medido un extenso continuo de excitaciones en la fase ordenada de la red triangular anisotrópica  $Cs_2CuCl_4$ , [37, 38] siendo un claro indicio de la presencia de excitaciones espinónicas. Este resultado sería la primer evidencia de espinones  $2D$  desconfiados y podría entenderse si el  $Cs_2CuCl_4$  estuviese muy próximo a una fase tipo líquido de espín RVB, donde se manifestaría un *crossover* en la naturaleza de las excitaciones [38]. Pero recientes estudios teóricos apuntan a que las excitaciones elementales en juego serían mas bien espinones  $1D$  con la particularidad de que se mueven entre cadenas como un triplón de espinones ligados, enmarcando al  $Cs_2CuCl_4$  como un material donde ocurre un novedoso fenómeno de “reducción dimensional” inducida por la frustración [39, 11].

También novedosos son los resultados de mediciones sobre el material CFTD (*copper deuterioformate tetradeuterate*), un típico AF de Heisenberg sobre la red cuadrada [40]. En este compuesto se ha medido en el vector de onda  $(\pi; 0)$  y  $(0; \pi)$  una reducción importante de la intensidad espectral respecto de la teoría de ondas de espín, la cual ha sido vinculada con un fuerte entrelazamiento cuántico (*entanglement*) que en principio no puede capturarse con una descripción semiclásica convencional. Una interpretación alternativa del estado fundamental cuántico de Néel puede ser representada mediante una función de onda compuesta por una combinación lineal de una parte clásica (Néel) más configuraciones tipo RVB de corto alcance, como se muestra en la figura 1.6. De esta manera

$$|\text{AF}\rangle = \eta \left| \begin{array}{cccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \end{array} \right\rangle + \nu_1 \left| \begin{array}{cccc} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{array} \right\rangle + \nu_2 \left| \begin{array}{cccc} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{array} \right\rangle + \dots$$

Fig. 1.6: Una imagen pictórica alternativa a la semiclásica del estado fundamental de la red cuadrada, visto como el estado de Néel (con peso  $\eta$ ) más las correcciones cuánticas (con pesos  $\nu_n$ ) debidas al entrelazamiento cuántico.

las fluctuaciones cuánticas sobre el estado de Néel clásico, además de la renormalización usualmente conocida (magnetización reducida, energía, etc.), estarían dando lugar a un entrelazamiento de corto alcance entre espines, aún en un sistema no frustrado como este.

Un comportamiento similar de disminución del peso espectral en  $(\pi; 0)$  y  $(0; \pi)$  se ha observado recientemente en el cuprato  $La_2CuO_4$  [41]. Aquí se propone que las ondas de espín con vector de onda  $(\pi; 0)$  y  $(0; \pi)$  estarían más fuertemente acopladas a excitaciones espinónicas que existen a altas energías. Esto facilitaría el proceso de decaimiento del

magnón en estos puntos de la ZB, reduciendo su intensidad espectral y produciendo un continuo de excitaciones en mayores energías.

Estos nuevos resultados motivan el desarrollo de técnicas analíticas que puedan enmarcarse en estos escenarios y que permitan capturar los comportamientos no convencionales obtenidos experimentalmente. En este sentido, la teoría de bosones de Schwinger es una técnica ideal para estos estudios: naturalmente incorpora partículas de espín fraccionario, ofrece una descripción en términos de operadores de enlace y puede describir tanto fases ordenadas como desordenadas. Si bien esta técnica admite distintos tipos de implementaciones, recientemente Flint y Coleman [42] mostraron la necesidad de utilizar dos tipos de operadores de *link* singletes de manera de capturar en el límite *large-N* la invariancia rotacional y la inversión temporal de los espines. Por esa razón esta última implementación es utilizada a lo largo de esta tesis (ver descripción en capítulo 2), con excepción del capítulo 6 donde se estudia el modelo  $XXZ$ .

### **1.1.2. Estudios realizados y resultados más relevantes de esta tesis**

#### **1- Ruptura de simetría discreta y continua en el modelo de Heisenberg $J_1 - J_3$ sobre la red cuadrada**

Como ya hemos mencionado en la introducción general, el estudio de los efectos de las fluctuaciones cuánticas de punto cero en el estado fundamental de sistemas bidimensionales magnéticamente frustrados ha sido de gran interés en las últimas dos décadas. Debido a su bidimensionalidad se sabe que estos sistemas no pueden romper la simetría  $SU(2)$  a temperatura finita por el teorema de Mermin-Wagner. Sin embargo, Chandra, Coleman y Larkin [43] propusieron la posible existencia de fases no convencionales a temperatura finita como consecuencia de la ruptura de alguna simetría discreta no trivial proveniente de la frustración magnética del sistema. Si bien esta fenomenología resultó ser correcta en el modelo de la red cuadrada con interacciones a primeros y segundos vecinos, modelo  $J_1 - J_2$ , solo algún indicio de este fenómeno fue encontrado por Capriotti y Sachdev en el modelo con interacciones a primeros y terceros vecinos, modelo  $J_1 - J_3$ , mediante cálculos de Monte Carlo clásico [44]. Motivados por todo esto, en el capítulo 3 de esta tesis estudiamos el diagrama de fases cuántico ( $T = 0$ ) y a temperatura finita del modelo  $J_1 - J_3$ . Además de ser ideal para el estudio de fases invariantes rotacionales a temperaturas finitas, la teoría de bosones de Schwinger nos da la posibilidad de incorporar el

efecto combinado de las fluctuaciones térmicas y cuánticas en el modelo. El resultado más relevante que encontramos es que dicho fenómeno de ruptura de simetría discreta efectivamente ocurre a temperaturas cualitativamente similares a las predichas por Monte Carlo clásico. Además, inesperadamente, para  $J_3/J_1 > 1$  encontramos una región del diagrama correspondiente a una fase de cuatro subredes de Néel desacopladas una de otra (ver figura 3.11 en el capítulo 3).

## **2- Excitaciones elementales y propiedades termodinámicas del antiferromagneto triangular**

En la comunidad hay un consenso bastante firme sobre la presencia de un orden de Néel de  $120^\circ$  como estado fundamental del AF triangular, lo cual da un apoyo a teorías semiclásicas tales como la teoría de ondas de espín o el modelo sigma no-lineal. Sin embargo surgen dos problemas importantes: i) el espectro de energías predicho a  $T = 0$  por expansiones en series muestra una fuerte renormalización respecto de la dispersión de ondas de espín, junto con la aparición de mínimos de tipo rotónico [45] y ii) la entropía predicha por expansiones de alta temperatura [46] alrededor de  $T = 0.25J$  es un orden de magnitud mayor que la encontrada con el modelo sigma no-lineal [47]. Los intentos de explicar las excitaciones rotónicas van desde una descripción de espinones de espín- $\frac{1}{2}$  fermiónicos hasta una de magnones interactuantes, mientras que los altos valores de entropía fueron atribuidos a un probable cambio de régimen a temperatura finita desde uno clásico renormalizado a uno crítico cuántico. En los capítulos 4 y 5 de esta tesis mostramos que la teoría de bosones de Schwinger, apropiadamente adaptada, resuelve coherentemente estos dos problemas mencionados arriba. Nuestro resultado más relevante consiste en el hecho de que hemos podido reproducir el espectro de excitaciones que predicen las expansiones en series con una teoría que describe las excitaciones de espín-1 en términos de pares de espinones. En particular las excitaciones rotónicas se pueden identificar con fluctuaciones colineales de corto alcance por sobre el orden de Néel de  $120^\circ$ . Además hemos podido identificar las excitaciones no físicas provenientes de la relajación de la condición local de un bosón por sitio, característica de la aproximación de campo medio de bosones de Schwinger. Esto nos permitió reconstruir una energía libre que recupera resultados muy confiables para la entropía, susceptibilidad uniforme y calor específico. Todos estos resultados sugieren que la teoría de espinones bosónicos debería ser considerada seriamente como una alternativa válida para interpretar la física de un antiferromagneto triangular.

## **3- Estudio del modelo XXZ en la red triangular y su relación con experi-**

## mentos recientes

Recientemente se halló que el compuesto inorgánico  $Ba_3CoSb_2O_9$  parece ser una muy buena realización experimental del modelo de Heisenberg de espín- $\frac{1}{2}$  sobre la red triangular [48]. Además de presentar el característico plateau a  $1/3$  de la magnetización de saturación con campo magnético, este compuesto se ordena a una  $T = 3.8K$  con una estructura de Néel de  $120^\circ$ . Los experimentos de dispersión inelástica de neutrones muestran un espectro con excitaciones de tipo rotónica similar a los mencionados anteriormente. Sin embargo, a diferencia de lo que usualmente se espera, el peso espectral se concentra mayormente sobre el continuo de altas energías –en vez de a bajas energías– lo cual ha sido relacionado con la posible presencia de excitaciones fraccionarias de tipo espinónica [49]. Dado que el modelo más adecuado es el Heisenberg XXZ triangular, como primer paso, extendimos la teoría de bosones de Schwinger para este caso lo cual requirió la incorporación de cuatro tipos de operadores de *link* que respetan la simetría  $O(2) \times Z_2$  del Hamiltoniano. Cabe destacar que si bien este tipo de operadores ya había sido sugerido en otro contexto, el cálculo completo para el modelo XXZ triangular ha sido realizado por primera vez en esta tesis, obteniéndose resultados muy confiables respecto a las predicciones de teorías convencionales. El resultado más relevante, sin embargo, radica en el hecho de que para lograr la importante transferencia de peso espectral hacia altas energías –observada en los espectros– es crucial la incorporación de una frustración extra a segundos vecinos. En este sentido, consideramos que nuestros resultados pueden ser de utilidad en el análisis del espectro de dispersión inelástica de neutrones, sobre todo, a la hora de discernir entre una descripción convencional en términos de magnones y una alternativa en términos de espinones.

## 1.2. Ruptura espontánea de simetría

En esta sección utilizaremos el hamiltoniano de Heisenberg con acople AF,  $J > 0$ , a primeros vecinos en la red cuadrada

$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (1.2)$$

para ilustrar el concepto de ruptura espontánea de simetría.  $\langle i,j \rangle$  recorre sobre todos los *links* entre primeros vecinos. También haremos algunas referencias al orden en la red

triangular.

### 1.2.1. Singletes

Comenzamos con el caso más sencillo de sólo dos espines  $S = \frac{1}{2}$ ,

$$\mathcal{H} = J\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = J\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z + J\frac{1}{2}\left(\hat{S}_1^+\hat{S}_2^- + \hat{S}_1^-\hat{S}_2^+\right). \quad (1.3)$$

La dimensión del espacio de Hilbert es  $2^2 = 4$  y una base del mismo es el conjunto de los estados  $\{|\sigma_1\sigma_2\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ , que son simultáneamente autoestados de  $\hat{S}_1^z$  y  $\hat{S}_2^z$ . Desde el punto de vista clásico las configuraciones con espines antiparalelos  $|\uparrow\downarrow\rangle$  y  $|\downarrow\uparrow\rangle$  son las que minimizan la energía, por lo que uno esperaría que también suceda en el caso cuántico. Pero observando la acción de  $\mathcal{H}$  sobre estas 2 configuraciones

$$\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 \begin{bmatrix} |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \end{bmatrix} = -\frac{1}{4} \begin{bmatrix} |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \end{bmatrix}. \quad (1.4)$$

vemos que surge un término de intercambio entre los dos espines debido a la acción de los operadores  $\hat{S}^+$  y  $\hat{S}^-$  de la expresión (1.3). Por lo tanto ambos estados no son autoestados de  $\hat{\mathcal{H}}$  y no pueden representar su estado fundamental. Este intercambio de espines es lo que se denomina *fluctuación cuántica* de punto cero y su efecto sobre la configuración de espines antiparalelos es el de voltear constantemente los espines en el tiempo. Este efecto puede verse explícitamente si se prepara al sistema, por ejemplo, en el estado  $|\uparrow\downarrow\rangle$  en el instante  $t = 0$  y se lo deja evolucionar en el tiempo  $|\uparrow\downarrow(t)\rangle = \hat{U}(t)|\uparrow\downarrow\rangle$ , siendo  $\hat{U}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t}$  el operador evolución. Calculando, por ejemplo, la magnetización del sitio 1

$$\langle\uparrow\downarrow(t)|\hat{S}_1^z|\uparrow\downarrow(t)\rangle = \frac{1}{2}\cos(Jt), \quad (1.5)$$

se ve claramente que la misma cambia con el tiempo debido al efecto de  $\mathcal{H}$  sobre la configuración antiparalela inicial. Las fluctuaciones cuánticas se encuentran en los sistemas cuánticos aún a  $T = 0$ , marcando un claro contraste con el caso clásico dónde sólo tenemos las fluctuaciones térmicas a temperatura finita. Como hemos comentado en la sección anterior, las fluctuaciones cuánticas juegan entonces un papel importante en la determinación del estado fundamental, ya que dependiendo del valor de las mismas pueden establecerse diferentes estados fundamentales.

El hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}$  es invariante rotacional, y al diagonalizarlo se encuentra que el estado

fundamental es un singlete

$$|S\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (1.6)$$

que es un estado con las mismas simetrías que  $\hat{\mathcal{H}}$ , es decir, también es invariante rotacional.

*¿Qué sucederá al tener más espines?* Aparece aquí el teorema de Lieb y Mattis, [19] quienes extendieron y generalizaron el resultado originalmente obtenido por Marshall, [18] el cual es uno de los pocos resultados rigurosos sobre las propiedades del estado fundamental del modelo de Heisenberg AF. El mismo establece que en el modelo de Heisenberg para toda red bipartita y finita el estado fundamental es un singlete,  $S_{\text{tot}} = 0$ , no degenerado.

Veamos ahora el caso de 4 espines. Se puede ver que existen para este sistema 2 estados singletes ( $S_{\text{tot}} = 0$ ) posibles<sup>4</sup> y el estado fundamental  $|\text{GS}\rangle$  será una combinación lineal de los mismos. De manera general los estados singletes de más de dos espines se obtienen dejando a todos los espines participar en un “enlace” singlete con un espín vecino. Para este caso de 4 espines se puede elegir, por ejemplo, la base de los dos estados representados en la figura 1.7, donde cada línea entre dos sitios representa un enlace singlete como el de la ecuación (1.6). Análogamente a lo encontrado para dos sitios, donde el hamiltoniano

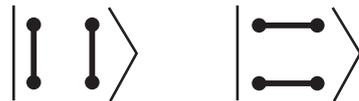


Fig. 1.7: Dos configuraciones singletes posibles en el sistema de 4 espines.

intercambia en el tiempo los espines y convierte el estado  $|\uparrow\downarrow\rangle$  en  $|\downarrow\uparrow\rangle$  y viceversa, en el caso de 4 espines existen términos del hamiltoniano que hacen “resonar” al sistema entre las dos configuraciones de enlaces singletes de la figura 1.7. El estado fundamental  $|\text{GS}\rangle$  resulta una combinación lineal de estas dos configuraciones singletes, como se muestra en la figura 1.8, y se le llama estado de “enlaces de valencia resonantes” (RVB)<sup>5</sup>. A medida que vamos tomando redes más grandes el número total de configuraciones singletes que existen crece rápidamente. De manera general, todos los estados singletes pueden construirse por una combinación lineal de enlaces de valencia, de todos los alcances posibles, y así el

<sup>4</sup> Además pueden configurarse 3 tripletes ( $S_{\text{tot}} = 1$ ) y 1 quintuplete ( $S_{\text{tot}} = 2$ ).

<sup>5</sup> La palabra *valencia* aparece en analogía a un estado de la molécula de benceno, el cual resuena entre dos configuraciones diferentes de sus enlaces valentes.

$$|\text{GS}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ \downarrow & \downarrow \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \downarrow \\ \downarrow & \uparrow \end{array} \right\rangle \right)$$

Fig. 1.8: Estado fundamental singlete del sistema de 4 espines.

$|\text{GS}\rangle$  RVB resulta ahora una superposición de una gran cantidad de estados de enlaces de valencia, tal cual se mostró previamente en la figura 1.2. Pero el interés real consiste en dilucidar si en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  el estado fundamental sigue siendo RVB, o si ocurre una ruptura de simetría.

### 1.2.2. Orden de largo alcance

Se puede verificar que la configuración clásica de menor energía del hamiltoniano de Heisenberg (1.2) es aquella en que cada espín se encuentra ordenado antiparalelamente a sus vecinos próximos. Este es el estado de “Néel”, compuesto por dos subredes ferromagnéticas interpenetradas y alineadas antiparalelamente entre ellas, y se muestra en la figura 1.9.a. Análogamente, en la red triangular el estado de Néel clásico es aquel compues-

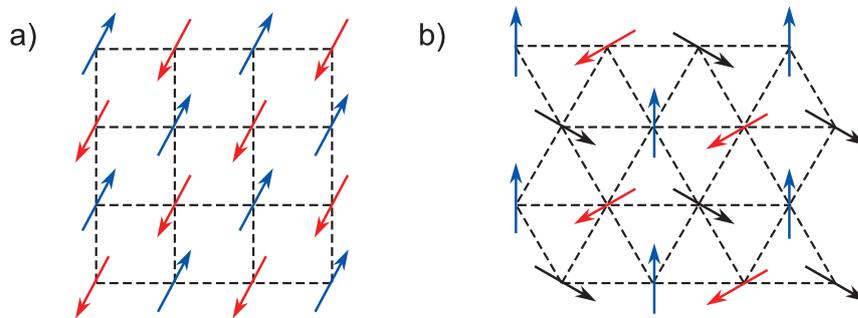


Fig. 1.9: a) Configuración de Néel clásica en una red cuadrada. b) Configuración de Néel clásica en una red triangular.

to de tres subredes ferromagnéticas interpenetradas pero que ahora están rotadas  $120^\circ$  una respecto de otra (figura 1.9.b). Estos estados de Néel poseen LRO magnético caracterizado por el vector de onda magnético  $\mathbf{Q}_{AF} = (\pi; \pi)$  para la red cuadrada y  $\mathbf{Q}_{AF} = (\frac{2}{3}\pi; \frac{2}{\sqrt{3}}\pi)$  para la red triangular. En estos estados la función correlación espín-espín AF

$$C_{\mathbf{Q}_{AF}}(\mathbf{R}_i) = e^{i\mathbf{Q}_{AF}\cdot\mathbf{R}_i} \langle \hat{\mathbf{S}}_0 \cdot \hat{\mathbf{S}}_i \rangle, \quad (1.7)$$

mantiene un valor finito en el límite de  $\mathbf{R}_i \rightarrow \infty$

$$\lim_{|\mathbf{R}_i| \rightarrow \infty} C_{\mathbf{Q}_{AF}}(\mathbf{R}_i) > 0, \quad (1.8)$$

lo cual significa por ejemplo en la red cuadrada que dos espines de distintas subredes que se encuentran muy alejados permanecen correlacionados antiferromagnéticamente. La cantidad  $(\mathbf{Q}_{AF} \cdot \mathbf{R}_i)$  mide el ángulo relativo entre el espín del sitio  $i$  y el del sitio 0. Para el orden de Néel en la red triangular este ángulo es siempre múltiplo de  $120^\circ$ , mientras que en la red cuadrada es múltiplo de  $180^\circ$  (y en este caso la exponencial  $e^{i\mathbf{Q}_{AF} \cdot \mathbf{R}_i}$  toma el valor  $+1$  o  $-1$  dependiendo a cual subred pertenece el sitio  $i$ ). Por otro lado, en el caso en que la función de correlación  $C_{\mathbf{Q}_{AF}}(\mathbf{R}_i)$  decaiga a cero de acuerdo a una ley de potencias,  $C_{\mathbf{Q}_{AF}}(\mathbf{R}_i) \sim |\mathbf{R}_i|^{-n}$ , se dice que hay *cuasi-orden de largo alcance* (como ocurre en la cadena AF de espín- $\frac{1}{2}$ ); mientras que si decae de manera exponencial,  $C_{\mathbf{Q}_{AF}}(\mathbf{R}_i) \sim e^{-|\mathbf{R}_i|/\xi}$  con  $\xi$  finito, se dice que el sistema posee un *orden de corto alcance* (SRO) y está desordenado magnéticamente. La cantidad  $\xi$  es la *longitud de correlación* característica e indica hasta qué distancia dos espines permanecen correlacionados con momento  $\mathbf{Q}_{AF}$ . Un estado con LRO implica una longitud de correlación  $\xi$  infinita.

Similarmente al estado clásico  $|\uparrow\downarrow\rangle$  en el modelo de dos espines, el estado de Néel clásico no es autoestado del hamiltoniano cuántico. Esto puede verse notando que el operador *parámetro de orden* de un estado Néel, el operador magnetización AF, o *staggered*

$$\hat{m}_{AF} = \frac{1}{N} \sum_i e^{i\mathbf{Q}_{AF} \cdot \mathbf{R}_i} \hat{S}_i^z, \quad (1.9)$$

no conmuta con el hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}$ . Esta no conmutatividad implica que  $\hat{m}_{AF}$  es una cantidad que no se conserva y por lo tanto al actuar el operador evolución se inducen fluctuaciones cuánticas. De esta manera un estado de Néel *cuántico* difiere de uno *clásico* en que las fluctuaciones cuánticas provocan una reducción de la magnetización  $m_{AF} = \langle \hat{m}_{AF} \rangle$  respecto del valor clásico  $S$ . Si son lo suficientemente intensas, incluso pueden anular la magnetización,  $m_{AF} = 0$ , e inducir una transición de fase a un estado desordenado magnéticamente.

Ahora, si bien por Lieb-Mattis para toda red bipartita finita el estado fundamental es un singlete, hay mucha evidencia analítica y numérica de que el estado fundamental en la red cuadrada en el límite termodinámico es un LRO de Néel [29]. En cuanto a la red triangular, al ser una red frustrada durante mucho tiempo se pensó que poseía un estado

fundamental desordenado. Pero actualmente desde el lado numérico se ha establecido firmemente que su estado fundamental es un orden de Néel de  $120^\circ$  robusto [50, 51, 52].

Los experimentos de dispersión de neutrones son ideales para observar el orden magnético y en varios materiales con redes magnéticas cuadradas han verificado el orden magnético de Néel. El LRO y la presencia de subredes magnéticas se relaciona en estos experimentos con la aparición de picos de Bragg extra en el factor de estructura estático. Esta relación es bastante directa si observamos la definición del factor de estructura estático,

$$S(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \langle \hat{\mathbf{S}}_0 \cdot \hat{\mathbf{S}}_i \rangle, \quad (1.10)$$

donde se ve que la presencia de un orden de Néel cuántico conduce a una señal intensa de  $S(\mathbf{k})$  en  $\mathbf{k} = \mathbf{Q}_{AF}$ , ya que se estaría satisfaciendo (1.8). La amplitud de este pico da una medida de cuan robusto es el orden magnético, ya que está relacionada con el parámetro de orden  $m_{AF}$ . Esta relación puede verse en el siguiente ejemplo: supóngase un orden de Néel semiclásico con magnetización reducida  $m_{AF}$  yaciendo sobre el plano  $x - y$ . La estructura de los espines resulta

$$\begin{aligned} S_i^x &= m_{AF} \cos(\mathbf{Q}_{AF} \cdot \mathbf{R}_i) \\ S_i^y &= m_{AF} \sin(\mathbf{Q}_{AF} \cdot \mathbf{R}_i) \\ S_i^z &= 0. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Al evaluar el factor de estructura estático (1.10), es fácil ver que los picos de Bragg valen

$$S(\mathbf{Q}_{AF}) = \frac{N}{2} m_{AF}^2. \quad (1.12)$$

Sin embargo por teorema de Lieb-Mattis sabemos que el estado fundamental es un singlete por lo que el valor medio de la magnetización local es  $\langle \hat{m}_{AF} \rangle = 0$ . Una manera de compatibilizar esto con la ecuación (1.12) es asumir que en vez de  $\langle \hat{m}_{AF} \rangle$  es la cantidad  $\langle \hat{m}_{AF}^2 \rangle$  la que está relacionada con  $S(\mathbf{Q}_{AF})$ . Es decir que, si bien el promedio temporal de la magnetización local es cero las dos subredes están orientadas antiferromagnéticamente – una respecto de otra –, aunque la dirección preferencial sigue siendo arbitraria. Esto puede interpretarse como que el orden AF se encuentra “rotando” de forma tal que se restaura la invariancia rotacional del singlete. A medida que el tamaño de la red  $N$  aumenta el momento de inercia se incrementa, mientras que la velocidad de rotación del

orden de Néel se hace cada vez más lenta. Luego se puede demostrar que el estado con simetría rota se encuentra cuasi-degenerado con el estado fundamental singlete.

Una de las consecuencias de la ruptura de simetría es la aparición de modos de energía cero lo cual constituye el resultado fundamental del teorema de Goldstone que afirma:

*cuando el estado fundamental de un hamiltoniano con interacciones de corto alcance rompe alguna simetría continua se inducen excitaciones de bajas energías denominadas modos de Goldstone.*

Así, cuando se establece un orden de Néel de dos subredes la invariancia del hamiltoniano ante rotaciones de los espines alrededor de los ejes  $x, y$  y  $z$  se rompe, quedando sólo la invariancia ante rotaciones alrededor, por ejemplo, del eje  $z$ . De esta manera, el número de modos de Goldstone es  $3 - 1 = 2$ . En el caso de fases con orden espiral (ver capítulo 3) no queda ninguna simetría original del hamiltoniano, razón por la cual aparecen 3 modos de Goldstone.

### 1.2.3. Torre de estados de Anderson

Una profundización sobre el proceso de ruptura de simetría fue dada por P. W. Anderson, [24] proponiendo que la estructura del espectro de energías de un AF de tamaño finito contiene información suficiente para dilucidar la ocurrencia de la ruptura de simetría en el límite termodinámico<sup>6</sup>. Por ejemplo, de existir un orden de Néel de dos subredes a  $T = 0$ , el estado macroscópico queda definido por los ángulos de Euler del parámetro de orden. Por otro lado las variables conjugadas de estos ángulos de Euler son las componentes del espín total, cuya precesión está descrita por el hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{Néel}} = \frac{\hat{\mathbf{S}}_{\text{tot}}^2}{2\chi N}. \quad (1.14)$$

Esta ecuación representa el movimiento de un rotor rígido con momento de inercia  $I$  expresado en función de la susceptibilidad magnética homogénea  $\chi$  y el tamaño  $N$  de la forma  $I = \chi N$ . Luego, si el sistema tiene un orden de largo alcance con una cierta rigidez

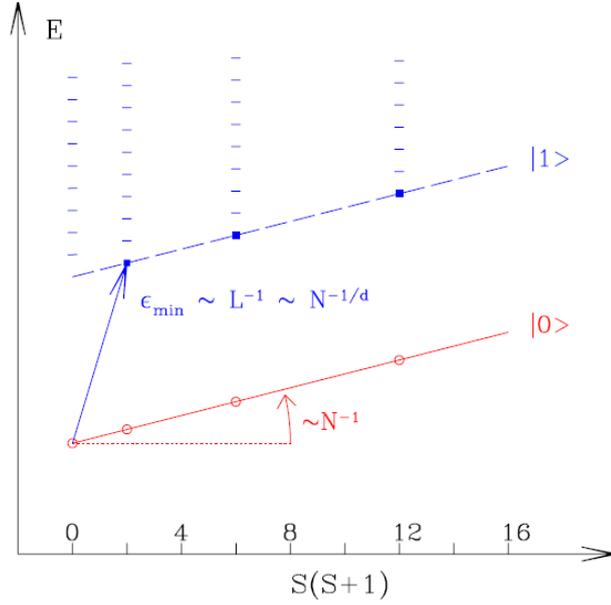
<sup>6</sup> El procedimiento usual para detectar la ocurrencia de una ruptura espontánea de simetría consiste en incorporar al sistema un campo magnético infinitesimal alternante,  $\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{\mathcal{H}} + (h \sum_i e^{i \mathbf{Q}_{AF} \cdot \mathbf{R}_i}) \hat{S}_i^z$ . Luego la existencia de ruptura espontánea de simetría en el límite termodinámico queda comprobada cuando, respetando el siguiente orden de límites, el valor medio de la magnetización adquiere un valor finito:

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \hat{m}_{\mathbf{Q}} \rangle \neq 0. \quad (1.13)$$

el movimiento de los grados de libertad internos estarán gobernados por un hamiltoniano AF de magnones  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{magnones}}$ , resultando el hamiltoniano total:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{tot}} = \frac{\hat{\mathbf{S}}_{\text{tot}}^2}{2\chi N} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{magnones}} \quad (1.15)$$

Cuando  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{tot}}$  es invariante  $SU(2)$ ,  $\hat{\mathbf{S}}_{\text{tot}}^2$  es una constante de movimiento y sus autovalores  $S(S+1)$  son buenos números cuánticos. Entonces, cuando el espectro de tamaño finito



*Fig. 1.10:* Espectro típico de un AF con orden de Néel. Los autoestados unidos por la línea roja y notado  $|0\rangle$  conforman la torre de estados de Anderson necesaria para formar el estado fundamental de Néel ordenado con ruptura de simetría. Dicho estado es no estacionario en una red finita. El segundo conjunto  $|1\rangle$ , unido por la línea azul discontinua, está asociado al magnón de más baja energía.  $S_{\text{tot}}$  se nota aquí como  $S$ .

de un AF ordenado se expresa en función de  $S(S+1)$  su estructura es similar a la mostrada en la línea roja sólida de la figura 1.10. Esta línea es una torre (de Pisa) de estados asociados al vacío de magnones  $|0\rangle$  que colapsa al estado fundamental como  $1/N$ , y puede reconocerse también otra torre de estados  $|1\rangle$  asociada al magnón más blando que colapsa al estado fundamental como  $N^{-\frac{1}{D}}$ , con  $D$  la dimensión del sistema (línea de trazos azul). El orden de Néel semiclásico del estado fundamental, con parámetro de orden apuntando en la dirección  $(\theta, \phi)$  de los ángulos de Euler, corresponde a un paquete de ondas construido a partir de los distintos estados de espín total  $S$  de la torre  $|0\rangle$ . Cuando el número de valores diferentes de  $S$  es del orden de  $\sqrt{N}$  el parámetro de orden puede quedar localizado.

Si además los niveles de la familia de estados  $|0\rangle$  colapsan hacia el estado fundamental más rápido que el magnón más blando  $|1\rangle$ , entonces la descripción semiclásica sobrevive a los efectos de las fluctuaciones cuánticas y el sistema exhibe orden magnético de largo alcance<sup>7</sup>. En particular, cálculos de diagonalización exacta para un AF en  $2D$  confirman esta estructura de las torres de estados lo cual demuestra la presencia de un estado con simetría  $SU(2)$  rota en el límite termodinámico. Este último procedimiento ha sido utilizado para demostrar la existencia, o no, de ruptura de simetría en el límite termodinámico de una gran variedad de sistemas magnéticos frustrados a partir de sistemas finitos.

#### 1.2.4. Teorema de Mermin-Wagner: efecto de la temperatura

Al igual que con las fluctuaciones cuánticas, es de esperar que la aparición de fluctuaciones térmicas también reduzca las correlaciones de espín. Esto pasa tanto para sistemas cuánticos como clásicos. Cuando la temperatura  $k_B T$  es mucho mayor que el rango de energías de acople característico del sistema ( $J$ ), se espera que el parámetro de orden se anule y la correlación entre espines decaiga exponencialmente. Existirá entonces una temperatura  $T_c$  en la cual se produce una transición entre la fase ordenada y la desordenada. De la misma manera, la aparición de un gap en el espectro de excitaciones magnéticas puede demostrarse que implica la existencia de longitudes de correlación espín-espín finitas y por lo tanto un estado fundamental desordenado magnéticamente.

La dimensionalidad del sistema tiene un drástico efecto sobre la temperatura crítica mencionada. Mermin y Wagner [26] mostraron que para modelos de espín uni- y bidimensionales con interacciones de corto alcance no puede haber ruptura espontánea de una simetría continua a temperatura finita, por lo tanto la temperatura crítica es estrictamente igual a cero. Es decir, el orden de largo alcance es inestable, para todo  $S$ , ante la presencia de fluctuaciones térmicas. Este resultado impone una restricción muy importante en las técnicas a utilizar para el tratamiento de los AF  $2D$  a  $T$  finita, ya que las mismas deben permitir estados que no rompan la simetría  $SU(2)$ . Por ejemplo, como veremos en la sección 2.2 del próximo capítulo, la teoría de ondas de espín (SWT) presupone un estado ordenado, por lo que se vuelve inválida al utilizarla a temperaturas finitas (aunque existe una teoría modificada que permite aplicar SWT a  $T > 0$ ). Por otro lado, la teoría de bosones de Schwinger incorpora naturalmente la simetría  $SU(2)$ , permitiendo trabajar

---

<sup>7</sup> Es interesante notar que en  $D = 1$  es imposible distinguir entre las torres de estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ , lo cual invalida la descripción semiclásica. Esto es consistente con las predicciones de la teoría de ondas de espín para  $D = 1$ .

---

con estados desordenados. A la vez permite también la posibilidad de estados ordenados a  $T = 0$ , donde estos últimos están relacionados con la condensación de los bosones.

Es importante remarcar que el teorema de Mermin-Wagner se aplica sólo a simetrías continuas. Existen sistemas que a  $T = 0$  además de romper la simetría continua  $SU(2)$  pueden también romper alguna simetría discreta. Esto ocurre por ejemplo en fases con orden espiral tipo  $(Q; Q)$ , donde el estado fundamental rompe también la simetría discreta  $Z_2$  al seleccionar alguna de las dos estructuras equivalentes  $(Q; Q)$  o  $(Q; -Q)$  (ver capítulo 3). Cuando la temperatura toma valores finitos las simetrías continuas se restauran inmediatamente, pero no necesariamente ocurre lo mismo con la simetría discreta, pudiendo esta última restaurarse a una temperatura  $T_c > 0$ .

## 2. TEORÍA DE BOSONES DE SCHWINGER PARA SISTEMAS FRUSTRADOS

### Índice

---

<b>2.1. Introducción</b>	<b>31</b>
2.1.1. Modelo de Heisenberg AF frustrado: teorías semiclásicas	31
2.1.2. Teoría de bosones de Schwinger: un poco de historia	33
<b>2.2. Representación de bosones de Schwinger</b>	<b>36</b>
2.2.1. Interacción espín-espín	40
2.2.2. Aproximación de campo medio	42
2.2.3. Diagonalización	44
2.2.4. Ecuaciones autoconsistentes a $T$ finita	46
2.2.5. Orden de largo alcance y Factor de Estructura Estático	47
2.2.6. Estado fundamental en redes finitas	50
2.2.7. Ruptura de simetría	51
2.2.8. Excitaciones de espín sobre $ \text{GS}\rangle$	54
<b>2.3. Factor de Estructura Dinámico</b>	<b>55</b>
2.3.1. Cálculo de $G^{(R)}(\mathbf{k}, \omega)$ en campo medio	56
2.3.2. Espectro de excitaciones del estado fundamental	58
2.3.3. Regla de suma	60
2.3.4. Ligadura de espinones	62
<b>2.4. Caso Anisotrópico</b>	<b>64</b>

---

## 2.1. Introducción

### 2.1.1. Modelo de Heisenberg AF frustrado: teorías semiclásicas

El antiferromagnetismo frustrado ocupa un lugar importante dentro del área de electrones fuertemente interactuantes dado que en muchas situaciones los paradigmas convencionales del magnetismo, tales como la teoría de ondas de espín o la teoría de Landau-Ginzburg-Wilson, no son válidos para describir la física relevante del problema. En ese sentido el modelo de Heisenberg AF frustrado en 2D se constituyó en un prototipo de un sistema cuántico de muchos cuerpos fuertemente interactuantes, ya que posee una gran variedad de peculiaridades que resultan muy atractivas para su estudio:

- A temperatura finita no puede haber ruptura de simetría continua –orden magnético de largo alcance– debido al teorema de Mermin-Wagner, [26] aunque ciertas simetrías discretas sí pueden ser rotas a temperatura finita, dando lugar a la aparición de nuevos grados de libertad no triviales. (ver capítulo 3)
- A temperatura cero las fluctuaciones cuánticas inherentes del AF pueden ser lo suficientemente fuertes como para desestabilizar cualquier tipo de orden semiclásico (ver capítulo 3). Esto requiere la necesidad de desarrollar nuevos conceptos y teorías capaces de describir fases magnéticas que no rompan ninguna simetría original del hamiltoniano, dando lugar a nuevos estados sin análogo clásico, tipo líquidos de espines.
- En presencia de frustración prácticamente no existen resultados exactos analíticos, salvo alguna excepciones, y la falta de un parámetro chico en el hamiltoniano dificulta la implementación de una teoría perturbativa controlada.
- Las técnicas numéricas tienen algunas limitaciones en su implementación, tales como el problema de tamaño finito en cálculos de diagonalización exacta o el problema de signo en simulaciones de Monte Carlo (MC) cuántico. En este sentido, para el estudio de las propiedades del estado fundamental, los métodos Grupo de Renormalización de la Matriz Densidad (DMRG), [53, 54] *coupled cluster method* [55] y expansiones en series (SE) [56, 57] parecen tener menos dificultades de implementación que los métodos antes mencionados; mientras que expansiones de altas temperaturas (HTE) [46] arrojan resultados confiables a bajas y no tan bajas temperaturas (En esta tesis se comparan los resultados obtenidos con MC, SE y HTE).

- Finalmente, en experimentos recientes se han encontrado una gran variedad de compuestos magnéticamente frustrados con comportamientos inusuales (ver capítulo 1). Esto provee un ámbito ideal para la investigación del modelo de Heisenberg frustrado mediante descripciones microscópicas alternativas que permitan interpretar coherentemente las observaciones.

Todos estos puntos motivan, y también condicionan, el desarrollo e implementación de técnicas analíticas que permitan derivar soluciones capaces de capturar el comportamiento *verdadero* del modelo para diferentes regímenes.

Desde el punto de vista analítico, las teorías convencionales como la teoría de ondas de espín (SWT) describen bastante bien las propiedades estáticas y dinámicas cuando los sistemas están magnéticamente ordenados. En estos casos, una vez que los operadores de espín son transformados a operadores bosónicos –transformación de Holstein Primakoff– es posible estructurar una teoría perturbativa alrededor de las estructuras clásicas mediante el parámetro  $1/S$ . Estas teorías, sin embargo, se vuelven inaplicables a temperatura finita dado que el número de magnones diverge (Mermin-Wagner), invalidando completamente el estado ordenado asumido de partida.

Para incorporar la invariancia rotacional a temperatura finita dentro de la perspectiva semiclassical se utiliza la acción efectiva de bajas energías del modelo sigma no-lineal ( $NL\sigma M$ ) en  $D + 1$  en la función de partición [58]. Esta acción efectiva resulta luego de separar apropiadamente las fluctuaciones de altas y bajas energías del parámetro de orden AF e integrar las de altas energías. Desde el punto de vista experimental, el  $NL\sigma M$  a mostrado ser muy eficiente para describir AF bidimensionales en el denominado régimen clásico renormalizado<sup>1</sup>. Sin embargo, en el caso de sistemas frustrados pueden aparecer excitaciones de energía no tan baja y que no estén contenidas en la acción efectiva, pero que afecten significativamente las propiedades termodinámicas a bajas temperaturas. Esto último se estudia en detalle en el capítulo 5.

Por otro lado, la teoría de ondas de espín junto con el  $NL\sigma M$  no son apropiados para estudiar en detalle el espectro de excitaciones de fases desordenadas 2D. Para AF en 1D, sin embargo, la inclusión de términos topológicos asociados al parámetro AF en el  $NL\sigma M$  tiene en cuenta las diferencias entre los espectros de excitaciones magnéticas desordenados correspondientes a  $S = 1/2$  (*gapless*) y  $S = 1$  (*gapped*).

<sup>1</sup> Por ejemplo, en el cuprato superconductor no dopado  $Sr_2CuO_2Cl_2$  el comportamiento de la longitud de correlación a medida que la temperatura se acerca a la temperatura de Néel  $T_N$  está muy bien descrito por el  $NL\sigma M$  [59].

### 2.1.2. Teoría de bosones de Schwinger: un poco de historia

Una idea que ha dominado las últimas dos décadas en el área del magnetismo cuántico es la incorporación de campos de *gauge* acoplados a partículas fraccionarias como fenómeno emergente de bajas energías. Esta noción, en la que los grados de libertad relevantes del problema no se encuentran contenidos en el modelo microscópico original, es análoga a la emergencia de bosones de Goldstone (magnones) como consecuencia de la ruptura de simetría rotacional, aunque en el primer caso la simetría de gauge no aparece explícitamente en el hamiltoniano.

La manera natural de introducir dichos campos de *gauge* junto con partículas de espín fraccionario es utilizando la representación de bosones de Schwinger en donde los operadores de espín se expresan en función de operadores bosónicos de espín-1/2 sujetos a una condición local en el número de bosones por sitio<sup>2</sup>. Una de las ventajas de esta representación consiste en el hecho de que la interacción espín-espín ( $\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ ) puede ser escrita en función de estructuras bicuadráticas de operadores de *link*  $\hat{X}_{ij}^\dagger \hat{X}_{ij}$  tal que los operadores  $\hat{X}_{ij}$  respeten las simetrías originales del hamiltoniano. En el transcurso de esta tesis trabajamos con dos tipos de operadores de link,  $\hat{A}_{ij}$  y  $\hat{B}_{ij}$ , para el caso isotrópico mientras que para el caso magnéticamente anisotrópico trabajamos con cuatro operadores,  $\hat{A}_{ij}$ ,  $\hat{B}_{ij}$ ,  $\hat{C}_{ij}$  y  $\hat{D}_{ij}$  (el significado de estos operadores se detalla en las secciones 2.2.1 y 2.4). Esta estructura alternativa de la interacción espín-espín permite realizar ciertos desacoples de campo medio generalizados, diferentes del desacople usual  $\langle \hat{\mathbf{S}}_i \rangle \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ , capaces de capturar la física de corto alcance, o altas energías, relevantes tanto para el estudio de fases magnéticas ordenadas como desordenadas.

Históricamente, los primeros en utilizar la teoría de bosones de Schwinger<sup>3</sup> para el estudio de AFs en  $D \leq 2$ , resaltando la relación directa entre los operadores de *link* y los singletes constituyentes de los estados RVB de Anderson, fueron Arovas y Auerbach en 1988 [60]. Además de hacer hincapié en el hecho de que estas teorías de campo medio respetaban la invariancia rotacional impuesta por el teorema de Mermin-Wagner, mostraron en forma unificada que era posible recuperar el comportamiento esperado a  $T \rightarrow 0$  de las propiedades estáticas y dinámicas de los AFs en 2D desde una fase magnética desordenada a

<sup>2</sup> Notar que no hay problemas en tener bosones de espín-1/2, ya que la teoría de campos resultante no es invariante de Lorentz; mientras que para cumplir con el teorema de estadística de espín entero la teoría cuántica de campos debe ser relativista.

<sup>3</sup> H. L. Davis utilizó en 1960 la representación de bosones de Schwinger para estudiar el estado fundamental de AF en general.

$T$  finita. Poco tiempo después, la aparición de orden magnético de largo alcance a  $T = 0$  se identificó con una condensación de los bosones de Schwinger,<sup>4</sup> quedando descriptas las fluctuaciones cuánticas de punto cero por el fluido normal de bosones [61, 62] (ver sección 2.2.7). De esta manera, el antiferromagnetismo podía ya no ser más tratado como una estructura magnética rígida, sino más bien como un fluido cuántico (esto se representa esquemáticamente en la figura 2.1).

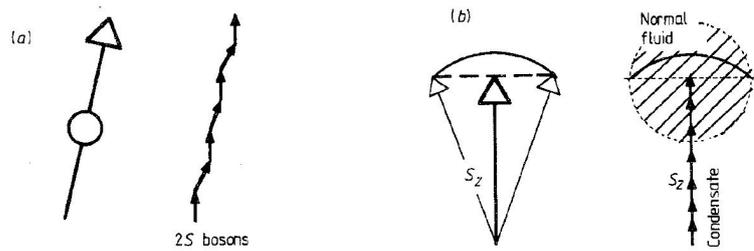


Fig. 2.1: La aproximación semiclassical versus la aproximación cuántica del magnetismo. a) Ilustración de cómo un espín de valor  $S$  es construido con  $2S$  bosones de Schwinger. b) Diagrama esquemático de la imagen de dos fluidos: el fluido normal describe las fluctuaciones de espín, mientras que el magnetismo clásico es descrito por el condensado. Figura tomada de [62].

Una ventaja metodológica importante de esta teoría, señalada por Arovas y Auerbach, es que puede ser formulada en el contexto de una teoría *large- $\mathcal{N}$*  en la cual el modelo de Heisenberg de espines interactuantes  $SU(2)$  se generaliza a una familia de modelos de espines interactuantes  $SU(\mathcal{N})$ , donde  $\mathcal{N}$  indexa un grado de libertad interno que en el lenguaje de los bosones de Schwinger se corresponde con el número  $\mathcal{N}$  de *flavors* de bosones. Luego, en el límite  $\mathcal{N} \rightarrow \infty$  es posible obtener soluciones exactas de dicho modelo, mientras que las propiedades para  $\mathcal{N}$  finito se pueden obtener como una expansión en serie de potencias del parámetro  $1/\mathcal{N}$  alrededor de estas soluciones. En pocas palabras, el procedimiento consiste en efectuar una transformación de Hubbard-Stratonovich en la función de partición formulada con la integral de camino vía estados coherentes de bosones de Schwinger y desarrollar la acción efectiva alrededor de la aproximación del punto de ensilladura. Resulta, entonces, que el primer orden de dicha aproximación coincide con la aproximación de campo medio de los operadores  $\hat{X}_{ij}^\dagger, \hat{X}_{ij}$  mencionados anteriormente. Por completitud, en el apéndice B desarrollamos brevemente los pasos principales de la

<sup>4</sup> Anteriormente, M. Cieplak y L. A. Turrski ya habían identificado en 1976 la condensación de los bosones de Schwinger con la magnetización de un ferromagneto.

aproximación de punto de ensilladura que establece la relación entre la teoría *large- $\mathcal{N}$*  y la teoría de campo medio de los bosones de Schwinger.

Estos estudios fueron extendidos por Read y Sachdev para sistemas AF frustrados [36] encontrando, en la aproximación de punto de ensilladura, o campo medio, una gran variedad de soluciones, ordenadas y desordenadas, dependiendo del valor de  $S/\mathcal{N}$ . Luego de estos hallazgos se intentaron distintos tipos de desacoples de campo medio basados en las diferentes formas en que podía ser expresada la interacción espín-espín del modelo de Heisenberg. Estos campos medios alternativos consistían en la inclusión de nuevos operadores de *link* con carácter singlete [63, 64] o triplete [62]. Comparaciones entre estos campos medios y cálculos de diagonalización exacta aplicados a una gran variedad de modelos frustrados mostraron que el esquema de cálculo basado en dos operadores de *link* singletes era el más apropiado [65]. Más aún, correcciones gaussianas a dicha aproximación de campo medio realizadas por el grupo mostraron que los resultados de campo medio eran notablemente mejorados respecto de los exactos [66]. Es interesante notar que si bien se sabía que el esquema de dos singletes era crucial para describir correctamente los resultados exactos todavía no se contaba con un argumento físico claro que justificara la utilización de dicho esquema de cálculo por sobre otro.

En el 2009 Flint y Coleman [42] reinvestigaron esta problemática en el contexto de las teorías *large- $\mathcal{N}$*  e imponiendo criterios simples de simetría, como la invariancia ante rotaciones e inversión temporal del espín, demostraron que para capturar el comportamiento colectivo correcto de los AF frustrados es fundamental expresar la interacción espín-espín en función de dos tipos de operadores de *link* invariantes  $SU(\mathcal{N})$ . Luego, en la aproximación de punto de ensilladura, las soluciones coinciden con la teoría de campo medio desarrollada por el grupo cuando  $\mathcal{N} = 2$ . Es decir que, gracias al trabajo de Flint y Coleman, el esquema de dos singletes desarrollado anteriormente por el grupo está elegantemente justificado sobre la base de argumentos de simetría para el espín en la teoría *large- $\mathcal{N}$* .

