

Trabajo de diploma

MAGNETISMO CUÁNTICO EN ESCALERAS DE
ESPÍN.

Santiago D. Acevedo

Director: Carlos A. Lamas

Departamento de Física
Facultad de Ciencias Exactas Universidad
Nacional de La Plata

22 de Marzo de 2019

Resumen

En este trabajo de diploma estudiamos el magnetismo de un sistema de espines $1/2$ en una dimensión espacial con una estructura que se conoce como cadena Kagomé. Esta disposición geométrica representa la reducción a una dimensión de la conocida red de Kagomé bidimensional. A lo largo del trabajo introducimos algunos conceptos generales que usaremos en el mismo, presentando el Hamiltoniano de Heisenberg, sus características principales, y algunos primeros resultados obtenidos en casos límites del modelo. Luego discutimos la representación de los operadores de espín en términos de diferentes operadores de creación y aniquilación de partículas y damos una breve descripción de las técnicas numéricas DMRG y Montecarlo. A continuación presentamos resultados obtenidos, empezando por los numéricos y terminando con los analíticos. Finalmente, mencionamos las conclusiones y las perspectivas a futuro.

En el apéndice presentamos detalles de la diagonalización de un Hamiltoniano bosónico y algunas definiciones utilizadas en la técnica DMRG.

Índice general

Introducción	3
Integral de intercambio	4
Hamiltoniano de Heisenberg y cadena Kagomé	5
Límites del modelo	9
Excitaciones elementales magnéticas	16
Bosones de Holstein-Primakov	18
Fermiones de Jordan-Wigner	23
Bosones de Schwinger	24
Técnicas numéricas	27
Método Lanczos	27
DMRG	28
Curvas de magnetización con DMRG	28
Montecarlo	29
Resultados y Discusión	30
Cálculos numéricos	30
Bosones de Holstein Primakov (spin waves)	36
Excitaciones localizadas en la cadena Kagomé	41
Conclusiones	45
Apéndice	46
Diagonalización spin-waves	46

Introducción

Los sistemas de electrones fuertemente correlacionados constituyen un tópico de gran interés en física de materiales, ya que dan lugar a estados exóticos de la materia, pueden obtenerse en el laboratorio y su comprensión puede dar lugar a avances tecnológicos.

El magnetismo en bajas dimensiones se realiza naturalmente a partir de la distribución de átomos magnéticos (Cu, Ni, Zn, Ag, Fe, etc) en una matriz paramagnética o diamagnética. El arreglo geométrico microscópico de los átomos magnéticos condiciona fuertemente el comportamiento magnético (macroscópico) del compuesto. En algunas redes no es posible minimizar completamente la energía de todas las interacciones. Comúnmente esto lleva a que no haya un único estado fundamental, sino una variedad de estados de mínima energía. En este caso, el sistema se dice frustrado. Ejemplos típicos de sistemas frustrados son la red triangular y la red de Kagomé. Algunas realizaciones del modelo de Heisenberg con estructura aproximadamente regular de tipo Kagomé están dados por compuestos como la Herbertsmithite $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$, α -vesignieite $\text{BaCu}_3\text{V}_2\text{O}_8(\text{OH})_2$ y $[\text{NH}_4]_2[\text{C}_7\text{H}_{14}\text{N}][\text{V}_7\text{O}_6\text{F}_{18}]_5$, que no muestran orden magnético de largo alcance a bajas temperaturas debido a la fuerte frustración geométrica.

En particular, los sistemas unidimensionales están lejos de ser sólo una simplificación académica, pues el estudio de sus propiedades permite abordar tópicos de gran interés en el área de magnetismo en bajas dimensiones, como son los hielos de espín, estadísticas fraccionarias, superconductividad de alta temperatura crítica, efecto Hall cuántico, orden topológico, etc.

Una característica importante de los sistemas magnéticos de baja dimensión es la ausencia de orden de largo alcance en modelos con una simetría continua a temperatura finita como consecuencia del teorema de Mermin y Wagner [1].

Las herramientas teóricas aplicables son muy diversas. En cuanto a las técnicas numéricas, se incluyen DMRG [2], diagonalización exacta (Lanczos) y Montecarlo (clásico o cuántico). En cuanto a técnicas analíticas, se incluyen soluciones exactas, teoría de campos, teoría de muchos cuerpos, teoría de perturbaciones, etc.

Aunque los modelos clásicos han jugado un papel importante en los comienzos del magnetismo en 1D, el énfasis hoy está en modelos donde los efectos cuánticos son esenciales. Un gran número de investigaciones se concentran en compuestos con Cu^{+2} , que realizan sistemas de espín 1/2, o con Ni^{+2} , que realizan espín 1. Entre los materiales de tipo cadena espín 1/2,

$CuCl_2 \cdot 2NC_5H_5$ (*Copperpyridinchloride = CPC*) es la primera ‘quantum chain’ investigada experimentalmente. Entre las mejores realizaciones actuales de cadenas de espín 1/2 antiferromagnéticas se encuentran $KCuF_3$ y Sr_2CuO_3 .