Dado que la vinculación entre la teoría de bosones de Schwinger y la teoría *large- $\mathcal{N}$*  ya ha sido desarrollada en la literatura, [60] a continuación nos concentraremos en hacer una descripción completa de la teoría de campo medio de bosones de Schwinger, la cual se utilizará a lo largo de los próximos capítulos. Aún en campo medio existen un montón de sutilezas de la teoría que han debido ser desarrolladas para el estudio de rupturas de simetrías no-triviales a  $T$  finita, transiciones de fases cuánticas, espectro de excitaciones

magnéticas y propiedades termodinámicas del modelo de Heisenberg frustrado isotrópico, así como también del modelo de Heisenberg magnéticamente anisotrópico  $XXZ$ .

## 2.2. Representación de bosones de Schwinger

En la representación de Schwinger [67, 60] la estructura matricial de un operador momento angular se reproduce exactamente con dos operadores bosónicos de espín- $\frac{1}{2}$ :

$$\hat{\mathbf{S}}_i = \frac{1}{2} \mathbf{b}_i^\dagger \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}_i, \quad (2.1)$$

con  $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z] = \left[ \left( \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right), \left( \begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array} \right), \left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right) \right]$  las matrices de Pauli y  $\mathbf{b}_i$  el espinor  $\begin{pmatrix} \hat{b}_{i\uparrow} \\ \hat{b}_{i\downarrow} \end{pmatrix}$ , donde se verifican las relaciones de conmutación bosónicas  $[\hat{b}_{i\sigma}, \hat{b}_{j\sigma'}] = 0$  y  $[\hat{b}_{i\sigma}, \hat{b}_{j\sigma'}^\dagger] = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ij} \quad \forall i, j$ .

Los operadores de espín se escriben entonces,

$$\hat{S}_i^x = \frac{1}{2} \left( \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} + \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} \right), \quad (2.2a)$$

$$\hat{S}_i^y = \frac{i}{2} \left( \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} - \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} \right), \quad (2.2b)$$

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2} \left( \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} - \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} \right), \quad (2.2c)$$

$$\hat{S}_i^+ = \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow}, \quad (2.2d)$$

$$\hat{S}_i^- = \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow}, \quad (2.2e)$$

y es fácil verificar que esta representación satisface el álgebra de los espines,  $[\hat{S}_i^x, \hat{S}_i^y] = i\hat{S}_i^z$ . Pero el espacio de Hilbert bosónico es en principio de dimensión infinita lo cual implicaría, por ejemplo, valores de  $\hat{S}_i^z$  desde  $-\infty$  a  $\infty$ , ya que el mismo está relacionado con el número de bosones de Schwinger. Es así que, para poder mapear correctamente los estados físicos de espín en los estados bosónicos, es necesario restringir el espacio de Hilbert al subespacio con el número de bosones correcto. Esto se logra agregando la restricción holonómica

$$\hat{n}_i^b = \hat{n}_{i\uparrow}^b + \hat{n}_{i\downarrow}^b = \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} + \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} = 2S \quad (2.3)$$

en cada sitio  $i$ . Puede verse que para espín  $S = \frac{1}{2}$  la restricción (2.3) sólo permite tener o 1 bosón *up* o 1 bosón *down*, que representan los dos valores posibles  $+\frac{1}{2}$  y  $-\frac{1}{2}$  de  $S^z$ , respectivamente. Este caso está representado en la figura 2.2 por los dos puntos anaranjados.

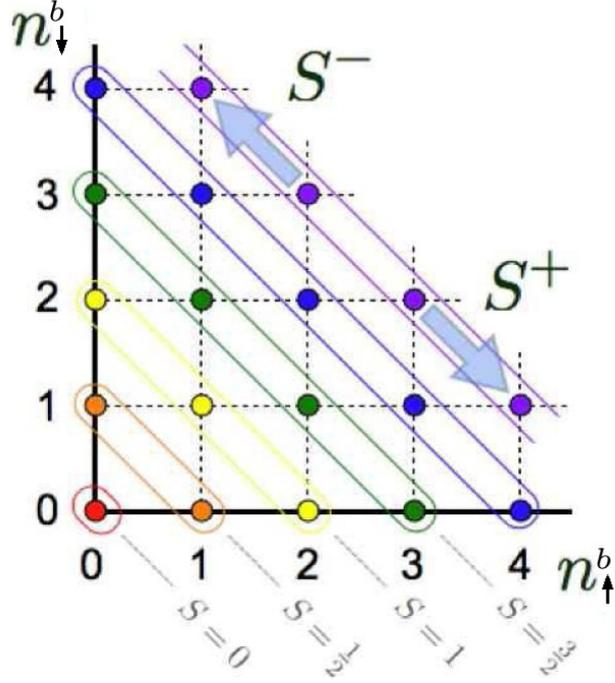


Fig. 2.2: Espacio de Fock de los bosones de Schwinger, cada color representa el subespacio de espín  $S$ . Figura tomada de [68].

En esta figura se representa el espacio de Fock de los operadores bosónicos y los subespacios físicos correspondientes a cada valor de espín  $S$  que resultan de imponer (2.3). Una manera de introducir (2.3) en el hamiltoniano es a través de un multiplicador de Lagrange,  $\lambda_i \left( \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} + \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} - 2S \right)$ , para cada sitio. Pero en esta implementación la cantidad de multiplicadores  $\lambda_i$  a resolver crece con el número de sitios, por lo cual para redes grandes resulta imposible realizar el cálculo. Debido a esto se utiliza la condición (2.3) promediada sobre todos los sitios de la red a través de un único multiplicador de Lagrange

$$\lambda \left( \sum_{i\sigma} \hat{b}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{i\sigma} - 2SN \right). \quad (2.4)$$

De esta manera se reemplaza la condición de un bosón por sitio por la condición menos restrictiva de  $2SN$  bosones en toda la red. En la figura 2.2 esto significa permitir configuraciones ubicadas entre medio de los puntos de cada color, es decir, permitir estados no físicos pero que cumplan que  $\langle \hat{n}_\uparrow^b \rangle + \langle \hat{n}_\downarrow^b \rangle = 2S$ . Por ejemplo, para espín  $-\frac{1}{2}$  se podría tener un estado donde  $\langle \hat{n}_\uparrow^b \rangle = \langle \hat{n}_\downarrow^b \rangle = \frac{1}{2}$ .

Los estados de espín (espín  $S$  y proyección  $M_S$ ) se obtienen a partir de los estados bosónicos de la siguiente manera [69]:

$$|SM_S\rangle = \frac{(\hat{b}_\uparrow^\dagger)^{S+M} (\hat{b}_\downarrow^\dagger)^{S-M}}{\sqrt{(S+M)! (S-M)!}} |0\rangle_b, \quad (2.5)$$

siendo  $|0\rangle_b$  el vacío de bosones de Schwinger.

Es importante notar, y fácil de verificar, que las ecuaciones (2.2) y la condición (2.3) no se modifican si se aplica sobre los bosones de Schwinger una transformación de *gauge*,  $\hat{b}_{i\sigma} \rightarrow \hat{b}_{i\sigma} e^{i\theta_i}$ . Es decir que la representación es invariante ante una transformación de *gauge*. Retomando lo dicho en la introducción, aparece naturalmente aquí esta simetría no trivial, la cual puede ser explotada para construir una teoría de campos de *gauge* efectiva de bajas energías interactuando con partículas fraccionarias [30].

Por otro lado, es interesante notar que esta simetría de *gauge* también puede utilizarse para eliminar uno de los bosones. En particular, si se fija el *gauge* tal que  $\hat{b}_{i\uparrow} = \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger = \sqrt{2S - \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow}}$ , [70] y escribiendo  $\hat{a}_i = \hat{b}_{i\downarrow}$ , la representación de Schwinger se transforma en la representación de Holstein-Primakoff [71]:

$$\hat{S}_i^z = S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (2.6a)$$

$$\hat{S}_i^+ = \sqrt{2S} \sqrt{\left(1 - \frac{\hat{n}_i^a}{2S}\right)} \hat{a}_i \quad (2.6b)$$

$$\hat{S}_i^- = \sqrt{2S} \hat{a}_i^\dagger \sqrt{\left(1 - \frac{\hat{n}_i^a}{2S}\right)}, \quad (2.6c)$$

donde  $\hat{a}_i$  es un operador bosónico. Antes de utilizar esta representación los operadores de espín son transformados a un sistema de ejes locales, de manera tal que en cada sitio el nuevo eje  $z'$  coincide con la estructura magnética clásica de partida. Luego, al aplicar (2.6a) las fluctuaciones locales de espín quedan descritas por el número de bosones creados en el sitio  $\hat{n}_i^a = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ . Se puede ver que una combinación lineal de dicha perturbación

$$\hat{S}_{\mathbf{k}}^- = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{i}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{S}_i^- \quad (2.7)$$

da lugar a la creación de un magnón con un momento  $\mathbf{k}$  sobre el estado clásico  $|\text{Clás}\rangle$ ,

$$\hat{S}_{\mathbf{k}}^- |\text{Clás}\rangle = |\mathbf{k}\rangle. \quad (2.8)$$

De la ecuación (2.6a) la magnetización local es

$$m = \langle \hat{S}_i^z \rangle = S - \langle \hat{n}_i^a \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.9)$$

y se ve que la misma resulta reducida desde su valor clásico  $S$  debido al número de magnones creados.

Desde el punto de vista del espín, un número de bosones  $\hat{n}_i^a > 2S$  implica valores de  $S^z$  menores a  $-S$ , por lo que este sector del espacio de Hilbert representa estados no-físicos y debe ser prohibido imponiendo la condición no holonómica  $0 < \hat{n}_i^a < 2S$ . Sin embargo, el procedimiento usual para trabajar con esta representación consiste en permitir cualquier número de bosones y realizar un desarrollo de Taylor de la raíz en potencias de  $\frac{\hat{n}_i^a}{2S}$ ,

$$\sqrt{\left(1 - \frac{\hat{n}_i^a}{2S}\right)} = 1 - \frac{\hat{n}_i^a}{4S} - \frac{\hat{n}_i^{a2}}{32S^2} \dots, \quad (2.10)$$

manteniendo sólo términos hasta cierto orden. De esta manera queda formulada la teoría de ondas de espín (SWT) en sus distintos órdenes. Reteniendo sólo el primer término (orden cero) del desarrollo (2.10) se obtiene un hamiltoniano de *magnones no interactuantes*, dando lugar a la teoría de ondas de espín lineal (LSWT). Incluyendo más términos de la serie se tiene en cuenta la interacción entre magnones.

Como el parámetro de control de la expansión (2.10) es  $\hat{n}_i^a/2S$ , el truncamiento de esta serie resulta justificado si  $\langle \hat{n}_i^a \rangle \ll 2S$ , lo cual se cumple en el régimen semiclásico,  $S$  grande, pero también puede extenderse a valores de espines más pequeños si las fluctuaciones  $\langle \hat{n}_i^a \rangle$  son lo suficientemente pequeñas. Sin embargo, sorprendentemente, para el caso físico  $S = \frac{1}{2}$  y con fluctuaciones  $\langle \hat{n}_i^a \rangle$  no tan pequeñas, SWT ha dado buenos resultados aún a orden lineal, donde difícilmente puede justificarse el truncamiento de la serie (2.10).

Un buen ejemplo de esto es el AF en la red cuadrada. Anderson [24] fue el primero en extender la LSWT al estudio de antiferromagnetos y obtuvo para la red cuadrada de espín- $\frac{1}{2}$  un valor de la magnetización *staggered*  $m_{AF} = 0.303$  (un 40 % menos que el valor clásico). Este valor apenas se modifica al agregar más términos de la serie (2.10) [72, 73] y concuerda bastante bien con métodos numéricos más sofisticados<sup>5</sup>, así como también con lo medido experimentalmente en el compuesto  $La_2CuO_4$  [29]. El espectro de energía de los magnones calculado con LSWT en este modelo también acuerda razonablemente con

<sup>5</sup> Manousakis [29] hace un análisis cuidadoso y detallado de varios resultados numéricos y propone como una buena estimación el valor  $m = 0.31 \pm 0.02$ .

los resultados obtenidos con Monte Carlo cuántico [74] y expansiones en serie (SE), [75] los cuales reproducen muy bien resultados experimentales.

Para el caso del AF en la red triangular, con LSWT se encuentra una reducción del 50 % en el valor de la magnetización,  $m \simeq 0.24$ , [76] el cual está en buen acuerdo con el valor  $m = 0.205(1)$  calculado con Monte Carlo cuántico [51]. Si bien la parte de bajas energías del espectro de excitaciones de espín calculado con LSWT acuerda bastante bien con los resultados de Monte Carlo cuántico y diagonalización exacta, [76] recientemente se ha utilizado el método de SE para calcular el espectro en la red triangular [45] y se han encontrado marcadas diferencias con LSWT en el sector de altas energías. Principalmente ocurre una fuerte renormalización hacia abajo del espectro a altas energías y se encuentra también unos marcados mínimos locales tipo *rotón* en los puntos medios de los bordes de la 1ZB [45, 77]. En el capítulo 4 abordaremos el AF triangular desde la teoría de campo medio de bosones de Schwinger, encontrando un muy buen acuerdo con estos últimos resultados.

Para finalizar, debe notarse que una de las principales limitaciones de la teoría de ondas de espín reside en la necesidad de presuponer un estado ordenado magnético, por lo que resulta inaplicable a estados desordenados. De esta manera no puede utilizarse a  $T \neq 0$ , ya que según el teorema de Mermin-Wagner el sistema estará desordenado. De hecho, consistentemente con Mermin-Wagner, el número de magnones diverge a  $T \neq 0$  lo cual implica destruir el orden magnético asumido de partida<sup>6</sup>.

### 2.2.1. Interacción espín-espín

A partir de la representación de Schwinger, la interacción espín-espín puede expresarse en término de operadores de *link* de la siguiente manera,

$$\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j = : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij}, \quad (2.11)$$

donde  $::$  indica orden normal en los bosones de Schwinger, lo cual significa que deben acomodarse todos los operadores dagados  $\hat{b}_\sigma^\dagger$  a la izquierda y los no dagados  $\hat{b}_\sigma$  a la derecha. Este orden normal es un requisito necesario para poder escribir la función partición en la

---

<sup>6</sup> Takahashi [78, 79] formuló una teoría de ondas de espín modificada que permite investigar fases desordenadas a  $T$  finita para el modelo de Heisenberg no frustrado, la cual consiste en complementar la SWT con la condición de *magnetización cero*. Esta condición se incorpora a través de un multiplicador de Lagrange,  $\lambda \sum_i (\hat{n}_i^a - S)$ , el cual actúa como un potencial químico que fija el número de magnones tal que sea  $m = 0$ .

formulación de integral de camino. Los operadores de *link* se definen como

$$\hat{A}_{ij}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma \hat{b}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{j\bar{\sigma}}^\dagger = \frac{1}{2} \left( \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{j\downarrow}^\dagger - \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{j\uparrow}^\dagger \right) \quad (2.12a)$$

$$\hat{B}_{ij}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \hat{b}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{j\sigma}^\dagger = \frac{1}{2} \left( \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{j\uparrow}^\dagger + \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{j\downarrow}^\dagger \right), \quad (2.12b)$$

pudiéndose constatar que dichas estructuras son invariantes rotacionales, es decir, son invariantes ante cualquier transformación  $SU(2)$  de los espinores  $\begin{pmatrix} \hat{b}_{i\uparrow} \\ \hat{b}_{i\downarrow} \end{pmatrix}$ . Por esta razón de aquí en adelante los llamaremos singletes. A partir de (2.12) se puede ver fácilmente que  $\hat{A}_{ij}^\dagger$  crea un singlete entre los espines de los sitios  $i$  y  $j$ , mientras que  $\hat{B}_{ij}^\dagger$  realiza un movimiento del extremo de un singlete que termina en el sitio  $i$  hacia el sitio  $j$ . Así  $\hat{A}_{ij}^\dagger$  da lugar a una correlación antiferromagnética efectiva entre  $i$  y  $j$ , mientras que  $\hat{B}_{ij}^\dagger$ , al resonar el extremo de un singlete entre ambos sitios, causa también una correlación efectiva entre ellos pero ferromagnética. En la figura 2.3 se muestra esquemáticamente la acción de los

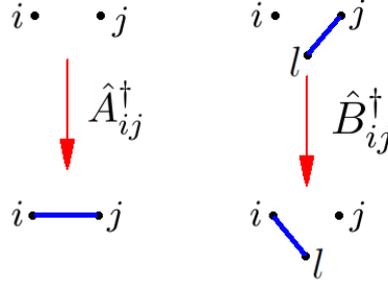


Fig. 2.3: Representación esquemática de la acción de los operadores  $\hat{A}_{ij}^\dagger$  y  $\hat{B}_{ij}^\dagger$ .

operadores  $\hat{A}_{ij}^\dagger$  y  $\hat{B}_{ij}^\dagger$ . Desde el punto de vista de los operadores de espín también se les puede dar esta interpretación. Los términos bicuadráticos pueden expresarse,

$$\begin{aligned} \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} &= \frac{1}{4} \left( \hat{\mathbf{S}}_i - \hat{\mathbf{S}}_j \right)^2 - \frac{S}{2} \\ : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : &= \frac{1}{4} \left( \hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_j \right)^2 - \frac{S}{2}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

donde vemos que  $\hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij}$  se maximiza con espines antiparalelos y  $: \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} :$  se maximiza con espines paralelos. Entonces, a nivel de campo medio  $\langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle \sim \langle \hat{\mathbf{S}}_i - \hat{\mathbf{S}}_j \rangle$  y  $\langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle \sim \langle \hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_j \rangle$ , los valores medios de  $\hat{A}_{ij}$  y de  $\hat{B}_{ij}$  pueden asociarse a correlaciones antiferromagnéticas y ferromagnéticas, respectivamente, entre los sitios  $i$  y  $j$ . Además, estos operadores poseen

las propiedades  $\hat{A}_{ji} = -\hat{A}_{ij}$  y  $\hat{B}_{ji} = \hat{B}_{ij}^\dagger$ ; y satisfacen la identidad

$$:\hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij}: + \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} = S^2, \quad (2.14)$$

a partir de la cual es posible escribir la interacción espín-espín (2.11) en términos de un solo operador singlete, ya sea  $\hat{A}_{ij}$  o  $\hat{B}_{ij}$ , y estudiar independientemente fases antiferromagnéticas o ferromagnéticas puras, respectivamente [60].

En los sistemas AF frustrados, donde se esperan fases desordenadas, se utilizan normalmente dos esquemas de cálculo: uno saca ventaja de la identidad (2.14) y utiliza únicamente el operador  $\hat{A}_{ij}$ , el otro mantiene ambos operadores,  $\hat{A}_{ij}$  y  $\hat{B}_{ij}$ . El primero fue utilizado originalmente por Auerbach y Arovas [80] para AF no frustrados y por Read, Sachdev y Yoshioka para AF frustrados [35, 70], mientras que el segundo esquema fue utilizado por primera vez en el contexto del modelo  $J_1 - J_2 - J_3$  [63, 64]. Ambos esquemas son equivalentes, pero a nivel de campo medio el esquema de dos operadores de *link* singlete ha demostrado ser el más apropiado para tratar los efectos de la frustración, ya que tiene en cuenta simultáneamente correlaciones ferro y antiferro como es de esperar en sistemas frustrados. Este esquema de dos operadores singletes es el que utilizaremos en el curso de esta tesis. Como comentamos en la introducción, la elección de este esquema ha sido elegantemente justificada por Flint y Coleman, quienes demostraron que para mantener la simetría de inversión temporal de los espines en el límite *large-N* se requiere la utilización de ambos operadores singletes [42].

### 2.2.2. Aproximación de campo medio

A diferencia del campo medio usual,  $\langle \hat{\mathbf{S}}_i \rangle \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ , la estructura bicuadrática de la ec. (2.11) permite realizar un desacople de campo medio sobre estos operadores, los cuales tienen mejor en cuenta las correlaciones magnéticas entre sitios vecinos. En dos dimensiones se espera que estas correlaciones sean importantes, tanto en presencia de fluctuaciones cuánticas como térmicas. En el contexto de la teoría *large-N*, una aproximación de campo medio sobre el esquema (2.11) es equivalente a retener sólo el orden cero del desarrollo en series de potencias de la acción alrededor de la aproximación de punto de ensilladura (ver apéndice B).

Utilizando la ecuación (2.11), el hamiltoniano de Heisenberg se expresa

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left( : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \right), \quad (2.15)$$

donde  $i = 1, 2, \dots, N$  recorre sobre todos los sitios de la red y  $j$  sobre todos los vecinos del sitio  $i$  para los que existe una interacción de intercambio  $J_{ij}$ . Para realizar el desacople de campo medio en ambos operadores se escribe cada operador como su valor medio más las variaciones alrededor de éste

$$\begin{aligned} \hat{A}_{ij} &= A_{ij} + \delta \hat{A}_{ij} \\ \hat{B}_{ij} &= B_{ij} + \delta \hat{B}_{ij}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde  $A_{ij} = \langle \hat{A}_{ij} \rangle$  y  $B_{ij} = \langle \hat{B}_{ij} \rangle$ , y luego se desecha, en la interacción espín-espín, los términos de segundo orden en las variaciones. Incorporando además la restricción promediada (2.4), se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left[ B_{ij}^* \hat{B}_{ij} + B_{ij} \hat{B}_{ij}^\dagger - A_{ij}^* \hat{A}_{ij} - A_{ij} \hat{A}_{ij}^\dagger - (|B_{ij}|^2 - |A_{ij}|^2) \right] \\ &+ \lambda \left( \sum_{i,\sigma} \hat{b}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{i\sigma} - 2SN \right). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Como  $\hat{A}_{ij}$  y  $\hat{B}_{ij}$  son operadores de *link* sus valores medios  $A_{ij}$  y  $B_{ij}$  son función de la distancia relativa  $\mathbf{R}_\delta = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$  (al igual que  $J_{ij}$ ). Durante esta tesis trabajaremos con el siguiente *ansatz*:  $A_{ij}$  es imaginario puro e impar en  $\mathbf{R}_\delta$  ( $A_{ij} = \iota A_\delta$  y  $A_{-\delta} = -A_\delta$ ); y  $B_{ij}$  es real y par en  $\mathbf{R}_\delta$  ( $B_{ij} = B_\delta$  y  $B_{-\delta} = B_\delta$ ). Esta elección quedará justificada en la sección 2.2.7 al tomar un orden semiclásico en un dado plano. La expresión (2.17) se escribe entonces

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} = \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} J_\delta \left[ B_\delta \left( \hat{B}_{ij} + \hat{B}_{ij}^\dagger \right) - \iota A_\delta \left( \hat{A}_{ij}^\dagger - \hat{A}_{ij} \right) - (B_\delta^2 - A_\delta^2) \right] + \lambda \sum_{i,\sigma} \hat{b}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{i\sigma} - 2S\lambda N. \quad (2.18)$$

Utilizando las definiciones (2.12) y transformando los bosones de Schwinger al espacio  $\mathbf{k}$

de la forma

$$\begin{aligned}\hat{b}_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}, \\ \hat{b}_{i\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i},\end{aligned}\quad (2.19)$$

se obtiene finalmente la siguiente expresión del hamiltoniano de campo medio en función de los bosones de Schwinger:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} &= \sum_{\mathbf{k}} \left[ (\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda) (\hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}) \right. \\ &\quad \left. - \gamma_{\mathbf{k}}^A (\hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}) \right] - 2S\lambda N - E_{\text{MF}}.\end{aligned}\quad (2.20)$$

donde

$$\gamma_{\mathbf{k}}^A = \frac{1}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} A_{\delta} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}) \quad (2.21a)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}}^B = \frac{1}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} B_{\delta} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}) \quad (2.21b)$$

$$E_{\text{MF}} = \frac{N}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} (B_{\delta}^2 - A_{\delta}^2), \quad (2.21c)$$

con  $E_{\text{MF}}$  la energía del sistema en la solución de campo medio, que puede obtenerse calculando el valor medio de (2.17). Podemos ver que para  $J_{\delta} > 0$  la energía se minimiza cuando las correlaciones AF  $A_{\delta}$  aumentan y se maximiza cuando lo hacen las ferromagnéticas  $B_{\delta}$ , dando cuenta así de una competencia entre correlaciones ferromagnéticas y antiferromagnéticas como es de esperar en AF frustrados.

### 2.2.3. Diagonalización

Para diagonalizar (2.20) se debe realizar una transformación de Bogoliubov, que no es más que una transformación paraunitaria de los operadores bosónicos con la forma

$$\begin{cases} \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{cases}, \quad (2.22)$$

donde  $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}$  son los nuevos operadores bosónicos de espín- $\frac{1}{2}$  que diagonalizan el hamiltoniano (los detalles de esta diagonalización se pueden encontrar en el apéndice A). Los coeficientes de la transformación resultan

$$\begin{cases} u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda}{\omega_{\mathbf{k}}} + 1 \right)} \\ v_{\mathbf{k}} = \text{signo}(\gamma_{\mathbf{k}}^A) \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda}{\omega_{\mathbf{k}}} - 1 \right)} \end{cases}, \quad (2.23)$$

donde

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda)^2 - (\gamma_{\mathbf{k}}^A)^2} \quad (2.24)$$

es la relación de dispersión de los nuevos bosones  $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}$ . De esta manera se obtiene el hamiltoniano de campo medio diagonalizado,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} &= \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} - (2S + 1)\lambda - E_{\text{MF}}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

En adelante nos referiremos a los bosones  $\hat{\alpha}_\sigma$  como “espinones” (poseen espín- $\frac{1}{2}$  y son las excitaciones elementales del hamiltoniano diagonalizado), mientras que nos referiremos a los bosones de Schwinger  $\hat{b}_\sigma$  solamente como “bosones”. Nótese que  $\omega_{\mathbf{k}}$  es igual para ambas clases de espinones (*up* y *down*) e invariante ante el cambio  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ . La positividad de  $\omega_{\mathbf{k}}$  para todo  $\mathbf{k}$  garantiza la diagonalización de (2.20), e implica que el estado fundamental  $|\text{GS}\rangle$  de menor energía será aquel que tenga un número de ocupación espinónico cero, es decir  $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}|\text{GS}\rangle = 0$  para todo  $\mathbf{k}$ ,  $\sigma$ , y su energía será

$$E_{\text{GS}} = \langle \text{GS} | \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} | \text{GS} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} - (2S + 1)\lambda - E_{\text{MF}}. \quad (2.26)$$

Este valor medio está calculado sobre el hamiltoniano diagonalizado (2.25) pero también puede realizarse a partir del hamiltoniano equivalente (2.17), de donde se deduce fácilmente que  $\sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} - (2S + 1)\lambda = 2E_{\text{MF}}$  y

$$E_{\text{GS}} = E_{\text{MF}} = \frac{N}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} (B_{\delta}^2 - A_{\delta}^2) \quad (2.27)$$

Por otro lado, utilizando el teorema de Wick se puede evaluar la energía del estado fundamental  $|\text{GS}\rangle$  con el hamiltoniano original  $\hat{\mathcal{H}}$ , que es cuártico en los bosones de Schwinger, resultando

$$\langle \text{GS} | \hat{\mathcal{H}} | \text{GS} \rangle = \frac{3}{2} \langle \text{GS} | \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} | \text{GS} \rangle = \frac{3}{2} E_{\text{MF}}, \quad (2.28)$$

Este factor  $\frac{3}{2}$  es el mismo que encuentran Arovas y Auerbach en el esquema de un solo operador singlete para la regla de la suma [60, 80]. Veremos en la sección 2.3.3 que la diferencia entre utilizar el teorema de Wick y el desacople de dos singletes en el cálculo de  $\langle \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \rangle$  determina la verificación, o no, de la regla de la suma.

Vale aclarar que ambos valores medios,  $\langle \text{GS} | \hat{\mathcal{H}} | \text{GS} \rangle$  y  $\langle \text{GS} | \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} | \text{GS} \rangle$ , son valores calculados “en campo medio” en el sentido de que se calculan sobre el estado fundamental  $|\text{GS}\rangle$  solución del campo medio utilizado. La diferencia reside en si el valor medio se realiza sobre el operador original ( $\hat{\mathcal{H}}$ ) o sobre el operador aproximado con campo medio ( $\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}$ ).

#### 2.2.4. Ecuaciones autoconsistentes a $T$ finita

De la sección anterior vemos que los coeficientes del hamiltoniano diagonalizado (2.25) ( $\omega_{\mathbf{k}}, E_{\text{MF}}, E_{\text{GS}}$ ) dependen de las cantidades  $A_{\delta}, B_{\delta}$  y  $\lambda$ , que se han convertido en los parámetros del campo medio que deben calcularse de manera autoconsistente. Para realizar esto, deben encontrarse los valores de los mismos que minimizan la energía libre del sistema. Como el hamiltoniano (2.25) es diagonal en los bosones  $\hat{\alpha}_{\sigma}$  la función de partición a calcular es la de un gas de bosones libres:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \left( e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}} \right) = \sum_{\{n_{\mathbf{p}\sigma}^{\alpha}\}} \langle \{n_{\mathbf{p}\sigma}^{\alpha}\} | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}} | \{n_{\mathbf{p}\sigma}^{\alpha}\} \rangle, \quad (2.29)$$

obteniendo el resultado

$$\mathcal{Z} = e^{-\beta E_{\text{GS}}} \prod_{\mathbf{k}=1}^N \frac{1}{(1 - e^{-\beta \omega_{\mathbf{k}}})^2}, \quad (2.30)$$

donde  $\beta = \frac{1}{T}$  y  $|\{n_{\mathbf{p}\sigma}^{\alpha}\}\rangle$  simboliza todos los autoestados posibles del hamiltoniano diagonal, que consisten en todas las formas posibles de acomodar cualquier número de espinoes  $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}$  en los  $2N$  niveles de energía dados por los  $N$  vectores  $\mathbf{k}$  y las 2 direcciones de espín. Luego,  $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left( e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}} \hat{\mathcal{O}} \right)$ .

Es importante notar que si bien el hamiltoniano tiene autoestados con cualquier número de espinoes, la restricción sobre el número de bosones se sigue cumpliendo en promedio, ya que está incorporada en  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}$  a través del multiplicador de Lagrange  $\lambda$ . Este multiplicador

pasa a jugar en este cálculo el papel de un *potencial químico* que controla el número total de bosones de Schwinger.

La solución buscada es aquella que minimiza la energía libre del sistema,

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln(\mathcal{Z}) = E_{\text{GS}} - 2T \sum_{\mathbf{k}=1}^N \ln(n_{\mathbf{k}}^{\alpha} + 1) , \quad (2.31)$$

donde  $n_{\mathbf{k}}^{\alpha} = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\alpha} \rangle = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}^{\alpha} \rangle = \frac{1}{e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}}-1}$  es el número de ocupación espinónico. Derivando (2.31) respecto de  $A_{\delta}$ ,  $B_{\delta}$  y  $\lambda$ , e igualando a cero, se obtienen las ecuaciones de autoconsistencia,

$$A_{\delta} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^{\text{A}}}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}^{\alpha}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}) , \quad (2.32a)$$

$$B_{\delta} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}}^{\text{B}} + \lambda)}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}^{\alpha}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}) , \quad (2.32b)$$

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}}^{\text{B}} + \lambda)}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}^{\alpha}) . \quad (2.32c)$$

Estas ecuaciones (2.32) también pueden obtenerse calculando explícitamente los valores medios  $\langle \hat{A}_{i\ i+\delta} \rangle$ ,  $\langle \hat{B}_{i\ i+\delta} \rangle$  y  $\langle \hat{n}_{i\uparrow}^b + \hat{n}_{i\downarrow}^b \rangle$ , ya que, como es de esperar, las ecuaciones autoconsistentes son variacionales.

### 2.2.5. Orden de largo alcance y Factor de Estructura Estático

Como ya hemos visto, de acuerdo al teorema de Mermin-Wagner, en AF bidimensionales no puede haber ruptura de simetría continua a temperatura finita, es decir, el sistema está desordenado magnéticamente a  $T \neq 0$ . En el caso de la red cuadrada se puede demostrar [79] que la función de correlación AF

$$C_{\mathbf{Q}_{AF}}(\mathbf{R}_i) = \langle e^{i\mathbf{Q}_{AF} \cdot \mathbf{R}_i} \hat{\mathbf{S}}_0 \cdot \hat{\mathbf{S}}_i \rangle , \quad (2.33)$$

decae exponencialmente como  $e^{-\frac{R_i}{\xi}}$ , donde  $\mathbf{Q}_{AF} = (\pi; \pi)$  es el vector de onda del orden de Néel y  $\xi$  la *longitud de correlación*, la cual aquí toma un valor finito. En la teoría de campo medio de bosones de Schwinger la longitud de correlación predicha es de la forma [60]

$$\xi \sim \frac{k_{\text{B}} T}{\rho_s} e^{\frac{2\pi\rho_s}{k_{\text{B}} T}} , \quad (2.34)$$

donde  $\rho_s$  es la *rigidez* de espín<sup>7</sup>. El exponente de esta expresión<sup>8</sup> coincide con la predicción del NL $\sigma$ M en el régimen clásico renormalizado [58] y vemos que a medida que la temperatura decrece la longitud de correlación  $\xi$  va en aumento. Luego a temperatura cero  $\xi$  diverge, estableciéndose un orden de largo alcance magnético. Este aumento de la longitud de correlación AF se traduce en la aparición y crecimiento de un pico en el momento  $\mathbf{k} = \mathbf{Q}_{AF}$  en el factor de estructura estático  $S(\mathbf{k})$ , el denominado pico de *Bragg* que caracteriza la estructura del orden magnético. En la figura (2.4) se muestra  $S(\mathbf{k})$  para

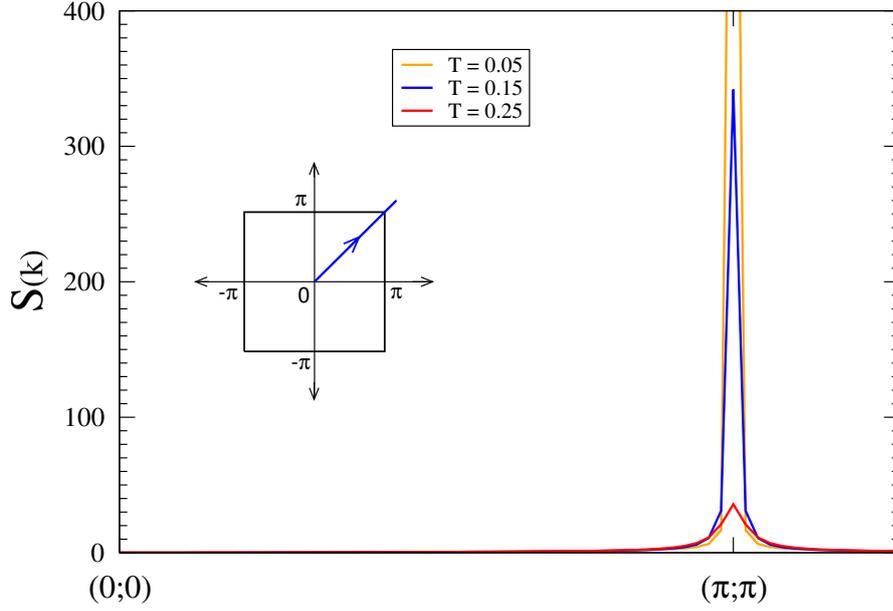


Fig. 2.4: Factor de estructura estático  $S(\mathbf{k})$  calculado con el campo medio de bosones de Schwinger en la red cuadrada para los valores de temperatura  $T = 0.25, 0.15$  y  $0.05$ . El camino recorrido es a lo largo de la diagonal de la 1ZB.

varias temperaturas calculado con la teoría de bosones de Schwinger (ver ecuación (2.38) más adelante) en una red cuadrada muy grande ( $N = 10000$  sitios). Puede verse que a medida que  $T$  decrece se desarrolla el pico intenso en  $\mathbf{Q}_{AF}$ . Como vimos, este pico está relacionado con la magnetización *staggered* al cuadrado (ver ecuación (1.12) en capítulo 1)

$$S(\mathbf{Q}_{AF}) = \frac{Nm_{AF}^2}{2}. \quad (2.35)$$

<sup>7</sup> La *rigidez* de espín es un parámetro que se utiliza en el tratamiento semiclásico. Es el análogo magnético a la constante de un resorte y está relacionado con la energía necesaria para rotar los espines un ángulo pequeño respecto de su posición de equilibrio.

<sup>8</sup> Aparece la potencia extra  $T$  en el prefactor de  $\xi$  que se ha demostrado es un artificio de *large-N* en la aproximación de campo medio,  $\mathcal{N} = \infty$ . Al realizar correcciones en  $1/\mathcal{N}$  se obtiene el prefactor  $T^{1-2/\mathcal{N}}$ , el cual se reduce a una constante para el caso físico  $\mathcal{N} = 2$ , recuperando el comportamiento correcto [81].

### Cálculo de $S(\mathbf{k})$ en campo medio

El cálculo del factor de estructura estático resulta, a primera vista, simple. Se deben reemplazar en la interacción espín-espín aproximada en campo medio las ecuaciones de autoconsistencia (2.32) de la siguiente manera

$$\begin{aligned} S(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{R}_{ij}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}} \langle \left( : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \right)_{\text{MF}} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{R}_{ij}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{ij}} \left( B_{ij}^2 - A_{ij}^2 \right). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Sin embargo, para el computo de (2.36) debe tenerse especial cuidado en tres cuestiones: Primero, se puede demostrar que  $: \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : = \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} - \frac{\hat{n}_i^b}{4}$  y  $\langle \hat{n}_i^b \rangle = 2S$ . Segundo, para tener en cuenta el caso  $i = j$  la interacción espín-espín (2.11) debe corregirse con el término  $\delta_{ij} \frac{3}{2} S$ . Tercero, hay que tener presente que las ecuaciones autoconsistentes (2.32) no están definidas para  $\mathbf{R}_\delta = 0$  y, como operatorialmente es  $\hat{B}_{ii} = \hat{n}_i^b/2$ , resulta el valor medio  $\langle \hat{B}_{ii} \rangle = S$ <sup>9</sup>. Tomando en cuenta estas cuestiones, el valor medio de la interacción espín-espín en campo medio resulta

$$\langle (\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j)_{\text{MF}} \rangle = \langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle \langle \hat{B}_{ij} \rangle - \langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle \langle \hat{A}_{ij} \rangle + \delta_{ij} \frac{3}{2} S - \frac{S}{2}, \quad (2.37)$$

De esta manera, utilizando ahora sí las ecuaciones de campo medio (2.32), se obtiene la expresión del factor de estructura estático:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{k}) &= \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{(\gamma_{\mathbf{q}}^B + \lambda)(\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^B + \lambda) - \gamma_{\mathbf{q}}^A \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^A}{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} (1 + 2n_{\mathbf{q}}^\alpha)(1 + 2n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\alpha) + \\ &+ \frac{S}{2} - \frac{1}{4} - N\delta_{\mathbf{k},0} \frac{S}{2}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Por último, analicemos dónde sucederá el máximo de  $S(\mathbf{k})$ . Como hemos dicho, la relación de dispersión espinónica  $\omega_{\mathbf{k}}$  es positiva, y además toma su valor mínimo en  $\pm\mathbf{k}_{\text{min}}$ . Entonces, para cualquier valor de  $\mathbf{k}$ , podemos ver que la mayor contribución a  $S(\mathbf{k})$  provendrá del término de la sumatoria en  $\mathbf{q}$  que haga mínimo el denominador en (2.38),  $\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ . Este mínimo del denominador se dará cuando alguna de las dos dispersiones tome su valor mínimo, es decir, cuando  $\mathbf{q} = \pm\mathbf{k}_{\text{min}}$  y/o  $\mathbf{k} + \mathbf{q} = \pm\mathbf{k}_{\text{min}}$ . De esta manera

<sup>9</sup> En cambio, hacer  $\mathbf{R}_\delta = 0$  en la ecuación de autoconsistencia (2.32b) resultaría en  $B_{\delta=0} = S + \frac{1}{2}$ .

podemos notar que el pico más intenso en  $S(\mathbf{k})$  se dará en el vector de onda  $\mathbf{Q}_{AF} = 2\mathbf{k}_{\min}$

### 2.2.6. Estado fundamental en redes finitas

El hamiltoniano (2.25) es diagonal en los espinones y, como ya adelantamos, su estado fundamental  $|\mathbf{GS}\rangle$  es el vacío de espinones. Además, de acuerdo al teorema de Lieb-Mattis este  $|\mathbf{GS}\rangle$  debe ser un singlete, es decir, desordenado. En los espinones esto queda garantizado ya que  $\omega_{\mathbf{k}}$  posee un gap finito para todo tamaño de red que se comporta como  $\omega_{\mathbf{k}_{\min}} \sim \frac{1}{N}$ . Más precisamente, puede demostrarse que este estado fundamental vacío de espinones es un singlete cuya función de onda tiene la siguiente forma de Jastrow [62]:

$$|\mathbf{GS}\rangle = |0\rangle_{\alpha} = e^{\sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}} |0\rangle_b, \quad (2.39)$$

donde  $f_{\mathbf{k}} = -\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}$  es la *función de apareamiento impar*, con  $|0\rangle_{\alpha}$  y  $|0\rangle_b$  el vacío de  $\hat{a}_{\sigma}$  y  $\hat{b}_{\sigma}$ , respectivamente. Es fácil de verificar que  $\langle \mathbf{GS} | \hat{S}_i^{\gamma} | \mathbf{GS} \rangle = 0$ , para  $\gamma = x, y, z$ . Obsérvese además que pasando al espacio real puede escribirse como

$$|\mathbf{GS}\rangle = e^{\sum_{ij} f_{ij} \hat{A}_{ij}^{\dagger}} |0\rangle_b, \quad (2.40)$$

donde claramente se ve el comportamiento singlete del estado fundamental, al poseer este una estructura de los operadores singletes  $\hat{A}_{ij}$  actuando sobre el vacío de bosones  $\hat{b}$ . Como  $e^{\hat{O}} = \sum_n \frac{\hat{O}^n}{n!}$  puede verse de (2.40) que  $|\mathbf{GS}\rangle$  está constituido en cada *link*  $ij$  por una superposición de términos donde se crean 1, 2... infinitos singletes. Esto se ve

Fig. 2.5: El estado fundamental es una superposición de colecciones de singletes, donde la restricción (2.3) se cumple en promedio y existen términos (como el 2do y 3ro) donde un mismo sitio comparte más de un singlete. Por simplicidad graficamos sólo términos con singletes de corto alcance, pero  $|\mathbf{GS}\rangle$  contiene singletes entre sitios a cualquier distancia, pesados por la función de apareamiento.

ejemplificado en la figura (2.5), donde se grafica esquemáticamente algunos términos de

corto alcance de  $|\text{GS}\rangle$ . Aquí se puede ver que la 2da y 3er configuración contienen sitios que comparten más de un singlete. Desde el punto de vista de los bosones esto implica que  $|\text{GS}\rangle$  viola la restricción física  $\hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} + \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} = 2S$ , ya que hay términos donde se crean más de  $2S$  bosones en un mismo sitio, y la restricción sólo se cumple en valor medio,

$$\langle \text{GS} | \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} | \text{GS} \rangle = \langle \text{GS} | \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} | \text{GS} \rangle = S. \quad (2.41)$$

De manera que no se puede decir que esta función de onda sea un verdadero estado RVB. Para conseguir un estado RVB, se debería proyectar  $|\text{GS}\rangle$  sobre el espacio de Hilbert físico, imponiendo la restricción local de manera exacta, mediante un proyector  $\hat{P}$ . En la figura 2.6 se muestra el efecto de  $\hat{P}$  sobre el  $|\text{GS}\rangle$  de campo medio de la figura 2.5.

$$\hat{P} |\text{GS}\rangle = |\text{RVB}\rangle = \left| \begin{array}{cccc} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cccc} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{cccc} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{array} \right\rangle + \dots$$

Fig. 2.6: Estado RVB como proyección del estado fundamental de campo medio  $|\text{GS}\rangle$  sobre el espacio físico.

Además, así como las configuraciones no físicas del estado fundamental están relacionadas con la densidad local de bosones  $n_i^b$ , de la misma manera existirán también excitaciones no físicas del estado fundamental relacionadas con las fluctuaciones de la densidad local de bosones, que también violan la restricción local. En el capítulo 4 mostraremos cómo pueden identificarse estas excitaciones y en el capítulo 5 utilizaremos esto para calcular las propiedades termodinámicas de manera más confiable.

### 2.2.7. Ruptura de simetría

A  $T = 0$ , a medida que  $N \rightarrow \infty$ , el gap de la relación de dispersión espinónica  $\omega_{\pm \frac{\mathbf{Q}}{2}} \rightarrow 0$ , lo cual implica que la función de apareamiento  $f_{\pm \frac{\mathbf{Q}}{2}} \rightarrow 1$ <sup>10</sup>. Esto significa que el estado fundamental (2.39) desarrolla una acumulación muy grande de bosones con espín *up* y *down* para  $\mathbf{k} = \pm \frac{\mathbf{Q}}{2}$ . Luego podemos dividir el estado fundamental como

$$|\text{GS}\rangle = |\phi_c\rangle |\phi_J\rangle, \quad (2.42)$$

<sup>10</sup> Hemos puesto directamente  $\mathbf{k}_{\min}$  como  $\frac{\mathbf{Q}}{2}$ , donde  $\mathbf{Q}$  es el momento en que se desarrolla el pico en  $S(\mathbf{k})$

donde  $|\phi_c\rangle$  representa la parte condensada y

$$|\phi_J\rangle = e^{\sum_{\mathbf{k}}' f_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle_b, \quad (2.43)$$

representa la parte normal, o no condensada, del estado fundamental [62] y donde  $\sum_{\mathbf{k}}' = \sum_{\mathbf{k} \neq \pm \frac{\mathbf{Q}}{2}}$ .

Dado que la función de onda de partida (2.39) es un singlete, se puede ver entonces que la aparición de este condensado está relacionado con la ruptura de la simetría  $SU(2)$  en el estado fundamental [60, 61, 62]. Físicamente esto puede pensarse considerando el proceso hipotético de encender un campo magnético espiral  $h$  con vector de onda  $\mathbf{Q}$ , tomar el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$ , y luego hacer el límite  $h \rightarrow 0$ . Por ejemplo, un estado coherente

$$|\phi_c\rangle = e^{\sqrt{\frac{Nm}{2}} \left( \hat{b}_{\frac{\mathbf{Q}}{2}\uparrow}^\dagger + \hat{b}_{-\frac{\mathbf{Q}}{2}\uparrow}^\dagger - \hat{b}_{\frac{\mathbf{Q}}{2}\downarrow}^\dagger + \hat{b}_{-\frac{\mathbf{Q}}{2}\downarrow}^\dagger \right)} |0\rangle_b \quad (2.44)$$

así seleccionado se corresponde con un estado espiral cuántico con magnetización  $m$  y vector de onda magnético  $\mathbf{Q}$  sobre el plano  $y - z$ , dado que el valor medio del operador espín en este estado es

$$\langle \phi_c | \hat{S}_i^y | \phi_c \rangle = m \sin(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i) \quad \langle \phi_c | \hat{S}_i^z | \phi_c \rangle = m \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i) ; \quad (2.45)$$

mientras que la magnetización local  $m$  y el condensado de bosones están relacionados por

$$\begin{aligned} \langle \phi_c | \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow} | \phi_c \rangle &= \sqrt{\frac{Nm}{2}} \left( \delta_{\mathbf{k}, -\frac{\mathbf{Q}}{2}} + \delta_{\mathbf{k}, +\frac{\mathbf{Q}}{2}} \right) \\ \langle \phi_c | \hat{b}_{\mathbf{k}\downarrow} | \phi_c \rangle &= \sqrt{\frac{Nm}{2}} \left( \delta_{\mathbf{k}, -\frac{\mathbf{Q}}{2}} - \delta_{\mathbf{k}, +\frac{\mathbf{Q}}{2}} \right), \end{aligned} \quad (2.46)$$

que en el espacio real implica un valor medio de los espinores de la forma

$$\begin{pmatrix} \langle \phi_c | \hat{b}_{i\uparrow} | \phi_c \rangle \\ \langle \phi_c | \hat{b}_{i\downarrow} | \phi_c \rangle \end{pmatrix} = \sqrt{2m} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i}{2}\right) \\ i \sin\left(\frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i}{2}\right) \end{pmatrix}. \quad (2.47)$$

Reemplazando estos valores en las ecs. (2.12) se obtienen las expresiones semiclásicas para los parámetros de campo medio

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \langle \phi_c | \hat{A}_{ij}^\dagger | \phi_c \rangle = i m \sin\left[\frac{\mathbf{Q}}{2} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)\right] \\ B_{ij} &= \langle \phi_c | \hat{B}_{ij}^\dagger | \phi_c \rangle = m \cos\left[\frac{\mathbf{Q}}{2} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)\right], \end{aligned} \quad (2.48)$$

que es consistente con las propiedades de los parámetros de campo medio  $\langle \hat{A}_\delta \rangle$  y  $\langle \hat{B}_\delta \rangle$  elegidas en la sección 2.2.2 (imaginario puro e impar, real y par, respectivamente). Este procedimiento puede realizarse también para un estado espiral cuántico con la magnetización yaciendo en el plano  $x - z$ , en cuyo caso las mismas formas semiclásicas (2.48) son recuperadas pero con  $\langle \phi_c | \hat{A}_{ij}^\dagger | \phi_c \rangle$  real (en el caso del plano  $x - y$  se obtienen nuevamente las expresiones (2.48)). Es interesante notar que ambas soluciones de campo medio están relacionadas por una transformación de *gauge* global  $\hat{b}_{i\sigma} \rightarrow e^{i\theta} b_{i\sigma}$  con  $\theta = -\pi/4$ .

Entonces, podemos interpretar que el condensado de los bosones *up/down* con momento  $\pm \frac{\mathbf{Q}}{2}$  representa el orden magnético y corresponde a la magnetización  $m$ . Mientras que el fluido “normal” de bosones  $|\phi_J\rangle$  corresponde a las fluctuaciones cuánticas de punto cero, [62] como hemos mostrado en la figura 2.1.

Para estudiar estos estados con ruptura de simetría  $SU(2)$  las ecuaciones autoconsistentes (2.32) a  $T = 0$  deben ser re-calculadas tomando en cuenta explícitamente el condensado de la ec. (2.44). Además en el límite termodinámico las sumatorias en  $\mathbf{k}$  se transforman en integrales sobre la 1ZB. El nuevo conjunto de ecuaciones autoconsistentes resulta

$$A_\delta = m \sin(\frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_\delta) + \int \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^A}{\omega_{\mathbf{k}}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta) d\mathbf{k} \quad (2.49a)$$

$$B_\delta = m \cos(\frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_\delta) + \int \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda}{\omega_{\mathbf{k}}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta) d\mathbf{k} \quad (2.49b)$$

$$S + \frac{1}{2} = m + \int \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda}{\omega_{\mathbf{k}}} d\mathbf{k} . \quad (2.49c)$$

Ahora, además de los parámetros  $A_\delta$  y  $B_\delta$ , la magnetización  $m$  entra como un nuevo parámetro autoconsistente, mientras que  $\lambda$  deja de ser un parámetro y se ajusta a fin de obtener una relación de dispersión espinónica sin gap, dando cuenta de la ruptura de simetría. De comparar las ecuaciones (2.32) y (2.49) se sigue que los componentes semiclásicos de estas últimas corresponden al tratamiento separado de los modos singulares  $\mathbf{k} = \pm \mathbf{Q}/2$  en las sumas de las ecs. (2.32), como usualmente se presenta en la literatura [61]. De esta manera, separando los términos  $\mathbf{k} = \pm \mathbf{Q}/2$  de la suma en (2.32c) podemos identificar un valor de magnetización en redes finitas

$$m = \frac{1}{N} \frac{\gamma_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}^B + \lambda}{\omega_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}} . \quad (2.50)$$

En el límite termodinámico esta expresión converge al valor autoconsistente calculado con (2.49). Así, la ecuación (2.50) es una forma alternativa de calcular la magnetización desde redes finitas con un estudio de escala. Consistentemente con esto, se puede notar que del tratamiento por separado de los modos singulares en el pico de  $S(\mathbf{k})$  (2.38) se obtiene

$$S(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2N} \left( \frac{\gamma_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}^B + \lambda}{\omega_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}} \right)^2, \quad (2.51)$$

que se relaciona con  $m$  a través de la ecuación (1.12) y nos conduce al mismo resultado

$$m = \sqrt{\frac{2S(\mathbf{Q})}{N}} = \frac{1}{N} \frac{\gamma_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}^B + \lambda}{\omega_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}}. \quad (2.52)$$

### 2.2.8. Excitaciones de espín sobre $|\text{GS}\rangle$

Para redes finitas nuestro estado fundamental  $|\text{GS}\rangle$  es un singlete, por lo que podemos investigar cómo se traducen en el lenguaje espinónico las excitaciones tripletes sobre este estado. Para crear un cambio de espín  $+1$  con momento  $\mathbf{q}$  sobre el estado fundamental se debe aplicar el operador

$$\hat{S}_{\mathbf{q}}^+ = \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{S}_i^+, \quad (2.53)$$

donde  $\hat{S}_i^+ = \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow}$ . Llamando  $|\text{T}_{\mathbf{q}+}\rangle$  al estado triplete que resulta de aplicar este operador sobre  $|\text{GS}\rangle$ , resulta

$$|\text{T}_{\mathbf{q}+}\rangle = \hat{S}_{\mathbf{q}}^+ |\text{GS}\rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\downarrow} |\text{GS}\rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} v_{-\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger |\text{GS}\rangle. \quad (2.54)$$

Por ejemplo, si tomamos el término  $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{Q}}{2}$  de (2.54)<sup>11</sup>, podemos ver que crear sobre el estado fundamental un cambio de espín de la forma

$$\hat{b}_{\frac{\mathbf{Q}}{2}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{\frac{\mathbf{Q}}{2}\downarrow} |\text{GS}\rangle, \quad (2.55)$$

donde destruyo en el condensado un bosón con espín *down* ( $\hat{b}_{\frac{\mathbf{Q}}{2}\downarrow}$ ) y creo en el fluido normal un bosón con espín *up* ( $\hat{b}_{\frac{\mathbf{Q}}{2}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger$ ), es equivalente a crear dos espinones

$$\hat{\alpha}_{\frac{\mathbf{Q}}{2}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \hat{\alpha}_{-\frac{\mathbf{Q}}{2}\uparrow}^\dagger |\text{GS}\rangle \quad (2.56)$$

<sup>11</sup> Veremos en la próxima sección que los términos más importantes son aquellos en los que alguno de los dos espinones  $\hat{\alpha}_\sigma$  es creado en el condensado, es decir, cuando  $\mathbf{k} = \pm \frac{\mathbf{Q}}{2}$  o cuando  $\mathbf{k} + \mathbf{q} = \pm \frac{\mathbf{Q}}{2}$ .

sobre el estado fundamental, ambos con espín  $up$ , uno en el condensado y el otro en el fluido normal.

Desde luego, se debe notar que la creación de los dos espinones  $\hat{a}_\sigma$  está acompañada por los coeficientes de la transformación de Bogoliubov, por lo que es importante señalar que una excitación con momento  $\mathbf{q}$  es una combinación no trivial de términos donde se crean pares de espinones.

Análogamente, los otros dos estados triplete son

$$\begin{aligned} |\mathbf{T}_{\mathbf{q}-}\rangle &= \hat{S}_{\mathbf{q}}^- |\mathbf{GS}\rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} u_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}} v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |\mathbf{GS}\rangle \\ |\mathbf{T}_{\mathbf{q}z}\rangle &= \hat{S}_{\mathbf{q}}^z |\mathbf{GS}\rangle = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} v_{\mathbf{k}} \left( \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) |\mathbf{GS}\rangle. \end{aligned}$$

Sobre cada uno de estos estados, debidamente normalizados, puede calcularse el valor de la componente  $z$  del espín total:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \mathbf{T}_{\mathbf{q}+} | \hat{S}_{\text{tot}}^z | \mathbf{T}_{\mathbf{q}+} \rangle}{\langle \mathbf{T}_{\mathbf{q}+} | \mathbf{T}_{\mathbf{q}+} \rangle} &= +1 \\ \frac{\langle \mathbf{T}_{\mathbf{q}-} | \hat{S}_{\text{tot}}^z | \mathbf{T}_{\mathbf{q}-} \rangle}{\langle \mathbf{T}_{\mathbf{q}-} | \mathbf{T}_{\mathbf{q}-} \rangle} &= -1 \\ \frac{\langle \mathbf{T}_{\mathbf{q}z} | \hat{S}_{\text{tot}}^z | \mathbf{T}_{\mathbf{q}z} \rangle}{\langle \mathbf{T}_{\mathbf{q}z} | \mathbf{T}_{\mathbf{q}z} \rangle} &= 0. \end{aligned}$$

### 2.3. Factor de Estructura Dinámico

La dispersión inelástica de neutrones es una de las técnicas más poderosas para estudiar las propiedades magnéticas de los sistemas de electrones fuertemente correlacionados. Los neutrones no tienen carga, son altamente penetrantes y no destructivos. Además, debido a su espín- $\frac{1}{2}$ , permiten observar directamente el orden y las excitaciones magnéticas.

La cantidad básica medida en un experimento de dispersión de neutrones es la *sección eficaz diferencial parcial*, la cual es proporcional a la función dinámica de correlación espín-espín

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} \propto S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega) = S^{xx}(\mathbf{k}, \omega) + S^{yy}(\mathbf{k}, \omega) + S^{zz}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.57)$$

donde

$$S^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle S_{\mathbf{k}}^\alpha(t) S_{-\mathbf{k}}^\alpha(0) \rangle e^{i\omega t} dt. \quad (2.58)$$

con  $S_{\mathbf{k}}^{\alpha}$  la transformada de Fourier espacial en la red, de la componente  $\alpha$  del operador espín. La cantidad  $S(\mathbf{k}, \omega)$  es el *factor estructura dinámico*, el cual mide detalladamente el espectro de excitaciones magnéticas, sólo depende de las propiedades físicas de la muestra y se puede calcular teóricamente. De acuerdo al teorema de fluctuación-disipación, el factor de estructura dinámico se relaciona con la parte imaginaria de la función de Green retardada del operador espín de la siguiente forma:

$$S^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{1 - e^{-\omega\beta}} \left( -\frac{1}{\pi} \right) \text{Im} \{ G_{\alpha\alpha}^{(R)}(\mathbf{k}, \omega) \}, \quad (2.59)$$

siendo  $G_{\alpha\alpha}^{(R)}(\mathbf{k}, \omega)$  la transformada al espacio de Fourier  $(\mathbf{k}, \omega)$  de la función de Green retardada

$$G_{\alpha\alpha}^{(R)}(i, j, t) = -i \theta_{(t)} \langle [\hat{S}_i^{\alpha}(t); \hat{S}_j^{\alpha}(0)] \rangle,$$

donde los operadores están expresados en la representación de Heisenberg,

$$\hat{S}_i^{\alpha}(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}t} \hat{S}_i^{\alpha} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}t}.$$

Dada la invariancia rotacional de la formulación de campo medio de bosones de Schwinger se tendrá que  $S^{xx}(\mathbf{k}, \omega) = S^{yy}(\mathbf{k}, \omega) = S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$ , por lo que calcular sólo el término  $zz$  es suficiente, y por simplicidad escribiremos  $S(\mathbf{k}, \omega)$ .

### 2.3.1. Cálculo de $G^{(R)}(\mathbf{k}, \omega)$ en campo medio

Hay que calcular la función de Green retardada

$$\begin{aligned} G^{(R)}(i, j, t) &= -i \theta_{(t)} \langle e^{i\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}t} \hat{S}_i^z e^{-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}t} \hat{S}_j^z \rangle \\ &+ i \theta_{(t)} \langle \hat{S}_j^z e^{i\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}t} \hat{S}_i^z e^{-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}t} \rangle. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Nos centraremos en el primer término de esta expresión (2.60), siendo el cálculo del segundo término totalmente análogo. Llamemos  $E_{\{n\}}$  a la energía de la configuración  $\{n_{\mathbf{p}\sigma}^{\alpha}\}$ ,

$$E_{\{n\}} = \langle \{n_{\mathbf{p}\sigma}^{\alpha}\} | \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} | \{n_{\mathbf{p}\sigma}^{\alpha}\} \rangle = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \omega_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}\sigma}^{\alpha} + E_{\text{GS}}. \quad (2.61)$$

Entonces, el valor medio del primer término de (2.60) resulta,

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_i^z(t) \hat{S}_j^z(0) \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\substack{n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}, \\ n_{2\uparrow}, \dots = 0}}^{\infty} \langle \{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\} | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}} e^{i\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}t} \hat{S}_i^z e^{-i\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}t} \hat{S}_j^z | \{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\} \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\substack{n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}, \\ n_{2\uparrow}, \dots = 0}}^{\infty} e^{-\beta E_{\{n\}}} \langle \{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\} | \hat{S}_i^z e^{-i(\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} - E_{\{n\}})t} \hat{S}_j^z | \{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\} \rangle. \end{aligned}$$

La transformada de Fourier temporal de la función escalón es

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta_{(t)} e^{i\omega t} dt = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} i \frac{1}{\omega + i\delta} = i \frac{1}{\omega + i0^+},$$

y la función de Green retardada resulta

$$\begin{aligned} G^{(R)}(i, j, \omega) &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\substack{n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}, \\ n_{2\uparrow}, \dots = 0}}^{\infty} e^{-\beta E_{\{n\}}} \left[ \langle \{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\} | \hat{S}_i^z \frac{1}{\omega + i0^+ - (\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} - E_{\{n\}})} \hat{S}_j^z | \{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\} \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle \{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\} | \hat{S}_j^z \frac{1}{\omega + i0^+ + (\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} - E_{\{n\}})} \hat{S}_i^z | \{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\} \rangle \right]. \quad (2.62) \end{aligned}$$

Analicemos el primer término (el segundo término se consigue fácilmente intercambiando  $i$  con  $j$  y cambiando un signo en el denominador). Para ello hay que calcular el efecto del operador  $\hat{S}_j^z$  sobre  $|\{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\}\rangle$ , lo cual puede realizarse expresándolo en términos de los bosones de Schwinger en el espacio  $\mathbf{k}$ ,

$$\hat{S}_j^z = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \sigma} \sigma \hat{b}_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2\sigma} e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}_j}, \quad (2.63)$$

para luego hacer actuar el operador

$$\frac{1}{\omega + i0^+ - (\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} - E_{\{n\}})} \quad (2.64)$$

y evaluar el producto escalar con  $\langle \{n_{\mathbf{p}\sigma}^\alpha\} | \hat{S}_i^z$ . Juntando todos los términos y realizando la transformada de Fourier espacial

$$G^{(R)}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} G^{(R)}(i, j, \omega), \quad (2.65)$$

después de un cálculo algo extenso, se puede obtener la función de Green retardada en el espacio  $(\mathbf{k}, \omega)$

$$G^{(R)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} \left[ 2(u_{\mathbf{q}}u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - v_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha} - n_{\mathbf{q}}^{\alpha}) \frac{1}{\omega + i0^+ - (\omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})} \right. \\ \left. + (u_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}})^2 (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha} + n_{\mathbf{q}}^{\alpha} + 1) \right. \\ \left. * \left\{ \frac{1}{\omega + i0^+ - (\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})} - \frac{1}{\omega + i0^+ + (\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})} \right\} \right].$$

Dado que  $-\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\omega + i0^+} \right\} = \delta(\omega)$ , finalmente llegamos a

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \{G^{(R)}(\mathbf{k}, \omega)\} = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} \left[ 2(u_{\mathbf{q}}u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - v_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha} - n_{\mathbf{q}}^{\alpha}) \delta[\omega - (\omega_{\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] \right. \\ \left. + (u_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}})^2 (n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha} + n_{\mathbf{q}}^{\alpha} + 1) \right. \\ \left. * \{ \delta[\omega - (\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] - \delta[\omega + (\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] \} \right].$$

### 2.3.2. Espectro de excitaciones del estado fundamental

A temperatura cero es  $n_{\mathbf{k}}^{\alpha} = 0$  para todo  $\mathbf{k}$  y el factor de estructura dinámico (2.59) resulta

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}})^2 \delta[\omega - (\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})], \quad (2.66)$$

donde hemos descartado la señal para  $\omega < 0$ , ya que a  $T = 0$  el sistema no entrega energía a los neutrones dispersados.

Siguiendo con el ejemplo del AF a primeros vecinos en la red cuadrada, sabemos que el estado fundamental está ordenado y que la relación de dispersión espinónica tiene su mínimo en  $\pm \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}$ . Como las excitaciones magnéticas de espín se construyen creando de a dos espinones, es de esperar que haya un continuo de excitaciones en el espectro de  $S(\mathbf{k}, \omega)$ . En la figura 2.7 se grafica  $S(\mathbf{k}, \omega)$  para  $\mathbf{k} = (0.6\pi; 0.6\pi)$  donde se puede ver un pico intenso a baja energía seguido de un continuo de pares de espinones para mayores energías. De la fórmula (2.66) se puede deducir que para cada  $\mathbf{k}$  tendremos una señal de  $S(\mathbf{k}, \omega)$  en todo el rango de energía  $\omega$  que abarca la combinación  $\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$  para los distintos vectores  $\mathbf{q}$ . Consecuentemente, el rango en que existen excitaciones abarcará desde el par de espinones con menor energía,  $\min\{\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\}$ , hasta el par con mayor energía,  $\max\{\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\}$ . Esto puede verse esquemáticamente en la gráfica izquierda de la figura 2.8 para la diagonal de la 1ZB. La mínima energía se alcanza cuando una de las dos relaciones de dispersión

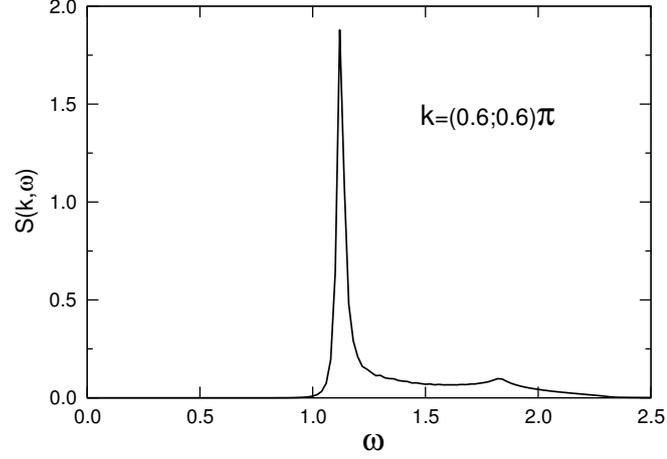


Fig. 2.7:  $S(\mathbf{k}, \omega)$  para el vector de onda magnético  $\mathbf{k} = (0.6\pi; 0.6\pi)$ .

toma su valor mínimo, de esta manera la señal intensa en  $S(\mathbf{k}, \omega)$  para cada  $\mathbf{k}$  ocurre en el valor de energía  $\omega = \omega_{\pm \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}} + \omega_{\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}}$ . Como  $\omega_{\pm \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}} \sim 0$  para redes suficientemente grandes se deduce que la señal intensa de bajas energías en  $S(\mathbf{k}, \omega)$  que describe la relación de dispersión física coincide con la relación de dispersión espinónica desplazada  $\omega_{\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}}$ . La gráfica derecha de la fig. 2.8 muestra el factor de estructura dinámico  $S(\mathbf{k}, \omega)$  (2.66)

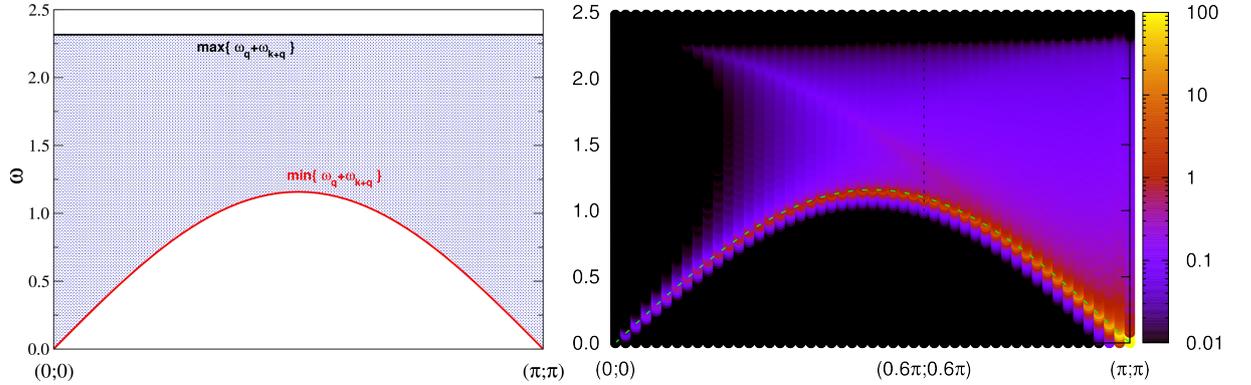


Fig. 2.8: **Izquierda:** Valores extremos de la energía de las excitaciones magnéticas de espín 1. **Derecha:** Factor de estructura dinámico calculado con nuestro campo medio para un AF en la red cuadrada ( $J = 1$ ). Ambas gráficas están hechas sobre la diagonal de la 1ZB de la red cuadrada. La paleta de colores sigue una escala logarítmica

en el mismo tramo diagonal. La señal intensa a bajas energías se visualiza aquí con el color rojo y amarillo, el continuo de excitaciones con el color azul/violeta y la línea de trazos de color verde es la relación de dispersión espinónica desplazada  $\omega_{\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}}$ <sup>12</sup>. Esta

<sup>12</sup>  $\omega_{\mathbf{k} - \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}} = \omega_{\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}}$  en el orden de Néel en la red cuadrada, ya que  $\mathbf{Q}_{AF} \equiv -\mathbf{Q}_{AF}$

relación de dispersión espinónica desplazada recupera los modos de Goldstone correctos calculados con LSWT, que aparecen en los vectores  $\mathbf{k} = \mathbf{0}, \mathbf{Q}_{AF}$  y no cuestan energía,  $\omega \sim 0$ . Correctamente con el punto de vista de los espinones, en estos vectores de onda es donde se pueden crear dos espinones con la energía  $\omega = 2\omega_{\frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}} \sim 0$ .

En el capítulo 4 retomaremos este análisis del espectro de excitaciones para el caso del AF en la red triangular..

### 2.3.3. Regla de suma

Por definición el factor de estructura estático debe satisfacer la regla de la suma,

$$\sum_{\mathbf{k}} S(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \left[ \langle \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_i \rangle + \sum_{\mathbf{R}_{ij} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{ij}} \langle \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \rangle \right] \quad (2.67)$$

$$= N \langle \hat{S}_i^2 \rangle + \sum_{\mathbf{R}_{ij} \neq 0} \delta_{\mathbf{R}_{ij}, 0} \langle \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \rangle \quad (2.68)$$

$$= NS(S+1). \quad (2.69)$$

La expresión (2.38) de  $S(\mathbf{k})$ , calculada a partir de la interacción espín-espín en campo medio  $(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j)_{\text{MF}}$ , verifica esta regla

$$\sum_{\mathbf{k}} S(\mathbf{k}) = NS(S+1). \quad (2.70)$$

Por otro lado, el factor de estructura dinámico se define como la transformada al espacio de Fourier  $(\mathbf{k}, \omega)$  de la función de correlación a *tiempos diferentes* (ver ecuación (2.58)), y debe verificar que

$$S(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega) d\omega, \quad (2.71)$$

donde  $S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega) = S^{xx}(\mathbf{k}, \omega) + S^{yy}(\mathbf{k}, \omega) + S^{zz}(\mathbf{k}, \omega) = 3S(\mathbf{k}, \omega)$ <sup>13</sup>. Sin embargo, la expresión de  $S(\mathbf{k}, \omega)$  calculada previamente no verifica esto último. Por ejemplo, para  $T = 0$  se obtiene que

$$\int_{-\infty}^{\infty} S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega) d\omega = \frac{3}{2} \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{(\gamma_{\mathbf{q}}^B + \lambda)(\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^B + \lambda) - \gamma_{\mathbf{q}}^A \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^A}{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} - \frac{3}{2} \frac{1}{4}, \quad (2.72)$$

<sup>13</sup> Está relación también puede deducirse inmediatamente notando que  $S(\mathbf{k})$  es por definición la transformada al espacio de Fourier  $\mathbf{k}$  de la función de correlación a *tiempos iguales*.

que no es exactamente igual a la expresión (2.38) de  $S(\mathbf{k})$ , para  $T = 0$ . Desde luego podemos verificar que no satisface la regla de la suma, resultando

$$\sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega) d\omega = \frac{3}{2} NS(S+1). \quad (2.73)$$

Nuevamente aparece el factor  $\frac{3}{2}$  de Arovas y Auerbach que nombramos al final de la sección 2.2.3. Allí vimos que el mismo aparece cuando se calcula el valor medio de términos de cuatro bosones de Schwinger de manera completa, sin aproximación de campo medio, utilizando el teorema de Wick. En el caso de  $S(\mathbf{k}, \omega)$  tenemos términos de cuatro operadores del tipo

$$\langle \hat{S}_i^z \frac{1}{\omega + i0^+ - (\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} - E_{\{n\}})} \hat{S}_j^z \rangle, \quad (2.74)$$

por lo que resulta natural que al calcular estos valores medios aparezca el factor  $\frac{3}{2}$ , ya que no realizamos desacople de campo medio en esta cantidad. También puede comprobarse esta diferencia para el cuadrado del operador espín,

$$\langle (\hat{S}_i^2)_{\text{MF}} \rangle = S(S+1) \quad (2.75)$$

$$\langle \hat{S}_i^2 \rangle = \frac{3}{2} S(S+1), \quad (2.76)$$

donde hay que recordar que ambos valores medios están calculados sobre el estado  $|\mathbf{GS}\rangle$  (2.39) y el operador  $(\hat{S}_i^2)_{\text{MF}}$  está expresado en aproximación de campo medio, es decir, utilizando (2.37) con  $i = j$ .

Arovas y Auerbach atribuyen este factor  $\frac{3}{2}$  al sobreconteo del número de grados de libertad bosónicos independientes. Esto puede entenderse notando que la condición local (2.3) restringe a un único bosón independiente en cada sitio (*up* o *down*) y al relajar ésta, imponiéndola en promedio, se permiten dos bosones independientes en cada sitio (*up* y *down*) lo que incorpora estados no físicos [61]. Al agrandarse el espacio de Fock estos estados no físicos son tenidos en cuenta cuando se calculan valores medios (caso ecuación (2.76)). En cambio, realizando en los operadores el desacople en campo medio  $(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j)_{\text{MF}}$  se establece que por cada link existen sólo dos grados de libertad independientes,  $\langle \hat{A}_{ij} \rangle$  y  $\langle \hat{B}_{ij} \rangle$ , y el conteo de estados es el correcto satisfaciendo así la regla de la suma (caso ecuación (2.75)).

### 2.3.4. Ligadura de espinones

Dado que a nivel de campo medio los espinones son libres, es relevante preguntarse si resultarán ligados o no una vez que vayamos más allá del campo medio. La cuestión del confinamiento de espinones ha sido abordada por Read y Sachdev para AF frustrados en el contexto de teorías de campo, en las que la acción efectiva describe espinones interactuando con campos de *gauge* [35, 36]. Estos autores mostraron cómo el efecto de las fluctuaciones de los campos de *gauge* llevan a diferencias cualitativas entre fases de corto alcance commensuradas e incommensuradas. Para fases commensuradas la acción efectiva de bajas energías incorpora naturalmente un campo de *gauge* emergente  $U(1)$ , cuyas fluctuaciones confinan los espinones. Para fases incommensuradas el campo efectivo posee una invariancia de *gauge*  $Z_2$ . En contraste con las teorías de *gauge*  $U(1)$ , una teoría de *gauge*  $Z_2$  puede tener fases con espinones desconfiados. Basados en estos resultados, la conjetura de estos autores es que, de manera general, en las fases commensuradas de corto alcance los espinones estarán confinados, mientras que para fases incommensuradas de corto alcance estarán desconfiados. Además, en fases ordenadas hemos visto que la ruptura de la simetría  $SU(2)$  genera la aparición de los modos de Goldstone, excitaciones de energía cero que restauran la simetría  $SU(2)$ . En particular, es de esperar que estas excitaciones magnónicas de espín-1 estén bien definidas (tiempo de vida media muy grande). Por lo tanto, en la teoría de bosones de Schwinger, los espinones que las componen deberían estar fuertemente ligados, mientras que para altas energías las excitaciones magnónicas podrían estar constituidas por pares de espinones más débilmente ligados.

Para ir más allá del campo medio e investigar sobre la ligadura, o no, de espinones deberíamos realizar un cálculo de fluctuaciones sobre los parámetros  $A_\delta$ ,  $B_\delta$  y  $\lambda$ . Sin embargo, conviene realizar antes un cálculo más sencillo usando la teoría perturbativa a primer orden y obtener algún indicio de la posible ligadura. Para llevar adelante esto vamos a dividir el hamiltoniano original como

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} + \hat{\mathcal{V}}, \quad (2.77)$$

donde  $\hat{\mathcal{H}}$  es el hamiltoniano de Heisenberg original (cuártico en los bosones de Schwinger) y  $\hat{\mathcal{V}}$  el término de interacción, dado por  $\hat{\mathcal{V}} = \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}$ . Luego, el efecto de  $\hat{\mathcal{V}}$  en un estado de dos espinones libres  $|2s\rangle = |\mathbf{q}\sigma; \mathbf{p}\sigma\rangle = \alpha_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger \alpha_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger |\mathbf{GS}\rangle$  puede estimarse, a primer orden en teoría de perturbación, comparando la energía que cuesta crear dos espinones sobre el

estado fundamental

$$E_{2s} = \langle 2s | \hat{\mathcal{H}} | 2s \rangle - \langle \text{GS} | \hat{\mathcal{H}} | \text{GS} \rangle, \quad (2.78)$$

con la energía que cuesta crearlos en el sistema de espinones independientes, es decir, en campo medio

$$E_{2s}^{\text{MF}} = \langle 2s | \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} | 2s \rangle - \langle \text{GS} | \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} | \text{GS} \rangle = \omega_{\mathbf{q}\sigma} + \omega_{\mathbf{p}\sigma}. \quad (2.79)$$

De esta manera la interacción entre dos espinones se obtiene como

$$v_{\text{int}} = \bar{E}_{2s} - E_{2s}^{\text{MF}}, \quad (2.80)$$

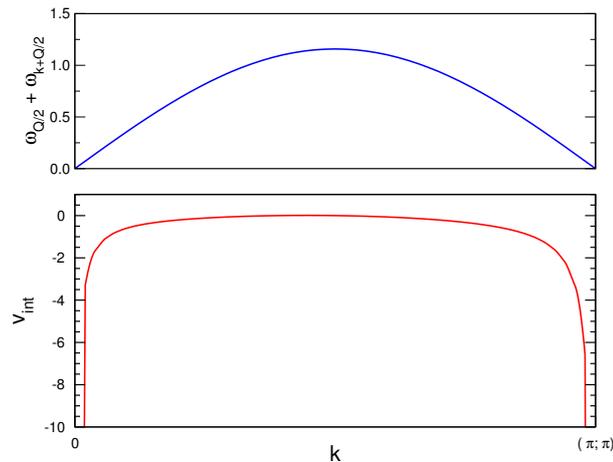
donde  $E_{2s}$  se reescala como  $\bar{E}_{2s} = \frac{2}{3}E_{2s}$  con el fin de compensar el factor  $\frac{3}{2}$  de la aplicación del teorema de Wick. Realizando el cálculo la interacción entre espinones resulta

$$\begin{aligned} v_{\text{int}} = & \frac{1}{3N} \left[ \gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{p}} \left( u_{\mathbf{q}}^2 u_{\mathbf{p}}^2 + v_{\mathbf{q}}^2 v_{\mathbf{p}}^2 + 2u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \right) + \right. \\ & \left. + 2\gamma_{\mathbf{q}+\mathbf{p}} \left( u_{\mathbf{q}}^2 v_{\mathbf{p}}^2 + u_{\mathbf{p}}^2 v_{\mathbf{q}}^2 - 2u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \right) + 9J \right], \end{aligned} \quad (2.81)$$

donde

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}).$$

Como hemos descrito en la sección 2.3.2 la excitación física de baja energía más importante para cada  $\mathbf{k}$  se compone de la creación de dos espinones, uno en el condensado con momento  $\frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}$  y otro en el fluido normal con momento  $\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}$ . La relación de dispersión de estas excitaciones es igual a la espinónica desplazada, que se ha graficado para la red cuadrada en el panel superior de la figura 2.9. Para evaluar  $v_{\text{int}}$  en estas excitaciones debemos utilizar  $|2s\rangle = |\frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}\sigma; \mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}_{AF}}{2}\sigma\rangle$ . Es fácil comprobar numéricamente el carácter atractivo de (2.81) para estas excitaciones. Cuando  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{Q}_{AF}$  resulta ser  $|v_{\text{int}}| \sim O(m)$  mientras que en los modos de Goldstone  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{Q}_{AF}$ , cuando los dos espinones se crean en el condensado, la interacción se vuelve  $|v_{\text{int}}| \sim O(Nm^2)$ , significando una atracción infinita para los espinones que construyen los magnones en estos modos. En el panel inferior de la figura 2.9 se ha graficado  $v_{\text{int}}$  de acuerdo a (2.81) para las excitaciones físicas nombradas, con  $\mathbf{k}$  recorriendo a lo largo de la diagonal. Aquí puede observarse la divergencia en los modos de Goldstone y que, para las zonas de mayor energía de la relación de dispersión, esta aproximación predice que los espinones estarán débilmente ligados entre sí. A primera vista, una corrección infinita en una teoría perturbativa de primer orden



*Fig. 2.9:* Superior: Energía de las excitaciones físicas de mayor señal en el factor de estructura dinámico. Inferior: energía de interacción  $v_{\text{int}}$  a primer orden perturbativo entre los dos espinones que conforman esas excitaciones físicas. Ambas cantidades calculadas sobre la diagonal de la 1ZB de la red cuadrada.

es inconsistente. Sin embargo, este resultado está en línea con la interpretación física de espinones fuertemente ligados en la vecindad de los modos de Goldstone, mientras que a altas energías se mantienen débilmente ligados. Por supuesto, esta afirmación deberá ser respaldada por un cálculo más riguroso [82, 83].

Esta perspectiva espinónica es la que está presente en los capítulos 4 y 5, donde se investiga el espectro de excitaciones y las propiedades termodinámicas del AF en la red triangular.

## 2.4. Caso Anisotrópico

Otro modelo de interés que estudiamos en esta tesis es el modelo  $XXZ$ , el cual es una variación del hamiltoniano de Heisenberg en el que existe una anisotropía magnética para la componente  $zz$  de la interacción espín. En el capítulo 6 analizamos los resultados de aplicar la teoría del campo medio de bosones de Schwinger sobre este modelo. Aquí describiremos el esquema utilizado de manera resumida, ya que los pasos técnicos son muy similares a lo visto hasta ahora para el hamiltoniano de Heisenberg.

El hamiltoniano correspondiente al modelo XXZ es

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}^{\text{xxz}} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left( \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \Delta \hat{S}_i^z \cdot \hat{S}_j^z \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left( \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y + (1 - \Delta) \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \right),\end{aligned}\quad (2.82)$$

donde  $\Delta$  parametriza la anisotropía magnética, es decir, para un link  $ij$  dado  $J_{ij}^z = (1 - \Delta)J_{ij}^{xy}$ .

Como hemos visto el hamiltoniano de Heisenberg posee una simetría de invariancia rotacional  $O(3) \equiv SU(2)$ , según la cual rotar sobre cualquier eje los espines deja invariante el hamiltoniano. En el caso del modelo  $XXZ$  este posee una simetría  $O(2) \times Z_2$ , lo cual significa que este modelo es invariante ante rotaciones alrededor del eje  $z$  y también invariante ante inversiones de las componentes  $z$ .

El límite  $\Delta = 0$  corresponde al hamiltoniano de Heisenberg, mientras que el límite  $\Delta = 1$  corresponde al modelo  $XY$

$$\hat{\mathcal{H}}^{\text{xy}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left( \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right), \quad (2.83)$$

De manera similar a lo descrito previamente, donde se expresó la interacción espín-espín como  $\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j = : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij}$ , para la componente  $zz$  de la interacción espín-espín se encuentra la siguiente expresión:

$$\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z = \frac{1}{2} \left( : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} + : \hat{C}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij} : - \hat{D}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij} \right). \quad (2.84)$$

donde aparecen dos nuevos operadores,

$$\begin{aligned}\hat{C}_{ij} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma \hat{b}_{i\sigma} \hat{b}_{j\sigma}^\dagger = \frac{1}{2} \left( \hat{b}_{i\uparrow} \hat{b}_{j\uparrow}^\dagger - \hat{b}_{i\downarrow} \hat{b}_{j\downarrow}^\dagger \right), \\ \hat{D}_{ij} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \hat{b}_{i\sigma} \hat{b}_{j\bar{\sigma}} = \frac{1}{2} \left( \hat{b}_{i\uparrow} \hat{b}_{j\downarrow} + \hat{b}_{i\downarrow} \hat{b}_{j\uparrow} \right).\end{aligned}$$

Luego,

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}^{\text{xxz}} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left[ \left( : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \right) - \frac{\Delta}{2} \left( : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} + : \hat{C}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij} : - \hat{D}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left[ \left( 1 - \frac{\Delta}{2} \right) \left( : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \right) - \frac{\Delta}{2} \left( : \hat{C}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij} : - \hat{D}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij} \right) \right]\end{aligned}\quad (2.85)$$

Así como los operadores  $\hat{A}_{ij}$  y  $\hat{B}_{ij}$  son invariantes ante cualquier rotación de los espinores  $\begin{pmatrix} \hat{b}_{i\uparrow} \\ \hat{b}_{i\downarrow} \end{pmatrix}$ , se puede verificar ahora que los operadores  $\hat{C}_{ij}$  y  $\hat{D}_{ij}$  son invariantes ante rotaciones alrededor del eje  $z$  y ante inversiones de la componente  $z$  de los espines. Estas propiedades garantizan que al aplicar la aproximación de campo medio sobre el hamiltoniano (2.85) se mantendrán las simetrías del hamiltoniano original (2.82).

Análogamente a los operadores  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$ , estos nuevos operadores verifican la identidad

$$:\hat{C}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij}: + \hat{D}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij} = S^2 \quad \forall i \neq j, \quad (2.86)$$

y desde el punto de vista de los operadores de espín se pueden expresar como

$$:\hat{C}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij}: = \frac{1}{2} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{2} \left( \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right) + \frac{S^2}{2}, \quad (2.87)$$

$$\hat{D}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij} = -\frac{1}{2} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + \frac{1}{2} \left( \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y \right) + \frac{S^2}{2}. \quad (2.88)$$

De manera similar a lo descrito para las ecs. (2.13), considerando los signos de cada término podemos asociar que el valor medio del término bicuadrático  $:\hat{C}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij}:$  se maximiza con correlaciones ferromagnéticas en la dirección  $z$  y antiferromagnéticas en el plano  $xy$ , y viceversa para el término  $\hat{D}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij}$ . Así, este esquema de operadores tiene en cuenta los efectos combinados de la anisotropía y la frustración de una manera no trivial.

Tanto la diagonalización como el tratamiento para los estados con ruptura de simetría y los cálculos de los factores de estructura estático y dinámico, se realizan de manera similar al caso isotrópico y están resumidos en el comienzo del capítulo 6.

### 3. RUPTURA DE SIMETRÍAS CONTINUAS Y DISCRETAS EN EL MODELO $J_1 - J_3$ .

#### Índice

---

<b>3.1. Introducción</b>	<b>68</b>
<b>3.2. Descripción de órdenes semiclásicos en campo medio</b>	<b>71</b>
<b>3.3. Cálculo numérico a temperatura cero</b>	<b>72</b>
<b>3.4. Resultados</b>	<b>74</b>
3.4.1. Diagrama de fases cuántico a temperatura cero	74
3.4.1.1. Regímenes con orden de largo alcance	74
3.4.1.2. Regímenes con orden de corto alcance	75
3.4.1.3. Caso espín $S = 1/2$	76
3.4.2. El límite semiclásico de la relación de dispersión	78
3.4.3. Diagrama de fases a temperatura finita	79
<b>3.5. Conclusiones</b>	<b>84</b>

---

Los resultados de este capítulo forman parte del artículo: Mezio A., Sposetti C. N., Manuel L. O. and Trumper A. E., *Journal of Physics: Condensed Matter* **25**, 465602 (2013).

### 3.1. Introducción

En este capítulo estudiamos la posible existencia de fases magnéticas con simetrías continuas o discretas rotas en antiferromagnetos espirales. Como ya hemos visto, la ruptura de simetría continua  $SU(2)$  está directamente relacionada con la presencia de un orden magnético de largo alcance, el cual, en  $2D$ , sólo puede ocurrir a  $T = 0$ . Por otro lado, en presencia de frustración pueden ocurrir degeneraciones que involucren grados de libertad discretos no triviales, los cuales pueden dar lugar a transiciones a  $T$  finita, debido a la naturaleza discreta de la simetría involucrada. Este último tipo de transiciones ha sido investigado extensivamente en el contexto del modelo de Heisenberg frustrado  $J_1 - J_2$  en la red cuadrada [10, 84, 85]. En este caso, mientras la simetría rotacional se mantiene intacta (de acuerdo con el teorema de Mermin-Wagner [26]), la fase magnética rompe la simetría de rotación discreta de la red cuadrada desde  $Z_4$  hacia  $Z_2$ , con una variable de Ising asociada que da una medida de las correlaciones magnéticas colineales con vector de onda  $(0, \pi)$  y  $(\pi, 0)$  [62]. Varios estudios analíticos [62, 42] y numéricos [86, 87] en el modelo  $J_1 - J_2$  han confirmado la ocurrencia de una transición a temperatura finita hacia una fase con la simetría  $Z_2$  rota que pertenece a la clase de universalidad de Ising.

Menos explorada, en cambio, ha sido la ocurrencia de este tipo de transición a temperatura finita en el modelo  $J_1 - J_3$

$$\hat{\mathcal{H}} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + J_3 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (3.1)$$

en el cual la frustración se debe a la competencia entre las interacciones de intercambio a primeros ( $J_1$ ) y terceros ( $J_3$ ) vecinos. Para comprender mejor a que tipo de grados de libertad discretos nos estamos refiriendo conviene hacer, primero, un análisis clásico del modelo. Por ejemplo, para un orden magnético clásico en el plano  $x - y$  la energía es

$$E_{\mathbf{Q}} = NS^2 J_{\mathbf{Q}},$$

donde

$$J_{\mathbf{k}} = J_1 (\cos(k_x) + \cos(k_y)) + J_3 (\cos(2k_x) + \cos(2k_y)).$$

Minimizando esta energía se encuentra que para  $0 \leq J_3/J_1 \leq 0.25$  el estado fundamental posee una configuración de Néel con vector de onda  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , mientras que para  $J_3/J_1 >$

0.25 hay dos estados fundamentales espirales incommensurados degenerados,  $\mathbf{Q} = (Q, Q)$  y  $(Q, -Q)$ , con  $Q$  decreciendo continuamente con  $J_3/J_1$  desde el valor  $Q = \pi$  hasta  $Q = \frac{\pi}{2}$  en el límite de  $J_3$  muy grande (ver figura 3.1). Estos dos estados fundamentales espirales

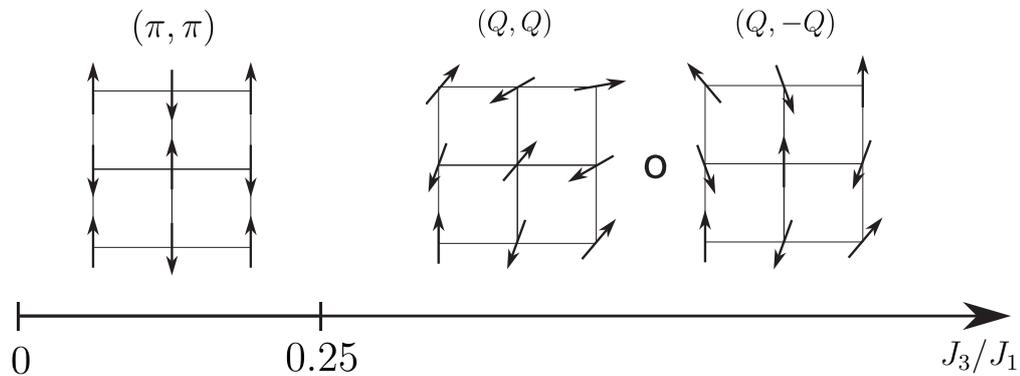


Fig. 3.1: Diagrama de fases clásico del modelo  $J_1 - J_3$ . Para  $J_3/J_1 \leq 0.25$  el estado fundamental posee un orden de Néel  $(\pi, \pi)$ . Para  $J_3/J_1 > 0.25$  el estado fundamental posee dos configuraciones degeneradas  $(Q, Q)$  y  $(Q, -Q)$ . Aquí se muestran ambas configuraciones para un valor  $Q = 160^\circ \simeq 2.79\pi$ .

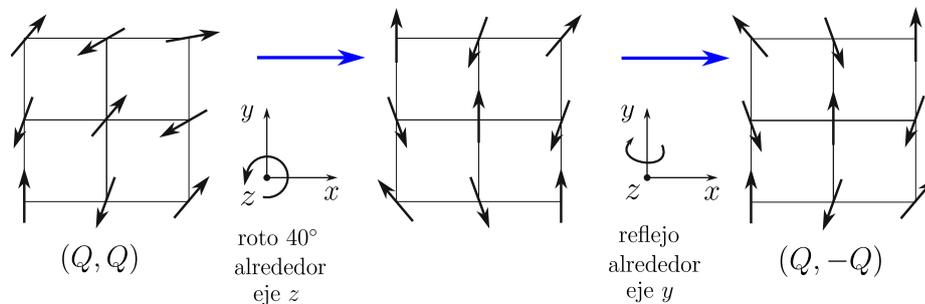


Fig. 3.2: Transformación que conecta la configuración  $(Q, Q)$  con la  $(Q, -Q)$  de la figura 3.1.

están conectados entre si por una rotación global más una reflexión sobre el eje  $y$ , como se muestra en la figura 3.2. Luego, la simetría global del estado fundamental clásico es  $O(3) \times Z_2$ .

Cálculos de Monte Carlo clásico sobre este modelo [44] predicen que una fase con ruptura de simetría  $Z_2$ , descrita por un parámetro de orden Ising nemático (ver ecuación (3.14)), sobrevive dentro de un rango de temperaturas finito, siendo la transición también de la clase de universalidad Ising. Los resultados para la temperatura crítica  $T_c$  se muestran en la figura 3.3 [44].

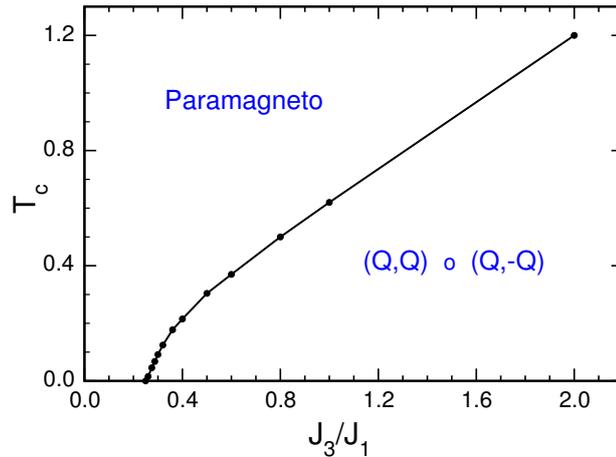


Fig. 3.3: Temperatura crítica  $T_c$  para la fase con ruptura de simetría  $Z_2$  calculada con Monte Carlo clásico por Ref. [44].

Por otro lado, a temperatura cero para espín- $\frac{1}{2}$  estudios numéricos predicen que el efecto combinado de las fluctuaciones cuánticas y la frustración modifica la transición continua clásica (figura 3.1), apareciendo una fase desordenada intermedia en el rango  $0.4 \lesssim J_3/J_1 \lesssim 0.8$  (ver figura 3.4) con, probablemente, regímenes con orden de corto alcance

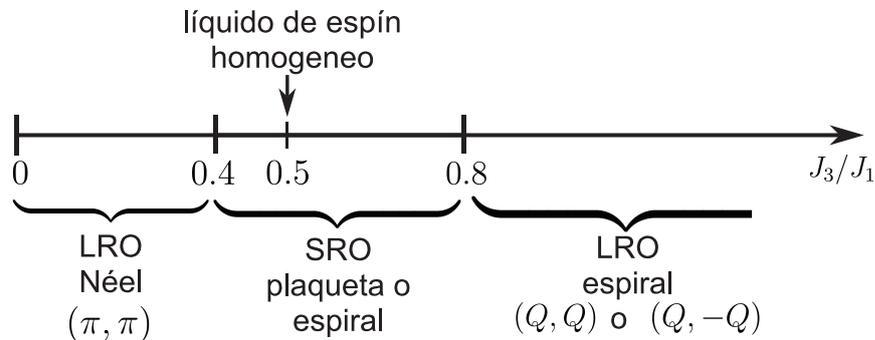


Fig. 3.4: Diagrama de fases del modelo  $J_1 - J_3$  predicho por estudios numéricos.