En este contexto, recientemente se han sintetizado dos nuevos telluros de sulfato $A_2Cu_5(TeO_3)–(SO_4)_3(OH)_4$ ($A = Na, K$) con estructura de tipo cadena Kagomé distorcionada [3], que presentan orden antiferromagnético a bajas temperaturas. Estos nuevos materiales han motivado el estudio del modelo magnético en el que está centrado este trabajo.

Integral de Intercambio

Para un sistema de dos electrones, con coordenadas espaciales \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 respectivamente, la función de onda total debe ser antisimétrica frente al intercambio de ambas partículas.

$$\Psi_T = \frac{\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}\chi_T \quad (1)$$

$$\Psi_S = \frac{\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}\chi_S \quad (2)$$

donde se tomaron en cuenta tanto la parte espacial, ψ , como la parte de espín χ , de la función de onda del sistema de electrones.

Luego, los valores medios del Hamiltoniano \mathcal{H} en cada estado se escriben

$$E_T = \int \Psi_T^* \mathcal{H} \Psi_T d^3r_1 d^3r_2 \quad (3)$$

$$E_S = \int \Psi_S^* \mathcal{H} \Psi_S d^3r_1 d^3r_2 \quad (4)$$

Entonces, usando un \mathcal{H} que sólo actúa sobre la parte espacial de las funciones de onda, y que χ_S y χ_T son ortonormales, se sigue

$$J \equiv E_T - E_S = -2 \int \Psi_1^*(\mathbf{r}_1)\Psi_2^*(\mathbf{r}_2)\mathcal{H}\Psi_1(\mathbf{r}_2)\Psi_2(\mathbf{r}_1)d^3r_1d^3r_2 \quad (5)$$

donde la integral en (5) se denomina integral de intercambio.

Si $J > 0$ entonces $E_T > E_S$, el estado singlete ($S = 0$) es favorecido. Si $J < 0$ entonces $E_S > E_T$, el estado triplete ($S = 1$) es favorecido.

Si sólo estamos interesados en los grados de libertad de espín del sistema, puede utilizarse un Hamiltoniano efectivo, el de Heisenberg, donde J es proporcional a la constante de acoplamiento entre espines, y su signo determina si estos tienden a estar paralelos o antiparalelos entre sí.

Hamiltoniano de Heisenberg y cadena Kagomé

Dado un sistema de espines, el Hamiltoniano de Heisenberg, \mathcal{H} , en presencia de un campo magnético externo se puede escribir como

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - g\mu_B \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H} \quad (6)$$

donde $g \approx 2$ es el factor de giromagnético del electrón (de carga $-e$ y masa m), $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$, es el magnetón de Bohr, \mathbf{S}_i es el i -ésimo operador de espín, $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ es el campo magnético externo y J_{ij} es la constante de acoplamiento entre espines (i, j) , y es igual a la diferencia de energía entre los estados triplete y singlete.

Recientemente fueron sintetizados dos nuevos sulfatos de telurio[3]. En ambos compuestos la estructura topológica de los átomos de Cu^{2+} presentan un arreglo unidimensional de tipo Kagome 1D distorcionado, siendo la primer realización experimental de este tipo de estructura. Interesantemente, la cadena Kagomé encontrada está deformada presentando diferentes distancias Cu-Cu de 2.84, 2.94, 3.01, 3.07, y 3.08 Å.

Estos resultados nos motivan a estudiar una cadena Kagomé (figura 1) de espines 1/2, donde los acoplamientos magnéticos no son homogéneos intentando modelar el efecto de las deformaciones de la red.