(SRO) tipo plaquetas y espiral [88, 89, 90], mientras que para el caso especial  $J_3/J_1 \simeq 0.5$  hay evidencia de que existe un estado tipo líquido de espín homogéneo con un gap en el espectro de excitaciones de espín [91].

Con el fin de complementar los resultados de Monte Carlo clásico y hacer contacto con el régimen cuántico a temperatura cero, en este capítulo investigamos la interrelación entre fluctuaciones cuánticas y térmicas a bajas temperaturas con la teoría de campo medio de bosones de Schwinger en el esquema de dos operadores singletes. Además, recientemente, Flint y Coleman mostraron que este esquema de campo medio provee una descripción cualitativamente buena de la transición de Ising a temperatura finita en el modelo  $J_1 - J_2$

[42].

## 3.2. Descripción de órdenes semiclásicos en campo medio

Como hemos visto en la sección 2.2.7 del capítulo 2, un orden semiclásico espiral implica una estructura de parámetros de campo medio de la forma

$$\begin{aligned} A_\delta &= m \sin \left[ \frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_\delta}{2} \right] \\ B_\delta &= m \cos \left[ \frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_\delta}{2} \right], \end{aligned} \quad (3.2)$$

Utilizando estas expresiones puede verse que las estructuras magnéticas semiclásicas están relacionadas con los parámetros de campo medio de la siguiente manera (ver figura 3.5):

- Para un orden de Néel  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$

$$A_{1x} = A_{1y} = A_1 \neq 0 \quad (3.3)$$

$$B_{1x} = B_{1y} = B_1 = 0 \quad (3.4)$$

$$A_{3x} = A_{3y} = A_3 = 0 \quad (3.5)$$

$$B_{3x} = B_{3y} = B_3 \neq 0 \quad (3.6)$$

- Para un orden espiral  $\mathbf{Q} = (Q, Q)$

$$A_{1x} = A_{1y} = A_1 \neq 0 \quad (3.7)$$

$$B_{1x} = B_{1y} = B_1 \neq 0 \quad (3.8)$$

$$A_{3x} = A_{3y} = A_3 \neq 0 \quad (3.9)$$

$$B_{3x} = B_{3y} = B_3 \neq 0 \quad (3.10)$$

Es importante destacar que para la fase de Néel la frustración  $J_3/J_1$  es tomada en cuenta a través del parámetro  $B_3$ , mientras que en el esquema de sólo un operador singlete no hay parámetro de campo medio sensible a la frustración, ya que el único parámetro que

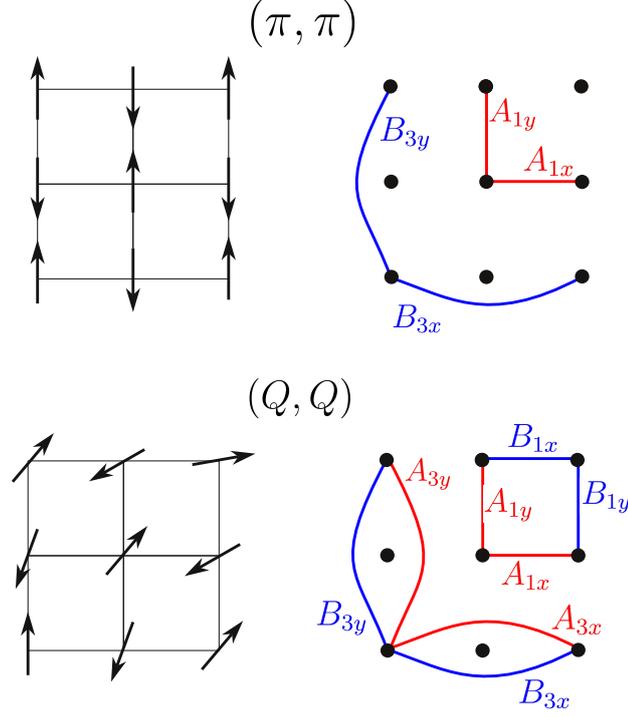


Fig. 3.5: Estructura de los parámetros de campo medio correspondiente a correlaciones Néel  $(\pi, \pi)$  y espiral  $(Q, Q)$  para el modelo  $J_1 - J_3$ . Se indican sólo los parámetros no nulos.

medir correlaciones a terceros vecinos resulta  $A_3 = 0$  [35, 36]<sup>1</sup>. Veremos más adelante cómo esto se manifiesta en el diagrama de fases.

### 3.3. Cálculo numérico a temperatura cero

Para resolver las ecuaciones de autoconsistencia (2.49) numéricamente utilizamos como valores iniciales  $m^0 = S$  y un vector de onda magnético  $\mathbf{Q}^0$ . Estos permiten establecer como punto de partida un orden semiclásico, donde se calcula el multiplicador de Lagrange inicial como  $\lambda^0 = SJ_{\mathbf{Q}^0}$  y utilizando las ecuaciones (3.2),

$$\begin{aligned} A_\delta^0 &= m^0 \sin \left[ \frac{\mathbf{Q}^0 \cdot \mathbf{R}_\delta}{2} \right] \\ B_\delta^0 &= m^0 \cos \left[ \frac{\mathbf{Q}^0 \cdot \mathbf{R}_\delta}{2} \right], \end{aligned}$$

<sup>1</sup> En la sección 4.2.5 del próximo capítulo desarrollamos brevemente el campo medio con el esquema de sólo un operador singlete.

se calculan también los parámetros  $A_\delta^0$  y  $B_\delta^0$  iniciales de la estructura semiclásica.

Con estos valores iniciales  $A_\delta^0$ ,  $B_\delta^0$ ,  $\mathbf{Q}^0$ ,  $\lambda^0$  y  $m^0$  comienza el proceso iterativo:

- a) Se busca el mínimo  $\mathbf{k}_{\min}$  de la relación de dispersión  $\omega_{\mathbf{k}}$  y se obtiene el vector de onda de la nueva estructura espiral como  $\mathbf{Q}^1 = 2\mathbf{k}_{\min}$
- b) Se evalúa el nuevo parámetro  $\lambda^1$  que hace *gapless* la dispersión espinónica en  $\frac{\mathbf{Q}^1}{2}$ , es decir que satisface la igualdad

$$\left(\gamma_{\frac{\mathbf{Q}^1}{2}}^{B^0} + \lambda^1\right)^2 = \left(\gamma_{\frac{\mathbf{Q}^1}{2}}^{A^0}\right)^2.$$

- c) El nuevo valor de magnetización  $m^1$  se obtiene de la ecuación autoconsistente del constraint (2.49c) como

$$m^1 = S + \frac{1}{2} - \int \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^{B^0} + \lambda^1}{\omega_{\mathbf{k}}} d\mathbf{k}.$$

- d) Se calculan los nuevos parámetros  $A_\delta^1$  y  $B_\delta^1$  de las ecuaciones autoconsistentes (2.49a) y (2.49b),

$$\begin{aligned} A_\delta^1 &= m^1 \sin\left(\frac{\mathbf{Q}^1 \cdot \mathbf{R}_\delta}{2}\right) + \int \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^{A^0}}{\omega_{\mathbf{k}}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta) d\mathbf{k} \\ B_\delta^1 &= m^1 \cos\left(\frac{\mathbf{Q}^1 \cdot \mathbf{R}_\delta}{2}\right) + \int \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^{B^0} + \lambda^1}{\omega_{\mathbf{k}}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta) d\mathbf{k}. \end{aligned}$$

- e) Con las nuevas cantidades  $A_\delta^1$ ,  $B_\delta^1$ ,  $\mathbf{Q}^1$ ,  $\lambda^1$  y  $m^1$  se retoma el proceso iterativo hasta su convergencia.

El criterio de convergencia se toma para los tres parámetros de campo medio  $A_\delta$ ,  $B_\delta$  y  $m$ .

Dependiendo de la intensidad de las fluctuaciones cuánticas, las cuales pueden medirse por el valor de  $S$ , hay soluciones con correlaciones tipo Néel o tipo espiral, pero con un valor de magnetización  $m = 0$ . A estas soluciones las hemos llamado SRO  $(\pi, \pi)$  y SRO  $(Q, Q)$ , respectivamente.

## 3.4. Resultados

### 3.4.1. Diagrama de fases cuántico a temperatura cero

Evaluando numéricamente las ecuaciones autoconsistentes (2.49) con el proceso iterativo arriba descrito, hemos obtenido el diagrama de fases cuántico predicho por la teoría de campo medio de bosones de Schwinger (SBMFT) para diferentes valores de espín  $S$  y frustración  $J_3/J_1$ , el cual se muestra en la figura 3.6.

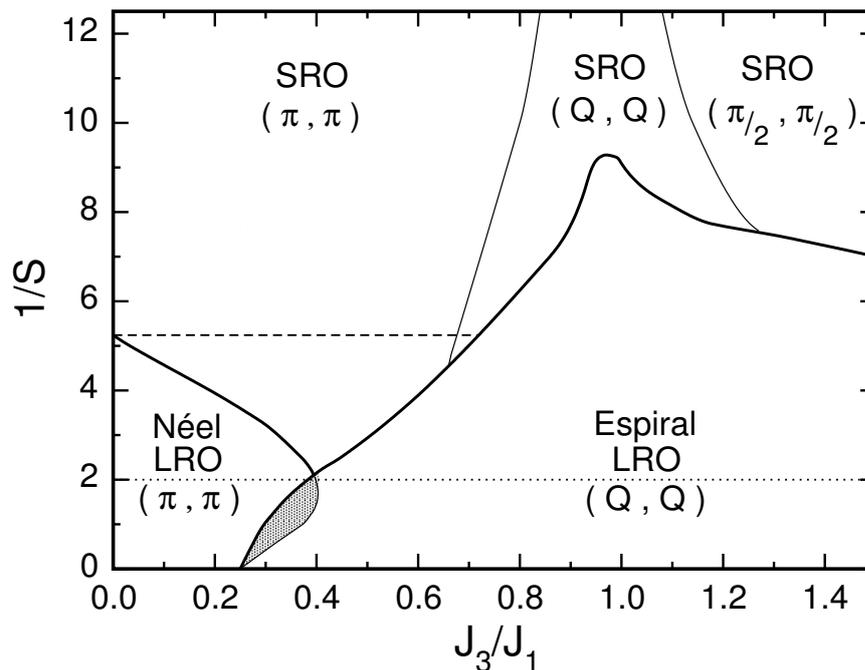


Fig. 3.6: Diagrama de fases magnéticas para el modelo  $J_1 - J_3$  calculado con SBMFT en el esquema de dos singletes descrito en el capítulo 2. Las líneas sólidas representan transiciones continuas o de segundo orden. Las líneas delgadas denotan cruces entre diferentes regímenes SRO. El área sombreada es una región de Néel metaestable y la línea punteada indica el caso  $S = 1/2$ . La línea horizontal de trazos corresponde a la predicción de SBMFT en el esquema de sólo un singlete para la fase de Néel (ver texto).

#### 3.4.1.1. Regímenes con orden de largo alcance

Para  $S = \infty$  se recupera la transición continua clásica a  $J_3/J_1 = 0.25$  entre las fases LRO Néel y LRO espiral [92]. Al disminuir  $S$  hay un aumento en la estabilidad de la fase Néel acompañada de una similar reducción de la estabilidad de la fase espiral. Este comportamiento ya había sido predicho hace algún tiempo por Ferrer utilizando argumentos de

simetría [93]. En la línea de transición de este régimen (línea sólida) el vector de onda magnético cambia continuamente desde  $(\pi, \pi)$  a órdenes espirales incommensurados a medida que aumenta la frustración. Para valores de espín  $S \gtrsim 1/2$  hay una región de Néel metaestable, caracterizada por un reingreso mostrado en el área sombreada de la figura 3.6. Este comportamiento es característico de la interrelación no trivial entre frustración y fluctuaciones cuánticas tomada en cuenta por el esquema de dos operadores singletes. Cabe destacar que este tipo de comportamiento ya ha sido encontrado con la misma aproximación en modelos relacionados como los modelos  $J_1 - J_2$  o  $J_1 - J_2 - J_3$  en la red cuadrada [42, 63, 64] y panal de abeja [94, 95]. Si se aplica el esquema de un operador singlete la línea sólida que delimita la transición entre las fases LRO Néel y SRO Néel debe reemplazarse por la línea horizontal de trazos de la figura 3.6, perdiéndose completamente el efecto de la frustración para la fase Néel [35, 36, 96]. Finalmente, para valores de espín  $S \lesssim 0.5$  las transiciones delineadas en la figura con una línea sólida gruesa resultan ser transiciones de segundo orden entre estados LRO y SRO.

#### 3.4.1.2. Regímenes con orden de corto alcance

El estudio del diagrama de fases para los casos no físicos  $S < \frac{1}{2}$  es interesante ya que éste puede proveer alguna idea sobre los posibles efectos cuánticos que se obtendrían cuando las fluctuaciones de los parámetros  $A_\delta$  y  $B_\delta$  sean tenidas en cuenta para el caso físico ( $S = \frac{1}{2}$ ). En estos regímenes tienen lugar sucesivas transiciones SRO a través de las líneas delgadas,  $(\pi, \pi) \leftrightarrow (Q, Q) \leftrightarrow (\pi/2, \pi/2)$ , al variar la frustración [97]. Aquí las soluciones de campo medio pueden relacionarse con las soluciones en el límite *large- $\mathcal{N}$* ,  $\kappa = \frac{2S}{\mathcal{N}}$ , donde los espinones son exactamente libres para  $\kappa = 0$ . La inclusión de fluctuaciones de  $\mathcal{N}$  finito puede cambiar drásticamente la naturaleza del estado fundamental y de las excitaciones. En este sentido, teorías efectivas de campos de *gauge* predicen que un estado fundamental SRO conmensurado (colineal) es inestable hacia un orden de sólido de enlaces de valencia (VBS) con espinones confinados, mientras que en el caso de SRO incommensurado (espiral) se estabiliza un estado tipo líquido de espín  $Z_2$ <sup>2</sup> con espinones desconfinados [35, 36]. Desde luego esta descripción está más allá del alcance de la aproxi-

<sup>2</sup> En el contexto de las teorías de campo efectivas de bajas energías, el pasaje al continuo para un orden espiral incommensurado se realiza mediante una parametrización particular de la cual resultan unos campos espinoriales (análogos a los espinores de los bosones Schwinger, ver sección 2.2 capítulo 2) que poseen una simetría de *gauge*  $Z_2$  (análoga a la simetría de *gauge* de los bosones de Schwinger, que es del tipo  $U(1)$ ). En este marco, un líquido de espín  $Z_2$  es un estado magnéticamente desordenado, que no rompe la simetría  $SU(2)$ , y que además no rompe ninguna otra simetría, ni siquiera la simetría emergente  $Z_2$  [30, 9].

mación de campo medio, cuya principal debilidad reside en la relajación de la restricción local del número de bosones.

Para el régimen  $S \rightarrow 0$  hemos encontrado que las dos líneas delgadas, que separan los estados  $(\pi, \pi)$  y  $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$  SRO, convergen en una sola línea (no mostrada en la figura 3.6) alrededor del valor  $J_3/J_1 \sim 1$ . Para  $J_3/J_1 < 1$  sólo sobreviven

$$A_{1x} = A_{1y} = A_1 \neq 0,$$

mientras que para  $J_3/J_1 > 1$  sólo lo hacen

$$A_{3x} = A_{3y} = A_3 \neq 0.$$

Estos estados, que sólo forman enlaces singletes  $A_\delta$  a lo largo de los *links* con mayor  $J_\delta$ , coinciden con una familia de soluciones acuñadas *greedy bosons*, encontrada en el contexto de la teoría *large-N* grande para  $\kappa \rightarrow 0$  [98]. Por otro lado, uno puede notar el amplio margen de estabilidad para la fase SRO  $(\pi, \pi)$ . De hecho, la presencia de una larga línea de transición entre fases LRO espirales y SRO Néel  $(\pi, \pi)$ , alrededor de  $0.4 \lesssim J_3/J_1 \lesssim 0.65$ , implica una tendencia de las fluctuaciones cuánticas a formar correlaciones magnéticas conmensuradas que a su vez se espera favorezcan estados con carácter VBS [35, 36]. Basados en trabajos previos del grupo, [66] podemos estimar que las fluctuaciones gaussianas incrementarán la estabilidad de los SRO  $(\pi, \pi)$  y SRO  $(Q, Q)$ , empujando las fases LRO  $(\pi, \pi)$  y  $(Q, Q)$  hacia valores mayores de  $S$ , y abriendo así una ventana desordenada intermedia con probablemente un carácter de VBS o de líquido de espín  $Z_2$ .

#### 3.4.1.3. Caso espín $S = 1/2$

Los resultados para  $S = \frac{1}{2}$  son particularmente interesantes debido a la comparación adicional con los estudios numéricos disponibles. En la figura 3.7.a se grafica la magnetización local versus frustración para  $S = 1/2$ . Se observa una transición continua desde la fase Néel hacia una fase espiral. Esta transición se vuelve cuasi-crítica a  $(J_3/J_1)_c \sim 0.38$ , con una magnetización local muy pequeña  $m \sim 0.015$ . En la misma figura la línea de trazos muestra la predicción del esquema que utiliza sólo un operador singlete  $\hat{A}_{ij}$  [35]. Aunque la transición ocurre en el mismo punto, esta aproximación falla en describir los efectos de la frustración sobre la fase de Néel, como discutimos antes para el diagrama de

fases en  $\frac{1}{S}$  (figura 3.6). La figura 3.7.b muestra el vector de onda magnético  $\mathbf{Q}$  variando

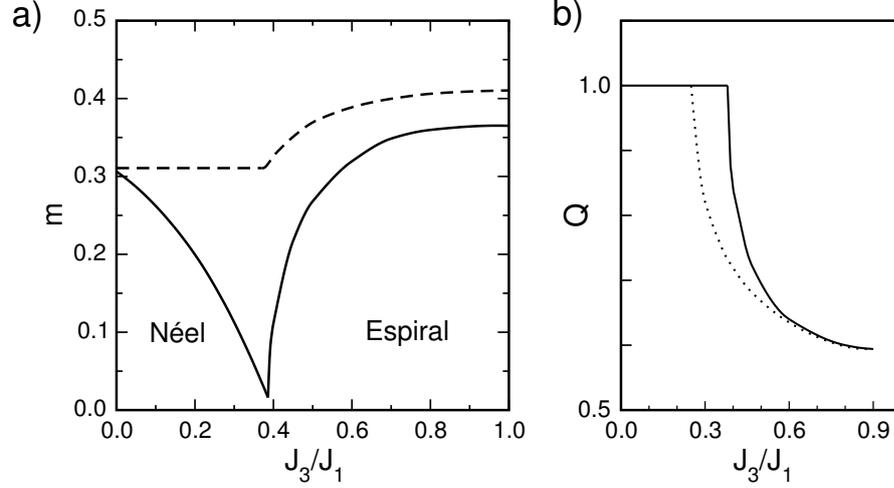


Fig. 3.7: Magnetización local  $m$  como función de la frustración para el caso  $S = 1/2$ . La línea sólida es para el esquema de dos operadores singletes y la línea de trazos es para el esquema de un operador singlete [35]. En ambos esquemas el punto de transición ocurre en el valor  $(J_3/J_1)_c \sim 0.38$ .

continuamente con la frustración calculado con SBMFT (línea sólida) donde se observa una fuerte renormalización cuántica respecto del valor clásico (línea de puntos) [92]. Para fases espirales, ambos esquemas de desacople, uno y dos operadores singletes, predicen el mismo valor de  $\mathbf{Q}$  (línea sólida).

Como hemos visto en la introducción, recientes estudios numéricos para  $S = 1/2$  predicen la existencia de un régimen desordenado intermedio en el rango  $0.4 \lesssim J_3/J_1 \lesssim 0.8$  con, probablemente, regímenes SRO plaqueta y SRO espiral entre las fases LRO Néel y LRO espiral [88, 89, 90], mientras que para el valor  $J_3/J_1 \simeq 0.5$  hay evidencia de que existe un estado tipo líquido de espín homogéneo [91] (ver figura 3.4). También, como ya hemos dicho, basándonos en cálculos de fluctuaciones gaussianas previos [66] estimamos que las correcciones al campo medio abrirán una ventana desordenada con correlaciones SRO  $(\pi, \pi)$  alrededor del valor crítico  $(J_3/J_1)_c \sim 0.38$ , de manera similar a la figura 3.4. Una manera más sencilla de inferir los efectos de dichas fluctuaciones sobre el campo medio consiste en recordar, de la sección 2.3.3 en el capítulo 2, que el valor medio del espín en el sitio es sobrestimado por las fluctuaciones de campo medio, resultando  $\langle \hat{\mathbf{S}}_i^2 \rangle = \frac{3}{2}S(S+1)$ . Uno puede elegir un valor de espín  $S^*$  para ajustar las fluctuaciones de espín local correctas [99] es decir, que se satisfaga  $\frac{3}{2}S^*(S^*+1) = S(S+1)$ . El valor de  $S^*$  así encontrado es  $S^* = \frac{1}{2}(\sqrt{3}-1) \sim 0.366$  que, inspeccionando la figura 3.6 a  $1/S^* \sim 2.73$ , implica una

región SRO  $(\pi, \pi)$  dentro del rango  $0.35 \lesssim J_3/J_1 \lesssim 0.5$ . Dado que estos estados tienen una tendencia a formar estados VBS, [35, 36] concluimos que podría haber un acuerdo razonable con los resultados numéricos [90].

Sin embargo, para recuperar el estado tipo líquido de espín homogéneo encontrado en  $J_3/J_1 = 0.5$  uno debe mejorar el cálculo, por ejemplo implementando la restricción local exactamente. Recientes estudios de Monte Carlo variacional basados en el *ansatz* de SBMFT [100] predicen un estado tipo líquido de espín  $Z_2$  en el régimen desordenado del modelo  $J_1 - J_2$ , aún en ausencia de SRO espiral [35, 36]. Entonces, en concordancia con Ref. [91], también esperamos la probable existencia de un líquido de espín  $Z_2$  en la región desordenada del modelo  $J_1 - J_3$ . Recientemente, se han encontrado características similares usando la misma aproximación para el diagrama de fase del modelo  $J_1 - J_2$  en la red “panal de abeja” [101].

### 3.4.2. El límite semiclásico de la relación de dispersión

Para concluir este análisis de la ruptura de simetría  $SU(2)$  nos concentraremos en el límite semiclásico de la relación de dispersión obtenida con SBMFT, la cual compararemos con la correspondiente a la teoría de ondas de espín lineal (LSWT).

Si reemplazamos las expresiones semiclásicas para los parámetros de campo medio, ecuaciones (3.2),

$$\begin{aligned} A_\delta &= m \sin \left[ \frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_\delta}{2} \right] \\ B_\delta &= m \cos \left[ \frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_\delta}{2} \right], \end{aligned}$$

en la expresión de  $\omega_{\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{Q}}{2}}$ , entonces la relación de dispersión física de SBMFT en el límite de  $S$  grande resulta

$$\omega_{\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{Q}}{2}} = S \sqrt{[J_{\mathbf{k}} - J_{\mathbf{Q}}][J_{\mathbf{k} \pm \mathbf{Q}} - J_{\mathbf{Q}}]}, \quad (3.11)$$

donde  $\lambda = SJ_{\mathbf{Q}}$ . Las dos relaciones de dispersión desplazadas posibles,  $\omega_{\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}}$  y  $\omega_{\mathbf{k} - \frac{\mathbf{Q}}{2}}$ , no coinciden con la expresión semiclásica de LSWT

$$\omega_{\mathbf{k}}^{LSW} = S \sqrt{[J_{\mathbf{k}} - J_{\mathbf{Q}}][(J_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}} + J_{\mathbf{k} - \mathbf{Q}})/2 - J_{\mathbf{Q}}]}. \quad (3.12)$$

En particular, para recuperar el resultado convencional de onda de espín deben introducirse parámetros de campo medio singletes y tripletes [62]. No obstante ambas ecuaciones,

(3.11) y (3.12), tienen los mismos modos de energía cero  $\mathbf{k} = (0, 0), (\pm Q, \pm Q), (\pm Q, \mp Q)$ . Para un dado orden espiral se espera solamente tres modos de Goldstone:  $(0, 0), (Q, Q)$  y  $(-Q, -Q)$ , relacionados con la ruptura completa de la simetría  $SO(3)$ . Como hemos visto, los modos espurios  $(Q, -Q)$  y  $(-Q, Q)$  en el espectro reflejan la simetría de reflexión de la red, estando relacionados con los modos  $(\pm Q, \pm Q)$  por una rotación global combinada con una reflexión alrededor de un eje (ver figura 3.2). En el caso cuántico  $S = 1/2$ , sin embargo, después del proceso iterativo, la dispersión SBMFT recupera la correcta estructura de modos de Goldstone en  $\mathbf{k} = (0, 0), (\pm Q, \pm Q)$  para antiferromagnetos espirales; mientras que en la teoría de ondas de espín la remoción de los modos cero espurios requiere ir más allá de la aproximación armónica [102]. La imposibilidad del esquema de operadores singletes de recuperar el límite semiclásico correcto para fases espirales fue tomado, originalmente, como una gran debilidad de la aproximación. Sin embargo, en el próximo capítulo vamos a mostrar que esta discrepancia es crucial para describir correctamente las excitaciones físicas del AF triangular en el límite cuántico  $S = \frac{1}{2}$ .

### 3.4.3. Diagrama de fases a temperatura finita

El diagrama de fase a temperatura finita se obtiene resolviendo las ecuaciones auto-consistentes (2.32)

$$A_\delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^A}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}^a) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta), \quad (3.13a)$$

$$B_\delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda)}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}^a) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta), \quad (3.13b)$$

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda)}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}^a). \quad (3.13c)$$

en redes muy grandes ( $N \sim 10\,000$ ), con los parámetros de campo medio  $A_\delta, B_\delta$ , y  $\lambda$ . Aquí, en concordancia con el teorema de Mermin-Wagner, la magnetización  $m$  da siempre cero, aún cuando los parámetros de campo medio tienen estructura semiclásica. Estas soluciones invariantes rotacionales corresponden al régimen clásico renormalizado<sup>3</sup> con un decaimiento exponencial de la función de correlación espín-espín [70]. En particular,

<sup>3</sup> En un estado ordenado, apenas  $T > 0$  las fluctuaciones térmicas destruyen el LRO y la longitud de correlación se vuelve finita. Además estas fluctuaciones térmicas resultan significativamente más importantes que las fluctuaciones cuánticas, por lo que el sistema posee un comportamiento predominantemente clásico. En este régimen los parámetros de acoplamiento están renormalizados debido a las fluctuaciones cuánticas de punto cero, por lo cual se lo denomina régimen “clásico renormalizado” [58].

estamos interesados en las fases SRO espirales, ya que a temperatura finita rompen la simetría discreta  $Z_2$  que relaciona las fases  $(Q, Q)$  y  $(Q, -Q)$ . Resultados de Monte Carlo clásico [44] predicen una fase con ruptura de simetría  $Z_2$  que pertenece a la clase de universalidad de Ising caracterizada por el parámetro de orden *nemático*

$$\sigma = \langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 - \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4 \rangle, \quad (3.14)$$

donde los números denotan los sitios de una plaqueta cuadrada ordenados en la forma

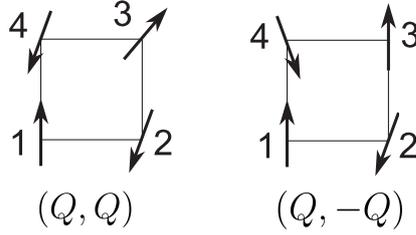


Fig. 3.8: Las dos diferentes configuraciones espirales posibles con vectores de onda magnéticos  $(Q, Q)$  y  $(Q, -Q)$  donde se han numerado los espines de acuerdo a la definición (3.14) del parámetro de orden  $\sigma$ .

cíclica  $(1, 2, 3, 4)$  [44] (ver figura 3.8). Además de dar una medida de las correlaciones espirales –se desvanece para correlaciones Néel– es fácil ver que el parámetro de orden  $\sigma$  asume signos opuestos para las correlaciones  $(Q, Q)$  y  $(Q, -Q)$ . Para calcular  $\sigma$  en la teoría SBMFT es suficiente recurrir a la ecuación (2.11) que expresa la interacción espín-espín en términos de los operadores singletes, por lo cual  $\sigma$  se escribe en términos de correlaciones a segundos vecinos como

$$\sigma = |B_{13}|^2 - |A_{13}|^2 - |B_{24}|^2 + |A_{24}|^2. \quad (3.15)$$

Aunque los parámetros de campo medio son los  $A$ 's y  $B$ 's a primeros y terceros vecinos, es posible calcular  $B_{13}$ ,  $B_{24}$ ,  $A_{13}$ , y  $A_{24}$  resolviendo primero las ecuaciones de autoconsistencia (3.13) y luego calculando las expresiones (3.13a) y (3.13b) con el vector  $\mathbf{R}_\delta$  conectando los segundos vecinos  $(1, 1)$  y  $(1, -1)$ . Por otra parte, insertando las expresiones semiclásicas (3.2) de estos en la ecuación (3.15), el parámetro de orden resulta

$$\sigma = -2S^2 \sin Q_x \sin Q_y, \quad (3.16)$$

donde se evidencia claramente la diferencia de signo (Ising) entre los estados  $(Q, Q)$  y  $(Q, -Q)$ .

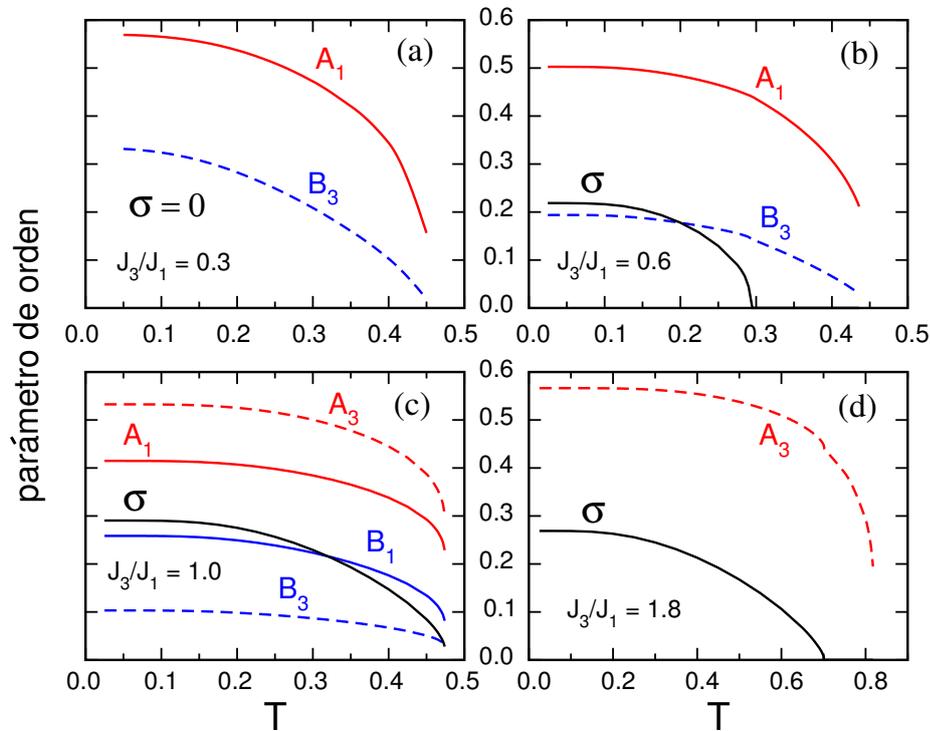


Fig. 3.9: Estructura de parámetros de campo medio correspondiente a correlaciones Néel  $(\pi, \pi)$  y espiral  $(Q, Q)$  para el modelo  $J_1 - J_3$ . Sólo los parámetros no nulos relevantes son indicados en cada caso.

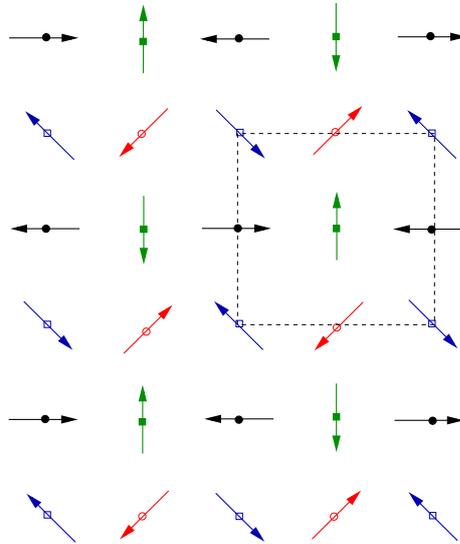
Dependiendo del valor de la frustración hemos encontrado diferentes regímenes cuando aumentamos la temperatura desde los estados fundamentales a temperatura cero. En la fig. 3.9.a se muestra la dependencia con la temperatura de los parámetros no nulos  $A_1$  y  $B_3$  correspondientes a una fase con orden de Néel a  $J_3/J_1 = 0.3$ . Los parámetros decrecen monótonamente dando lugar a una fase SRO Néel hasta  $T^* \sim 0.45^4$ . Superando esta temperatura el SBMFT da un paramagneto perfecto con todos los parámetros de campo medio iguales a cero.

Comenzando desde un estado fundamental espiral se observan dos temperaturas diferentes. Por un lado, para  $0.38 < J_3/J_1 < 1$ , la fase SRO espiral sufre una transición a una fase SRO Néel cuando la temperatura aumenta, ya que las fluctuaciones sobre un SRO colineal pueden minimizar más eficientemente la energía libre. Este comportamiento, ya observado en modelos relacionados, [103] se muestra en la fig. 3.9.b para  $J_3/J_1 = 0.6$ .

<sup>4</sup> Todas las temperaturas de este capítulo están expresadas en unidades de  $J_1$ .

Aquí las correlaciones espirales indicadas por  $\sigma \neq 0$  persisten hasta  $T \sim 0.3$ , mientras que para temperaturas mayores se estabilizan correlaciones SRO de Néel  $-A_1, B_3 \neq 0$  hasta que se alcanza el valor  $T \sim 0.45$ .

Por otro lado, para  $J_3/J_1 > 1$  (figura 3.9.d), antes de alcanzar la fase paramagnética hay nuevamente una fase colineal intermedia que hemos llamado  $(\pi, \pi)_4$  porque está compuesta por cuatro subredes de terceros vecinos desacopladas con correlaciones de Néel de corto alcance en cada una (ver figura 3.10) En este sentido la energía libre puede minimizarse

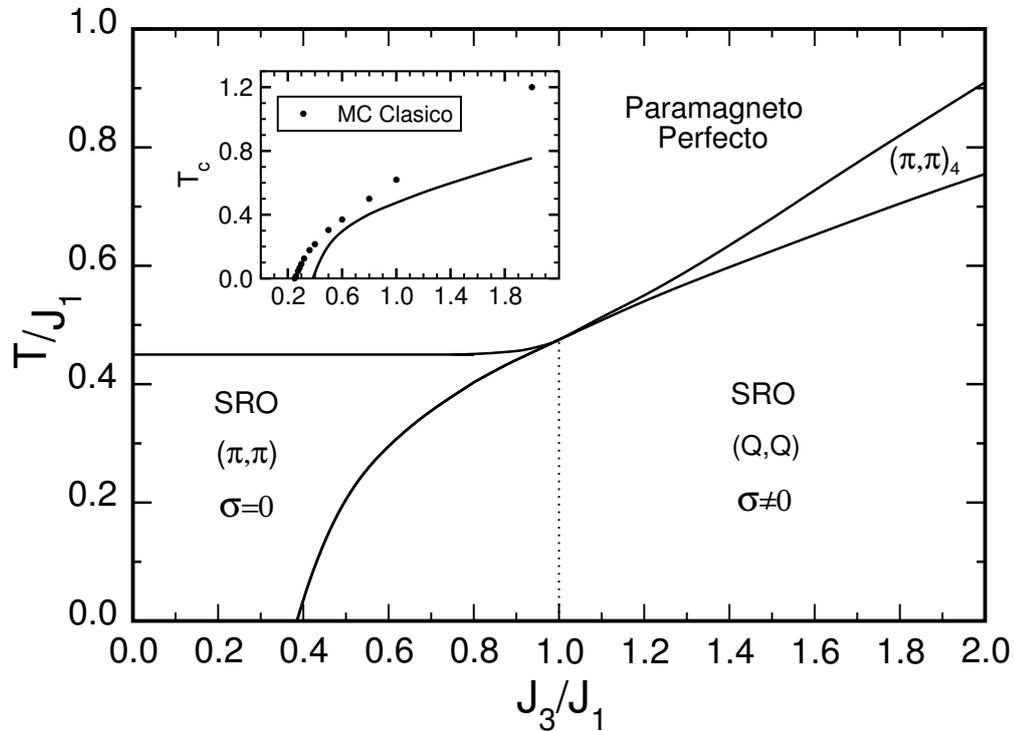


*Fig. 3.10:* Esquema de la estructura magnética correspondiente a la fase  $(\pi, \pi)_4$ , compuesta de cuatro subredes de terceros vecinos desacopladas con correlaciones de Néel de corto alcance en cada una.

más eficientemente ya que las fluctuaciones térmicas sobre ese orden de corto alcance AF colineal desacoplado entre terceros vecinos optimiza tanto la energía interna como la entropía. Esto se muestra en la fig. 3.9 (d) para  $J_3/J_1 = 1.8$  donde, dentro del rango  $0.7 < T < 0.8$ , sólo sobrevive el parámetro AF de campo medio  $A_3$  junto con una correlación ferromagnética más pequeña entre quintos vecinos  $B_5$  (que no se muestra en la figura), y así sucesivamente.

La figura 3.9.c muestra el caso especial  $J_3/J_1 = 1$  donde hay una transición directa desde una fase SRO espiral a un paramagneto perfecto alrededor de  $T = 0.45$ . Los saltos de  $A_1$  y  $A_3$  encontrados a esta temperatura se deben a la dificultad en resolver numéricamente la ecuación autoconsistente de la restricción local (3.13c) a temperaturas alrededor de  $T = 0.45$ . En realidad, acercándose desde altas temperaturas, puede mostrarse analíticamente que en ciertos límites  $A_1$  y  $A_3$  se van continuamente a cero [42]. Resumiendo,

el diagrama de fases consiste en la figura 3.11. Es interesante notar que las transicio-



*Fig. 3.11:* Diagrama de fases magnéticas a temperatura finita para el modelo  $J_1 - J_3$  con espín- $\frac{1}{2}$ , donde pueden observarse los distintos regímenes descritos en las figuras 3.9. Recuadro: comparación de la temperatura crítica  $T_c$  predicha por SBMFT (línea sólida) y Monte Carlo Clásico (puntos).

nes a la fase paramagnética pueden encontrarse, en los límites de  $J_3/J_1$ , de una manera analítica. En este régimen todos los parámetros de campo medio son cero y la ecuación de autoconsistencia (3.13c) implica

$$\omega_{\mathbf{k}} = \lambda = T \ln \left( 1 + \frac{1}{S} \right). \quad (3.17)$$

Luego, asumiendo que en el límite  $J_1 \gg J_3$  el primer parámetro de campo medio que se prende es  $A_1$  con su forma semiclásica, la ecuación (2.32a) conduce a

$$\frac{1}{J_1} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\sin^2 k_x + \sin k_y \sin k_x)}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}) \quad (3.18)$$

Reemplazando (3.17) y realizando la sumatoria de (3.18) sobre la primer ZB, se obtiene

la temperatura crítica

$$T_1^* = \frac{J_1}{2} \frac{S + \frac{1}{2}}{\ln\left(\frac{S+1}{S}\right)}. \quad (3.19)$$

Para  $S = \frac{1}{2}$  esta temperatura,  $T_1^* \simeq 0.45$ , coincide con el límite horizontal entre la fase paramagnética y la fase SRO Néel ( $J_3/J_1 < 1$ ) del diagrama de fases a temperatura finita de la figura 3.11. Un procedimiento similar puede llevarse a cabo para  $A_3$  en el límite  $J_3 \gg J_1$ , dando la temperatura crítica

$$T_3^* = \frac{J_3}{2} \frac{S + \frac{1}{2}}{\ln\left(\frac{S+1}{S}\right)}. \quad (3.20)$$

Nuevamente, para  $S = \frac{1}{2}$ , esto da un comportamiento lineal  $T_3^* \simeq 0.45J_3$  que coincide con el límite entre el régimen paramagnético y el régimen  $(\pi, \pi)_4$  del diagrama de fases de la figura 3.11. Por otro lado, el límite del régimen con ruptura de simetría  $Z_2$  ha sido identificado numéricamente con la temperatura  $T_c$  donde el parámetro de orden nemático  $\sigma$  se va a cero. En el recuadro de la figura 3.11 se muestra el buen acuerdo cualitativo de la temperatura crítica  $T_c$  predicha por Monte Carlo clásico [44] y la SBMFT. Dado que SBMFT recupera el resultado clásico en el límite de  $S$  grande, el ligero desplazamiento hacia la derecha de  $T_c$  respecto de los resultados de MC clásico puede interpretarse como el efecto cuántico para el caso  $S = \frac{1}{2}$ . En realidad, esperamos un corrimiento aún más marcado una vez que se hayan calculado correcciones sobre SBMFT.

### 3.5. Conclusiones

Hemos investigado la ruptura de simetrías discreta y continua en la fase espiral del modelo de Heisenberg frustrado  $J_1 - J_3$  usando la teoría de campo medio de bosones de Schwinger. Hemos estudiado en detalles ambas: la ruptura de simetría  $SU(2)$  que se relaciona explícitamente con la parte condensada de la función de onda del estado fundamental, y la ruptura de simetría  $Z_2$  que está relacionada con la ruptura de la degeneración discreta de las fases espirales  $(Q, Q)$  y  $(Q, -Q)$ .

Para  $T = 0$ , comparando con los resultados que existen actualmente, hemos mostrado que el esquema de dos operadores de enlace singletes de SBMFT da resultados confiables para el diagrama de fases cuántico. En particular, este esquema describe correctamente los efectos de la frustración esperados en la fase colineal [93] que no son capturados por el esquema de un singlete usado en la literatura [35, 36].

Para el caso  $S = \frac{1}{2}$ , consideraciones de fluctuaciones de espín local nos permiten inferir un régimen desordenado en  $0.35 \lesssim J_3/J_1 \lesssim 0.5$  que concuerda cualitativamente con recientes resultados numéricos [90].

Con respecto al régimen de temperatura finita, hemos encontrado una fase con la invariancia rotacional restaurada y con ruptura de simetría  $Z_2$  caracterizada por el parámetro de orden nemático  $\sigma$ . El comportamiento de la temperatura crítica  $T_c$  versus la frustración concuerda cualitativamente con resultados de Monte Carlo clásico [44]. Basándose en estos resultados de MC clásico, se ha sugerido la posible realización de un líquido de espín  $Z_2$  con orden nemático en el límite  $T \rightarrow 0$  entre las fases Néel y espiral [44]. Sin embargo, debe notarse que en principio no hay conexión directa entre la simetría global  $Z_2$  del parámetro de orden nemático tipo Ising  $\sigma$  y la teoría de *gauge*  $Z_2$  de la fase líquido de espín (ver en este capítulo la nota al pie 2 de la página 75).

En la presente teoría de SBMFT las soluciones cuánticas y a temperatura finita estudiadas son de la misma naturaleza, con un valor finito del parámetro de orden nemático tipo Ising; consecuentemente, es importante remarcar que, si existen, las propiedades no triviales del estado tipo líquido de espín  $Z_2$  aparecerán, por ejemplo, al resolver la restricción local exactamente. No obstante, actualmente, su implementación en Monte Carlo variacional muestra varias limitaciones, permitiendo sólo el estudio de sistemas con tamaño hasta  $6 \times 6$  [100, 104, 105].

Otro resultado interesante es la tendencia general de las fluctuaciones térmicas a estabilizar correlaciones colineales. En particular, hemos encontrado transiciones de SRO espiral hacia SRO Néel colineal antes de alcanzar la fase paramagnética: para  $J_3/J_1 < 1$  se favorecen correlaciones de corto alcance Néel  $(\pi, \pi)$ , mientras que para  $J_3/J_1 > 1$  hay una fase intermedia  $(\pi, \pi)_4$  caracterizada por cuatro subredes de terceros vecinos desacopladas con correlaciones de corto alcance de Néel en cada una. Un estudio con Monte Carlo clásico permitiría investigar mejor la presencia, o no, de esta nueva fase  $(\pi, \pi)_4$ .

## 4. ESPECTRO DEL ANTIFERROMAGNETO TRIANGULAR

### Índice

---

<b>4.1. Introducción</b>	<b>87</b>
<b>4.2. Resultados</b>	<b>89</b>
4.2.1. Magnetización y energía	89
4.2.2. Factor de Estructura Dinámico	91
4.2.3. Funciones de correlación densidad-densidad	96
4.2.4. Ligadura de espinones	98
4.2.5. Comparación con el esquema de un singlete	100
<b>4.3. Conclusiones</b>	<b>101</b>

---

Los resultados de este capítulo forman parte del artículo: Mezio A., Sposetti C. N., Manuel L. O. and Trumper A. E., *Europhysics Letters* **94**, 47001 (2011).

## 4.1. Introducción

Si bien Anderson en 1973 [27] propuso el estado RVB como estado fundamental del AF de Heisenberg triangular (THM), el método convencional más sencillo, la teoría de ondas de espín lineal (LSWT), daba como resultado un estado ordenado. Con el descubrimiento de los cupratos superconductores revivió el interés sobre la naturaleza ordenada, o no, de distintos AF  $2D$  y se desarrollaron métodos más precisos y sofisticados. En este sentido los métodos numéricos son de fundamental importancia para extraer información rigurosa sobre las propiedades estáticas, dinámicas y termodinámicas de los sistemas magnéticos frustrados, siendo el THM un buen ejemplo donde prácticamente no hay resultados analíticos exactos. En particular, gracias al enorme esfuerzo de la comunidad en desarrollar técnicas confiables [50, 51, 106, 107, 55, 52, 77], se ha establecido firmemente que el estado fundamental del THM de espín- $\frac{1}{2}$  es un robusto orden de Néel de  $120^\circ$ , como el ilustrado en la figura 4.1.a, con un valor de magnetización  $m$  reducido en un 59 % respecto del valor clásico,  $m = 0.205(1)$  [51].

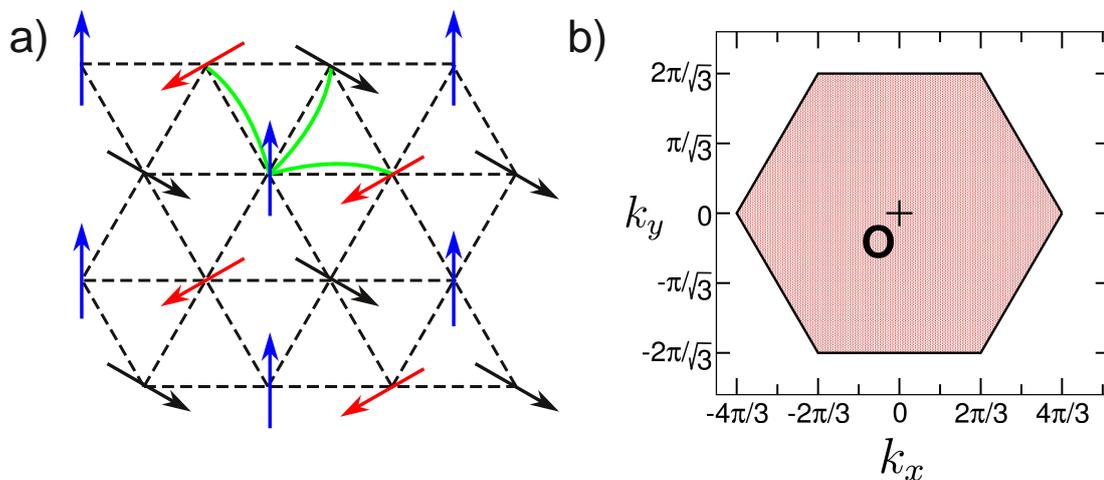


Fig. 4.1: a) Red triangular con los espines conformando una estructura con orden de Néel  $120^\circ$ . Las líneas verdes señalan las interacciones de intercambio a primeros vecinos presentes en el THM. b) Primer zona de Brillouin (ZB) de la red triangular.