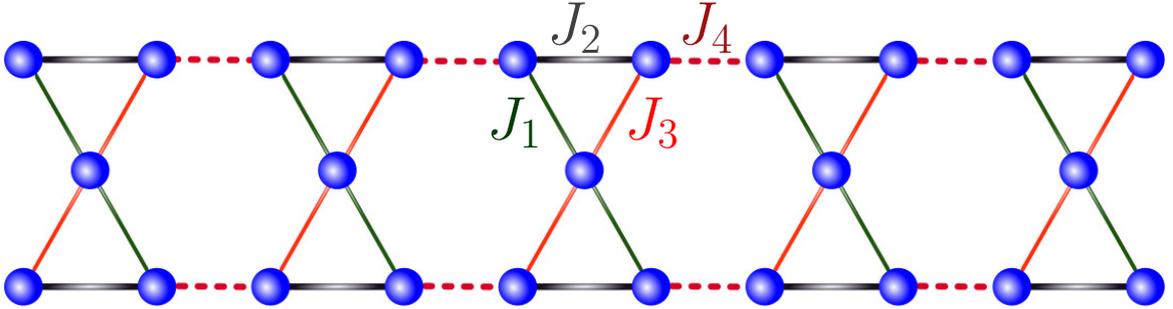


Figura 1: Esquema de cadena Kagomé, geometría estudiada en este trabajo, en donde se señalan los acoplamientos J_{ij} utilizados. Consideramos los acoplamientos como adimensionales, fijando así un sistema de unidades y una escala de energías. Con esta convención, el parámetro h en la ecuación (7) tiene las mismas unidades que los acoplamientos J_{ij} .

Para describir las propiedades magnéticas de la cadena Kagomé, escribimos el Hamiltoniano de Heisenberg (6) de la siguiente forma

$$\mathcal{H} = \sum_{(i,j)} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{h} \quad (7)$$

Donde $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_i$ es el operador de espín en el sitio i (con $\hbar = 1$ y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ las matrices de Pauli) y $\mathbf{h} = (0, 0, h)$ es el campo magnético externo en el que se absorbieron las

constantes g y μ_B . J_{ij} es la constante de acoplamiento entre espines (i, j) definida según la figura 1, considerada adimensional, fijando así un sistema de unidades y una escala de energías. Con esta convención, el parámetro h tiene las mismas unidades que los acoplamientos J_{ij} .

Simetrías del Hamiltoniano

Simetría de rotación

El Hamiltoniano (6) es invariante frente a rotaciones de la forma

$$\mathcal{D}(R) = e^{\frac{i}{\hbar} S^z} \quad (8)$$

donde $S^z = \sum_i S_i^z$ es la componente z del operador de espín total, ya que se cumple

$$[\mathcal{H}, S^z] = 0 \quad (9)$$

Como consecuencia de (9), S^z es una ‘constante de movimiento’. Además, teniendo en cuenta el Kasimir, \mathbf{S}^2 , que también cumple $[\mathbf{S}^2, \mathcal{H}] = 0$ se tiene el siguiente conjunto completo de operadores que conmutan (CCOC) $\{\mathbf{S}^2, S^z\}$ y pueden definirse autoestados para todo tiempo t

$$\mathbf{S}^2 |s, m\rangle = s(s+1) |s, m\rangle \quad (10)$$

$$S^z |s, m\rangle = m |s, m\rangle \quad (11)$$

En ausencia de campo magnético ($\mathbf{h} = \mathbf{0}$), \mathcal{H} es invariante frente a rotaciones generales de SU(2)

$$\mathcal{D}(R) = e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{n} \cdot \mathbf{S}} \quad (12)$$

donde \tilde{n} es un versor arbitrario, determinado por los ángulos polar y azimutal.

Simetría de paridad

El operador de paridad, π , puede definirse exigiendo que al transformar un estado $|\alpha\rangle$, el valor espectación de \mathbf{x} sobre el estado transformado cambie de signo, es decir

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\rightarrow \pi |\alpha\rangle \\ \langle \alpha | \pi^\dagger \mathbf{x} \pi | \alpha \rangle &= - \langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (13)$$

El operador de paridad resulta hermítico y unitario, con autovalores ± 1 , y cumple

$$\begin{aligned}\pi^\dagger \mathbf{x} \pi &= -\mathbf{x} \\ \pi^\dagger \mathbf{p} \pi &= -\mathbf{p}\end{aligned}\tag{14}$$

Además,

$$\begin{aligned}\pi^\dagger \mathbf{L} \pi &= \mathbf{L} \\ \pi^\dagger \mathbf{S} \pi &= \mathbf{S}\end{aligned}\tag{15}$$

Como consecuencia, el Hamiltoniano de Heisenberg (6) en ausencia de campo magnético es invariante frente a transformación de paridad, dando lugar a la posibilidad de construir autoestados de \mathcal{H} con paridad definida. El campo magnético rompe la simetría de paridad pues transforma invirtiendo su sentido ($\mathbf{h} \rightarrow -\mathbf{h}$).

Simetría de inversión temporal

El operador de inversión temporal, Θ , es un operador al cual se le impone la condición

$$\begin{aligned}\Theta^{-1} \mathbf{p} \Theta &= -\mathbf{p} \\ \Theta^{-1} \mathbf{x} \Theta &= \mathbf{x}\end{aligned}\tag{16}$$

Para preservar las reglas de conmutación entre \mathbf{x} y \mathbf{p} , se debe imponer sobre Θ además la condición de ser anti-unitario.