Dada la naturaleza ordenada del estado fundamental del THM la LSWT parece capturar las características semiclásicas esperadas para este orden, ya que reproduce bastante bien las propiedades estáticas encontradas con estos métodos, [108, 76] encontrando un valor de magnetización  $m \simeq 0.24$ . Sin embargo, en recientes estudios de expansiones en serie (SE) [45, 77] se han encontrado resultados que desafían la validez de LSWT, mostrando que para

$S = \frac{1}{2}$  la forma funcional de la relación de dispersión magnónica difiere considerablemente (puntos azules en la figura 4.2) de la obtenida con LSWT (línea sólida verde de la figura 4.2). En particular, se observó una fuerte renormalización hacia abajo de la parte de

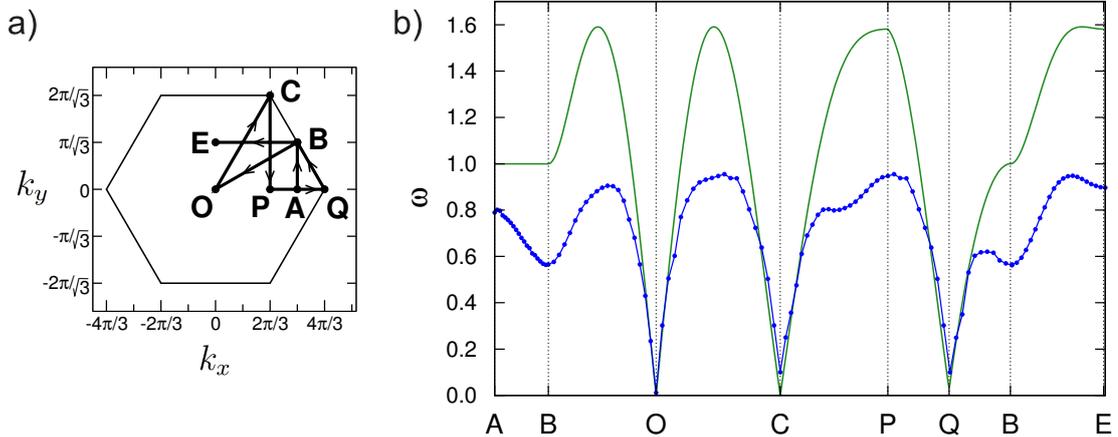


Fig. 4.2: a) Trayectoria de la Zona de Brillouin triangular a lo largo del cual se grafica la relación de dispersión. b) Relación de dispersión de las excitaciones magnónicas a lo largo de la trayectoria  $ABOCPQBE$  calculada con SE (puntos azules) y con LSWT (línea verde).

alta energía del espectro junto con la aparición de mínimos tipo rotones en los puntos medios de los bordes de la zona de Brillouin hexagonal (punto B de la figura 4.2). Se propuso, entonces, que estas diferencias podrían atribuirse, probablemente, a la presencia de excitaciones espinónicas de tipo fermiónicas. No obstante, mediante extensión de LSWT a correcciones en  $1/S$  se encontraron correcciones no triviales a la dispersión de LSWT que describen bastante bien los resultados de SE [109]. Pero sin embargo, como consecuencia de las interacciones, los magnones no están bien definidos – no tienen vida media infinita – en una amplia región de la zona de Brillouin [110].

Dadas las precisas predicciones de la teoría de bosones de Schwinger para las propiedades estáticas del estado fundamental del THM calculadas por el grupo, [111] es importante investigar si los comportamientos anómalos encontrados en el espectro con SE pueden reproducirse, o no, con una teoría que naturalmente incorpora excitaciones fraccionales de espín- $\frac{1}{2}$  como la teoría de bosones de Schwinger. Cabe destacar que originalmente existió un debate sobre la validez de la SBMF sobre fases espirales en general [112, 65] ya que, debido a su estructura singlete, la misma no es capaz de reproducir el límite semiclásico. Retomando lo visto en la sección 3.4.2 del capítulo 3, las relaciones de dispersión

desplazadas de SBMFT en el límite semiclásico

$$\omega_{\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{Q}}{2}}^{SBMF} = S \sqrt{[J_{\mathbf{k}} - J_{\mathbf{Q}}][J_{\mathbf{k} \pm \mathbf{Q}} - J_{\mathbf{Q}}]},$$

no coinciden con la expresión semiclásica de LSWT

$$\omega_{\mathbf{k}}^{LSW} = S \sqrt{[J_{\mathbf{k}} - J_{\mathbf{Q}}][(J_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + J_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}})/2 - J_{\mathbf{Q}}]},$$

aunque sí reproducen bien la posición de los modos de Goldstone. Esta discrepancia en el límite semiclásico puede tener algún correlato en el límite cuántico  $S = \frac{1}{2}$ , donde el resultado de SE difiere notoriamente respecto de LSWT.

En este capítulo investigamos la validez de la teoría de campo medio de bosones de Schwinger, basada en el esquema de dos operadores singletes desarrollado por el grupo, [64] para interpretar el espectro del THM de espín- $\frac{1}{2}$ . El principal resultado obtenido es que esta teoría reproduce cualitativamente y cuantitativamente bastante bien el espectro obtenido con SE. Esto se logra gracias a que hemos podido identificar las excitaciones no físicas provenientes de la relajación de la condición local de un bosón por sitio, lo cual permite construir una relación de dispersión notablemente similar a la calculada con SE. En este marco, además, las excitaciones rotónicas pueden relacionarse con fluctuaciones de corto alcance colineales.

## 4.2. Resultados

### 4.2.1. Magnetización y energía

Antes de pasar a las propiedades dinámicas haremos un repaso de las propiedades estáticas del antiferromagneto triangular.

Se resolvieron numéricamente las ecuaciones autoconsistentes (2.32) (sección 2.2.4 del capítulo 2) a temperatura cero

$$A_{\delta} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^A}{\omega_{\mathbf{k}}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}), \quad (4.1a)$$

$$B_{\delta} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda)}{\omega_{\mathbf{k}}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}), \quad (4.1b)$$

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda)}{\omega_{\mathbf{k}}}, \quad (4.1c)$$

Tab. 4.1: Magnetización y energía del estado fundamental de Néel de  $120^\circ$  del THM de espín- $\frac{1}{2}$  obtenidas con: campo medio en bosones de Schwinger con esquema de un [70] ( $A$ ) y dos [113] ( $AB$ ) singletes; Fluctuaciones Gaussianas [111] sobre el campo medio  $AB$  ( $AB + \text{Fluct}$ ), Monte Carlo cuántico [51] (QMC), Teoría de Ondas de Espín Lineal [76] (LSWT) y Teoría de Ondas de Espín no Lineal (LSWT+1/ $S$ ) [114].

\*Este valor de  $m$  se obtiene con SBMFT para el valor de espín  $S^* \simeq 0.366$ , el cual ajusta las fluctuaciones locales de espín al valor correcto  $\frac{3}{2}S^*(S^* + 1) = S(S + 1)$ .

	$E/JN$	$m$
$AB$	-0.5697	0.275
$A$	-0.7119	0.328
$AB+\text{Fluct}$	-0.5533	0.151*
QMC	-0.5458(1)	0.205(1)
LSWT	-0.5388	0.2387
LSWT+1/ $S$	-0.5434	0.2497

para redes muy grandes ( $N = 30\,000$ ). Con los valores de los parámetros de campo medio obtenidos calculamos el valor de la magnetización local, según la ecuación (2.50),

$$m = \frac{1}{N} \frac{\gamma_{\mathbf{Q}}^B + \lambda}{\omega_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}}, \quad (4.2)$$

y el valor de la energía del estado fundamental, según (2.27),

$$E_{\text{GS}} = E_{\text{MF}} = \frac{N}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} (B_{\delta}^2 - A_{\delta}^2), \quad (4.3)$$

donde  $\mathbf{Q} = 2\mathbf{k}_{\text{min}} = (\frac{2}{3}\pi; \frac{2}{\sqrt{3}}\pi)$  es el vector de onda magnético correspondiente al orden de Néel  $120^\circ$ , y donde  $\pm\mathbf{k}_{\text{min}}$  son los ceros ( $\sim 1/N$ ) de la relación de dispersión espinónica  $\omega_{\mathbf{k}}$ .

Los valores obtenidos para el estado fundamental se muestran en la tabla 4.1 ( $AB$ ) junto a otros valores obtenidos con: el esquema de sólo un operador singlete ( $A$ ), [70] fluctuaciones Gaussianas ( $AB + \text{Fluct}$ ), [111] teoría de ondas de espín lineal (LSWT), [76] teoría de ondas de espín no lineal (LSWT+1/ $S$ ), [114] junto con resultados de Monte Carlo cuántico (QMC) [51]<sup>1</sup>. De la tabla 4.1 se observa que el esquema de dos singletes describe

<sup>1</sup> Un resumen completo de resultados para la THM obtenidos con diferentes métodos analíticos y

cuantitativamente mejor las propiedades estáticas de la THM que el esquema que utiliza sólo un operador. A pesar de que todavía no ha sido calculado, esperamos que las fluctuaciones Gaussianas sobre el campo medio reduzcan la magnetización, como ya se ha encontrado para la *rigidez* de espín en la THM [111]. En ese sentido es que ponemos el valor  $m = 0.151$  en la fila de  $AB + \text{Fluct}$ , que es el valor de magnetización obtenido en el caso  $S^* = \frac{1}{2}(\sqrt{3} - 1) \simeq 0.366$ , donde  $S^*$  es el valor de espín en SBMFT que ajusta las fluctuaciones de espín local al valor correcto  $\frac{3}{2}S^*(S^* + 1) = S(S + 1)$ , como hemos visto en la sección 3.4.1.3 del capítulo 3.

#### 4.2.2. Factor de Estructura Dinámico

Hemos estudiado el espectro de excitaciones magnéticas evaluando el factor de estructura dinámico a  $T = 0$  calculado en la ecuación (2.66),

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}})^2 \delta[\omega - (\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})], \quad (4.4)$$

donde numéricamente hemos implementado la función delta  $\delta(\omega)$  como una función lorentziana

$$\delta(\omega) \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{\omega^2 + \eta^2},$$

siendo  $\eta$  un parámetro de control que maneja el ancho y alto de la función lorentziana ( $2\eta$  es el ancho medio de la función y  $(\pi\eta)^{-1}$  el máximo en  $\omega = 0$ ).

Al estar las excitaciones de espín-1 conformadas por dos espinones libres de espín- $\frac{1}{2}$  se espera, además de una señal de baja energía bien definida correspondiente a los magnones, un amplio continuo de pares de espinones a energías altas. Retomando lo discutido en la sección 2.3.2 del capítulo 2, y utilizando el hecho de que en una fase con ruptura de simetría es  $u_{\pm\frac{\mathbf{Q}}{2}}, |v_{\pm\frac{\mathbf{Q}}{2}}| \sim \sqrt{\frac{Nm}{2}}$  y  $\omega_{\pm\frac{\mathbf{Q}}{2}} \sim 0$ , podemos distinguir tres contribuciones distintas al espectro, a saber:

##### i) ambos espinones se crean en el condensado

Esto es posible sólo para los vectores de onda  $\mathbf{k} = \pm\mathbf{Q}$ , en donde el espectro está compuesto por procesos de energía cero que conforman los modos de Goldstone del orden magnético<sup>2</sup>. Esta contribución da lugar a los picos de Bragg magnéticos los cuales,

numéricos puede encontrarse en la tabla III de Ref. [77].

<sup>2</sup> Puede verse que para el modo uniforme  $\mathbf{k} = 0$  el factor de estructura dinámico se anula  $S(\mathbf{0}, \omega) = 0$  en todo valor de  $\omega$ .

a primer orden, se comportan como  $S(\pm\mathbf{Q}, \omega) \sim Nm^2\delta(\omega)$ .

ii) **un espinón se crea en el condensado y otro en el fluido normal**

Para  $\mathbf{k} \neq \pm\mathbf{Q}$  el espectro de bajas energías está compuesto por este tipo de procesos. En la sección 2.3.2 del capítulo 2 identificamos estas contribuciones con las relaciones de dispersión espínónicas desplazadas,  $\omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  y  $\omega_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}$ . Al contrario que para la red cuadrada, el orden de Néel en la red triangular es un orden espiral y  $\mathbf{Q}$  no es equivalente a  $-\mathbf{Q}$ . Por lo tanto estas contribuciones darán lugar a dos señales diferentes a energías  $\omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  y  $\omega_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  respectivamente.

iii) **ambos espinones creados en el fluido normal**

Finalmente, a altas energías, el espectro está compuesto por este tercer tipo de procesos. Esto da lugar a un amplio continuo que se extiende por el rango de energías que toma el valor  $\omega = \omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ .

Entonces, puede resultar instructivo dividir (4.4) como

$$S(\mathbf{k}, \omega) = S_{\mathbf{k},\omega}^{sing} + S_{\mathbf{k},\omega}^{cont}, \quad (4.5)$$

donde  $S_{\mathbf{k},\omega}^{sing}$  es la parte compuesta por los procesos singulares *i)* y *ii)*,

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{k},\omega}^{sing} &= \frac{m}{4} (u_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}} - v_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}})^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}) + \\ &+ \frac{m}{4} (u_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}} + v_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}})^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}), \end{aligned}$$

y representa las excitaciones de bajas energías magnónicas, mientras que  $S_{\mathbf{k},\omega}^{cont}$  está compuesta por los procesos *iii)*,

$$S_{\mathbf{k},\omega}^{cont} = \frac{1}{4N} \sum'_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}} - u_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 \delta[\omega - (\omega_{-\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})],$$

y representa las excitaciones del continuo a altas energías, donde la prima indica que la suma se realiza sobre la ZB triangular excepto para  $\mathbf{q} = \pm\frac{\mathbf{Q}}{2}$  y  $\pm\frac{\mathbf{Q}}{2} - \mathbf{k}$ . En la fig. 4.3.b hemos graficado la ec. (4.4) para el punto de la ZB ubicado a medio camino entre los puntos *A* y *B* de la fig. 4.2.a. Puede notarse la estructura de doble pico a bajas energías que proviene de  $S_{\mathbf{k},\omega}^{sing}$ , mientras que el continuo extendido a energías arriba de los picos corresponde a  $S_{\mathbf{k},\omega}^{cont}$ . En la figura 4.3.a hemos graficado las curvas de intensidad de  $S(\mathbf{k}, \omega)$  a lo largo de la trayectoria mostrada en la figura 4.2.a (la línea de trazos amarilla señala

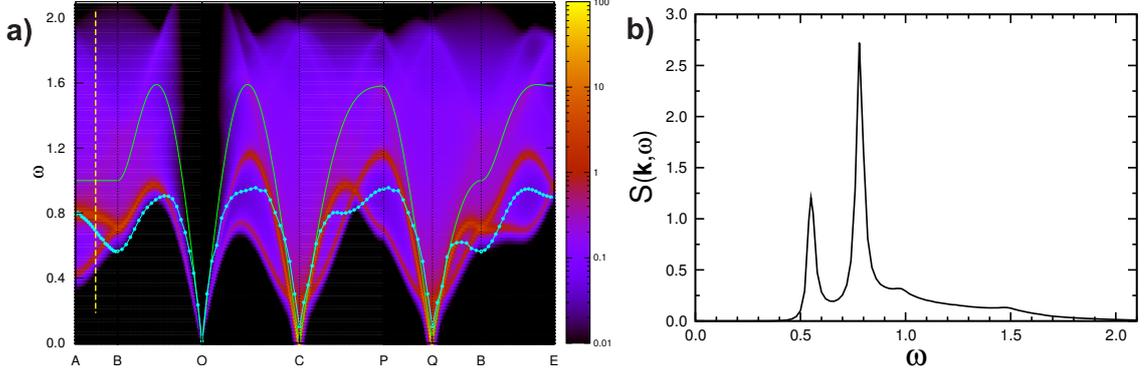


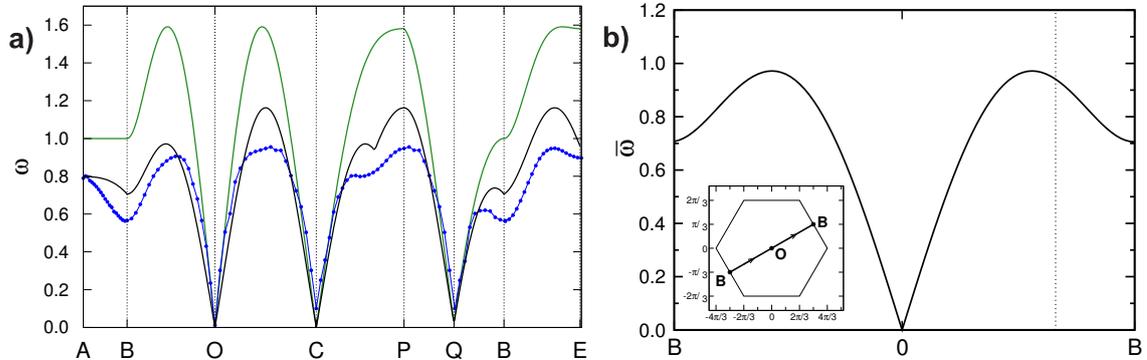
Fig. 4.3: **a)** Curvas de intensidad para el factor de estructura dinámico,  $S(\mathbf{k}, \omega)$ , calculado con la SBMFT en el esquema de dos operadores singletes. La línea verde y los puntos azules son las dispersiones obtenidas con LSWT y SE, [45] respectivamente. La trayectoria  $ABOCPQBE$  se muestra en la figura 4.2.a. **b)** Factor de estructura dinámico,  $S(\mathbf{k}, \omega)$ , para el vector de onda  $k = (\pi, \frac{1}{2\sqrt{3}}\pi)$  ubicado en el punto medio del tramo  $A - B$  de la figura 4.2.a.

el corte de la figura 4.3.b). Las curvas rojas y amarillas son las dispersiones espinónicas desplazadas  $\omega_{\mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{Q}}{2}}$  de  $S_{\mathbf{k}, \omega}^{sing}$ , mientras que las zonas azul y violeta corresponden a  $S_{\mathbf{k}, \omega}^{cont}$ . En la figura también se grafican las relaciones de dispersión obtenidas con LSWT (línea sólida) y SE [45, 77] (puntos)<sup>3</sup>. A bajas energías la dispersión coincide bastante bien con LSWT y SE, estando el peso espectral mayoritariamente localizado alrededor de  $\mathbf{k} \sim \pm \mathbf{Q}$  (puntos  $C$  y  $Q$ , respectivamente). En este régimen las excitaciones físicas corresponden a distorsiones transversales de largo alcance de la magnetización local, las cuales están correctamente descritas por ambos, LSWT y SBMFT. A altas energías LSWT no es más válida, ya que las excitaciones de espín verdaderas muestran una fuerte renormalización hacia abajo junto con la aparición de mínimos tipo rotón (puntos). Notablemente, SBMFT predice una redistribución no trivial del peso espectral entre las dos ramas espinónicas moduladas por el factor de forma de la ecuación (4.4).

Observando con atención la intensidad de los dos picos provenientes de  $S_{\mathbf{k}, \omega}^{sing}$  en la figura 4.3.b se puede discernir que el más intenso coincide con SE, mientras que el otro tiene una intensidad bastante menor. Por lo tanto, guiados por los resultados de SE podemos definir una relación de dispersión  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  reconstruida a partir de las partes de las dispersiones espinónicas con peso espectral dominante, la cual, sorprendentemente, recupera las

<sup>3</sup> Es importante tener presente que la escala de colores utilizada para la intensidad de  $S(\mathbf{k}, \omega)$  es logarítmica, cada color es un orden de magnitud diferente. Esta misma escala de colores es utilizada en todas las gráficas de intensidad de este capítulo y el capítulo 6.

principales características de los resultados de SE [45]. En la figura 4.4.a graficamos esta relación de dispersión reconstruida junto a la calculada con LSWT y SE.



**Fig. 4.4:** **a)** Dispersión física reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  calculada con el campo medio de los bosones (línea negra), junto con las dispersiones calculadas con LSWT (verde) y SE (azul), a lo largo de la trayectoria indicada en la figura 4.2.a. **b)** Relación de dispersión física  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  a lo largo de la trayectoria  $B-0-B$ . La línea de puntos indica la posición del aparente mínimo local entre  $C$  y  $P$  de la figura **a**.

En particular, el cruce de las dispersiones espinónicas en el punto  $B = (\pi, \frac{\pi}{\sqrt{3}})$  puede identificarse con los mínimos tipo rotón observados en SE, lo mismo ocurre con los otros dos puntos medios de la ZB no equivalentes,  $(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\pi)$  y  $(-\pi, \frac{1}{\sqrt{3}}\pi)$ . Debe notarse que en las figuras de la relación de dispersión que hemos mostrado existe otro aparente mínimo local, ubicado entre los puntos  $C$  y  $P$ . Este vector de onda está ubicado en la línea  $k_y = \frac{k_x}{\sqrt{3}}$  de la ZB, cuyo extremo en el borde de la ZB es  $B$ . Para demostrar que los únicos mínimos locales de la relación de dispersión reconstruida son los puntos medios de los bordes de la ZB, hemos graficado en la figura 4.4.b la relación de dispersión en la línea  $k_y = \frac{k_x}{\sqrt{3}}$ , a lo largo de la trayectoria  $B-0-B$ , donde el punto en cuestión está señalado con la línea de puntos y puede verse que no es un mínimo local. Analizando la relación de dispersión reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  en toda la ZB se concluye que los puntos medios de los bordes de la ZB son los únicos mínimos locales.

En cuanto a la interpretación de estos mínimos rotónicos, originalmente se propuso que estaban relacionados con posibles excitaciones de espinones fermiónicos interactuantes, las cuales a su vez darían lugar a las propiedades anómalas encontradas a bajas temperaturas, [45] principalmente longitud de correlación un orden de magnitud menor y entropía un orden de magnitud mayor a la temperatura  $T \sim 0.25 J$  (ver capítulo 5). Por otro lado, la interpretación de magnones interactuantes dada por la SWT con correcciones de

primer orden en  $1/S$  [109] reproduce bastante bien la dispersión obtenida con SE, pero los magnones resultan no estar bien definidos en una amplia región de la ZB [110, 114]. Desde nuestra perspectiva, la estructura de enlaces singletes de la teoría de bosones de Schwinger tiene en cuenta de manera natural las fluctuaciones colineales de espín, aún en la presencia del orden de Néel de  $120^\circ$  de la THM. Por ejemplo, el mínimo rotónico localizado en  $B$  puede interpretarse como el desarrollo de correlaciones magnéticas moduladas por el vector de onda magnético  $(\pi, \frac{1}{\sqrt{3}}\pi)$  el cual corresponde a cierto patrón de correlaciones colineales, como se muestra en la figura 4.5.a, mientras que los otros dos puntos medios no equivalentes corresponden a patrones de fluctuaciones colineales diferentes. En

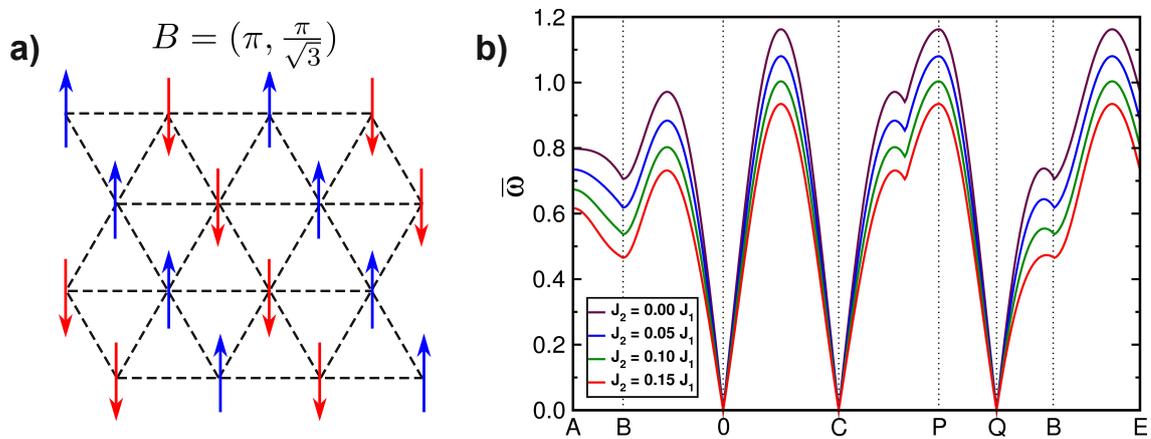


Fig. 4.5: **a)** Configuración colineal que determina el vector de onda magnético  $B = (\pi, \frac{\pi}{\sqrt{3}})$ . **b)** Relación de dispersión reconstruida calculada a lo largo de la trayectoria  $ABOCPQBE$  para distintos valores de interacción de intercambio a segundos vecinos  $J_2$ .

efecto, si se favorecen estas fluctuaciones introduciendo anisotropía espacial o interacciones de intercambio a segundos vecinos el mínimo rotónico se ablanda, dando lugar a la nueva estructura de modos de Goldstone del estado fundamental colineal estabilizado, [113, 115, 116]. En la figura 4.5.b puede verse el ablandamiento de los modos rotónicos en la relación de dispersión reconstruida al incorporar interacción a segundos vecinos.

Realizando la integral en frecuencia es posible analizar el peso relativo del continuo de dos espinones (zona azul/violeta de la figura 4.3.a) en el factor de estructura estático  $S(\mathbf{k})$  [117]. En el panel superior de la figura 4.6 graficamos  $S(\mathbf{k})$  donde se observan picos divergentes en los vectores de onda magnéticos esperados  $\pm\mathbf{Q}$ . En el panel inferior puede verse el peso relativo del continuo de dos espinones,  $\int S_{\mathbf{k},\omega}^{cont}/S(\mathbf{k})d\omega$ . De manera interesante la contribución a  $S(\mathbf{k})$  del continuo de dos espinones es despreciable alrededor de  $\pm\mathbf{Q}$

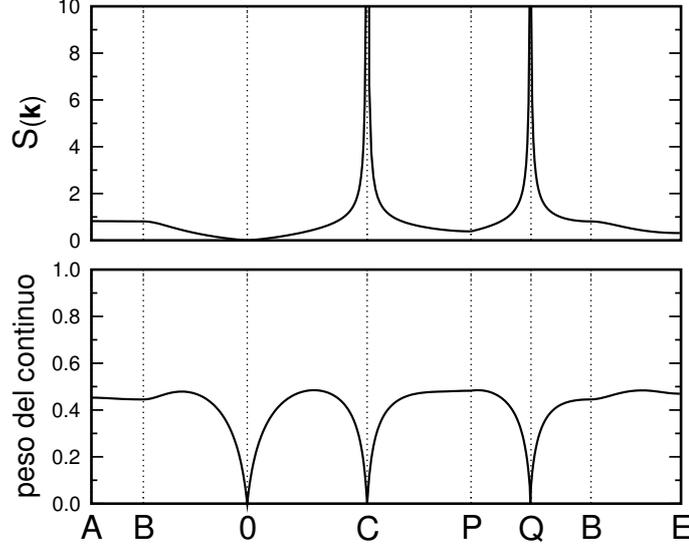


Fig. 4.6: Factor de estructura estático (panel superior) y peso relativo del continuo de dos espinones,  $\int S_{\mathbf{k},\omega}^{cont}/S(\mathbf{k})d\omega$ , (panel inferior) a lo largo de la trayectoria  $ABOCPQBE$ .

mientras que fuera de su cercanía, y en particular en la posición del rotón, la contribución del continuo es alrededor del 40 %.

### 4.2.3. Funciones de correlación densidad-densidad

Con el objetivo de detectar las fluctuaciones no físicas espurias del modelo, provenientes de la relajación de la condición local del número de bosones (2.3) hemos calculado también el factor de estructura dinámico densidad-densidad

$$\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega) = \left(-\frac{1}{\pi}\right) \text{Im} \{G_{\hat{n}^b \hat{n}^b}^{(R)}(\mathbf{k}, \omega)\}$$

a partir de la transformada al espacio  $(\mathbf{k}, \omega)$  de la función de Green retardada del operador número de bosones de Schwinger,

$$G_{\hat{n}^b \hat{n}^b}^{(R)}(i, j, t) = -i \theta(t) \langle [\hat{n}_i^b(t); \hat{n}_j^b(0)] \rangle, \quad (4.6)$$

donde

$$\hat{n}_i^b = \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} + \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow}. \quad (4.7)$$

Como ya hemos visto, para describir el espacio de Hilbert físico de los operadores de espín se debe satisfacer exactamente la condición local de los bosones de Schwinger,  $\hat{n}_i^b = 2S$ , y no deberían observarse fluctuaciones en el número de bosones por sitio. Sin embargo,

como la restricción es implementada en promedio, en  $S(\mathbf{k}, \omega)$  hay fluctuaciones de espín no físicas provenientes de esas fluctuaciones de densidad.

Realizando el cálculo con un procedimiento análogo al utilizado en la sección 2.3.1 del capítulo 2 para calcular la función de Green retardada  $G^{(R)}(\mathbf{k}, \omega)$ , es que se llega a la expresión

$$\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}} + u_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}|^2 \delta(\omega - (\omega_{-\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})), \quad (4.8)$$

la cual es similar a la ecuación (4.4), excepto el signo + en el factor de forma.

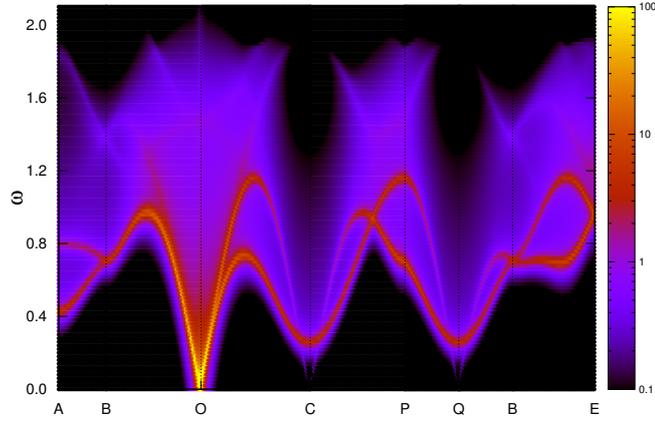


Fig. 4.7: Curvas de intensidad para el factor de estructura dinámico densidad-densidad,  $\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega)$ , calculado con el campo medio de bosones de Schwinger basado en el esquema de dos singletes.

Si nuevamente dividimos las dos contribuciones espinónicas como  $\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega) = \mathcal{N}_{\mathbf{k}, \omega}^{sing} + \mathcal{N}_{\mathbf{k}, \omega}^{cont}$ , es fácil mostrar que las señales principales se localizan de nuevo en las dispersiones espinónicas desplazadas,  $\omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  y  $\omega_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}$ . Pero ahora, debido a la diferencia en el factor de forma, hay una importante transferencia de peso espectral entre dichas dispersiones espinónicas. Esto se muestra en la figura 4.7, donde se ha graficado las curvas de intensidad de  $\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega)$ . Se puede observar claramente que ahora la señal dominante está “gapeada” en los puntos  $C$  y  $Q$ , mientras que la mayor parte del peso espectral se encuentra en torno a  $\mathbf{k} \sim \mathbf{0}$ <sup>4</sup>. Dada la notable coincidencia con la señal fuerte de  $\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega)$ , nuestra conjetura es que la señal débil de baja energía de  $S(\mathbf{k}, \omega)$  en las figuras 4.3 puede atribuirse a efectos no físicos de la fluctuación en la densidad, los cuales esperamos que desaparezcan una vez que se proyecte sobre el espacio de Hilbert físico.

En la red cuadrada no frustrada  $\omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}} = \omega_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  ya que  $\mathbf{Q}$  y  $-\mathbf{Q}$  son equivalentes, entonces

<sup>4</sup> Un modo blando como este puede identificarse con una tendencia espuria del sistema bosónico a una separación de fase

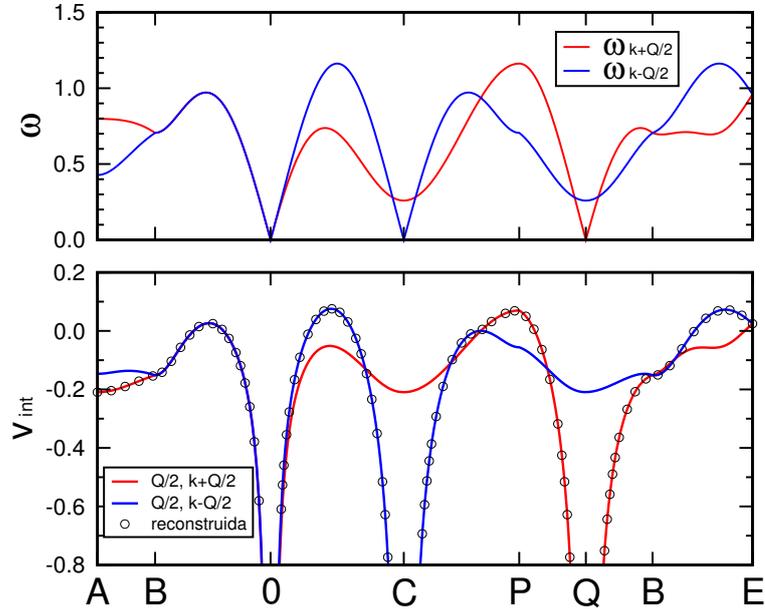
ambos tipos de excitaciones de espín, físicas y no físicas, se superponen, dando lugar a una sola banda de baja energía en  $S(\mathbf{k}, \omega)$  (ver figura 2.8 en sección 2.3.2) [60, 80, 117].

#### 4.2.4. Ligadura de espinones

Como vimos en la sección 2.3.4 del capítulo 2, a primer orden en teoría perturbativa se puede tener un indicio de si estarán ligadas, o no, las excitaciones espinónicas una vez que se vaya más allá del campo medio. Para ello la interacción entre dos espinones da

$$v_{\text{int}} = \frac{1}{3N} \left[ \gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{p}} \left( u_{\mathbf{q}}^2 u_{\mathbf{p}}^2 + v_{\mathbf{q}}^2 v_{\mathbf{p}}^2 + 2u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \right) + 2\gamma_{\mathbf{q}+\mathbf{p}} \left( u_{\mathbf{q}}^2 v_{\mathbf{p}}^2 + u_{\mathbf{p}}^2 v_{\mathbf{q}}^2 - 2u_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \right) + 9J \right].$$

En el panel inferior de la figura 4.8 se grafica  $v_{\text{int}}$  para los pares de espinones que conforman las excitaciones físicas  $|2s\rangle = |\frac{\mathbf{Q}}{2}\sigma; \mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}\sigma\rangle$  y  $|2s\rangle = |\frac{\mathbf{Q}}{2}\sigma; \mathbf{k} - \frac{\mathbf{Q}}{2}\sigma\rangle$ , las cuales corresponden a las dispersiones desplazadas  $\omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  y  $\omega_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  (panel superior). Con círculos hemos marcado  $v_{\text{int}}$  correspondiente a la relación de dispersión reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ . Puede verse que

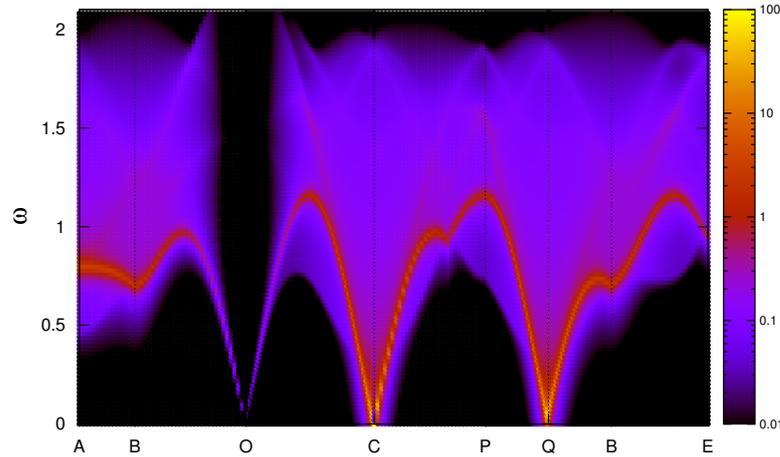


*Fig. 4.8:* **Superior:** dispersiones desplazadas  $\omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  y  $\omega_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}$ . **Inferior:** Valores de  $v_{\text{int}}$  para las excitaciones singulares que conforman estas dispersiones desplazadas (líneas), donde se ha marcado con círculos los tramos correspondientes a la relación de dispersión física reconstruida.

la interacción es atractiva ( $v_{\text{int}} < 0$ ) en la mayor parte de la ZB y, de manera general, puede observarse que los espinones que conforman las excitaciones singulares de mayores

energías estarán menos ligados que aquellos que conforman las de bajas energías (como hemos discutido en la sección 2.3.4 del capítulo 2). En particular, cuando el momento total de dos espinones es  $\mathbf{k} = B$  la energía de ligadura es  $v_{\text{int}} \sim -0.16J$ , mientras que el costo de energía para crear dos espinones encima del estado fundamental es  $\omega_{\frac{\mathbf{Q}}{2}\sigma} + \omega_{B+\frac{\mathbf{Q}}{2}\sigma} \sim 0.7J$ . Por otro lado, cuando ambos espinones se crean en el condensado la interacción diverge como  $|v_{\text{int}}| \sim O(Nm^2)$ , significando una atracción infinita de los espinones que construyen los magnones en los modos de Goldstone  $\mathbf{k} = \mathbf{0}, \pm\mathbf{Q}$ . Incluso si esta inestabilidad es un artificio de la corrección de primer orden, creemos que este cálculo sencillo le da apoyo a la imagen física de espinones fuertemente ligados en la vecindad de los modos de Goldstone, mientras que a altas energías se mantienen débilmente ligados. Por supuesto, esta afirmación deberá ser apoyada por un cálculo más riguroso [82, 83].

Basados en el cálculo y análisis de  $\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega)$  y  $v_{\text{int}}$  podemos asumir que **i)** el efecto de proyectar sobre el espacio de Hilbert físico equivale a eliminar las excitaciones no físicas de mayor señal en el espectro densidad-densidad (4.8), y **ii)** que existe una interacción residual atractiva que liga los espinones. Consecuentemente, todo esto nos permite definir un nuevo campo medio de Schwinger “reconstruido” (RSBMF) que consiste en excitaciones de espín-1 de baja energía que tienen una relación de dispersión “física” reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ , como se muestra en la figura 4.4.a. En la figura 4.9 mostramos el factor de estructura dinámico (4.4)



*Fig. 4.9:* Curvas de intensidad para el factor de estructura dinámico  $S(\mathbf{k}, \omega)$  calculado con la RSBMFT, es decir, donde se han removido las excitaciones espurias asociadas a las señales intensas en  $\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega)$ .

correspondiente a RSBMF, es decir, donde se han removido las excitaciones no físicas, identificadas con el pico de mayor intensidad de  $\mathcal{N}_{\mathbf{k}, \omega}^{\text{sing}}$ . En el capítulo 5 veremos que estas consideraciones son fundamentales para el estudio de la termodinámica del THM.

#### 4.2.5. Comparación con el esquema de un singlete

Hemos encontrado que el campo medio de bosones de Schwinger en el esquema de dos singletes reproduce bastante bien el espectro de expansiones en serie [45]. También es interesante comparar con las predicciones del esquema de sólo un singlete, ya que es ampliamente utilizado en la literatura [35, 36].

Recordemos que el procedimiento consiste en usar la relación de identidad (2.14),

$$: \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : + \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} = S^2, \quad (4.9)$$

y escribir la interacción espín-espín (2.11) solamente en términos del operador singlete  $\hat{A}_{ij}$  [60, 80, 70, 118]:

$$\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j = -2\hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} + S^2. \quad (4.10)$$

Incluso si las ecuaciones (2.11) y (4.10) son equivalentes, la última lleva a un diferente desacople de campo medio, con parámetros  $A_\delta$  y  $\lambda$  [70, 118]. La energía del estado fundamental en este esquema resulta

$$E_{\text{GS}} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} - (2S + 1)\lambda + \frac{N}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} (S^2 - 2A_{\delta}^2), \quad (4.11)$$

y la magnetización

$$m = \frac{1}{N} \frac{\lambda}{\omega_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}}, \quad (4.12)$$

donde ahora la relación de dispersión espinónica es

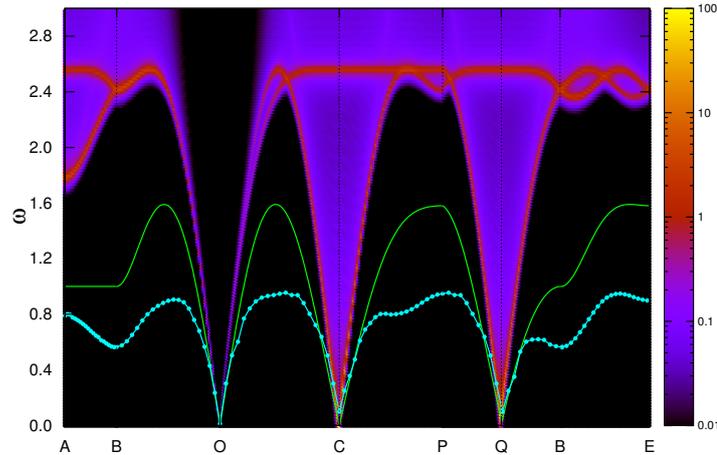
$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\lambda^2 - (\gamma_{\mathbf{k}}^A)^2}, \quad (4.13)$$

y los parámetros de campo medio  $A_\delta$  y  $\lambda$  se calculan de las ecuaciones autoconsistentes

$$A_{\delta} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{2\gamma_{\mathbf{k}}^A}{\omega_{\mathbf{k}}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}), \quad (4.14a)$$

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\lambda}{\omega_{\mathbf{k}}}. \quad (4.14b)$$

Los valores de magnetización y energía obtenidos con este desacople se muestran en la tabla 4.1 (A). En la figura 4.10, hemos graficado  $S(\mathbf{k}, \omega)$  después de resolver las correspondientes ecuaciones de autoconsistencia (4.14a, 4.14b). A muy bajas energías el espectro



*Fig. 4.10:* Curvas de intensidad para el factor de estructura dinámico calculado con el esquema de un singlete, a lo largo de la trayectoria indicada en la figura 4.2.a. Líneas sólidas y puntos son mismas que en fig. 4.3.a.

parece ser correcto alrededor de los puntos  $C$ ,  $O$  y  $Q$ . Sin embargo, a altas energías es imposible discernir una dispersión reconstruida que se ajuste a los resultados de SE en todo el camino de la ZB, además de la existencia de un factor alrededor de 3 en la escala de energía. Por lo tanto, concluimos que el esquema de dos singletes resulta el marco más adecuado para describir correctamente el espectro del THM.

### 4.3. Conclusiones

Hemos demostrado que la estructura singlete del estado fundamental de campo medio, junto con el carácter fraccional de las excitaciones de espín de la teoría de bosones de Schwinger, toman en cuenta, naturalmente, las excitaciones anómalas del modelo de Heisenberg triangular de espín- $\frac{1}{2}$  recientemente encontradas con SE [45, 77]. La aparición de mínimos tipo rotón puede atribuirse a la tendencia del estado fundamental a estar correlacionado colinealmente, incluso en presencia del orden de Néel  $120^\circ$ . Al calcular el factor de estructura dinámico densidad-densidad, y gracias a los resultados de SE, hemos sido capaces de discernir por primera vez, a nivel de campo medio, entre las fluctuaciones físicas y espurias procedentes de la relajación de la restricción local. Una investigación posterior en el contexto de la teoría de bosones de Schwinger revela que la descripción correcta del espectro depende fundamentalmente del desacople en el campo medio. En particular, el esquema de dos singletes resulta más apropiado que el esquema de un singlete. En base a la descripción precisa de las propiedades estáticas del estado fundamental

[111] (ver tabla 4.1), y a la luz de los resultados actuales para el espectro, pensamos que la hipótesis de espinones bosónicos debe ser considerada seriamente como un punto de vista alternativo para interpretar la física del modelo de Heisenberg triangular.

A nivel de campo medio las excitaciones triplete constan de dos espinones libres de espín- $\frac{1}{2}$  y, además de las bandas de bajas energías debido a la aparición de orden de largo alcance, hay un amplio continuo de dos espinones, lo que podría estar relacionado con el decaimiento de magnones encontrado en la literatura [114]. Hemos calculado con teoría perturbativa de primer orden una energía de ligadura, la cual da apoyo a la imagen física de espinones fuertemente ligados cerca de los modos de Goldstone, mientras que a altas energías estarían débilmente ligados.

Una interpretación alternativa a nuestra RSBMF ha sido propuesta en Ref. [119], utilizando la física del modelo de Heisenberg  $XXZ$  de *plano fácil* como punto de partida. Allí construyen una teoría efectiva de baja energía en términos de vórtices fermionizados, donde el rotón resulta ser una excitación vórtice-antivórtice en la red dual “panal de abeja”. Resulta interesante que la dependencia de las excitaciones rotónicas con la anisotropía espacial se asemeja bastante a la dependencia con la temperatura que veremos en el capítulo siguiente (ver figura 5.2 en capítulo 5). Aún si algunas de las características predichas por la SE son tomadas en cuenta por los vórtices fermionizados, el enfoque bosónico que hemos presentado parece ser más apropiado para describir las características esperadas del modelo de Heisenberg AF isotrópico, es decir, el orden de Néel de  $120^\circ$  junto con la correcta estructura de modos de Goldstone. En cualquier caso, sería interesante investigar el rango de validez de cada enfoque mediante una detallada comparación entre ambas teorías.

En el próximo capítulo investigamos las propiedades termodinámicas que resultan de la teoría de bosones de Schwinger reconstruida aquí propuesta.

## 5. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DEL ANTIFERROMAGNETO TRIANGULAR

### Índice

---

<b>5.1. Introducción</b> . . . . .	<b>104</b>
<b>5.2. Resultados</b> . . . . .	<b>105</b>
5.2.1. Entropía . . . . .	107
5.2.2. Caso exacto de dos espines . . . . .	110
5.2.3. Susceptibilidad uniforme . . . . .	112
<b>5.3. Conclusiones</b> . . . . .	<b>114</b>

---

Los resultados de este capítulo forman parte del artículo: Mezio A., Manuel L. O., Singh R. R. P. and Trumper A. E., *New Journal of Physics* **14**, 123033 (2012).

## 5.1. Introducción

Como ya se mencionó en el capítulo 1 uno de los problemas concretos a resolver en el antiferromagneto triangular estaba relacionado con el hecho de que los primeros estudios de expansión de alta temperatura (HTE) [46, 120] realizados hasta bajas temperaturas no mostraban evidencia de un comportamiento clásico renormalizado como predice el modelo sigma no lineal (NL $\sigma$ M) [121, 47]. Por ejemplo, alrededor de  $T = 0.25 J$ , la longitud de correlación calculada con HTE es de solo  $\xi \sim 1.5$  veces la constante de red, en contraste con el valor de  $\xi \sim 12$  predicho por NL $\sigma$ M [46, 120, 77]. Consistentemente con estos valores, la entropía calculada por HTE es un orden de magnitud mas grande que la de NL $\sigma$ M. Estos primeros resultados fueron interpretados por Chubukov, Sachdev y Senthil como un probable *crossover* entre los regímenes clásico renormalizado y crítico cuántico [122].

Zheng y colaboradores sugirieron en Ref. [45] que los altos valores de entropía podrían explicarse si se considera que los rotones encontrados con SE (ver capítulo 4) están compuestos de pares de espinones los cuales son térmicamente excitados. Sin embargo, al poco tiempo los mismos autores mostraron que mediante un cálculo simple, en el que las excitaciones magnónicas son asumidas como un gas libre de magnones tal que la relación de dispersión sea aquella predicha por SE, era posible describir el comportamiento anómalo de la entropía encontrado con HTE [77]. Esto significaba que la presencia de excitaciones tipo rotónicas en la relación de dispersión era crucial para capturar el comportamiento termodinámico correcto a bajas  $T$ .

En este capítulo investigamos las propiedades de baja temperatura de la THM desde la perspectiva de espinones bosónicos. Como hemos visto en el capítulo 3 una ventaja del formalismo de bosones de Schwinger es que preserva la invariancia rotacional a temperaturas finitas, de acuerdo con el teorema de Mermin-Wagner [26]; mientras que a temperatura cero también hemos visto que se recupera el estado ordenado de Néel de  $120^\circ$  como una condensación de bosones de Schwinger [123, 62]. También hemos mostrado en el capítulo previo que esta teoría describe muy bien las propiedades del estado fundamental del THM, [113, 111] y que las principales características del espectro de excitaciones magnéticas encontrado con SE son reproducidas.

Desde el punto de vista técnico una de las dificultades que debemos enfrentar es el hecho de que, si bien la relajación de la restricción local del número de bosones parece no ser crucial para la correcta descripción de ciertas propiedades estáticas del estado fundamental, tan

pronto como la temperatura aumenta el sistema comienza a explorar en cantidades cada vez mayores un espacio de las fases no físico, lo que lleva a una estimación incorrecta de las cantidades termodinámicas. En lugar de introducir factores *ad hoc* para compensar este problema –como por ejemplo, hicieron Arovas y Auerbach [60, 80]– utilizamos la relación de dispersión física “reconstruida”  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  que obtenemos de la teoría de campo medio de bosones de Schwinger reconstruida (RSBMFT), la cual hemos desarrollado en el capítulo 4 gracias a nuestra capacidad de distinguir entre las excitaciones físicas y espurias. Los valores de entropía y susceptibilidad uniforme calculados con  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  interpolan bastante bien dentro del rango de temperatura  $0 - 0.3 J$ , en cuyos extremos opuestos se vuelven confiables LSWT más correcciones  $1/S$  y HTE, respectivamente. Así, nuestros resultados apoyan la idea [77] de que los altos valores de entropía encontrados con HTE se deben a la excitación de los rotones que, como hemos mostrado en el capítulo 4 anterior, pueden identificarse con fluctuaciones AF colineales de corto alcance sobre las correlaciones de Néel  $120^\circ$  subyacentes.

## 5.2. Resultados

Nos centraremos principalmente en la importancia de las excitaciones tipo rotón para explicar los altos valores de entropía encontrados a temperaturas intermedias ( $T \sim 0.3 J$ ) [46, 77]. Es importante notar primeramente que si bien las soluciones de RSBMF corresponden a un régimen clásico renormalizado, la teoría no recupera plenamente el comportamiento esperado cerca de la transición de temperatura cero. En efecto, (ver sección 2.2.5) que a nivel de campo medio la longitud de correlación tiene una potencia extra de  $T$  en el prefactor en comparación con lo predicho por las teorías de campo efectivas sobre la base del NL $\sigma$ M o espinones confinados cerca de la temperatura de transición  $T = 0$  [82, 83].

Por otro lado, cabe destacar que resolviendo las ecuaciones autoconsistentes (2.32)

$$A_\delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^A}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}^\alpha) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta), \quad (5.1a)$$

$$B_\delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda)}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}^\alpha) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta), \quad (5.1b)$$

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda)}{\omega_{\mathbf{k}}} (1 + 2n_{\mathbf{k}}^\alpha). \quad (5.1c)$$

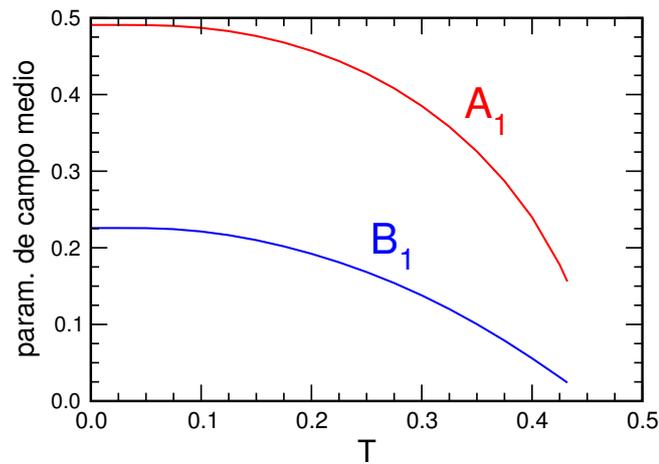


Fig. 5.1: Valor de los parámetros de campo medio  $A_1$  y  $B_1$  en función de la temperatura para el AF triangular.

hemos encontrado soluciones no triviales,  $A_\delta, B_\delta \neq 0$  hasta  $T \sim 0.43 J$ , como se muestra en la figura 5.1. Para  $T > 0.43 J$  la fase de temperatura finita del AF triangular se convierte en un paramagneto perfecto sin correlaciones entre sitios. Tal fase no tiene análogo en el problema de espines interactuantes, por lo que es un artificio del campo medio o de la aproximación *large-N*. De hecho, el efecto de las correcciones de  $\mathcal{N}$  finito a esta transición no buscada ha sido investigado en la literatura [124]. En cualquier caso, ya que los resultados disponibles de HTE son confiables hasta  $T \sim 0.3 J$ , nos hemos concentrado en el rango de temperatura  $0 \leq T \leq 0.43 J$ .

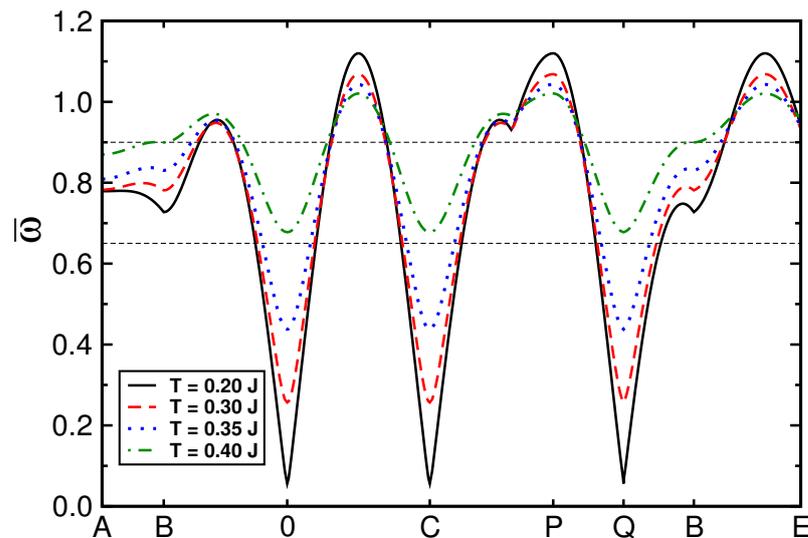


Fig. 5.2: Dependencia en temperatura de la relación de dispersión reconstruida, a lo largo de la trayectoria indicada en la figura 4.2.a. Las líneas de trazos horizontales corresponden a los intervalos de energía usados en la figura 5.4.

En la figura 5.2 se muestra la dependencia en temperatura de la dispersión reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  siendo ésta armada, como se mostró en la sección 4.2.2, a partir de las dispersiones espinónicas desplazadas  $\omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  y  $\omega_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}$ , donde

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda)^2 - (\gamma_{\mathbf{k}}^A)^2}. \quad (5.2)$$

A medida que la temperatura aumenta, se observa un estrechamiento del ancho de banda junto con la apertura de un gap y un achatamiento de las excitaciones rotónicas.

### 5.2.1. Entropía

Asumiendo los supuestos del capítulo previo que nos permiten formular la teoría de campo medio de bosones de Schwinger reconstruida (RSBMF), es que podemos también calcular las propiedades termodinámicas tomando las excitaciones magnónicas de espín-1 como un gas de bosones libres con la relación de dispersión  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ , al igual que hicieron Zheng y colaboradores con la relación de dispersión de SE en Ref. [77]. Así, la entropía por sitio de un gas de bosones libres resulta

$$\mathcal{S} = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [ (\bar{n}_{\mathbf{k}} + 1) \ln (\bar{n}_{\mathbf{k}} + 1) - \bar{n}_{\mathbf{k}} \ln \bar{n}_{\mathbf{k}} ], \quad (5.3)$$

donde la dispersión reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  está incorporada en el número de ocupación  $\bar{n}_{\mathbf{k}} = (e^{\beta \bar{\omega}_{\mathbf{k}}} - 1)^{-1}$ . Por otro lado, cuando se consideran los dos tipo de espinones libres (SBMF), sin tener en cuenta la reconstrucción, la entropía por sitio resulta

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} [ (n_{\mathbf{k}\sigma} + 1) \ln (n_{\mathbf{k}\sigma} + 1) - n_{\mathbf{k}\sigma} \ln n_{\mathbf{k}\sigma} ], \quad (5.4)$$

donde nuevamente las excitaciones espinónicas  $\omega_{\mathbf{k}\sigma}$  están incorporadas en el número de ocupación  $n_{\mathbf{k}\sigma}$ , con la diferencia que ahora la suma tiene en cuenta las dos clases de espinones. En la figura 5.3 se muestra cómo la entropía calculada con RSBMF (línea sólida negra) interpola bastante bien entre los valores esperados a temperatura cero y aquellos predichos por HTE a  $T \sim 0.3 J$  (línea de trazos-puntos naranja); mientras que los altos valores de la entropía calculada con SBFM (línea de trazos roja) se deben a la inclusión de excitaciones espurias. Para complementar estos resultados, también mostramos en la figura 5.3 la entropía correspondiente a las excitaciones de espín-1 de baja energía con la relación de dispersión encontrada con SE a temperatura cero (línea de puntos azul) y aquella

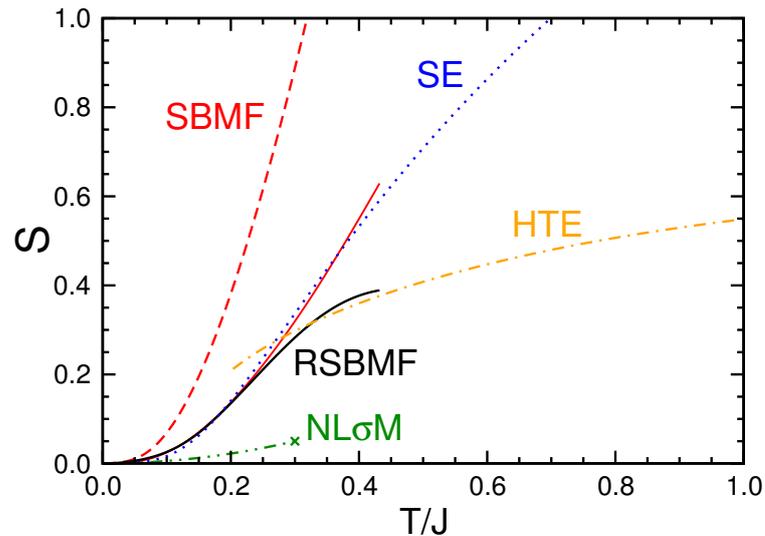


Fig. 5.3: Dependencia en temperatura de la entropía calculada con la RSBMF (5.3) (línea sólida negra); SBMF (5.4) (línea de trazos roja); HTE [46] (línea de trazo-punto naranja); SE [77] (línea de puntos azul) y  $NL\sigma M$  [77] (línea de doble punto-trazo verde). La línea roja sólida representa el resultado de SBMF dividido por 2.785 (ver sección 5.2.2).

correspondiente al  $NL\sigma M$  [77]. El acuerdo con SE es muy bueno a bajas temperaturas, aunque la entropía RSBMF está mejor alineada con la HTE a temperaturas más altas. Esta diferencia puede atribuirse al hecho de que la entropía SE fue calculada en todo el rango de temperatura utilizando la relación de dispersión a  $T = 0$ , mientras que en RSBMF la relación de dispersión reconstruida es dependiente de la temperatura, como puede verse en la figura 5.2).

Para distinguir entre la contribución a la entropía de las excitaciones magnónicas de baja energía y las excitaciones tipo rotónicas de alta energía, hemos calculado la entropía para diferentes rangos de energía, [77] lo cual se muestra en la figura 5.4. La línea de trazos azul representa la contribución de los modos de baja energía  $0 \leq \omega \leq 0.65 J$ , mientras que la línea de trazos-puntos roja representa los modos de baja energía más los rotones  $0 \leq \omega \leq 0.9 J$ , las cotas superiores de estos rangos de energía están indicados en la fig. 5.2 con líneas de trazos. En concordancia con Ref. [77] se puede observar que el aumento de la contribución de los modos rotónicos comienza desde  $T \sim 0.1 J$ . Como referencia hemos incluido el valor de entropía predicho por el  $NL\sigma M$  a  $T = 0.3 J$  (cruz negra) la cual concuerda razonablemente con la contribución de bajas energías de RSBMF. La aparentemente contra-intuitiva disminución de las entropías parciales a mayores temperaturas se debe a la dependencia con la temperatura de  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ . En el caso de la dispersión de SE,

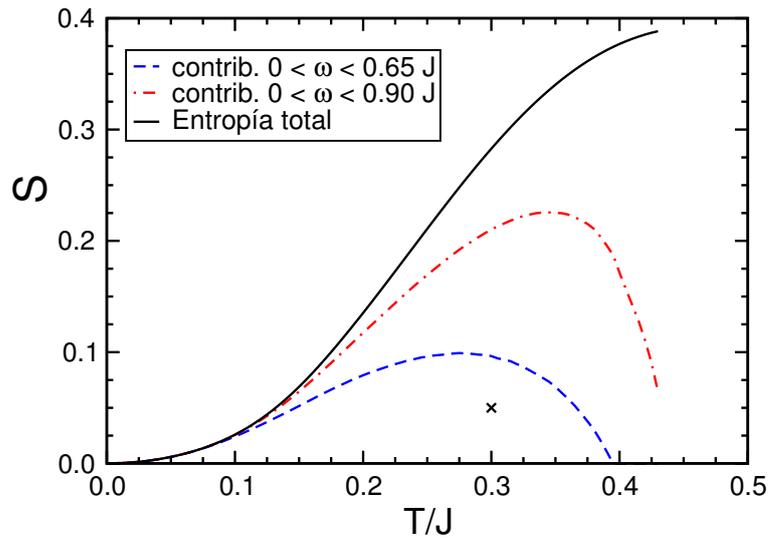


Fig. 5.4: Dependencia con la temperatura de la entropía RSBMF calculada con la contribución de diferentes rangos de energía. La cruz indica el valor predicho por  $NL\sigma M$  a  $T = 0.3 J$ .

que es independiente de la temperatura, se espera una contribución cada vez mayor de cada intervalo de energía debido al aumento del número de ocupación promedio para cada modo al aumentar  $T$ . En cambio, en nuestro caso la temperatura también produce el efecto de mover hacia arriba una cantidad importante de modos, dejándolos fuera de los intervalos de energía correspondientes, reduciendo su contribución a la entropía parcial para  $T \geq 0.3 J$ . Por ejemplo, el mínimo de la dispersión a  $T = 0.4 J$  es mayor que  $0.65 J$ , entonces la contribución de este intervalo de energía a la entropía es cero. Similarmente, dentro del intervalo de energía  $0 - 0.9 J$ , la disminución de la entropía a  $T = 0.4 J$  se debe al hecho de que la parte rotónica de la dispersión cruza la cota superior de dicho intervalo.

Tomando en cuenta lo mencionado arriba concluimos que, al menos dentro del rango de temperaturas  $0.1 - 0.3 J$ , la contribución de los modos rotónicos se vuelve relevante para la entropía total. En particular, estos resultados confirman la idea de que los altos valores de entropía encontrados con HTE alrededor de  $T \sim 0.3 J$  pueden atribuirse, en el contexto de la RSBMF, a la contribución de excitaciones rotónicas lo cual se refleja en el achatamiento de la relación de dispersión alrededor de las mismas. Este efecto se pierde en  $NL\sigma M$ , donde sólo los modos efectivos de baja energía son tomados en cuenta.

### 5.2.2. Caso exacto de dos espines

Una manera alternativa de confirmar si el conteo de los grados de libertad que estamos tomando dentro del RSBMF es correcto, al menos de manera aproximada, puede verse concentrándose en el problema de dos espines  $S$  acoplados con una interacción de intercambio AF  $J$ .

En este caso, el problema puede resolverse exactamente y en el límite de temperatura infinita, donde el sistema se vuelve paramagnético, el valor de la entropía es

$$\mathcal{S}_{\text{ex}} = 2 \ln(2S + 1). \quad (5.5)$$

Por otro lado, para trabajar este problema desde el campo medio de bosones de Schwinger escribimos el hamiltoniano de Heisenberg de la forma,

$$\hat{\mathcal{H}} = J \left( : \hat{B}^\dagger \hat{B} : - \hat{A}^\dagger \hat{A} \right) + \lambda \left( \sum_{i=1,2} \hat{b}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{i\sigma} - 4S \right) \quad (5.6)$$

con los operadores singletes definidos igual que en el capítulo 2, con  $i = 1$  y  $j = 2$ . Sobre esta expresión (5.6) realizamos un desacople de campo medio en los operadores  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$ , y por simplicidad consideramos parámetros reales. Pasando de los operadores de sitio  $\hat{b}_{i\sigma}$  a los operadores *bonding*  $\hat{a}_{s\sigma}$  y *antibonding*  $\hat{a}_{a\sigma}$

$$\begin{aligned} \hat{b}_{1\sigma} &= \frac{\hat{a}_{s\sigma} + \hat{a}_{a\sigma}}{\sqrt{2}} \\ \hat{b}_{2\sigma} &= \frac{\hat{a}_{s\sigma} - \hat{a}_{a\sigma}}{\sqrt{2}}, \end{aligned}$$

el hamiltoniano puede luego diagonalizarse mediante una transformación de Bogoliubov, que introduce los nuevos operadores  $\hat{\alpha}_\sigma$  y  $\hat{\beta}_\sigma$ . De esta manera el hamiltoniano diagonalizado resulta

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} = \sum_{\sigma} \left( \omega_{\alpha} \hat{\alpha}_{\sigma}^{\dagger} \hat{\alpha}_{\sigma} + \omega_{\beta} \hat{\beta}_{\sigma}^{\dagger} \hat{\beta}_{\sigma} \right) + E_0, \quad (5.7)$$

donde

$$\begin{aligned}\omega_\alpha &= \frac{JB}{2} + \sqrt{\lambda^2 - \left(\frac{JA}{2}\right)^2} \\ \omega_\beta &= -\frac{JB}{2} + \sqrt{\lambda^2 - \left(\frac{JA}{2}\right)^2} \\ E_0 &= \omega_\alpha + \omega_\beta - 2(2S+1)\lambda - J(B^2 - A^2),\end{aligned}$$

y las ecuaciones de autoconsistencia resultan

$$A = \frac{J(1+n_\alpha+n_\beta)}{4\sqrt{\lambda^2 - \left(\frac{JA}{2}\right)^2}} A \quad (5.8a)$$

$$B = \frac{n_\alpha - n_\beta}{2} \quad (5.8b)$$

$$\frac{2S+1}{\lambda} = \frac{(1+n_\alpha+n_\beta)}{\sqrt{\lambda^2 - \left(\frac{JA}{2}\right)^2}} \quad (5.8c)$$

donde

$$n_{\alpha,\beta} = \frac{1}{e^{\frac{\omega_{\alpha,\beta}}{T}} - 1} \quad (5.9)$$

son los números de ocupación bosónicos usuales.

Como hemos discutido antes, un artificio del campo medio es el de encontrar una fase paramagnética perfecta a una cierta temperatura finita, donde los parámetros de campo medio se anulan. Trabajando analíticamente las soluciones de (5.8) se encuentra que la entropía en esta fase paramagnética perfecta resulta

$$\mathcal{S}_{\text{MF}} = 2 \ln \left[ \frac{(S+1)^{2S+2}}{S^{2S}} \right]. \quad (5.10)$$

Comparando este resultado con la ecuación (5.5) para  $S = 1/2$  se encuentra que  $\mathcal{S}_{\text{MF}} = 2.785 \mathcal{S}_{\text{ex}}$ . Por lo tanto, el factor 2.785 nos permite relacionar aproximadamente las discrepancias de  $\mathcal{S}$  entre un caso exacto y otro en el que el conteo de estados no es del todo correcto, como en SBMF. Notablemente, si se divide la entropía SBMF (línea de trazos roja) de la figura 5.3 por el factor 2.785 (línea roja) se recupera la entropía RSBMF (línea sólida negra) de la figura 5.3, al menos dentro del rango de interés de temperatura  $0 - 0.3 J$ . Este acuerdo le da aún más soporte a nuestro procedimiento de reconstrucción RSBMF, realizado en el capítulo 4.

### 5.2.3. Susceptibilidad uniforme

La susceptibilidad uniforme calculada con RSBMF resulta

$$\chi_u = \frac{S(0)}{T} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \bar{n}_{\mathbf{k}}(\bar{n}_{\mathbf{k}} + 1) \quad (5.11)$$

donde  $S(\mathbf{k})$  es el factor de estructura estático, mientras que en SBMF resulta

$$\chi_u = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}(n_{\mathbf{k}} + 1). \quad (5.12)$$

En la figura 5.5.a se muestra la susceptibilidad uniforme calculada con RSBMF (línea

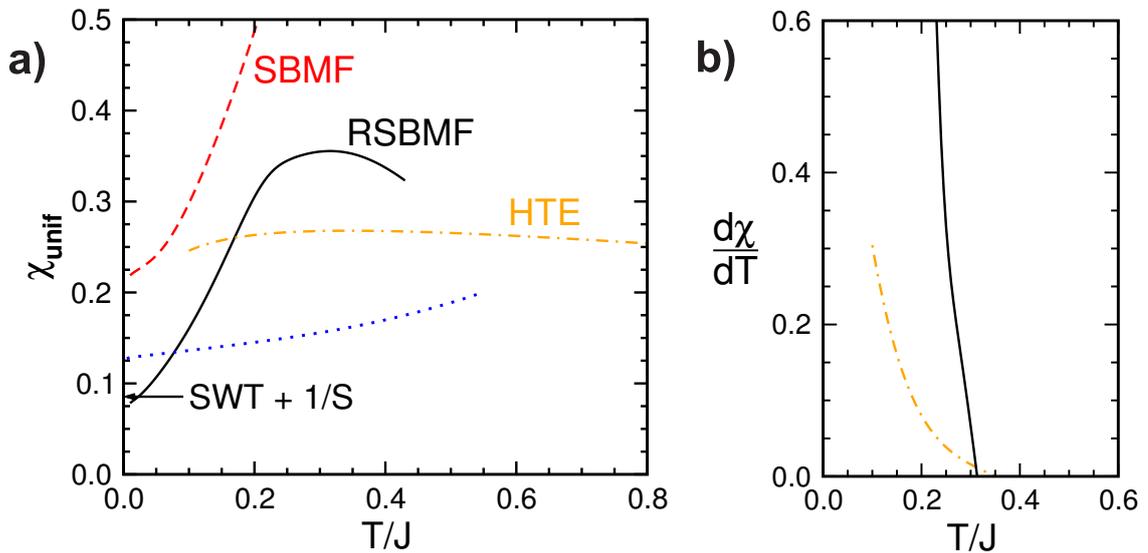


Fig. 5.5: a) Susceptibilidad uniforme calculada con: RSBMF (5.11) (línea sólida negra); SBMF (5.12) (línea de trazos roja); HTE [46] (línea de trazos-puntos naranja) y SBMF calculado con el esquema de un singlete [70, 118] (línea de puntos azul). La flecha indica el resultado a  $T = 0$  de LSWT+1/S [125]. b) Derivada respecto de la temperatura de la susceptibilidad uniforme versus temperatura.

sólida negra) y con SBMF (línea de trazos roja). En consonancia con los resultados previos de entropía, la susceptibilidad uniforme es sobrestimada con SBMF. Es decir, la presencia de excitaciones magnéticas espurias mejora la respuesta del sistema a un campo magnético uniforme. Por otro lado, los resultados con RSBMF interpolan bastante bien entre los valores esperados a temperatura cero (flecha) y los resultados HTE de [46] (línea de trazos-puntos naranja). En particular, el valor extrapolado a temperatura cero es  $\chi_u \sim 0.072$  que debe compararse con  $\chi_u \sim 0.084$ , correspondiente al resultado de ondas de

espín más correcciones  $\frac{1}{S}$  [122]. A temperaturas muy bajas RSBMF se comporta como  $\chi_u \sim 0.072 + 0.6 T$  mientras que el comportamiento esperado para un régimen clásico renormalizado es  $\chi_u \sim 0.084 + 0.07 T$  [122]. La diferencia de un orden de magnitud en la pendiente está relacionado con la diferencia antes mencionada en la longitud de correlación (potencia de  $T$  extra en el prefactor), de donde al tender  $T \rightarrow 0$  la longitud de correlación verdadera aumenta más rápido que las soluciones de campo medio [122, 83]). Para  $T > 0.15 J$  la susceptibilidad uniforme difiere de los resultados de HTE en contraste con el excelente acuerdo obtenido para la entropía. Mientras que la entropía depende del correcto conteo de estados, a través de la dispersión reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ , la susceptibilidad uniforme  $\chi_u$  está relacionada con la distribución del peso espectral a lo largo de la ZB que a estas temperaturas, probablemente, no es tomada en cuenta correctamente por la aproximación de campo medio. Sin embargo, puede notarse que a pesar que el pico redondeado de la HTE es más amplio que el de RSBMF ambos están situados aproximadamente a la misma temperatura,  $T \sim 0.35 J$  [46]. Esto puede verse en la figura 5.5.b, donde se grafica la derivada respecto de la temperatura de  $\chi_u$  versus temperatura. Por completitud, en la figura 5.5.a también mostramos la predicción con SBMF en el esquema de sólo un operador singlete (línea de puntos azul), realizado previamente en [70, 118] (ver sección 4.2.5). En este caso la interpolación no es buena porque este esquema de cálculo no reproduce correctamente el espectro de bajas energías del THM, como hemos visto en la sección 4.2.5 del capítulo anterior.

Finalmente, podemos calcular el calor específico  $C_v$ , el cual es una cantidad que resulta interesante estudiar porque existen en la literatura resultados confiables especialmente extrapolados a muy bajas temperaturas desde los resultados de HTE [126].

El calor específico se puede obtener de la entropía mediante

$$C_v = \frac{1}{\beta} \frac{\partial S}{\partial T}, \quad (5.13)$$

que en el caso de un gas de bosones libres resulta, para RSBMF,

$$C_v = \sum_{\mathbf{k}} (\beta \bar{\omega}_{\mathbf{k}})^2 \bar{n}_{\mathbf{k}} (\bar{n}_{\mathbf{k}} + 1), \quad (5.14)$$

*Tab. 5.1:* Valores del coeficiente  $a$  del comportamiento cuadrático del calor específico  $C_v \sim a(T/J)^2$  calculados con RSBMF (5.14) y SBMF (5.14), junto con los valores obtenidos de extrapolar el resultado de HTE a muy bajas temperaturas [126] y de insertar las velocidad de onda de espín en el esquema de Debye.

	$a$
HTE	5.3(2)
SWT	3.4
SBMF	7.3
RSBMF	5.2

y utilizando SBMF resulta

$$C_v = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\beta \bar{\omega}_{\mathbf{k}\sigma})^2 \bar{n}_{\mathbf{k}\sigma} (\bar{n}_{\mathbf{k}\sigma} + 1). \quad (5.15)$$

A temperaturas bajas esta cantidad se comporta cuadráticamente como  $C_v \sim a(T/J)^2$ . Hemos encontrado que este comportamiento cuadrático se mantiene hasta la temperatura  $T \sim 0.03 J$  para SBMF y  $T \sim 0.06 J$  para RSBMF, donde la constante de proporcionalidad  $a$  se muestra para ambos caso en la tabla 5.1, junto con el resultado obtenido por el método de extrapolación desde HTE ya nombrado y el obtenido de introducir los valores de velocidad de onda de espín en la construcción de Debye (SWT), donde resulta notable el buen acuerdo que existe entre nuestra teoría de campo medio reconstruida RSBMF y el valor confiable extrapolado desde HTE.

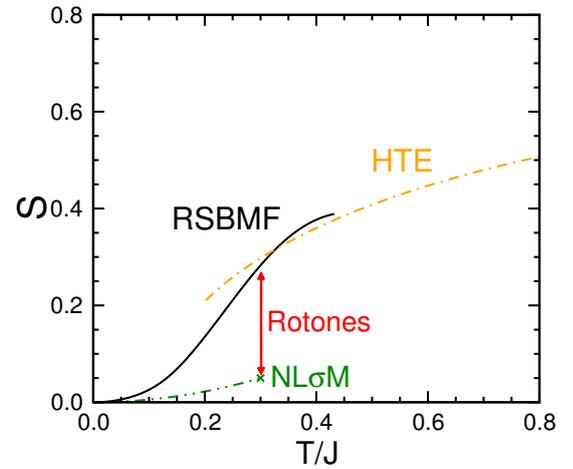
### 5.3. Conclusiones

Hemos investigado las propiedades a bajas temperaturas del modelo de Heisenberg en la red triangular desde una perspectiva de espinones bosónicos basada en la teoría de campo medio de bosones de Schwinger “reconstruida” (RSBMFT) que hemos desarrollado en el capítulo 4. Una comparación con los resultados confiables a  $T = 0$  y alta temperatura ( $T \gtrsim 0.3 J$ ) revelan que RSBMFT proporciona una muy buena interpolación para muchas de las propiedades termodinámicas como la entropía, la susceptibilidad uniforme y el calor específico sobre el rango de temperatura  $0 \leq T \lesssim 0.3 J$ , el cual es de muy difícil acceso mediante otros métodos.

Uno de nuestros principales resultados físicos es confirmar la idea de que los altos valores de entropía encontrados con HTE se deben a la contribución de las excitaciones rotónicas [77] que, en el contexto de nuestra teoría, se pueden identificar con fluctuaciones AF colineales de corto alcance por encima del orden de Néel  $120^\circ$  subyacente (ver capítulo 4).

La simplicidad del RSBMF junto con la consistente descripción de varias características de la THM, tales como propiedades estáticas del estado fundamental, espectro de energía y propiedades termodinámicas a bajas temperaturas, da un fuerte apoyo

a la perspectiva de espinoes bosónicos para interpretar la física del modelo de Heisenberg en la red triangular. Por supuesto, la presente aproximación debe ser refinada mediante el uso de técnicas diagramáticas de muchos cuerpos [82] o mediante la realización de correcciones  $1/\mathcal{N}$  [66].



## 6. MODELO $XXZ$ ANTIFERROMAGNÉTICO SOBRE LA RED TRIANGULAR

### Índice

---

<b>6.1. Introducción</b> . . . . .	<b>117</b>
<b>6.2. Esquema de cuatro operadores de <i>link</i></b> . . . . .	<b>118</b>
6.2.1. Ecuaciones de autoconsistencia . . . . .	120
6.2.2. Expresiones para los factores de estructura estático y dinámico . . . . .	121
<b>6.3. Resultados</b> . . . . .	<b>122</b>
6.3.1. Factor de estructura estático y magnetización . . . . .	122
6.3.2. Factor de estructura dinámico $zz$ . . . . .	123
6.3.3. Transferencia de peso espectral . . . . .	125
6.3.4. Factor de estructura dinámico total . . . . .	127
6.3.5. Ligadura de espinones . . . . .	129
<b>6.4. Conclusiones</b> . . . . .	<b>130</b>

---

## 6.1. Introducción

Durante muchos años, incentivada por la propuesta de Anderson del estado RVB [27] y el posterior descubrimiento de los cupratos superconductores, la pregunta sobre si el estado fundamental del THM estaba ordenado, o no, convirtieron a este modelo en uno de los más ampliamente estudiados en el área de sistemas fuertemente correlacionados, y sobre el mismo se volcó un gran esfuerzo teórico y numérico en pos de dilucidar su estado fundamental y excitaciones elementales.

En los últimos años se han podido sintetizar distintos compuestos que han sido investigados intensamente como realizaciones experimentales del THM. La mayoría de los materiales estudiados, tales como los inorgánicos  $Cs_2CuCl_4$  [37] y  $Cs_2CuBr_4$ , [127] o la sal orgánica  $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu_2(CN)_3$ , [128] poseen una red triangular distorsionada y, por lo tanto, interacciones de intercambio espacialmente anisotrópicas<sup>1</sup>. Originalmente se pensaba que en el compuesto  $Ba_3CuSb_2O_9$  los iones  $Cu^{2+}$  conformaban una red triangular de espín- $\frac{1}{2}$ , y en donde experimentalmente no se encuentran indicios de orden magnético hasta temperaturas de  $0.2K$  [129]. Sin embargo, una caracterización más detallada sobre monocristales mostró que el material es mejor descrito por una estructura donde los iones  $Cu^{2+}$  magnéticos se ordenan en una red panal de abeja [130].

Por otro lado, recientes estudios experimentales sobre el compuesto  $Ba_3CoSb_2O_9$  han resultado prometedores [48]. En este material los iones de  $Co^{2+}$  tienen espín efectivo  $S = \frac{1}{2}$  (doblete de Kramer) los cuales se organizan en redes triangulares altamente simétricas. Experimentos de dispersión de neutrones encuentran que este sistema se ordena en una estructura magnética de Néel de  $120^\circ$  debajo de los  $3.8 K$ , debido a una pequeña interacción entre capas [131]. Las mediciones de magnetización en función de la temperatura y campo magnético son cuantitativamente consistentes con el THM isotrópico [48]. La susceptibilidad dinámica medida, [48] además, resulta consistente con HTE [46] (ver capítulo 5 anterior). De esta manera,  $Ba_3CoSb_2O_9$  resulta hoy el principal candidato a ser la realización experimental de una red triangular de espines  $S = \frac{1}{2}$ . Mediciones de resonancia de espín electrónico (ESR), junto a los resultados de magnetización, indican que el mismo parecería corresponder a un THM con una leve anisotropía magnética tipo  $XXZ$  de *plano fácil* [132, 133]. Pero lo mas interesante en este compuesto resultan ser los experimentos de dispersión inelástica de neutrones, donde debajo de la temperatura de ordenamien-

<sup>1</sup> Los compuestos inorgánicos además poseen una considerable interacción del tipo Dzyaloshinsky-Moriya.

to ( $1.5 K$ ) se ha encontrado en el espectro un extenso continuo de excitaciones de alta energía por encima de las excitaciones de ondas de espín [49] y con un peso espectral mucho mayor que estas últimas. Si bien estos datos no son concluyentes, sugieren la posible fraccionalización de las excitaciones de ondas de espín, implicando que el sistema podría estar próximo a una fase tipo líquido de espines. Al ser una red  $2D$  ideal, podría ser una evidencia experimental de la existencia de espinones en sistemas  $2D$ .

Dados los buenos resultados que hemos obtenido en el THM de espín- $\frac{1}{2}$  con la teoría de campo medio de bosones de Schwinger reconstruida (RSBMF) es que en este capítulo investigaremos el modelo  $XXZ$  con este método, el cual tiene en cuenta naturalmente tanto el orden magnético como las excitaciones espinónicas fraccionarias. Para tal caso incorporamos dos nuevos operadores de *link*  $\hat{C}_{ij}$  y  $\hat{D}_{ij}$ , gracias a los cuales hemos podido expresar el hamiltoniano en término de operadores que respetan la simetría  $O(2) \times Z_2$  del mismo. Finalmente hemos contrastado –cuando era posible– nuestros resultados con la teoría de ondas de espín (SWT) desarrollada previamente por otros autores [114].

## 6.2. Esquema de cuatro operadores de *link*

Retomando lo visto en la sección 2.4 del capítulo 2, la parte  $zz$  de la interacción espín-espín  $\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$  puede expresarse según (2.84) como

$$\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z = \frac{1}{2} \left( : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} + : \hat{C}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij} : - \hat{D}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij} \right), \quad (6.1)$$

donde aparecen dos nuevos operadores de *link*

$$\begin{aligned} \hat{C}_{ij} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma \hat{b}_{i\sigma} \hat{b}_{j\sigma}^\dagger = \frac{1}{2} \left( \hat{b}_{i\uparrow} \hat{b}_{j\uparrow}^\dagger - \hat{b}_{i\downarrow} \hat{b}_{j\downarrow}^\dagger \right), \\ \hat{D}_{ij} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \hat{b}_{i\sigma} \hat{b}_{j\bar{\sigma}} = \frac{1}{2} \left( \hat{b}_{i\uparrow} \hat{b}_{j\downarrow} + \hat{b}_{i\downarrow} \hat{b}_{j\uparrow} \right), \end{aligned}$$

que son invariantes ante rotaciones alrededor del eje  $z$  y ante inversiones de la componente  $z$  de los espines. De esta manera el hamiltoniano (2.82) del modelo de Heisenberg  $XXZ$ ,

$$\hat{\mathcal{H}}^{\text{xxz}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left( \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \Delta \hat{S}_i^z \cdot \hat{S}_j^z \right), \quad (6.2)$$

en término de los operadores de *link*, resulta

$$\hat{\mathcal{H}}^{\text{XXZ}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left[ \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \left( : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \right) - \frac{\Delta}{2} \left( : \hat{C}_{ij}^\dagger \hat{C}_{ij} : - \hat{D}_{ij}^\dagger \hat{D}_{ij} \right) \right]. \quad (6.3)$$

Consecuentemente, el hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}^{\text{XXZ}}$  queda expresado en función de términos cuadráticos de operadores bilineales, donde cada uno de estos operadores respetan las simetrías originales de  $\hat{\mathcal{H}}^{\text{XXZ}}$ . De manera análoga a los pasos dados en la sección 2.2 del capítulo 2 con el hamiltoniano isotrópico, podemos realizar un desacople de campo medio en los operadores  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ ,  $\hat{C}$  y  $\hat{D}$ , e incorporar además la restricción local del número de bosones de Schwinger a través de un multiplicador de Lagrange  $\lambda$ , resultando en la expresión

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}^{\text{XXZ}} = & \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left[ \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^C + \lambda \right] \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \right. \\ & \left. - \left[ \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^D \right] \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \right\} - 2S\lambda N - E_{\text{MF}}^{\text{XXZ}}, \quad (6.4) \end{aligned}$$

que respeta la simetría  $O(2) \times Z_2$  del hamiltoniano original, y donde la energía en campo medio viene dada por

$$E_{\text{MF}}^{\text{XXZ}} = \frac{N}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} \left[ \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) (B_{\delta}^2 - A_{\delta}^2) - \frac{\Delta}{2} (C_{\delta}^2 - D_{\delta}^2) \right], \quad (6.5)$$

y donde

$$\gamma_{\mathbf{k}}^C = \frac{1}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} C_{\delta} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}) \quad (6.6)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}}^D = \frac{1}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} D_{\delta} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}). \quad (6.7)$$

Aquí hemos además elegido el *ansatz*  $C_{ij} = iC_{\delta}$  imaginario puro e impar, y  $B_{ij} = B_{\delta}$  real y par en  $\mathbf{R}_{\delta}$ , que se condicen con las expresiones semiclassicals resultantes de asumir una magnetización en el plano  $x - y$ ,

$$\begin{aligned} C_{ij} &= i m \sin \left[ \frac{\mathbf{Q}}{2} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) \right] \\ D_{ij} &= m \cos \left[ \frac{\mathbf{Q}}{2} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) \right], \quad (6.8) \end{aligned}$$

las cuales se complementan con las ecuaciones (2.48) para  $A_{ij}$  y  $B_{ij}$  del capítulo 2.

Una transformación de Bogoliubov similar a la utilizada en el capítulo 2 para el caso isotrópico (ver apéndice A) nos permite diagonalizar este hamiltoniano de campo medio,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}}^{\text{XXZ}} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) + E_{\text{GS}}^{\text{XXZ}}, \quad (6.9)$$

donde la energía del estado fundamental es

$$E_{\text{GS}}^{\text{XXZ}} = E_{\text{MF}}^{\text{XXZ}} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} - (2S + 1)\lambda - E_{\text{MF}}^{\text{XXZ}}, \quad (6.10)$$

y la relación de dispersión espinónica

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\left[ \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^C + \lambda \right]^2 - \left[ \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^D \right]^2}. \quad (6.11)$$

Es importante notar que como  $\gamma_{\mathbf{k}}^B$  y  $\gamma_{\mathbf{k}}^D$  son pares en  $\mathbf{k}$ , y  $\gamma_{\mathbf{k}}^A$  y  $\gamma_{\mathbf{k}}^C$  son impares en  $\mathbf{k}$ , entonces ambos términos entre corchetes, y consecuentemente  $\omega_{\mathbf{k}}$ , no poseen propiedad de paridad alguna respecto de  $\mathbf{k}$ . Finalmente, los coeficientes de la transformación de Bogoliubov siguen siendo reales y toman la forma

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^C + \lambda}{\omega_{\mathbf{k}}} + 1 \right)} \\ v_{\mathbf{k}} = \text{signo} \left\{ \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^D \right\} \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^C + \lambda}{\omega_{\mathbf{k}}} - 1 \right)} \end{array} \right. . \quad (6.12)$$

### 6.2.1. Ecuaciones de autoconsistencia

En este esquema los parámetros de campo medio son las cantidades  $A_{\delta}$ ,  $B_{\delta}$ ,  $C_{\delta}$ ,  $D_{\delta}$  y  $\lambda$ . A temperatura  $T = 0$ , minimizando la energía  $E_{\text{GS}}^{\text{XXZ}}$  respecto de estos parámetros, se

obtienen las ecuaciones de autoconsistencia (para redes finitas)

$$A_\delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^D}{\omega_{\mathbf{k}}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta), \quad (6.13a)$$

$$B_\delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^C + \lambda}{\omega_{\mathbf{k}}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta), \quad (6.13b)$$

$$C_\delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^C + \lambda}{\omega_{\mathbf{k}}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta), \quad (6.13c)$$

$$D_\delta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^D}{\omega_{\mathbf{k}}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta), \quad (6.13d)$$

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^C + \lambda}{\omega_{\mathbf{k}}}. \quad (6.13e)$$

### 6.2.2. Expresiones para los factores de estructura estático y dinámico

Recordando que la función  $\omega_{\mathbf{k}}$  ya no es más par en  $\mathbf{k}$ , podemos calcular el factor de estructura estático de manera análoga a lo realizado en la sección 2.2.5 del capítulo 2. La expresión final resulta

$$S(\mathbf{k}) = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \begin{aligned} & \frac{[(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{q}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{q}}^C + \lambda][(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}^C + \lambda] + [(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{q}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{q}}^D][(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}^D]}{4 \omega_{\mathbf{q}} \omega_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \\ & + \frac{[(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{q}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{q}}^C + \lambda][(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^C + \lambda] + [(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{q}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{q}}^D][(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^D]}{4 \omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \\ & + \frac{[(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{q}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{q}}^C + \lambda][(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^C + \lambda] + [(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{q}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{q}}^D][(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}^D]}{4 \omega_{\mathbf{q}} \omega_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \\ & + \frac{[(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{q}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{q}}^C + \lambda][(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^C + \lambda] + [(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{q}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{q}}^D][(1 - \frac{\Delta}{2}) \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^D]}{4 \omega_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \end{aligned} \right\} \\ + \frac{S}{2} - \frac{1}{4} - N \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{0}} \frac{S}{2}. \quad (6.14)$$

Esta expresión es un poco extensa pero totalmente análoga a la ecuación (2.38) de la sección 2.2.5 del capítulo 2, donde se debe realizar el cambio

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda & \longleftrightarrow \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^C + \lambda \\ \gamma_{\mathbf{k}}^A & \longleftrightarrow \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\mathbf{k}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^D \end{aligned}$$

y notar que ahora hay cuatro términos debido a la no paridad de  $\omega_{\mathbf{k}}$  y las expresiones entre corchetes.

En cuanto al factor de estructura dinámico de espín es importante notar que, debido a las simetrías del hamiltoniano, las componentes  $yy$  y  $xx$  serán iguales, más no la  $zz$ . Es decir,  $S^{xx}(\mathbf{k}, \omega) = S^{yy}(\mathbf{k}, \omega) \neq S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$ .

Calculando las funciones de Green retardadas de los operadores de espín, de igual manera a lo hecho en la sección 2.3.1 del capítulo 2, resulta ( $T = 0$ )

$$S^{zz}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}})^2 \delta[\omega - (\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})], \quad (6.15a)$$

$$\begin{aligned} S^{xx}(\mathbf{k}, \omega) = S^{yy}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \frac{1}{2} (u_{\mathbf{q}}v_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}} + u_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}})^2 \delta[\omega - (\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}})] + \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} (u_{\mathbf{q}}v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + u_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}v_{\mathbf{q}})^2 \delta[\omega - (\omega_{\mathbf{q}} + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \right\}, \quad (6.15b) \end{aligned}$$

## 6.3. Resultados

### 6.3.1. Factor de estructura estático y magnetización

Hemos aquí resuelto las ecuaciones de autoconsistencia (6.13) para redes grandes ( $N = 30\,000$ ), encontrando soluciones de campo medio en todo el rango de  $0.0 \leq \Delta \leq 1.0$ , siendo  $\Delta = 0.0$  el caso del modelo isotrópico y  $\Delta = 1.0$  el caso totalmente anisotrópico  $XY$ . En la figura 6.1.a se muestra el factor de estructura estático para distintos valores de anisotropía, donde puede observarse que el orden magnético de Néel de  $120^\circ$ , indicado por el pico en el vector de onda magnético  $(\frac{2}{3}\pi, \frac{2}{\sqrt{3}}\pi)$ , se robustece con el aumento de  $\Delta$ , tornándose los picos de Bragg más definidos e intensos.

Al calcular  $\omega_{\mathbf{k}}$  mediante la ecuación (6.11) la principal diferencia que hemos encontrado con el caso isotrópico es que, para un valor finito de  $\Delta$ , se abre un gap en uno de los dos mínimos  $\pm\mathbf{k}_{\min}$  antes encontrados. De esta manera la relación de dispersión espinónica  $\omega_{\mathbf{k}}$  sólo tiene un único mínimo en  $\mathbf{k}_{\min} = \frac{\mathbf{Q}}{2}$  con  $\mathbf{Q}$  el vector de onda del orden magnético el cual, análogamente a lo descrito en la sección 2.2.7 del capítulo 2, se hace cero en el límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ),  $\omega_{\frac{\mathbf{Q}}{2}} \rightarrow 0$ . Consecuentemente, en el límite termodinámico se desarrolla un condensado de bosones de Schwinger en  $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{Q}}{2}$ , el cual está relacionado con la ruptura de la simetría  $O(2)$  del hamiltoniano y corresponde a la magnetización del orden magnético<sup>2</sup>. Para el caso de redes finitas hemos visto que puede relacionarse

<sup>2</sup> Esto ocurre de igual manera que en el caso isotrópico, visto en la sección 2.2.7 del capítulo 2, en donde los dos tipos de condensados,  $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{Q}}{2}$  y  $\mathbf{k} = -\frac{\mathbf{Q}}{2}$ , están relacionados con la ruptura de la simetría  $SU(2)$ .

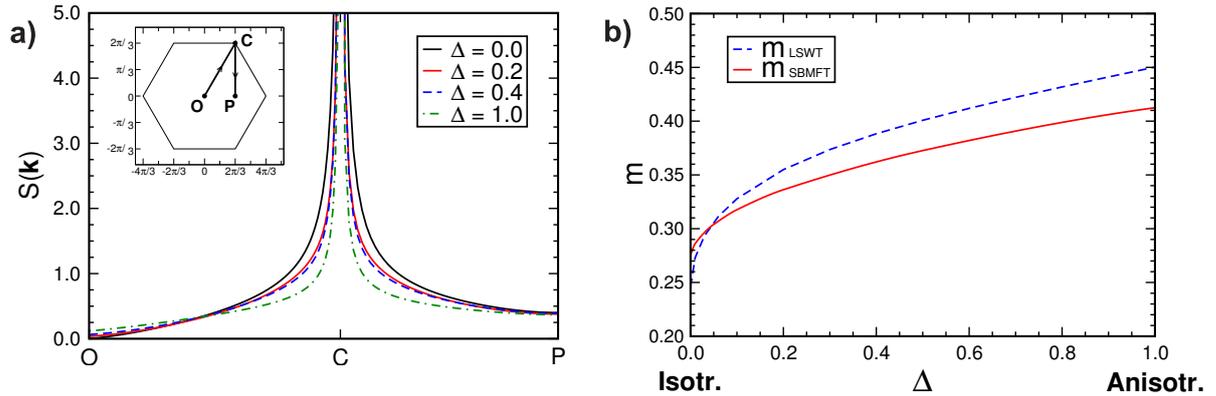


Fig. 6.1: **a)** Factor de estructura estático  $S(\mathbf{k})$  calculado en la trayectoria  $O - C - P$  para distintos valores de anisotropía. Puede observarse como el pico de Bragg en el vector de onda  $\mathbf{k} = C$  del orden magnético de Néel  $120^\circ$  se robustece a medida que crece la anisotropía. **b)** Magnetización local en función de la anisotropía  $\Delta$  calculada con SBMFT y LSWT.