Definición:

Dada la transformación

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle &\rightarrow |\tilde{\alpha}\rangle = \Theta |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle &\rightarrow |\tilde{\beta}\rangle = \Theta |\beta\rangle\end{aligned}\tag{17}$$

es anti-unitaria si y sólo si

$$\begin{cases} \langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* \\ \Theta(c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle) = c_1^* \Theta |\alpha\rangle + c_2^* \Theta |\beta\rangle \end{cases}\tag{18}$$

En general puede escribirse, para Θ anti-unitaria,

$$\Theta = UK\tag{19}$$

con U operador unitario, y K operador de conjugación compleja, que conjuga los coeficientes que multiplican un ket, y no modifica los kets que forman la base¹. Es decir, si $|\alpha\rangle$ es un estado perteneciente a la base de trabajo, se tiene

$$Kc|\alpha\rangle = c^*K|\alpha\rangle = c^*|\alpha\rangle \quad (20)$$

Luego, escribiendo $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$, como consecuencia de (16), los operadores de momento angular deben transformar frente a inversión temporal según

$$\begin{aligned} \Theta^{-1}\mathbf{L}\Theta &= -\mathbf{L} \\ \Theta^{-1}\mathbf{S}\Theta &= -\mathbf{S} \end{aligned} \quad (21)$$

Inversión temporal para sistemas de espines $\frac{1}{2}$:

Puede probarse que, habiendo elegido el eje de cuantización a lo largo del eje z , Θ se escribe en términos del operador S^y , a menos de una fase arbitraria η , según

$$\Theta = \eta e^{-\frac{i}{\hbar}\pi S^y} K = -i\eta \left(\frac{2S^y}{\hbar}\right) K \quad (22)$$

Donde K es el operador en (19) que da lugar a la anti-unitaridad.

Dado el carácter anti-unitario de Θ , resulta además, por aplicación directa sobre un estado $|\psi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$,

$$\Theta^2 = -1 \quad (23)$$

independientemente de la elección de la fase η .

Según (21), el Hamiltoniano de Heisenberg (6) en ausencia de campo magnético es invariante frente a inversión temporal y la presencia de campo magnético rompe esta simetría, pues el operador de espín que se acopla al campo transforma cambiando de signo ($\mathbf{S} \rightarrow -\mathbf{S}$).

Simetría de traslación

Considerando un sistema de electrones, el operador de traslación espacial está definido según

$$\mathcal{T}(\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{r}} \quad (24)$$

con $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ y $\hat{\mathbf{p}}$ el operador de impulso.

En una dimensión, dado un arreglo de iones positivos equiespaciados con parámetro de red a , un electrón en este sistema está sometido a un potencial periódico V que cumple

¹Al cambiar de base, cambia la acción del operador K , pues deja invariantes estados diferentes.

$$V(x) = V(x + a) \quad (25)$$

Considerando un ket $|n\rangle$ que represente un estado ligado de un electrón en el sitio n -ésimo, la acción de \mathcal{T} sobre $|n\rangle$ resulta

$$\mathcal{T}(a) |n\rangle = |n + 1\rangle \quad (26)$$

Imponiendo condiciones de contorno periódicas sobre el sistema, el operador $\mathcal{T}(a)$ es una simetría del Hamiltoniano, pues conmuta tanto con el término cinético como con el término de energía potencial.

Como consecuencia, pueden construirse autoestados simultáneos de \mathcal{H} y \mathcal{T} de la forma

$$|k\rangle = \sum_n e^{ikn} |n\rangle \quad (27)$$

Donde $k \equiv k_m = \frac{2\pi m}{Na}$ es el número de onda, discretizado debido a la imposición de condición periódica de contorno, con N el número de celdas unidad y $m = 0, 1, \dots, N - 1$.

Esta simetría es muy importante en física del estado sólido ya que los autoestados (27) diagonalizan Hamiltonianos de sistemas de partículas no interactuantes, como por ejemplo el Hamiltoniano tight-binding.

Para poder generalizar los resultados de esta simetría al Hamiltoniano de Heisenberg (6) es usual representarlo en lenguaje de partículas, como se desarrolla en la siguiente sección.

Límites del modelo

Estudiar casos límites de un modelo, en nuestro caso el Hamiltoniano de Heisenberg, permite obtener información sobre el sistema simplificando el cálculo, ya sea analítico o numérico. En particular, es muy útil como primer acercamiento a un sistema desconocido, como fue el caso en este trabajo.

Límite de plaquetas aisladas

Tomando el límite $J_4 = 0$ (ver figura 1) estudiamos una plaqueta (o celda unidad) aislada del resto de la cadena, lo que permite reducir la dimensión del espacio de Hilbert asociado al sistema a un tamaño finito $d = 2^5 = 32$ y entender algunas propiedades de la cadena Kagomé sin recurrir a técnicas de cálculo numérico avanzadas. A partir del Hamiltoniano (6) para el caso de la plaqueta aislada, fijando $J_1 = 1$, $(J_3, J_2) = (0.9, 1.1)$, realizamos una diagonalización

numérica y obtuvimos las energías como función del campo magnético externo aplicado

$$E_n(h) = E_n^0 - h(m_S)_n \quad (28)$$

donde $n = 1, 2, \dots, d$, $(m_S)_n$ es la magnetización^{2,3} del n -ésimo estado y E_n^0 es su energía a campo magnético nulo.

Cabe resaltar que este sistema finito compuesto por 5 espines $1/2$ puede tener espín $s = \{\frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\}$ y magnetización $m_S = \{\pm\frac{5}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\}$, cada una de ellas degenerada según indica la teoría de momentos angulares.

En la figura 2 mostramos un instructivo gráfico de las energías (28) donde observamos que el estado fundamental cambia al aumentar el campo magnético:

- Para $h = 0$ el estado fundamental está doblemente degenerado, pues hay dos estados con magnetizaciones $m_S = \pm 1/2$ con la misma energía.
- Para $0 < h < h_1 \approx 0.8$, el estado fundamental tiene magnetización $m_S = 1/2$.
- Para $h_1 < h < h_2 \approx 2.4$ el estado fundamental tiene $m_S = 3/2$.
- Para $h > h_2$ se alcanza la saturación del sistema, $m_S = 5/2$.

²utilizamos el término magnetización para referirnos al autovalor de $S_{total}^{(z)}$ del sistema.

³denotamos m_S a la magnetización por celda unidad. En cambio, denotamos m a la magnetización normalizada a la magnetización de saturación, m_{sat} . Para el caso de una celda unidad de 5 espines $1/2$, $m_{sat} = 5/2$.

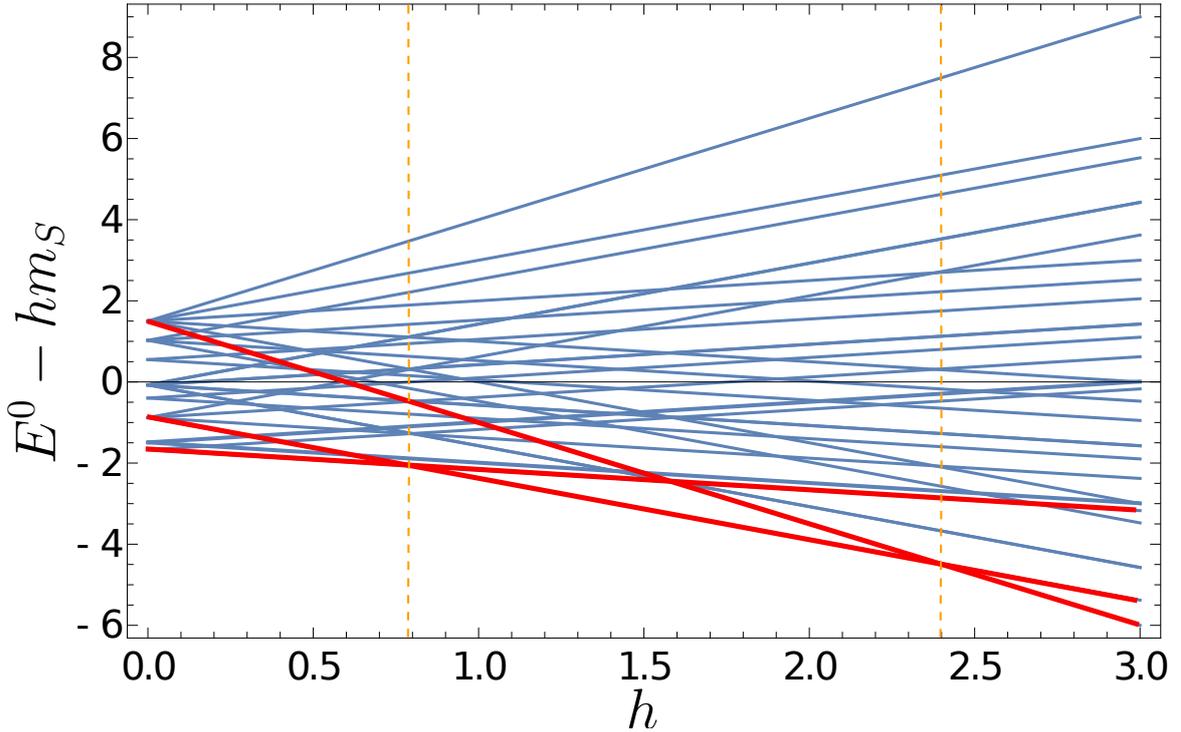


Figura 2: Energías de la plaqueta aislada como función del campo externo h aplicado, fijando $(J_3, J_2) = (0.9, 1.1)$. En rojo se marcan los estados de menor energía. Con línea a trazos vertical marcamos los campos $h_1 \approx 0.8$ y $h_2 \approx 2.4$ para los cuales se dan las transiciones entre estados de menor energía. Para $h = 0$, el estado fundamental está doblemente degenerado, pues hay dos estados con $m_S = \pm 1/2$ con la misma energía.