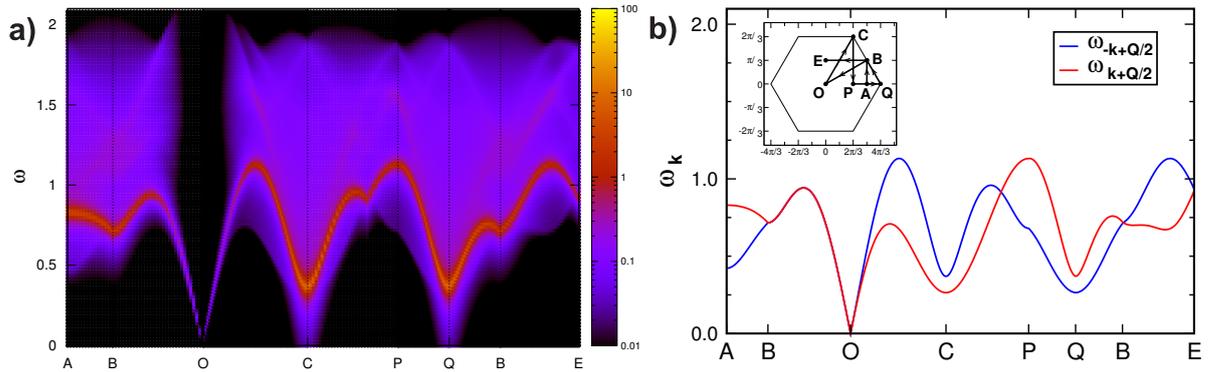
este condensado con la magnetización mediante el tratamiento por separado de los modos singulares en las ecuaciones autoconsistentes (ver ecuación (2.50) en sección 2.2.7 del capítulo 2). Similarmente, separando ahora el modo singular  $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{Q}}{2}$  en la ecuación autoconsistente (6.13e), obtenemos la siguiente expresión para la magnetización local,

$$m = \frac{1}{2N} \frac{\left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \gamma_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}^C + \lambda}{\omega_{\frac{\mathbf{Q}}{2}}}. \quad (6.16)$$

La figura 6.1.b muestra con línea roja los valores obtenidos para esta expresión (6.16), en función de la anisotropía  $\Delta$ , los cuales resultan muy parecidos a los valores encontrados con teoría de ondas de espín lineal (LSWT), que se muestra también en la figura con línea de trazos azul. Como es de esperar, los efectos de las fluctuaciones cuánticas son más fuertes en el caso isotrópico, donde encontramos una magnetización más reducida en comparación con los casos anisotrópicos.

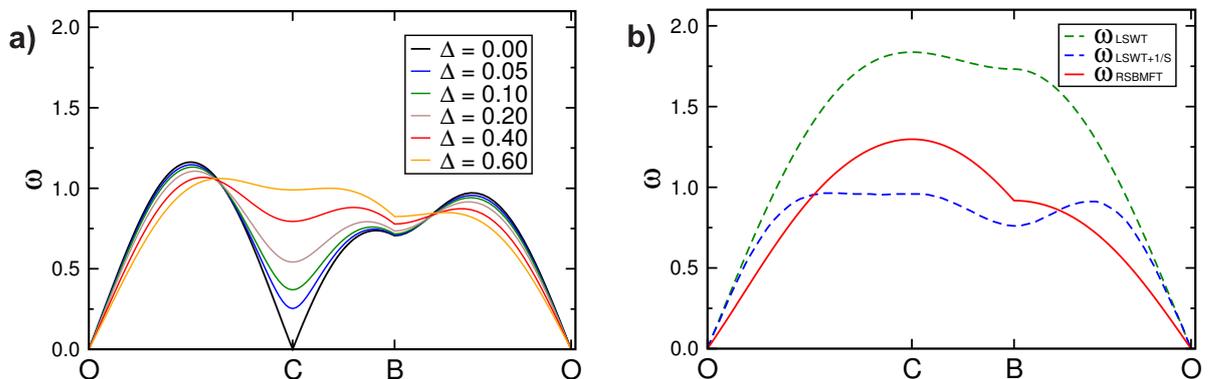
### 6.3.2. Factor de estructura dinámico $zz$

Podemos realizar sobre la expresión (6.15a) de  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  un análisis similar al de la sección 4.2.2 del capítulo 4, donde las contribuciones singulares de bajas energías están compuestas por alguno o ambos espinones creados en el condensado y el continuo de altas energías está compuesto por la creación de ambos espinones en el fluido normal. En la



*Fig. 6.2:* **a)** Factor de estructura dinámico  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  calculado en la trayectoria  $ABOCPQBE$  con RSBMFT, para anisotropía  $\Delta = 0.10$ . Puede observarse como se abre un gap en  $\pm\mathbf{Q}$ , mientras que se mantiene el modo en  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ . **b)** Relaciones de dispersión espinónica desplazadas,  $\omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  y  $\omega_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$ .

figura 6.2.a se muestra  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  para el caso de anisotropía  $\Delta = 0.10$  a lo largo de la trayectoria  $ABOCPQBE$  utilizada en el capítulo 4. El comportamiento de las excitaciones espurias es aquí similar al caso isotrópico: analizando el factor de estructura dinámico densidad-densidad  $\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega)$  puede identificarse sus señales singulares mas intensas con las señales singulares menos intensas de  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$ . De esta manera asumimos que las últimas se deben a efectos no físicos de la fluctuación en la densidad bosónica y, de manera equivalente a lo descrito en la sección 4.2.4 del capítulo 4, definimos el campo medio de bosones de Schwinger “reconstruido” (RSBMFT), con el cual hemos calculado el  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  de la figura 6.2.a. La relación de dispersión reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  de las excitaciones de espín-1



*Fig. 6.3:* **a)** Relación de dispersión física reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  para distintos valores de anisotropía  $\Delta$ . **b)** Relaciones de dispersión para  $\Delta = 1$  calculadas con RSBMFT, LSWT y LSWT+1/S [114].

de baja energía en RSBMFT se construye ahora a partir de las relaciones de dispersión

espinónicas desplazadas  $\omega_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$  y  $\omega_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}$ , las cuales se muestran en la figura 6.2.b para el valor  $\Delta = 0.10$ .

La apertura de un gap en uno de los mínimos de la relación de dispersión espinónica  $\omega_{\mathbf{k}}$  se traduce en la apertura de un gap en  $\pm\mathbf{Q}$  en la dispersión reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ . Esto puede verse claramente para el punto  $C = \mathbf{Q}$  en la figura 6.3.a, donde se grafica la relación de dispersión reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$  para diferentes valores de anisotropía, en la trayectoria  $OCBO$ . Al contrario del caso isotrópico, donde existen 3 modos de Goldstone  $\mathbf{k} = \mathbf{0}, \pm\mathbf{Q}$  relacionados con la ruptura de la simetría continua  $SU(2)$ , en el caso anisotrópico el único modo de Goldstone que se conserva es  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  el cual está relacionado con la ruptura de la simetría continua  $O(2)$  e indica la presencia de un orden magnético en el plano  $x - y$ . Este modo de Goldstone uniforme corresponde a rotaciones globales infinitesimales de los espines en el plano que contiene el orden magnético, mientras que los modos  $\pm\mathbf{Q}$  del caso isotrópico corresponden a rotaciones de los espines en planos perpendiculares al plano que contiene el orden, es decir, rotaciones del plano de magnetización. Consecuentemente, el hecho de que el gap en  $\pm\mathbf{Q}$  aumente con  $\Delta$  se interpreta como la energía necesaria para rotar rígidamente el orden magnético fuera del plano  $x - y$ .

En la figura 6.3.b se muestra la relación de dispersión reconstruida para el caso totalmente anisotrópico  $XY$  ( $\Delta = 1$ ), junto con las calculadas mediante LSWT y con LSWT más correcciones  $1/S$  (LSWT+ $1/S$ ) tomada de Ref. [114]. Las correcciones  $1/S$  reducen el ancho de banda de la relación de dispersión en un 50% respecto de LSWT, reducción que RSBMFT captura razonablemente, si bien no reproduce de LSWT+ $1/S$  el mínimo tipo rotón en el punto  $B$  y la velocidad de ondas de espín en  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ . Es importante destacar que el modelo  $XY$  es un límite extremo del modelo  $XXZ$  y, basándonos en los buenos resultados obtenidos con RSBMFT en el caso isotrópico (capítulo 4), estimamos que para valores intermedios de anisotropías este campo medio reconstruido reproducirá bien los resultados calculados con LSWT+ $1/S$ . Lamentablemente no existen actualmente resultados de LSWT+ $1/S$  disponibles para valores intermedios de anisotropía.

### 6.3.3. *Transferencia de peso espectral*

Como se ha mencionado en la introducción del capítulo, recientes experimentos de dispersión inelástica de neutrones (INS) sobre el compuesto  $Ba_3CoSb_2O_9$  muestran la presencia de un extenso continuo con alto peso espectral a altas energías, el cual podría atribuirse a la presencia de excitaciones fraccionarias espinónicas. La figura 6.4 ha si-

do tomada de Ref. [49] y muestra los resultados obtenidos con INS a una temperatura  $T = 1.5 K$  sobre  $Ba_3CoSb_2O_9$ , donde puede observarse el extenso continuo que existe

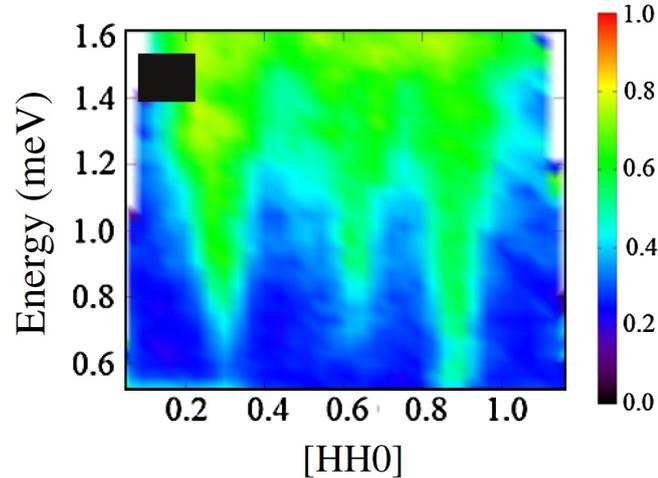


Fig. 6.4: Patrón de intensidades de los resultados de dispersión inelástica de neutrones sobre el material  $Ba_3CoSb_2O_9$ . Gráfica tomada de Ref. [49].

a altas energías, el cual sorprendentemente posee un peso espectral mayor que el de las excitaciones de bajas energías. Si bien estos autores, en base a sus resultados, estimaban que el modelo que mejor representa al  $Ba_3CoSb_2O_9$  es un Heisenberg  $XXZ$  con anisotropía tipo *eje fácil* (equivalente a  $\Delta < 0$ ) luego se confirmó que el modelo que mejor describe el material es el  $XXZ$  *plano fácil*, [132, 133] estimándose que las muestras en Ref. [49] podrían estar mal alineadas [133][134, (versión 1)]. Por lo tanto, estos resultados deben tomarse como preliminares y la comparación de RSBMFT con los mismos resulta de carácter cualitativo.

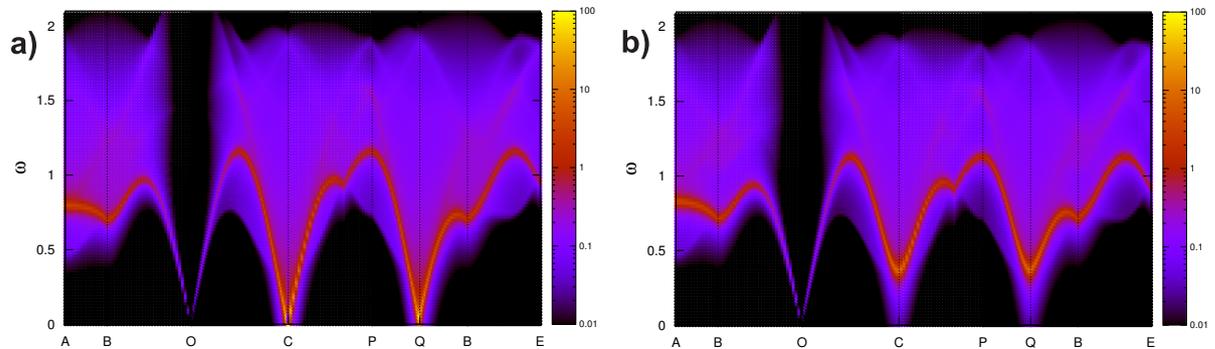


Fig. 6.5: Factor de estructura dinámico  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  calculado en la trayectoria  $ABOCPQBE$  con RSBMFT, para valores de anisotropía **a)**  $\Delta = 0$  y **b)**  $\Delta = 0.1$ .

En la figura 6.5 se muestra nuevamente, con el fin de compararlos,  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  para el caso isotrópico  $\Delta = 0$  y levemente anisotrópico  $\Delta = 0.1$ . Aquí puede verse que la incorporación de anisotropía en este modelo no transfiere peso espectral hacia altas energías. En cambio, hemos encontrado que la incorporación de interacciones a segundos vecinos  $J_2$ , si bien reduce el ancho de banda de dispersión, también produce una transferencia de peso espectral hacia energías por encima de las excitaciones magnónicas, tal como puede verse en la figura 6.6 para anisotropía  $\Delta = 0.1$  con distintos valores de  $J_2$  (en unidades de  $J_1$ ).

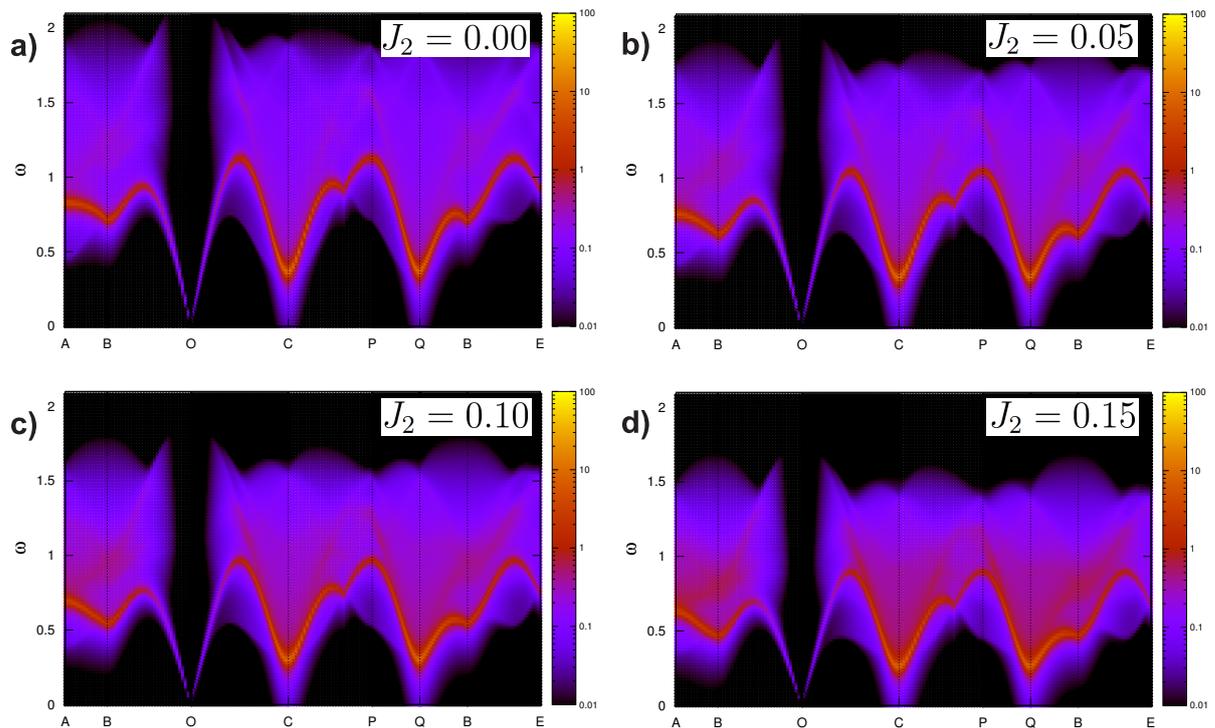


Fig. 6.6: Factor de estructura dinámico  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  calculado en la trayectoria  $ABOCPQBE$  con RSBMFT, para anisotropía  $\Delta = 0.10$  e interacción a segundos vecinos **a)**  $J_2 = 0.00$ , **b)**  $J_2 = 0.05$ , **c)**  $J_2 = 0.10$  y **d)**  $J_2 = 0.15$ .

#### 6.3.4. Factor de estructura dinámico total

Finalmente, es importante notar que, si bien los modos  $\pm\mathbf{Q}$  se encuentran gapeados en  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$ , hemos mostrado en la figura 6.1.a que el factor de estructura estático posee un pico de Bragg en estos mismos vectores de onda, lo cual indica que se produce dispersión elástica de neutrones con  $\mathbf{k} = \pm\mathbf{Q}$ . Desde luego, estos modos cero son recuperados en el factor de estructura dinámico total  $S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega)$  a través de las componentes  $S^{xx}(\mathbf{k}, \omega)$  y

$S^{yy}(\mathbf{k}, \omega)$  del mismo<sup>3</sup>. En la figura 6.7.a puede verse, para  $\Delta = 0.1$ , el factor de estructura dinámico  $S^{xx}(\mathbf{k}, \omega)$ , mientras que en la figura 6.7.b puede verse el factor de estructura dinámico total  $S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega)$ . Éste último es la cantidad que se mide en los experimentos de

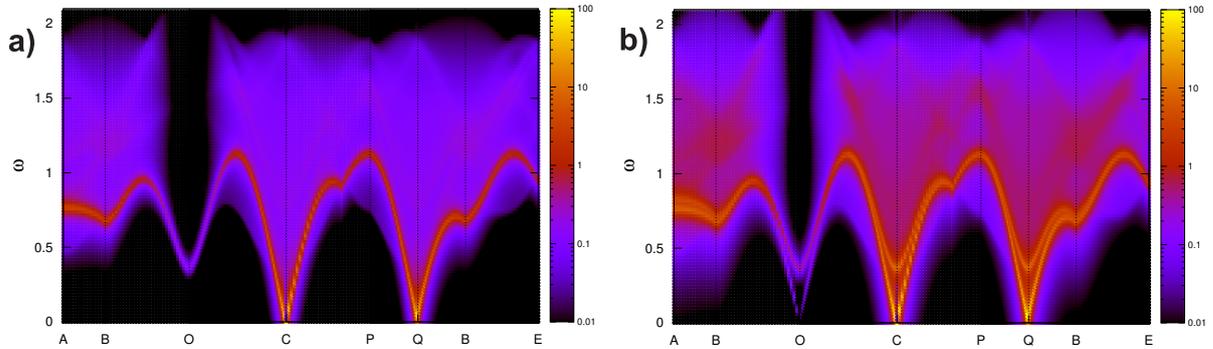


Fig. 6.7: **a)** Factor de estructura dinámico  $S^{xx}(\mathbf{k}, \omega)$  y **b)** Factor de estructura dinámico total  $S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega)$ , calculados en la trayectoria  $ABOCPQBE$  con RSBMFT, para anisotropía  $\Delta = 0.10$ .

dispersión inelástica de neutrones no polarizados. En la figura 6.8 se muestra  $S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega)$  para los casos con  $J_2 = 0.05$  y  $J_2 = 0.15$  ( $\Delta = 0.1$ ), donde puede verse de manera más

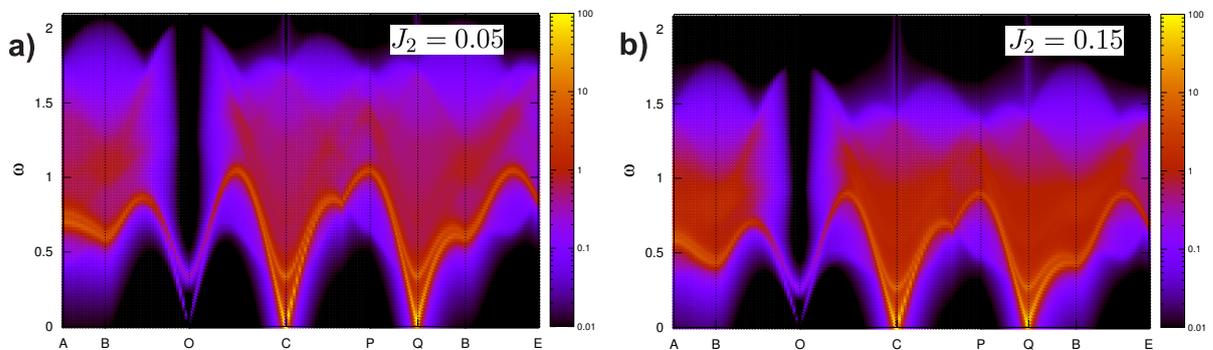


Fig. 6.8: Factor de estructura dinámico total  $S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega)$ , para  $\Delta = 0.10$ , con interacciones a segundos vecinos **a)**  $J_2 = 0.05$  y **b)**  $J_2 = 0.15$ .

marcada la transferencia de peso espectral hacia altas energías que provoca el incorporar interacciones a segundos vecinos.

<sup>3</sup> Es importante aclarar que estos modos cero que aparecen en  $S^{xx}(\mathbf{k}, \omega)$  y  $S^{yy}(\mathbf{k}, \omega)$  en  $\pm\mathbf{Q}$  no son modos de Goldstone, ya que representan excitaciones longitudinales en el plano  $x-y$  y no están asociados a la ruptura de laguna simetría continua.

### 6.3.5. Ligadura de espines

De manera similar a lo mostrado en la sección 4.2.4 del capítulo 4, en la figura 6.9.b puede verse el valor de la interacción de primer orden perturbativo  $v_{\text{int}}$  entre los dos espines que conforman la dispersión física reconstruida  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ , a lo largo de la trayectoria  $OCBO$  y para los valores de anisotropía  $\Delta = 0$  y 0.1. La figura 6.9.a muestra el factor de estructura dinámico  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  calculado con RSBMFT para  $\Delta = 0.10$ . Puede observarse

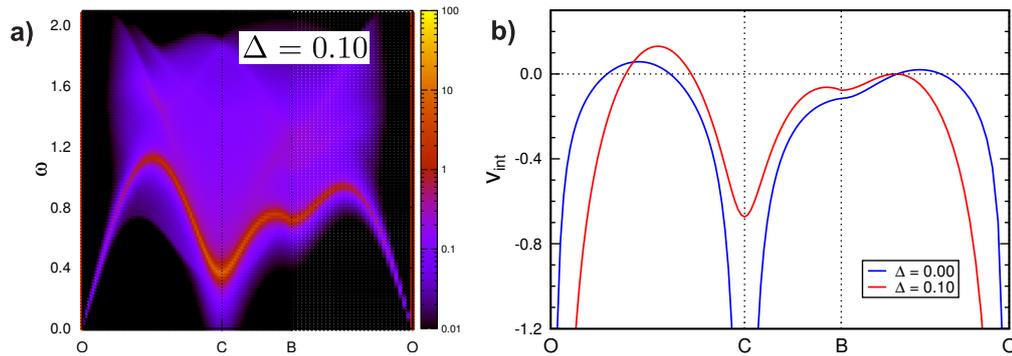


Fig. 6.9: **a)** Factor de estructura dinámico  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  sobre la trayectoria  $OCBO$ . **b)** Interacción  $v_{\text{int}}$  entre los dos espines que conforman la excitación magnónica  $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ .

aquí que en las vecindades de  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  el caso  $XXZ$  liga más los espines que el caso isotrópico, lo cual es físicamente esperable ya que hemos visto que el incremento de anisotropía  $\Delta$  robustece el orden magnético de Néel  $120^\circ$  sobre el plano  $x - y$ . Sin embargo lo más interesante es que al prender la anisotropía los espines resultan menos ligados en los tramos donde el continuo a altas energías resulta más intenso, como por ejemplo en el punto medio del tramo  $O - C$  y en las cercanías del punto  $B$ . Para ver que el continuo

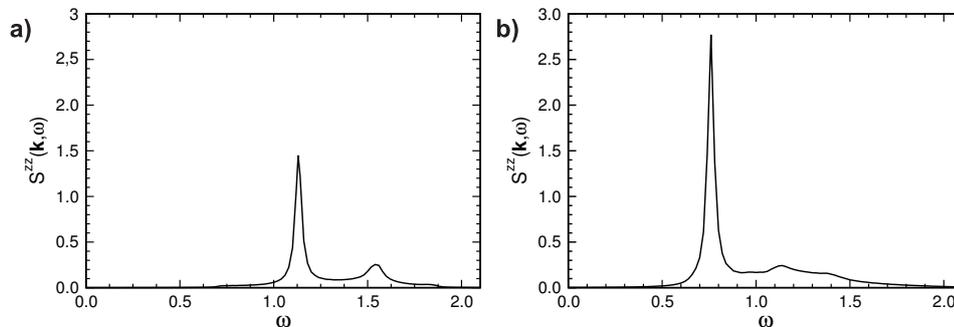


Fig. 6.10: Factor de estructura dinámico  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  para los vectores de onda ubicados **a)** en el punto medio del tramo  $O - C$  y **b)** un punto cercano a  $B$  en el tramo  $C - B$ .

es intenso en esos puntos hemos graficado en las figuras 6.10 dos cortes de la figura 6.9.a,

uno en el punto intermedio del tramo  $O - C$  (a) y otro en un punto cercano a  $B$  dentro del tramo  $C - B$  (b).

Este análisis nos permite conjeturar que existe una correlación entre la transferencia de peso espectral hacia altas energías y la eventual ligadura de espinones una vez que se vaya más allá de la aproximación de campo medio.

## 6.4. Conclusiones

Hemos investigado el modelo de Heisenberg triangular anisotrópico  $XXZ$  desde una formulación de espinones bosónicos, extendiendo la teoría de campo medio de bosones de Schwinger “reconstruida” (RSBMFT) que hemos desarrollado en el capítulo 4 para el caso isotrópico. Para realizar esta tarea hemos propuesto un esquema de cuatro operadores,  $\hat{A}_{ij}$ ,  $\hat{B}_{ij}$ ,  $\hat{C}_{ij}$  y  $\hat{D}_{ij}$ , que permiten mantener la simetrías del hamiltoniano original luego de realizar el desacople de campo medio.

Hemos encontrado que para toda anisotropía se establece un orden de Néel de  $120^\circ$  sobre el plano  $x - y$ , y los valores de magnetización obtenidos resultan muy similares a la teoría convencional de ondas de espín (figura 6.1). Hemos encontrado también que la dispersión reconstruida para el caso  $XY$  coincide razonablemente con el resultado de LSWT+1/ $S$  [114]. Sería interesante poder comparar nuestros resultados para valores intermedios de anisotropía con resultados de LSWT+1/ $S$ , pero estos últimos no se encuentran actualmente disponibles en la literatura.

También hemos calculado el  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  para distintos valores de anisotropía  $\Delta$  encontrando, como es de esperar, la apertura de un gap en los modos  $\pm\mathbf{Q}$ , el cual se interpreta como la energía necesaria para rotar rígidamente el orden magnético fuera del plano  $x - y$ .

Principalmente hemos encontrado que la incorporación de interacciones a segundos vecinos provoca una transferencia de peso espectral desde las excitaciones singulares de bajas energías hacia el continuo de dos espinones de mayores energías. Además, hemos podido estimar de nuestros resultados que existe una correlación entre los sectores de la ZB donde  $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$  posee un continuo con mayor peso espectral y una eventual reducción en la ligadura de los espinones que conforman las señales magnónicas.

Si bien todos estos cálculos por separado son preliminares, creemos que RSBMFT resulta una herramienta útil a la hora de analizar cualitativamente espectros de excitaciones a fin de estimar si ocurre, o no, fraccionalización de las excitaciones magnónicas.

El camino correcto sería el de contrastar estos resultados, junto al espectro calculado con una teoría de magnones interactuantes, con los resultados experimentales de dispersión inelástica de neutrones, como el recientemente medido en el compuesto  $Ba_3CoSb_2O_9$  [49].

## 7. CONCLUSIONES GENERALES Y PERSPECTIVAS

A lo largo de esta tesis hemos investigado distintos modelos de antiferromagnetos (AF) bidimensionales frustrados utilizando la teoría de campo medio de bosones de Schwinger. Esta teoría provee una formulación invariante  $SU(2)$  lo que permite satisfacer tanto el teorema de Lieb-Mattis como el teorema de Mermin-Wagner, mientras que también puede tratar fases ordenadas a través de una condensación de bosones. Otra característica importante es que los elementos constituyentes de esta teoría son espinones bosónicos de espín- $\frac{1}{2}$  lo cual permite investigar posibles escenarios de fraccionalización de las excitaciones de espín, algo que se cree que puede llegar a ocurrir en AF  $2D$  frustrados. Además, puede ser formulada en el contexto de una teoría  $large-\mathcal{N}$ , permitiendo entonces realizar cálculos de correcciones  $1/\mathcal{N}$  sobre las soluciones de campo medio.

En particular hemos utilizado para el desacople de campo medio un esquema de dos operadores de *link*  $\hat{A}_{ij}$  y  $\hat{B}_{ij}$  con estructura singlete. La ventaja de este esquema es que tiene en cuenta la competencia natural entre correlaciones ferro- y antiferromagnéticas que existe en los sistemas magnéticos frustrados. Además, Flint y Coleman [42] han justificado la elección del mismo al demostrar que este esquema es el único que mantiene las simetrías de rotación e inversión temporal del espín en el límite  $large-\mathcal{N}$ .

Desde el punto de vista técnico la limitación más importante de esta teoría resulta ser la relajación de la condición local del número de bosones de Schwinger por sitio, lo cual amplía el espacio de Hilbert incorporando estados no físicos. Al respecto, hemos sido capaces de distinguir entre las excitaciones físicas y aquellas espurias que provienen de la relajación mencionada, formulando así un campo medio de bosones de Schwinger “reconstruido” (RSBMF). De esta manera hemos logrado reproducir en el AF triangular el espectro de excitaciones de espín-1 predicho por el método exacto de expansiones en serie [45, 77]. Esto nos permitió además calcular valores muy confiables para la entropía, susceptibilidad uniforme y calor específico. En particular encontramos que los altos valores

de entropía a  $T \simeq 0.3 J$  respecto de las predicciones de  $NL\sigma M$  se deben a la contribución de las excitaciones rotónicas, pudiéndose identificar estas últimas con fluctuaciones AF colineales.

Extendiendo este esquema al modelo anisotrópico  $XXZ$  hemos encontrado una transferencia de peso espectral hacia altas energías al incorporar interacciones a segundos vecinos. Este resultado preliminar puede resultar útil en la interpretación de los experimentos de dispersión inelástica de neutrones realizados sobre el compuesto  $Ba_3CoSb_2O_9$  [49]. Creemos que una comparación con una teoría de magnones interactuantes resultaría muy útil para discernir qué tipo de excitaciones elementales (espinónicas o magnónicas) entran en juego en el modelo  $XXZ$ .

También hemos investigado el diagrama de fases cuántico a  $T = 0$  y a temperatura finita del modelo  $J_1 - J_3$  sobre la red cuadrada. El resultado más relevante encontrado ha sido la ruptura de una simetría discreta a temperaturas similares a las predichas con Monte Carlo clásico, [44] así como también la aparición para  $J_3/J_1 > 1$  de una nueva fase de cuatro subredes de Néel desacopladas.

Si bien con RSBMF removemos “a mano” las excitaciones no físicas de mayor peso espectral, éstas no abarcan el total de las excitaciones espurias del espectro, por lo que lejos se está de haber satisfecho la condición local de número de bosones. Además, el problema de la relajación de la condición sigue presente en el cálculo del estado fundamental. Es así que lograr la implementación exacta de la restricción local del número de bosones sigue siendo necesaria para poder mejorar los resultados obtenidos con campo medio. Desde el lado numérico la implementación exacta resulta limitada, como lo muestran los cálculos realizados mediante Monte Carlo variacional donde el tamaño de red máximo alcanzado es  $6 \times 6$ . Desde el lado teórico se han calculado correcciones gaussianas sobre el campo medio previamente en nuestro grupo, [66] encontrando una mejora en los valores de varias propiedades estáticas respecto a resultados exactos. Por lo tanto, resulta una perspectiva interesante poder realizar cálculos de este último tipo sobre las cantidades dinámicas y termodinámicas que hemos calculado a lo largo de la tesis.

Si bien no hemos presentado los resultados en esta tesis, hemos investigado también la red triangular espacialmente anisotrópica que describe al compuesto  $Cs_2CuCl_4$ , [38] no encontrando indicios del fenómeno de “reducción dimensional”. Recientemente se ha propuesto para este compuesto bidimensional que el efecto de la frustración puede reducir efectivamente la dimensión a  $1D$  [135]. Por lo tanto resultaría muy interesante contar

con resultados de la implementación de DMRG para este modelo, ya que se sabe que esta técnica provee resultados muy confiables de propiedades estáticas y dinámicas en sistemas cuasi-unidimensionales [136].

Finalmente, otra línea de trabajo futuro resulta la implementación de la teoría de campo medio de bosones de Schwinger con valores complejos de los parámetros de campo medio  $A_\delta$  y  $B_\delta$ , lo cual puede relacionarse a la existencia de estados magnéticos no coplanares o líquidos de espines quirales. Combinando la simetría de *gauge* junto con las simetrías microscópicas del hamiltoniano, es también posible realizar una clasificación de distintas soluciones no triviales que no rompen ninguna simetría original del hamiltoniano. Un estudio detallado de estas soluciones dentro del contexto de Grupo de Simetrías Proyectivas (PSG) puede verse en Ref. [137, 99].

## Apéndice A

# DIAGONALIZACIÓN PARAUNITARIA DEL HAMILTONIANO BOSÓNICO

En este apéndice mostramos los detalles de la diagonalización de los hamiltonianos de Heisenberg isotrópico y  $XXZ$  luego de efectuar la aproximación de campo medio. Un estudio más general sobre la diagonalización de hamiltonianos bosónicos cuadráticos puede encontrarse en Ref. [138].

Expresados en los bosones de Schwinger, luego de realizada la aproximación de campo medio sobre los operadores de *link*, ambos hamiltonianos pueden escribirse de la siguiente forma:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \left[ \Gamma_{\mathbf{k}}^{BC\lambda} \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) - \Gamma_{\mathbf{k}}^{AD} \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \right] - 2S\lambda N - E_{\text{MF}} , \quad (\text{A.1})$$

donde  $\Gamma_{\mathbf{k}}^{BC\lambda}$  y  $\Gamma_{\mathbf{k}}^{AD}$  son, para el hamiltoniano de Heisenberg isotrópico,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{k}}^{BC\lambda} &= \gamma_{\mathbf{k}}^B + \lambda \\ \Gamma_{\mathbf{k}}^{AD} &= \gamma_{\mathbf{k}}^A , \end{aligned}$$

mientras que para el hamiltoniano anisotrópico  $XXZ$ ,

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{k}}^{BC\lambda} &= \left( 1 - \frac{\Delta}{2} \right) \gamma_{\mathbf{k}}^B - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^C + \lambda \\ \Gamma_{\mathbf{k}}^{AD} &= \left( 1 - \frac{\Delta}{2} \right) \gamma_{\mathbf{k}}^A - \frac{\Delta}{2} \gamma_{\mathbf{k}}^D , \end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned}\gamma_{\mathbf{k}}^A &= \frac{1}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} A_{\delta} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}) \\ \gamma_{\mathbf{k}}^B &= \frac{1}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} B_{\delta} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}) \\ \gamma_{\mathbf{k}}^C &= \frac{1}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} C_{\delta} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}) \\ \gamma_{\mathbf{k}}^D &= \frac{1}{2} \sum_{\delta} J_{\delta} D_{\delta} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\delta}),\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}A_{\delta} &= \frac{\langle \hat{A}_{ij} \rangle}{\imath}, & B_{\delta} &= \langle \hat{B}_{ij} \rangle \\ C_{\delta} &= \frac{\langle \hat{C}_{ij} \rangle}{\imath}, & D_{\delta} &= \langle \hat{D}_{ij} \rangle.\end{aligned}$$

Cualquier hamiltoniano que es cuadrático en operadores bosónicos puede expresarse en forma matricial. En nuestro caso resulta

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}} - E_{\text{MF}} - (2S + 1)\lambda N, \quad (\text{A.2})$$

donde  $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}$  es el vector columna cuyas componentes son los operadores bosónicos y  $\mathcal{A}_{\mathbf{k}}$  es la llamada matriz dinámica del hamiltoniano,

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{A}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\mathbf{k}}^{BC\lambda} & -\Gamma_{\mathbf{k}}^{AD} \\ -\Gamma_{\mathbf{k}}^{AD} & \Gamma_{\mathbf{k}}^{BC\lambda} \end{pmatrix}.$$

La matriz dinámica en el caso particular nuestro es real, pero de manera general es hermítica, en cuyo caso  $-\Gamma_{\mathbf{k}}^{AD}$  es una cantidad compleja y en la posición de abajo a la izquierda resulta el elemento conjugado  $-(\Gamma_{\mathbf{k}}^{AD})^*$ .

Lo que debemos hacer entonces es encontrar una transformación  $\mathcal{U}$ ,

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}} = \mathcal{U} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}},$$

que convierta los bosones  $\hat{b}$  en unos nuevos bosones

$$\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

tal que el hamiltoniano sea diagonal en este nuevo vector, es decir,

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}} = \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}$$

con  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}$  la matriz diagonal buscada,

$$\mathcal{D}_{\mathbf{k}} = \mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{U}. \quad (\text{A.3})$$

Ahora bien,  $\mathcal{U}$  transforma los bosones en unos nuevos bosones, por lo que debe conservar su regla de conmutación. Esto se traduce en que  $\mathcal{U}$  no es una transformación unitaria (donde  $\mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U}^\dagger$ ) sino que es una transformación *paraunitaria*, donde  $\mathcal{U}^{-1} \neq \mathcal{U}^\dagger$ . Consecuentemente, la operación  $\mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{U}$  no es una diagonalización normal de la matriz  $\mathcal{A}_{\mathbf{k}}$ , y por lo tanto no podemos resolverlo de la manera usual. Para poder resolver la ecuación (A.3) debemos diagonalizar paraunitariamente.

Introduzcamos primero la matriz  $\mathcal{S}$ , responsable de la métrica “para”,

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Fácilmente puede verificarse que  $\mathcal{S}^2 = \mathcal{I}$ , por lo que  $\mathcal{S}^\dagger = \mathcal{S}^{-1} = \mathcal{S}$ . La matriz  $\mathcal{U}$  de una transformación paraunitaria satisface que,

$$\mathcal{U}^{-1} = \mathcal{S} \cdot \mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{S} \quad (\text{A.4})$$

y trabajando un poco,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}} &= \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{U} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}} \\ &= \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathcal{S}^2 \cdot \mathcal{U}^\dagger \cdot \mathcal{S}^2 \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{U} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}} \\ &= \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathcal{S} \cdot \mathcal{U}^{-1} \cdot \mathcal{S} \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{U} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}} \\ &= \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathcal{S} \cdot \mathcal{E}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{k}}, \end{aligned}$$

donde puede verse que  $\mathcal{U}$  transforma la matriz  $\mathcal{S} \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}}$  en la matriz  $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$ , que también es diagonal, dado que

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = \mathcal{S} \cdot \mathcal{D}_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A.5})$$

Por lo tanto, podemos decir que  $\mathcal{U}$  es la transformación paraunitaria que diagonaliza la matriz  $\mathcal{S} \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}}$ . Entonces, para conocer la matriz  $\mathcal{U}$  debemos diagonalizar de manera usual la matriz  $\mathcal{S} \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}}$  mediante

$$\det(\mathcal{S} \cdot \mathcal{A}_{\mathbf{k}} - \omega \mathcal{I}) = 0, \quad (\text{A.6})$$

de donde obtendremos  $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$  y por tanto  $\mathcal{D}_{\mathbf{k}}$ .

Por último, a la hora de buscar los autovectores y normalizarlos, debemos tener cuidado en que ahora estos poseen una norma con métrica “para”,

$$\|\alpha_{\mathbf{k}}\| = \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathcal{S} \cdot \alpha_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A.7})$$

Llevando adelante en el hamiltoniano (A.1) los pasos hasta aquí descritos, resulta

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad y \quad \mathcal{D}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & \omega_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

donde

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}^{BC\lambda}}{\omega_{\mathbf{k}}} + 1 \right)} \\ v_{\mathbf{k}} &= \text{signo} \{ \Gamma_{\mathbf{k}}^{AD} \} \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}^{BC\lambda}}{\omega_{\mathbf{k}}} - 1 \right)} \\ \omega_{\mathbf{k}} &= \sqrt{(\Gamma_{\mathbf{k}}^{BC\lambda})^2 - (\Gamma_{\mathbf{k}}^{AD})^2}. \end{aligned}$$

## Apéndice B

# FORMULACIÓN DE LA INTEGRAL FUNCIONAL Y SOLUCIÓN DE PUNTO DE ENSILLADURA

El fin de este apéndice es mostrar que la solución de punto de ensilladura que se obtiene de formular la función de partición como una integral funcional es equivalente a la teoría de campo medio de los bosones de Schwinger que hemos utilizado a lo largo de la tesis. Un cálculo más detallado, así como correcciones en  $1/\mathcal{N}$ , pueden encontrarse en Ref. [139]

### B.1. Bosones de Schwinger en la formulación de la integral funcional

La función de partición del hamiltoniano de Heisenberg

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j ,$$

puede escribirse como una integral funcional en estados coherentes de bosones de Schwinger, en la cual los operadores son reemplazados por variables complejas [140]:

$$Z = \int [\mathcal{D}\bar{b}\mathcal{D}b] e^{-\int_0^\beta d\tau \mathcal{L}(\tau)} \prod_{i\tau} \delta(\Sigma_\sigma \bar{b}_{i\sigma}^\tau b_{i\sigma}^\tau - 2S) ,^1 \quad (\text{B.1})$$

donde  $\tau$  es el tiempo imaginario,  $\beta$  es la temperatura inversa y el lagrangiano es

$$\mathcal{L}(\tau) = \sum_{i\sigma} \bar{b}_{i\sigma}^\tau \partial_\tau b_{i\sigma}^\tau + H(\tau) . \quad (\text{B.2})$$

---

<sup>1</sup> Estamos tomando aquí el límite continuo en la dirección de Matsubara (temporal) de la integral discreta.

La medida viene dada por  $[\mathcal{D}\bar{b}\mathcal{D}b] = \prod_{i\sigma\tau} \frac{d\bar{b}_{i\sigma}^\tau db_{i\sigma}^\tau}{2\pi i}$  con  $\bar{b}_{i\sigma}^\tau$  la variable compleja conjugada de  $b_{i\sigma}^\tau$ . Las variables complejas que representan a los bosones cumplen condiciones de contorno periódicas en la dirección de Matsubara  $b_{i\sigma}^\beta = b_{i\sigma}^0$  [140]. Escribiendo las funciones deltas, que restringen el número de bosones por sitio a  $2S$ , en su representación de Fourier, resulta

$$Z = \int [\mathcal{D}\bar{b}\mathcal{D}b][\mathcal{D}\lambda] e^{-\int_0^\beta d\tau \mathcal{L}'(\tau)}, \quad (\text{B.3})$$

con

$$\mathcal{L}'(\tau) = \mathcal{L}(\tau) + i \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau' \lambda_i^\tau (\sum_\sigma \bar{b}_{i\sigma}^{\tau'} b_{i\sigma}^{\tau'} - 2S)$$

y la medida  $[\mathcal{D}\lambda] \equiv \prod_{i\tau} \frac{d\lambda_i^\tau}{2\pi}$ .

En el lagrangiano (B.2) el hamiltoniano de Heisenberg se escribe

$$H(\tau) = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (\bar{B}_{ij}^\tau B_{ij}^\tau - \bar{A}_{ij}^\tau A_{ij}^\tau),$$

con los parámetros de *link* ferro- y antiferromagnético

$$\begin{aligned} \bar{B}_{ij}^\tau &= \frac{1}{2} \sum_\sigma \bar{b}_{i\sigma}^\tau b_{j\sigma}^\tau, \\ A_{ij}^\tau &= \frac{1}{2} \sum_\sigma \sigma b_{i\sigma}^\tau b_{j-\sigma}^\tau. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Este hamiltoniano es cuártico en las variables de integración. Utilizamos entonces una transformación de Hubbard-Stratonovich (HS) para efectuar el desacople de ese término. Esta transformación consiste simplemente en el uso de la integral gaussiana

$$\int \left[ \prod_i \frac{d\bar{W}_i dW_i}{2\pi i} \right] e^{-\bar{W}_i \mathcal{H}_{ij} W_j - \bar{\eta}_i W_i - \eta_i \bar{W}_i} = e^{\bar{\eta}_i \mathcal{H}_{ij} \eta_i} \det \mathcal{H}, \quad (\text{B.5})$$

donde la matriz  $\mathcal{H}$  tiene su parte hermitiana definida positiva. De esta manera el hamiltoniano puede escribirse como una integral sobre los campos complejos de Hubbard-Stratonovich  $W^{(\tau)}(r = A, B)$ :

$$e^{-\int_0^\beta d\tau H(\tau)} = \int [\mathcal{D}\bar{W}\mathcal{D}W] e^{-\int_0^\beta d\tau [\Omega^{(HS)}(\tau) + \Omega^{(bos)}(\tau)]},$$

donde

$$\Omega^{(HS)}(\tau) = \sum_{\langle ij \rangle r} J_{ij} \overline{W}_{ij}^{(r)\tau} W_{ij}^{(r)\tau}$$

y

$$\Omega^{(bos)}(\tau) = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left( W_{ij}^{(B)\tau} \overline{B}_{ij}^\tau - \overline{W}_{ij}^{(B)\tau} B_{ij}^\tau - W_{ij}^{(A)\tau} \overline{A}_{ij}^\tau - \overline{W}_{ij}^{(A)\tau} A_{ij}^\tau \right) .$$

La medida está dada por

$$[\mathcal{D}\overline{W}\mathcal{D}W] = \prod_{\langle ij \rangle \tau r} \frac{d\overline{W}_{ij}^{(r)\tau} dW_{ij}^{(r)\tau}}{2\pi i / J_{ij}} .$$

En estas expresiones  $\overline{W}^{(r)}$  es el campo complejo conjugado de  $W^{(r)}$ . Ahora podemos reescribir la función de partición (B.3) en la forma

$$Z = \int [\mathcal{D}\overline{W}\mathcal{D}W][\mathcal{D}\lambda] e^{-\int_0^\beta d\tau [\Omega^{(HS)}(\tau) - i2S\lambda_i^\tau]} Z_{bos}(\overline{W}, W, \lambda) ,$$

$$Z_{bos}(\overline{W}, W, \lambda) = \int [\mathcal{D}\vec{b}\mathcal{D}b] e^{-S_{bos}(\overline{W}, W, \lambda)} . \quad (\text{B.6})$$

Utilizando (B.4) para los parámetros  $A$  y  $B$  podemos escribir  $S_{bos}(\overline{W}, W, \lambda)$  de la forma

$$S_{bos} = \int_0^\beta d\tau \sum_{\langle ij \rangle} \vec{b}_i^{\tau\dagger} \cdot \mathcal{M}_{ij}^\tau \cdot \vec{b}_j^\tau ,$$

donde  $\vec{b}_i^{\tau\dagger} = (\overline{b}_{i\uparrow}^\tau, b_{i\downarrow}^\tau)$  y los elementos de la matriz dinámica  $\mathcal{M}$  están dados por

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{ij}^{11} &= (\partial_\tau + i\lambda_i) \delta_{ij} + \frac{J_{ij}}{2} (W_{ij}^{(B)} - \overline{W}_{ij}^{(B)}) , \\ \mathcal{M}_{ij}^{12} &= \frac{J_{ij}}{2} (W_{ji}^{(A)} - W_{ij}^{(A)}) , \\ \mathcal{M}_{ij}^{21} &= \overline{\mathcal{M}_{ji}^{12}} , \quad \mathcal{M}_{ij}^{22} = -\overline{\mathcal{M}_{ij}^{11}} . \end{aligned}$$

Resulta así una acción (cuadrática) correspondiente a bosones no interactivos entre sí, pero acoplados a campos de Hubbard-Stratonovich fluctuantes. Utilizando la integral gaussiana (B.5) podemos eliminar formalmente los bosones de Schwinger en (B.6):

$$Z_{bos}(\overline{W}, W, \lambda) = \det \mathcal{M}^{-1}(\overline{W}, W, \lambda) .$$

Luego de integrar los bosones nos queda un problema de campos interactivos  $W^{(A)}$ ,  $W^{(B)}$

y  $\lambda$ , cuya función de partición se escribe

$$Z = \int [\mathcal{D}\bar{W}\mathcal{D}W][\mathcal{D}\lambda] e^{-S_{ef}} , \quad (\text{B.7})$$

y su acción efectiva es

$$S_{ef} = \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{\langle ij \rangle_r} \bar{W}_{ij}^{(r)\tau} W_{ij}^{(r)\tau} - i2S \sum_i \lambda_i^\tau \right] + \beta \mathcal{F}_{bos}(\bar{W}, W, \lambda) .$$

De esta manera  $\mathcal{F}_{bos}(\bar{W}, W, \lambda)$  resulta la energía libre de un gas de bosones acoplados a la configuración de campos  $\bar{W}, W$ , con potencial químico  $\lambda$ :

$$\mathcal{F}_{bos}(\bar{W}, W, \lambda) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{bos}(\bar{W}, W, \lambda) = \frac{1}{\beta} Tr \ln \mathcal{M}(\bar{W}, W, \lambda) . \quad (\text{B.8})$$

donde hemos utilizado la propiedad de las matrices  $\ln \det \mathcal{M} = Tr \ln \mathcal{M}$ .