Para $0 < h < h_1$, el estado fundamental tiene magnetización $m_S = 1/2$. Para $h_1 < h < h_2$ el estado fundamental tiene $m_S = 3/2$. Para $h > h_2$ se alcanza la saturación del sistema, $m_S = 5/2$.

Habiendo obtenido todas las energías del sistema, construimos la función de partición en el ensamble canónico

$$Q(T, h) = \sum_{n=1}^d e^{-\beta E_n(h)} \quad (29)$$

con $\beta = 1/T$, donde absorbimos la constante de Boltzmann k_B en T , de manera tal que T , h y J_{ij} tienen todas las mismas unidades. A partir de la función de partición puede obtenerse toda la termodinámica del sistema. En particular, calculamos la magnetización

$$m = \frac{1}{m_{sat}} \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(Q(T, h))}{\partial h} \quad (30)$$

con $m_{sat} = 5/2$, y construimos curvas de magnetización a diferentes temperaturas, permitiendo observar la formación de mesetas⁴ conforme la temperatura tiende a cero, como mostramos en la figura 3.

⁴comúnmente llamadas plateaux, en francés.

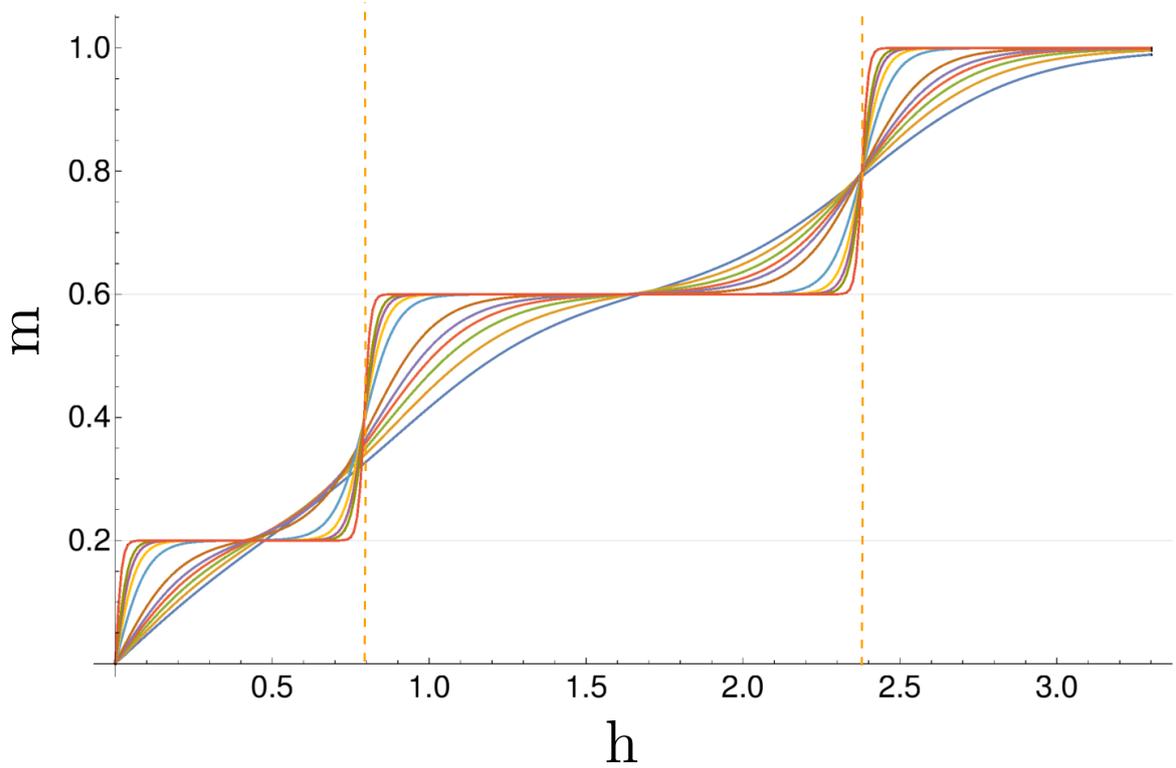


Figura 3: Curvas de magnetización (normalizada a la magnetización de saturación) para la plaqueta aislada a diferentes temperaturas, fijando $J_1 = 1$ y $(J_3, J_2) = (0.9, 1.1)$. Se observa la formación de los plateaux de magnetización en $m = 1/5$ y $m = 3/5$ al disminuir la temperatura. Con línea a trazos marcamos los campos h_1 y h_2 correspondientes a las transiciones entre estados de mínima energía en la figura 2. Las temperaturas utilizadas para este gráfico están entre $T = 1/100$ y $T = 1/4$.

Observamos en la figura 3 que a temperatura finita $T \neq 0$ la magnetización tiende a cero cuando el campo magnético externo lo hace. Esto se debe a que la magnetización (30) se calcula a partir de un promedio estadístico en un ensamble de sistemas, y a campo externo nulo el Hamiltoniano es invariante frente a la transformación $\mathbf{S}_i \rightarrow -\mathbf{S}_i$ (time reversal). Tomando el límite $T \rightarrow 0$ la magnetización (30) se discretiza:

$$m(T = 0, h) = \begin{cases} 1/5, & \text{si } h \in (0, h_1) \\ 3/5, & \text{si } h \in (h_1, h_2) \\ 1, & \text{si } h > h_2 \end{cases} \quad (31)$$

En concordancia con la figura 2, notando que $m = m_S/m_{sat}$.

Límite de alta anisotropía: Modelo de Ising

Consideramos un Hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico \mathcal{H} , y colocamos el eje coordenado z en la dirección del campo magnético externo.

$$\mathcal{H} = \sum_{(i,j)} \Gamma_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{h} \quad (32)$$

Luego, si consideramos el límite de alta anisotropía, $J \gg \Gamma$, despreciamos los términos que contienen a los operadores de espín en el plano xy , eliminando así las fluctuaciones cuánticas, obteniendo

$$\mathcal{H} \approx \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i^z S_j^z - h \sum_i S_i^z \quad (33)$$

Al permitir sólo un eje de magnetización, en cada sitio hay dos estados posibles: valor de espín positivo (spin up \uparrow) o negativo (spin down \downarrow) a lo largo de ese eje. Como los acoplamientos J_{ij} son positivos, la energía de intercambio entre dos espines se minimiza al disponerse estos antiparalelos. Sin embargo, para minimizar la energía de una celda unidad hay que considerar los distintos valores posibles de acoplamientos. En la figura 4 se muestran dos estados fundamentales en la celda unidad, a campo cero, para los casos:

- a) $J_2 > J_1, J_3$. Estado fundamental de magnetización $m = 1/5$.
- b) $J_2 < J_1, J_3$. Estado fundamental de magnetización $m = 3/5$.

Cabe mencionar que ambos estados fundamentales tienen una degeneración $D = 2$ a campo nulo, ya que una transformación $S_i \rightarrow -S_i$ deja invariante (33) con $h = 0$.

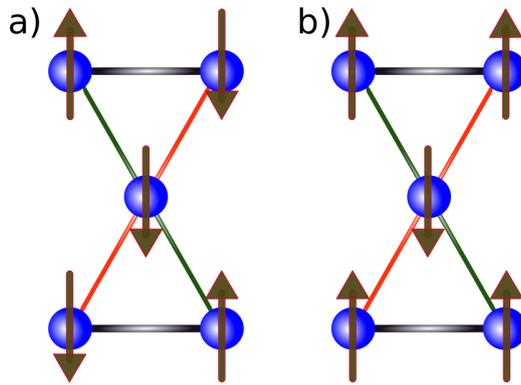


Figura 4: Configuraciones de espines que minimizan la energía en el límite de alta anisotropía de Ising. En los casos a) y b) se obtienen estados con magnetización $m = 1/5$ y $m = 3/5$ respectivamente, con m normalizada a la magnetización de saturación.

Luego, al acoplarse N celdas con $J_4 > 0$ se obtienen, si N es par, estados con $m = 1/5$ para el caso a) y $m = 0$ para el caso b), representados en la figura 5.