Para preservar la invariancia de gauge local de los bosones de Schwinger

$$b_{i\sigma}^\tau \rightarrow b_{i\sigma}^\tau e^{i\theta_i^\tau} ,$$

en la acción efectiva  $S_{ef}$  es necesario realizar las siguientes transformaciones de los campos de HS y del multiplicador de Lagrange:

$$\begin{aligned} W_{ij}^{(r)\tau} &\rightarrow W_{ij}^{(r)\tau} e^{i(\theta_i^\tau \pm \theta_j^\tau)} , \\ \lambda_i^\tau &\rightarrow \lambda_i^\tau - \partial_\tau \theta_i^\tau , \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

donde el signo  $+$ ( $-$ ) corresponde a  $r = A(B)$ . Además, como hemos visto, los parámetros  $A$  y  $B$  son singletes de  $SU(2)$  y, por lo tanto, la acción efectiva resulta también invariante ante rotaciones de los espinores bosónicos originales.

### **B.1.1. Aproximación de punto de ensilladura**

Hasta aquí la expresión de la función de partición es exacta, pero las integraciones en los campos (de HS y  $\lambda$ ) involucran un complicado peso no-gaussiano  $\exp(-S_{ef})$ . Para seguir adelante debe hacerse uso de la expansión de la acción efectiva alrededor del punto de ensilladura (*saddle-point* o SP). La justificación matemática de tal procedimiento se da en el contexto de las teorías *large- $\mathcal{N}$*  [141], donde  $\mathcal{N}$  es el parámetro grande que controla

la expansión alrededor del SP. Si bien en estos cálculos el parámetro  $\mathcal{N}$  no está explícito, puede verse fácilmente que es equivalente a un desarrollo a orden  $1/\mathcal{N}$ .

Los valores de los campos en SP se obtienen de las ecuaciones extremales

$$\frac{\partial S_{ef}}{\partial \vec{\phi}} \Big|_{\text{sp}} = \vec{\psi}_{\text{sp}}^\dagger + \text{Tr}(\mathcal{G}_{\text{sp}} \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \vec{\phi}} \Big|_{\text{sp}}) = 0, \quad (\text{B.10})$$

donde utilizamos la notación  $\vec{\phi}^\dagger \equiv (\overline{W}, W, \lambda)$ ,  $\vec{\psi}_{\text{sp}}^\dagger = (J\overline{W}_{\text{sp}}, JW_{\text{sp}}, -2Si)$ , y  $\mathcal{G}_{\text{sp}} = \mathcal{M}_{\text{sp}}^{-1}$  es la función de Green bosónica a orden SP.

Utilizando las expresiones (B.4) de los parámetros  $A$  y  $B$  podemos reescribir (B.10), resultando las siguientes ecuaciones de punto de ensilladura:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_{ef}}{\partial \overline{W}_{ij}^{(A)\tau}} &= J_{ij}(W_{ij}^{(A)\tau} - \langle A_{ij}^\tau \rangle_{\text{sp}}) = 0, \\ \frac{\partial S_{ef}}{\partial W_{ij}^{(A)\tau}} &= J_{ij}(\overline{W}_{ij}^{(A)\tau} - \langle \overline{A}_{ij}^\tau \rangle_{\text{sp}}) = 0, \\ \frac{\partial S_{ef}}{\partial \overline{W}_{ij}^{(B)\tau}} &= J_{ij}(W_{ij}^{(B)\tau} - \langle B_{ij}^\tau \rangle_{\text{sp}}) = 0, \\ \frac{\partial S_{ef}}{\partial W_{ij}^{(B)\tau}} &= J_{ij}(\overline{W}_{ij}^{(B)\tau} + \langle \overline{B}_{ij}^\tau \rangle_{\text{sp}}) = 0, \\ \frac{\partial S_{ef}}{\partial \lambda_i^\tau} &= i(-2S + \langle \sum_\sigma \overline{b}_{i\sigma}^\tau b_{i\sigma}^\tau \rangle_{\text{sp}}) = 0, \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

donde el valor de expectación de un operador  $\mathcal{O}$  evaluado en SP se escribe como

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\text{sp}} = \frac{1}{Z_{\text{bos}}} \int [\mathcal{D}\overline{b}\mathcal{D}b] \mathcal{O}(\overline{b}, b, \lambda) e^{-\vec{b}^\dagger \cdot \mathcal{M}_{\text{sp}} \cdot \vec{b}}.$$

Considerando los  $A$  y  $B$  reales buscaremos una solución de SP homogénea y estática, es decir,  $\overline{W}_{\text{sp}}$ ,  $W_{\text{sp}}$  dependientes sólo de la diferencia  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$ , y  $\lambda$  independiente de  $i$  y  $\tau$ . Esta condición sobre  $\lambda$  equivale a relajar la restricción local en el número de bosones por una restricción global sobre toda la red. Pasamos al espacio de Fourier mediante la siguiente transformación para los bosones:

$$b_{i\sigma}^\tau = \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_k b_{k\sigma} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i - \omega_n \tau)}, \quad (k \equiv \mathbf{k}, \omega_n), \quad (\text{B.12})$$

Las frecuencias de Matsubara bosónicas están determinadas por las condiciones de con-

torno periódicas en la dirección temporal y vienen dadas por  $\omega_n = 2\pi n/\beta$ .

Las transformaciones de los campos de HS y  $\lambda$  son las siguientes:

$$\begin{aligned} W_{iR}^\tau &= \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_k W_{kR} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i - \omega_n\tau)}, \\ \lambda_i^\tau &= \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_k \lambda_k e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i - \omega_n\tau)}, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

donde reemplazamos  $W_{ij}^\tau$  por  $W_{iR}^\tau$ .

De esta manera en el espacio  $k$  la acción  $S_{bos}$  resulta

$$S_{bos} = \sum_k \vec{b}_k^\dagger \cdot \mathcal{M}_{kk'} \cdot \vec{b}_{k'}, \quad (\text{B.14})$$

donde el espinor  $\vec{b}_k^\dagger = (\mathbf{b}_{k\uparrow}^\dagger, \mathbf{b}_{-k\downarrow})$  y los elementos de la matriz dinámica  $\mathcal{M}$  están dados por

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{kk'}^{11} &= -i\omega\delta_{kk'} + \frac{i}{2\sqrt{N\beta}}\lambda_{kk'} + \frac{1}{2\sqrt{N\beta}} \sum_{\mathbf{R}} J_R [W_{k-k',R}^{(B)} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} - \overline{W}_{k'-k,R}^{(B)} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}], \\ \mathcal{M}_{kk'}^{12} &= \frac{1}{2\sqrt{N\beta}} \sum_{\mathbf{R}} J_R W_{k-k',R}^{(A)} (e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}), \\ \mathcal{M}_{kk'}^{21} &= \frac{1}{2\sqrt{N\beta}} \sum_{\mathbf{R}} J_R \overline{W}_{k'-k,R}^{(A)} (e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}), \\ \mathcal{M}_{kk'}^{22} &= i\omega\delta_{kk'} + \frac{i}{2\sqrt{N\beta}}\lambda_{kk'} + \frac{1}{2\sqrt{N\beta}} \sum_{\mathbf{R}} J_R [W_{k-k',R}^{(B)} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}} - \overline{W}_{k'-k,R}^{(B)} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}], \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Debido a que los campos en SP son estáticos y homogéneos, se deduce que las matrices dinámicas, evaluadas en SP, son diagonales en el espacio de momentos y frecuencias. Utilizando las ecuaciones (B.11) obtenemos finalmente:

$$\mathcal{M}_{sp}(k) = \begin{pmatrix} -i\omega + \lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}}^{(B)} & -i\Gamma_{\mathbf{k}}^{(A)} \\ i\overline{\gamma}_{\mathbf{k}}^{(A)} & i\omega + \lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}}^{(B)} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.16})$$

donde hemos efectuado el reemplazo  $\lambda_{\text{sp}} \rightarrow i\lambda_{\text{sp}}$  y utilizado

$$\begin{aligned}\gamma_{\mathbf{k}}^{(B)} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}} J_R B_R \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) , \\ \gamma_{\mathbf{k}}^{(A)} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}} J_R A_R \text{sen}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) ,\end{aligned}$$

con  $A_R = \langle A_{ij}^{\tau} \rangle_{\text{sp}}$  y  $B_R = \langle B_{ij}^{\tau} \rangle_{\text{sp}}$ .

Finalmente, pueden calcularse las ecuaciones autoconsistentes (B.10), resultando

$$B_R = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^{(B)} + \lambda_{\text{sp}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \left[ n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right] \quad (\text{B.17})$$

$$A_R = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^{(A)}}{\omega_{\mathbf{k}}} \text{sen}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \left[ n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right] \quad (\text{B.18})$$

$$S + \frac{1}{2} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^{(B)} + \lambda_{\text{sp}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \left[ n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right] , \quad (\text{B.19})$$

las cuales resultan idénticas a las ecuaciones (2.32) que encontramos en la sección 2.2.4 del capítulo 2.

## Índice de figuras

1.2. Estado RVB . . . . .	14
1.3. Excitaciones espinónicas en $1D$ . . . . .	14
1.4. Excitaciones espinónicas en un RVB . . . . .	15
1.5. Excitaciones espinónicas en un VBS . . . . .	16
1.6. Estado de Néel cuántico como estado de Néel clásico más términos tipo RVB de corto alcance . . . . .	17
1.8. Estado fundamental singlete del sistema de 4 espines. . . . .	23
1.9. Configuración de Néel en las redes cuadrada y triangular . . . . .	23
1.10. Torre de estados de Anderson . . . . .	27
2.1. Interpretación del condensado y fluido normal de los bosones de Schwinger	34
2.2. Espacio de Fock de los bosones de Schwinger . . . . .	37
2.4. Factor de estructura estático $S(\mathbf{k})$ para la red cuadrada . . . . .	48
2.5. Estado fundamental de campo medio como una superposición de coleccio- nes de singletes . . . . .	50
2.6. Estado fundamental de campo medio proyectado sobre el espacio de Hilbert físico . . . . .	51
2.8. Factor de estructura dinámico $S(\mathbf{k}, \omega)$ para la red cuadrada . . . . .	59
2.9. Energía de interacción $v_{\text{int}}$ entre espinones en la red cuadrada . . . . .	64
3.2. Transformación de configuración $(Q, Q)$ en $(Q, -Q)$ . . . . .	69
3.3. Ruptura de simetría $Z_2$ calculada con Monte Carlo clásico en el modelo $J_1 - J_3$ . . . . .	70
3.6. Diagrama de fases magnéticas a $T = 0$ para el modelo $J_1 - J_3$ calculado con SBMFT . . . . .	74
3.7. Magnetización local $m$ para $S = \frac{1}{2}$ en el modelo $J_1 - J_3$ . . . . .	77
3.9. Parámetros de campo medio vs. temperatura en el modelo $J_1 - J_3$ . . . . .	81
3.10. Estructura correspondiente a la fase $(\pi, \pi)_4$ . . . . .	82

3.11. Diagrama de fases magnéticas a temperatura finita para el modelo $J_1 - J_3$ con espín- $\frac{1}{2}$ calculado con SBMFT . . . . .	83
4.3. Factor de estructura dinámico $S(\mathbf{k}, \omega)$ para la red triangular calculado con SBMFT . . . . .	93
4.4. Dispersión física reconstruida $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ calculada con RSBMF . . . . .	94
4.5. Dispersión física reconstruida $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ para diferentes valores de interacción a segundos vecinos $J_2$ . . . . .	95
4.7. Factor de estructura dinámico densidad-densidad $\mathcal{N}(\mathbf{k}, \omega)$ calculado con SBMFT . . . . .	97
4.8. Energía de interacción $v_{\text{int}}$ entre espinones en la red triangular . . . . .	98
4.9. Factor de estructura dinámico $S(\mathbf{k}, \omega)$ “reconstruido” . . . . .	99
4.10. Factor de estructura dinámico $S(\mathbf{k}, \omega)$ calculado con el esquema de un singlete	101
5.2. Dispersión reconstruida vs. temperatura . . . . .	106
5.3. Entropía . . . . .	108
5.5. Susceptibilidad uniforme . . . . .	112
6.1. Factor de estructura estático $S(\mathbf{k})$ y magnetización para el modelo $XXZ$ .	123
6.3. Dispersión reconstruida $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ para el modelo $XXZ$ . . . . .	124
6.5. Factor de estructura dinámico $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$ con anisotropía . . . . .	126
6.6. Factor de estructura dinámico $S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$ con anisotropía e interacción a segundos vecinos . . . . .	127
6.8. Factor de estructura dinámico total $S^{\text{total}}(\mathbf{k}, \omega)$ con anisotropía e interac- ción a segundos vecinos . . . . .	128
6.9. Energía de interacción $v_{\text{int}}$ entre espinones en el modelo $XXZ$ . . . . .	129

## Bibliografía

- [1] P. W. Anderson, “More is different.”, *Science*, **177**, 393 (1972), doi:10.1126/science.177.4047.393.
- [2] P. Coleman, “Many Body Physics: Unfinished Revolution”, *Annales Henri Poincaré*, **4**, 559 (2003), doi:10.1007/s00023-003-0943-9.
- [3] J. H. de Boer & E. J. W. Verwey, “Semi-conductors with partially and with completely filled 3 d -lattice bands”, *Proceedings of the Physical Society*, **49**, 59 (1937), doi:10.1088/0959-5309/49/4S/307.
- [4] N. F. Mott & R. Peierls, “Discussion of the paper by de Boer and Verwey”, *Proceedings of the Physical Society*, **49**, 72 (1937), doi:10.1088/0959-5309/49/4S/308.
- [5] E. Dagotto, “Correlated electrons in high-temperature superconductors”, *Reviews of Modern Physics*, **66**, 763 (1994), doi:10.1103/RevModPhys.66.763.
- [6] P. A. Lee & X.-G. Wen, “Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity”, *Reviews of Modern Physics*, **78**, 17 (2006), doi:10.1103/RevModPhys.78.17.
- [7] K. Takada, H. Sakurai, E. Takayama-Muromachi, F. Izumi, R. A. Dilanian & T. Sasaki, “Superconductivity in two-dimensional CoO<sub>2</sub> layers.”, *Nature*, **422**, 53 (2003), doi:10.1038/nature01450.
- [8] N. P. Ong & R. J. Cava, “Physics. Electronic frustration on a triangular lattice.”, *Science*, **305**, 52 (2004), doi:10.1126/science.1099387.
- [9] B. J. Powell & R. H. McKenzie, “Quantum frustration in organic Mott insulators: from spin liquids to unconventional superconductors”, *Reports on Progress in Physics*, **74**, 056501 (2011), doi:10.1088/0034-4885/74/5/056501.

- 
- [10] G. Misguich & C. Lhuillier, “Two-dimensional quantum antiferromagnets”, in H. T. Diep, editor, “Frustrated Spin Systems”, chapter 5, pp. 229–306 (World Scientific Publishing, Singapore) (**2005**).
- [11] L. Balents, “Spin liquids in frustrated magnets.”, *Nature*, **464**, 199 (**2010**), doi:10.1038/nature08917.
- [12] M. Gutzwiller, “Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals”, *Physical Review Letters*, **10**, 159 (**1963**), doi:10.1103/PhysRevLett.10.159.
- [13] J. Hubbard, “Electron Correlations in Narrow Energy Bands”, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **276**, 238 (**1963**), doi:10.1098/rspa.1963.0204.
- [14] J. Kanamori, “Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals”, *Progress of Theoretical Physics*, **30**, 275 (**1963**), doi:10.1143/PTP.30.275.
- [15] W. Heitler & F. London, “Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik”, *Zeitschrift Für Physik*, **44**, 455 (**1927**), doi:10.1007/BF01397394.
- [16] P. W. Anderson, “Antiferromagnetism. Theory of Superexchange Interaction”, *Physical Review*, **79**, 350 (**1950**), doi:10.1103/PhysRev.79.350.
- [17] L. Hulthén, *Arkiv för matematik, astronomi och fysik A*, **26**, 1 (**1938**).
- [18] W. Marshall, “Antiferromagnetism”, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **232**, 48 (**1955**), doi:10.1098/rspa.1955.0200.
- [19] E. H. Lieb & D. Mattis, “Ordering Energy Levels of Interacting Spin Systems”, *Journal of Mathematical Physics*, **3**, 749 (**1962**), doi:10.1063/1.1724276.
- [20] H. Bethe, “Zur Theorie der Metalle”, *Zeitschrift Für Physik*, **71**, 205 (**1931**), doi:10.1007/BF01341708.
- [21] E. a. Neves & J. Perez, “Long range order in the ground state of two-dimensional antiferromagnets”, *Physics Letters A*, **114**, 331 (**1986**), doi:10.1016/0375-9601(86)90571-2.

- 
- [22] C. Shull & J. Smart, “Detection of Antiferromagnetism by Neutron Diffraction”, *Physical Review*, **76**, 1256 (1949), doi:10.1103/PhysRev.76.1256.2.
- [23] L. Néel, *Annales de Physique*, **17**, 5 (1932).
- [24] P. W. Anderson, “An Approximate Quantum Theory of the Antiferromagnetic Ground State”, *Physical Review*, **86**, 694 (1952), doi:10.1103/PhysRev.86.694.
- [25] J. Goldstone, “Field theories with « Superconductor » solutions”, *Il Nuovo Cimento*, **19**, 154 (1961), doi:10.1007/BF02812722.
- [26] N. D. Mermin & H. Wagner, “Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models”, *Physical Review Letters*, **17**, 1133 (1966), doi:10.1103/PhysRevLett.17.1133.
- [27] P. W. Anderson, “Resonating valence bonds: A new kind of insulator?”, *Materials Research Bulletin*, **8**, 153 (1973), doi:10.1016/0025-5408(73)90167-0.
- [28] P. W. Anderson, “The Resonating Valence Bond State in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  and Superconductivity.”, *Science*, **235**, 1196 (1987), doi:10.1126/science.235.4793.1196.
- [29] E. Manousakis, “The spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides”, *Reviews of Modern Physics*, **63**, 1 (1991), doi:10.1103/RevModPhys.63.1.
- [30] S. Sachdev, “Quantum magnetism and criticality”, *Nature Physics*, **4**, 173 (2008), doi:10.1038/nphys894.
- [31] L. Faddeev & L. Takhtajan, “What is the spin of a spin wave?”, *Physics Letters A*, **85**, 375 (1981), doi:10.1016/0375-9601(81)90335-2.
- [32] D. A. Tennant, R. A. Cowley & A. M. Tsvelik, “Measurement of the spin-excitation continuum in one-dimensional  $\text{KCuF}_3$  using neutron scattering”, *Physical Review B*, **52**, 13368 (1995), doi:10.1103/PhysRevB.52.13368.
- [33] M. Mourigal, M. Enderle, A. Klöpperpieper, J.-S. Caux, A. Stunault & H. M. Rønnow, “Fractional spinon excitations in the quantum Heisenberg antiferromagnetic chain”, *Nature Physics*, **9**, 435 (2013), doi:10.1038/nphys2652.

- 
- [34] B. Lake, A. M. Tsvelik, S. Notbohm, D. Alan Tennant, T. G. Perring, M. Reehuis, C. Sekar, G. Krabbes & B. Büchner, “Confinement of fractional quantum number particles in a condensed-matter system”, *Nature Physics*, **6**, 50 (2009), doi:10.1038/nphys1462.
- [35] N. Read & S. Sachdev, “Large-N expansion for frustrated quantum antiferromagnets”, *Physical Review Letters*, **66**, 1773 (1991), doi:10.1103/PhysRevLett.66.1773.
- [36] S. Sachdev & N. Read, “Large-N expansion for frustrated and doped quantum antiferromagnets”, *International Journal of Modern Physics B*, **05**, 219 (1991), doi:10.1142/S0217979291000158.
- [37] R. Coldea, D. A. Tennant, A. M. Tsvelik & Z. Tylczynski, “Experimental Realization of a 2D Fractional Quantum Spin Liquid”, *Physical Review Letters*, **86**, 1335 (2001), doi:10.1103/PhysRevLett.86.1335.
- [38] R. Coldea, D. A. Tennant & Z. Tylczynski, “Extended scattering continua characteristic of spin fractionalization in the two-dimensional frustrated quantum magnet Cs<sub>2</sub>CuCl<sub>4</sub> observed by neutron scattering”, *Physical Review B*, **68**, 134424 (2003), doi:10.1103/PhysRevB.68.134424.
- [39] M. Kohno, O. A. Starykh & L. Balents, “Spinons and triplons in spatially anisotropic frustrated antiferromagnets”, *Nature Physics*, **3**, 790 (2007), doi:10.1038/nphys749.
- [40] N. Christensen, H. M. Rønnow, D. F. McMorrow, A. Harrison, T. G. Perring, M. Enderle, R. Coldea, L. P. Regnault & G. Aeppli, “Quantum dynamics and entanglement of spins on a square lattice.”, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **104**, 15264 (2007), doi:10.1073/pnas.0703293104.
- [41] N. Headings, S. Hayden, R. Coldea & T. Perring, “Anomalous High-Energy Spin Excitations in the High-T<sub>c</sub> Superconductor-Parent Antiferromagnet La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>”, *Physical Review Letters*, **105**, 1 (2010), doi:10.1103/PhysRevLett.105.247001.
- [42] R. Flint & P. Coleman, “Symplectic N and time reversal in frustrated magnetism”, *Physical Review B*, **79**, 014424 (2009), doi:10.1103/PhysRevB.79.014424.
- [43] P. Chandra, P. Coleman & A. I. Larkin, “Ising transition in frustrated Heisenberg models”, *Physical Review Letters*, **64**, 88 (1990), doi:10.1103/PhysRevLett.64.88.

- 
- [44] L. Capriotti & S. Sachdev, “Low-Temperature Broken-Symmetry Phases of Spiral Antiferromagnets”, *Physical Review Letters*, **93**, 257206 (2004), doi:10.1103/PhysRevLett.93.257206.
- [45] W. Zheng, J. Fjærestad, R. R. P. Singh, R. H. McKenzie & R. Coldea, “Anomalous Excitation Spectra of Frustrated Quantum Antiferromagnets”, *Physical Review Letters*, **96**, 057201 (2006), doi:10.1103/PhysRevLett.96.057201.
- [46] N. Elstner, R. R. P. Singh & A. Young, “Finite temperature properties of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice”, *Physical Review Letters*, **71**, 1629 (1993), doi:10.1103/PhysRevLett.71.1629.
- [47] A. V. Chubukov, T. Senthil & S. Sachdev, “Universal magnetic properties of frustrated quantum antiferromagnets in two dimensions”, *Physical Review Letters*, **72**, 2089 (1994), doi:10.1103/PhysRevLett.72.2089.
- [48] Y. Shirata, H. Tanaka, A. Matsuo & K. Kindo, “Experimental Realization of a Spin-1/2 Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet”, *Physical Review Letters*, **108**, 057205 (2012), doi:10.1103/PhysRevLett.108.057205.
- [49] H. D. Zhou, C. Xu, a. M. Hallas, H. J. Silverstein, C. R. Wiebe, I. Umegaki, J. Q. Yan, T. P. Murphy, J.-H. Park, Y. Qiu, J. R. D. Copley, J. S. Gardner & Y. Takano, “Successive Phase Transitions and Extended Spin-Excitation Continuum in the  $S=1/2$  Triangular-Lattice Antiferromagnet  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ ”, *Physical Review Letters*, **109**, 267206 (2012), doi:10.1103/PhysRevLett.109.267206.
- [50] B. Bernu, C. Lhuillier & L. Pierre, “Signature of Néel order in exact spectra of quantum antiferromagnets on finite lattices”, *Physical Review Letters*, **69**, 2590 (1992), doi:10.1103/PhysRevLett.69.2590.
- [51] L. Capriotti, A. E. Trumper & S. Sorella, “Long-Range Néel Order in the Triangular Heisenberg Model”, *Physical Review Letters*, **82**, 3899 (1999), doi:10.1103/PhysRevLett.82.3899.
- [52] S. R. White & a. L. Chernyshev, “Néel Order in Square and Triangular Lattice Heisenberg Models”, *Physical Review Letters*, **99**, 127004 (2007), doi:10.1103/PhysRevLett.99.127004.

- 
- [53] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups”, *Physical Review Letters*, **69**, 2863 (1992), doi:10.1103/PhysRevLett.69.2863.
- [54] S. R. White, “Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups”, *Physical Review B*, **48**, 10345 (1993), doi:10.1103/PhysRevB.48.10345.
- [55] S. Krüger, R. Darradi, J. Richter & D. Farnell, “Direct calculation of the spin stiffness of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on square, triangular, and cubic lattices using the coupled-cluster method”, *Physical Review B*, **73**, 094404 (2006), doi:10.1103/PhysRevB.73.094404.
- [56] R. R. P. Singh, M. P. Gelfand & D. A. Huse, “Ground States of Low-Dimensional Quantum Antiferromagnets”, *Physical Review Letters*, **61**, 2484 (1988), doi:10.1103/PhysRevLett.61.2484.
- [57] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh & D. A. Huse, “Perturbation expansions for quantum many-body systems”, *Journal of Statistical Physics*, **59**, 1093 (1990), doi:10.1007/BF01334744.
- [58] S. Chakravarty, B. Halperin & D. Nelson, “Two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnet at low temperatures”, *Physical Review B*, **39**, 2344 (1989), doi:10.1103/PhysRevB.39.2344.
- [59] M. Greven, R. Birgeneau, Y. Endoh, M. Kastner, B. Keimer, M. Matsuda, G. Shirane & T. Thurston, “Spin correlations in the 2D Heisenberg antiferromagnet Sr<sub>2</sub>CuO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>: Neutron scattering, Monte Carlo simulation, and theory”, *Physical Review Letters*, **72**, 1096 (1994), doi:10.1103/PhysRevLett.72.1096.
- [60] D. P. Arovas & A. Auerbach, “Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models”, *Physical Review B*, **38**, 316 (1988), doi:10.1103/PhysRevB.38.316.
- [61] S. Sarker, C. Jayaprakash, H. Krishnamurthy & M. Ma, “Bosonic mean-field theory of quantum Heisenberg spin systems: Bose condensation and magnetic order”, *Physical Review B*, **40**, 5028 (1989), doi:10.1103/PhysRevB.40.5028.
- [62] P. Chandra, P. Coleman & A. I. Larkin, “A quantum fluids approach to frustrated Heisenberg models”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **2**, 7933 (1990), doi:10.1088/0953-8984/2/39/008.

- 
- [63] F. Mila, D. Poilblanc & C. Bruder, “Spin dynamics in a frustrated magnet with short-range order”, *Physical Review B*, **43**, 7891 (1991), doi:10.1103/PhysRevB.43.7891.
- [64] H. A. Ceccatto, C. J. Gazza & A. E. Trumper, “Nonclassical disordered phase in the strong quantum limit of frustrated antiferromagnets”, *Physical Review B*, **47**, 12329 (1993), doi:10.1103/PhysRevB.47.12329.
- [65] H. A. Ceccatto, C. J. Gazza & A. E. Trumper, “Comment on “Quantum spin nematics: Moment-free magnetism””, *Physical Review Letters*, **72**, 1943 (1994), doi:10.1103/PhysRevLett.72.1943.
- [66] A. E. Trumper, L. O. Manuel, C. J. Gazza & H. A. Ceccatto, “Schwinger-Boson Approach to Quantum Spin Systems: Gaussian Fluctuations in the “Natural” Gauge”, *Physical Review Letters*, **78**, 2216 (1997), doi:10.1103/PhysRevLett.78.2216.
- [67] J. Schwinger, *Quantum Theory of angular momentum* (Academic, New York) (1965).
- [68] A. Auerbach & D. P. Arovas, “Schwinger Bosons Approaches to Quantum Antiferromagnetism”, *arXiv*, **0809.4836**, 1 (2008).
- [69] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Graduate Texts in Contemporary Physics (Springer New York, New York, NY) (1994), doi:10.1007/978-1-4612-0869-3.
- [70] D. Yoshioka & J. Miyazaki, “Boson Mean Field Theory of the Triangular Lattice Heisenberg Model”, *Journal of the Physics Society Japan*, **60**, 614 (1991), doi:10.1143/JPSJ.60.614.
- [71] T. Holstein & H. Primakoff, “Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet”, *Physical Review*, **58**, 1098 (1940), doi:10.1103/PhysRev.58.1098.
- [72] T. Oguchi, “Theory of Spin-Wave Interactions in Ferro- and Antiferromagnetism”, *Physical Review*, **117**, 117 (1960), doi:10.1103/PhysRev.117.117.
- [73] G. Castilla & S. Chakravarty, “Spin-wave expansion of the staggered magnetization of a square-lattice Heisenberg antiferromagnet at  $T=0$ ”, *Physical Review B*, **43**, 13687 (1991), doi:10.1103/PhysRevB.43.13687.

- 
- [74] A. W. Sandvik & R. R. P. Singh, “High-Energy Magnon Dispersion and Multi-magnon Continuum in the Two-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet”, *Physical Review Letters*, **86**, 528 (2001), doi:10.1103/PhysRevLett.86.528.
- [75] W. Zheng, J. Oitmaa & C. Hamer, “Series studies of the spin-12 Heisenberg antiferromagnet at  $T=0$ : Magnon dispersion and structure factors”, *Physical Review B*, **71**, 184440 (2005), doi:10.1103/PhysRevB.71.184440.
- [76] A. E. Trumper, L. Capriotti & S. Sorella, “Finite-size spin-wave theory of the triangular Heisenberg model”, *Physical Review B*, **61**, 11529 (2000), doi:10.1103/PhysRevB.61.11529.
- [77] W. Zheng, J. Fjærestad, R. R. P. Singh, R. H. McKenzie & R. Coldea, “Excitation spectra of the spin-12 triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet”, *Physical Review B*, **74**, 224420 (2006), doi:10.1103/PhysRevB.74.224420.
- [78] M. Takahashi, “Few-dimensional Heisenberg ferromagnets at low temperature”, *Physical Review Letters*, **58**, 168 (1987), doi:10.1103/PhysRevLett.58.168.
- [79] M. Takahashi, “Modified spin-wave theory of a square-lattice antiferromagnet”, *Physical Review B*, **40**, 2494 (1989), doi:10.1103/PhysRevB.40.2494.
- [80] A. Auerbach & D. P. Arovas, “Spin Dynamics in the Square-Lattice Antiferromagnet”, *Physical Review Letters*, **61**, 617 (1988), doi:10.1103/PhysRevLett.61.617.
- [81] O. A. Starykh, “ $1/N$  expansion for the Schwinger-boson theory of quantum antiferromagnets”, *Physical Review B*, **50**, 16428 (1994), doi:10.1103/PhysRevB.50.16428.
- [82] A. V. Chubukov, “Schwinger bosons and hydrodynamics of two-dimensional magnets”, *Physical Review B*, **44**, 12318 (1991), doi:10.1103/PhysRevB.44.12318.
- [83] A. V. Chubukov & O. A. Starykh, “Confinement of spinons in the CPM-1 model”, *Physical Review B*, **52**, 440 (1995), doi:10.1103/PhysRevB.52.440.
- [84] P. Chandra & B. Douçot, “Possible spin-liquid state at large  $S$  for the frustrated square Heisenberg lattice”, *Physical Review B*, **38**, 9335 (1988), doi:10.1103/PhysRevB.38.9335.

- 
- [85] J. Richter & J. Schulenburg, “The spin-1/2 J<sub>1</sub>–J<sub>2</sub> Heisenberg antiferromagnet on the square lattice: Exact diagonalization for N=40 spins”, *The European Physical Journal B*, **73**, 117 (2009), doi:10.1140/epjb/e2009-00400-4.
- [86] C. Weber, L. Capriotti, G. Misguich, F. Becca, M. Elhajal & F. Mila, “Ising Transition Driven by Frustration in a 2D Classical Model with Continuous Symmetry”, *Physical Review Letters*, **91**, 177202 (2003), doi:10.1103/PhysRevLett.91.177202.
- [87] L. Capriotti, A. Fubini, T. Roscilde & V. Tognetti, “Ising Transition in the Two-Dimensional Quantum J<sub>1</sub>-J<sub>2</sub> Heisenberg Model”, *Physical Review Letters*, **92**, 157202 (2004), doi:10.1103/PhysRevLett.92.157202.
- [88] P. Leung & N.-w. Lam, “Numerical evidence for the spin-Peierls state in the frustrated quantum antiferromagnet”, *Physical Review B*, **53**, 2213 (1996), doi:10.1103/PhysRevB.53.2213.
- [89] M. Mambrini, A. Läuchli, D. Poilblanc & F. Mila, “Plaquette valence-bond crystal in the frustrated Heisenberg quantum antiferromagnet on the square lattice”, *Physical Review B*, **74**, 144422 (2006), doi:10.1103/PhysRevB.74.144422.
- [90] J. Reuther, P. Wölfle, R. Darradi, W. Brenig, M. Arlego & J. Richter, “Quantum phases of the planar antiferromagnetic J<sub>1</sub>-J<sub>2</sub>-J<sub>3</sub> Heisenberg model”, *Physical Review B*, **83**, 064416 (2011), doi:10.1103/PhysRevB.83.064416.
- [91] L. Capriotti, D. Scalapino & S. R. White, “Spin-Liquid versus Dimerized Ground States in a Frustrated Heisenberg Antiferromagnet”, *Physical Review Letters*, **93**, 177004 (2004), doi:10.1103/PhysRevLett.93.177004.
- [92] P. Locher, “Linear spin waves in a frustrated Heisenberg model”, *Physical Review B*, **41**, 2537 (1990), doi:10.1103/PhysRevB.41.2537.
- [93] J. Ferrer, “Spin-liquid phase for the frustrated quantum Heisenberg antiferromagnet on a square lattice”, *Physical Review B*, **47**, 8769 (1993), doi:10.1103/PhysRevB.47.8769.
- [94] A. Mattsson, P. Fröjdh & T. Einarsson, “Frustrated honeycomb Heisenberg antiferromagnet: A Schwinger-boson approach”, *Physical Review B*, **49**, 3997 (1994), doi:10.1103/PhysRevB.49.3997.

- 
- [95] D. C. Cabra, C. A. Lamas & H. D. Rosales, “Quantum disordered phase on the frustrated honeycomb lattice”, *Physical Review B*, **83**, 094506 (2011), doi:10.1103/PhysRevB.83.094506.
- [96] C.-H. Chung, J. B. Marston & R. H. McKenzie, “Large-  $N$  solutions of the Heisenberg and Hubbard-Heisenberg models on the anisotropic triangular lattice: application to  $\text{Cs}_2\text{CuCl}_4$  and to the layered organic superconductors  $\kappa$ -(BEDT-TTF) $_2\text{X}$  (BEDT-TTF=bis(ethylene-dithio)tetrathiafulvalene); X=anion”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **13**, 5159 (2001), doi:10.1088/0953-8984/13/22/311.
- [97] W. Selke, “Spatially modulated structures in systems with competing interactions”, in C. Domb & J. L. Lebowitz, editors, “Phase transitions and critical phenomena, vol 15”, chapter 1, pp. 1–72 (Academic Press, New York, NY) (1992).
- [98] O. Tchernyshyov, R. Moessner & S. L. Sondhi, “Flux expulsion and greedy bosons: Frustrated magnets at large  $N$ ”, *Europhysics Letters (EPL)*, **73**, 278 (2006), doi:10.1209/epl/i2005-10389-2.
- [99] L. Messio, C. Lhuillier & G. Misguich, “Time reversal symmetry breaking chiral spin liquids: Projective symmetry group approach of bosonic mean-field theories”, *Physical Review B*, **87**, 125127 (2013), doi:10.1103/PhysRevB.87.125127.
- [100] T. Li, F. Becca, W.-J. Hu & S. Sorella, “Gapped spin-liquid phase in the  $J_1$ - $J_2$  Heisenberg model by a bosonic resonating valence-bond ansatz”, *Physical Review B*, **86**, 075111 (2012), doi:10.1103/PhysRevB.86.075111.
- [101] H. Zhang & C. A. Lamas, “Exotic disordered phases in the quantum  $J_1$ - $J_2$  model on the honeycomb lattice”, *Physical Review B*, **87**, 024415 (2013), doi:10.1103/PhysRevB.87.024415.
- [102] E. Rastelli & A. Tassi, “Goldstone modes and quantum gaps in the square frustrated Heisenberg antiferromagnet”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **4**, 1567 (1992), doi:10.1088/0953-8984/4/6/022.
- [103] P. Hauke, T. Roscilde, V. Murg, J. Ignacio Cirac & R. Schmied, “Modified spin-wave theory with ordering vector optimization: frustrated bosons on the spatially anisotropic triangular lattice”, *New Journal of Physics*, **12**, 053036 (2010), doi:10.1088/1367-2630/12/5/053036.

- 
- [104] W.-J. Hu, F. Becca, A. Parola & S. Sorella, “Direct evidence for a gapless  $Z_2$  spin liquid by frustrating Néel antiferromagnetism”, *Physical Review B*, **88**, 060402 (2013), doi:10.1103/PhysRevB.88.060402.
- [105] T. Tay & O. I. Motrunich, “Variational study of  $J_1$ - $J_2$  Heisenberg model on kagome lattice using projected Schwinger-boson wave functions”, *Physical Review B*, **84**, 020404 (2011), doi:10.1103/PhysRevB.84.020404.
- [106] D. A. Huse & V. Elser, “Simple Variational Wave Functions for Two-Dimensional Heisenberg Spin-1/2 Antiferromagnets”, *Physical Review Letters*, **60**, 2531 (1988), doi:10.1103/PhysRevLett.60.2531.
- [107] P. W. Leung & K. Runge, “Spin-1/2 quantum antiferromagnets on the triangular lattice”, *Physical Review B*, **47**, 5861 (1993), doi:10.1103/PhysRevB.47.5861.
- [108] P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier & L. Pierre, “Spin stiffnesses of the quantum Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice”, *Physical Review B*, **52**, 9162 (1995), doi:10.1103/PhysRevB.52.9162.
- [109] O. A. Starykh, A. V. Chubukov & A. Abanov, “Flat spin-wave dispersion in a triangular antiferromagnet”, *Physical Review B*, **74**, 180403 (2006), doi:10.1103/PhysRevB.74.180403.
- [110] a. L. Chernyshev & M. E. Zhitomirsky, “Magnon Decay in Noncollinear Quantum Antiferromagnets”, *Physical Review Letters*, **97**, 207202 (2006), doi:10.1103/PhysRevLett.97.207202.
- [111] L. O. Manuel, A. E. Trumper & H. A. Ceccatto, “Rotational invariance and order-parameter stiffness in frustrated quantum spin systems”, *Physical Review B*, **57**, 8348 (1998), doi:10.1103/PhysRevB.57.8348.
- [112] P. Chandra, P. Coleman & I. Ritchey, “Questions, Controversies and Frustration in Quantum Antiferromagnetism”, *International Journal of Modern Physics B*, **05**, 171 (1991), doi:10.1142/S0217979291000122.
- [113] C. J. Gazza & H. A. Ceccatto, “A Schwinger boson approach to Heisenberg antiferromagnets on a triangular lattice”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **5**, L135 (1993), doi:10.1088/0953-8984/5/10/003.

- 
- [114] a. L. Chernyshev & M. E. Zhitomirsky, “Spin waves in a triangular lattice antiferromagnet: Decays, spectrum renormalization, and singularities”, *Physical Review B*, **79**, 144416 (2009), doi:10.1103/PhysRevB.79.144416.
- [115] L. O. Manuel & H. A. Ceccatto, “Magnetic and quantum disordered phases in triangular-lattice Heisenberg antiferromagnets”, *Physical Review B*, **60**, 9489 (1999), doi:10.1103/PhysRevB.60.9489.
- [116] A. E. Trumper, “Spin-wave analysis to the spatially anisotropic Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice”, *Physical Review B*, **60**, 2987 (1999), doi:10.1103/PhysRevB.60.2987.
- [117] L. Capriotti, A. Läuchli & A. Paramekanti, “Effect of local charge fluctuations on spin dynamics in La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>”, *Physical Review B*, **72**, 214433 (2005), doi:10.1103/PhysRevB.72.214433.
- [118] S. Sachdev, “Kagom\’{e}- and triangular-lattice Heisenberg antiferromagnets: Ordering from quantum fluctuations and quantum-disordered ground states with unconfined bosonic spinons”, *Physical Review B*, **45**, 12377 (1992), doi:10.1103/PhysRevB.45.12377.
- [119] J. Alicea, O. Motrunich & M. Fisher, “Theory of the algebraic vortex liquid in an anisotropic spin-1/2 triangular antiferromagnet”, *Physical Review B*, **73**, 174430 (2006), doi:10.1103/PhysRevB.73.174430.
- [120] N. Elstner, R. R. P. Singh & a. P. Young, “Spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on the square and triangular lattices: A comparison of finite temperature properties”, *Journal of Applied Physics*, **75**, 5943 (1994), doi:10.1063/1.355521.
- [121] P. Azaria, B. Delamotte & D. Mouhanna, “Low-temperature properties of two-dimensional frustrated quantum antiferromagnets”, *Physical Review Letters*, **68**, 1762 (1992), doi:10.1103/PhysRevLett.68.1762.
- [122] A. V. Chubukov, S. Sachdev & T. Senthil, “Quantum phase transitions in frustrated quantum antiferromagnets”, *Nuclear Physics B*, **426**, 601 (1994), doi:10.1016/0550-3213(94)90023-X.
- [123] J. Hirsch & S. Tang, “Comment on a mean-field theory of quantum antiferromagnets”, *Physical Review B*, **39**, 2850 (1989), doi:10.1103/PhysRevB.39.2850.

- 
- [124] O. Tchernyshyov & S. L. Sondhi, “Liquid–gas and other unusual thermal phase transitions in some large- $N$  magnets”, *Nuclear Physics B*, **639**, 429 (2002), doi:10.1016/S0550-3213(02)00482-0.
- [125] A. V. Chubukov, S. Sachdev & T. Senthil, “Large- $S$  expansion for quantum antiferromagnets on a triangular lattice”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **6**, 8891 (1994), doi:10.1088/0953-8984/6/42/019.
- [126] B. Bernu, “Specific heat and high-temperature series of lattice models: Interpolation scheme and examples on quantum spin systems in one and two dimensions”, *Physical Review B*, **63**, 134409 (2001), doi:10.1103/PhysRevB.63.134409.
- [127] T. Ono, H. Tanaka, H. Aruga Katori, F. Ishikawa, H. Mitamura & T. Goto, “Magnetization plateau in the frustrated quantum spin system  $\text{Cs}_2\text{CuBr}_4$ ”, *Physical Review B*, **67**, 104431 (2003), doi:10.1103/PhysRevB.67.104431.
- [128] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato & G. Saito, “Spin Liquid State in an Organic Mott Insulator with a Triangular Lattice”, *Physical Review Letters*, **91**, 107001 (2003), doi:10.1103/PhysRevLett.91.107001.
- [129] H. D. Zhou, E. S. Choi, G. Li, L. Balicas, C. R. Wiebe, Y. Qiu, J. R. D. Copley & J. S. Gardner, “Spin Liquid State in the  $S=1/2$  Triangular Lattice  $\text{Ba}_3\text{CuSb}_2\text{O}_9$ ”, *Physical Review Letters*, **106**, 147204 (2011), doi:10.1103/PhysRevLett.106.147204.
- [130] S. Nakatsuji, K. Kuga, K. Kimura, R. Satake, N. Katayama, E. Nishibori, H. Sawa, R. Ishii, M. Hagiwara, F. Bridges, T. U. Ito, W. Higemoto, Y. Karaki, M. Halim, A. A. Nugroho, J. A. Rodriguez-Rivera, M. A. Green & C. Broholm, “Spin-orbital short-range order on a honeycomb-based lattice.”, *Science*, **336**, 559 (2012), doi:10.1126/science.1212154.
- [131] Y. Doi, Y. Hinatsu & K. Ohoyama, “Structural and magnetic properties of pseudo-two-dimensional triangular antiferromagnets  $\text{Ba}_3\text{MSb}_2\text{O}_9$  ( $M = \text{Mn}, \text{Co}, \text{and Ni}$ )”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **16**, 8923 (2004), doi:10.1088/0953-8984/16/49/009.
- [132] G. Koutroulakis, T. Zhou, C. D. Batista, Y. Kamiya, J. D. Thompson, S. E. Brown &

- 
- H. D. Zhou, “Magnetic Phases of the Spin-1/2 Triangular-Lattice Antiferromagnet Ba<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>”, p. 5 (**2013**).
- [133] T. Susuki, N. Kurita, T. Tanaka, H. Nojiri, A. Matsuo, K. Kindo & H. Tanaka, “Magnetization Process and Collective Excitations in the S=1/2 Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet Ba<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>”, *Physical Review Letters*, **110**, 267201 (**2013**), doi:10.1103/PhysRevLett.110.267201.
- [134] T. Susuki, N. Kurita, T. Tanaka, H. Nojiri, A. Matsuo, K. Kindo & H. Tanaka, “Magnetization Process and Collective Excitations in the S=1/2 Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet Ba<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub>”, *arXiv:cond-mat*, **1303.5271** (**2013**).
- [135] D. Heidarian, S. Sorella & F. Becca, “Spin-12 Heisenberg model on the anisotropic triangular lattice: From magnetism to a one-dimensional spin liquid”, *Physical Review B*, **80**, 012404 (**2009**), doi:10.1103/PhysRevB.80.012404.
- [136] J. Ren & J. Sirker, “Spinons and helimagnons in the frustrated Heisenberg chain”, *Physical Review B*, **85**, 140410 (**2012**), doi:10.1103/PhysRevB.85.140410.
- [137] F. Wang & A. Vishwanath, “Spin-liquid states on the triangular and Kagom\{e} lattices: A projective-symmetry-group analysis of Schwinger boson states”, *Physical Review B*, **74**, 174423 (**2006**), doi:10.1103/PhysRevB.74.174423.
- [138] J. Colpa, “Diagonalization of the quadratic boson hamiltonian”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **93**, 327 (**1978**), doi:10.1016/0378-4371(78)90160-7.
- [139] L. O. Manuel, *Frustración magnética en sistemas electrónicos fuertemente correlacionados*, Ph.D. thesis, IFIR-UNR (**1998**).
- [140] J. W. Negele, *Quantum Many-particle Systems* (Addison-Wesley, New York) (**1988**).
- [141] N. Read & S. Sachdev, “Valence-bond and spin-Peierls ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets”, *Physical Review Letters*, **62**, 1694 (**1989**), doi:10.1103/PhysRevLett.62.1694.