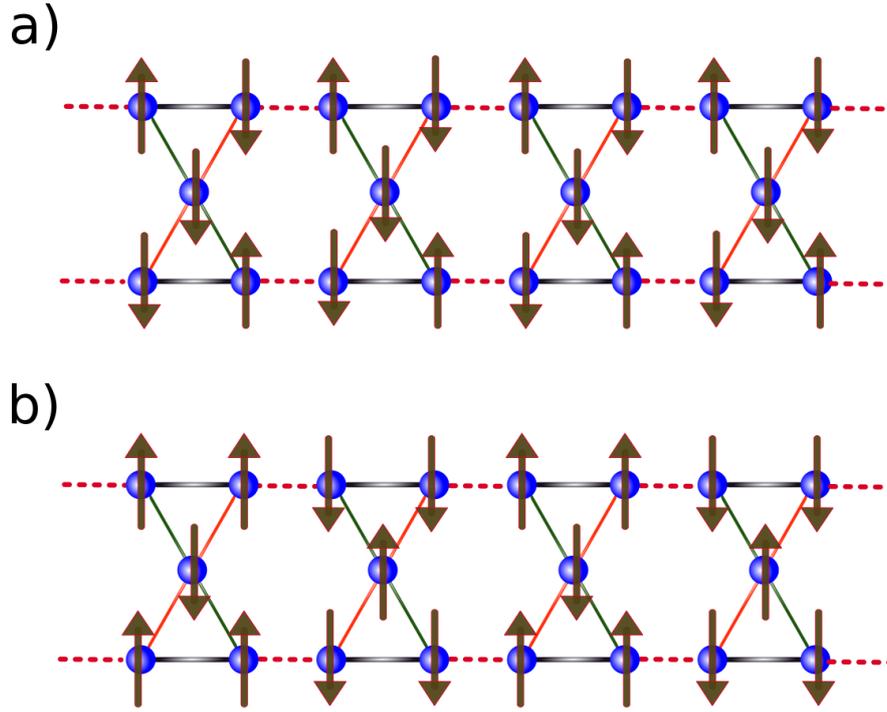


Figura 5: Estado fundamental para $N = 4$ celdas acopladas, en el límite de alta anisotropía de Ising. En los casos a) y b) se obtienen estados con momento magnético $m = 1/5$ y $m = 0$ respectivamente, con m normalizada a la magnetización de saturación.

Si se aplica un campo magnético suficientemente fuerte como para alinear los espines acoplados por J_4 , en la figura 5 b), es posible construir un estado con $m = 3/5$, como el presentado en la figura 6.

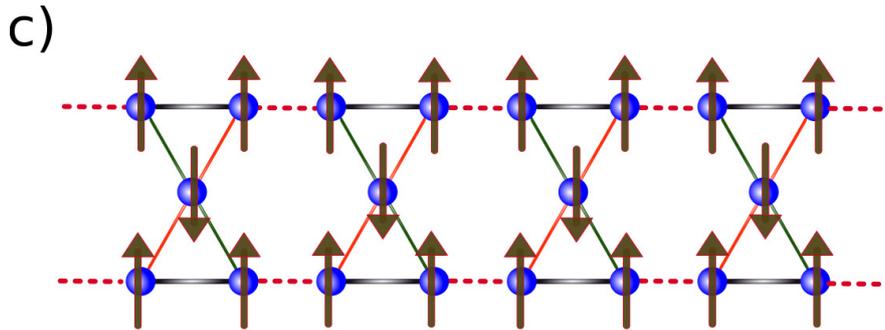


Figura 6: Estado fundamental para $N = 4$ celdas acopladas, con $m = 3/5$ (con m normalizada a la magnetización de saturación), en el límite de alta anisotropía de Ising, para el caso en que se aplica un campo magnético externo suficientemente fuerte como para alinear los espines acoplados por J_4 .

Es posible entonces en el límite de Ising obtener estados fundamentales con las magnetizaciones correspondientes a los plateaux encontrados en el límite de plaquetas aisladas, pudiendo comprender así clásicamente (y de manera elemental) el orden magnético en cada uno.

Representaciones de los operadores de espín

Es usual realizar transformaciones que mapeen un Hamiltoniano correspondiente a un sistema de espines en otro, escrito en términos de operadores de creación y aniquilación de partículas (bosones o fermiones) en segunda cuantificación, para estudiar el sistema de manera equivalente, utilizando herramientas conocidas para sistemas de partículas como mecánica estadística, excitaciones colectivas, scattering, etc. Sin embargo, para que el mapeo sea físico, son necesarias dos condiciones:

En primer lugar, que se satisfagan las relaciones de conmutación que satisfacen los operadores de espín; el álgebra de $SU(2)$

$$[S_j^\alpha, S_k^\beta] = \delta_{jk} i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} S_k^\gamma \quad (34)$$

con α, β, γ denotando las componentes cartesianas $\{x, y, z\}$, y j, k indexando espines de, por ejemplo, una red cristalina.

En segundo lugar, debe tenerse en cuenta que los operadores de espín actúan sobre un espacio de Hilbert de dimensión finita, $d_s = 2s + 1$, con s el espín.

Para escribir a los operadores de espín en el lenguaje de operadores de creación y aniquilación, primero es conveniente introducir a los operadores escalera

$$\begin{aligned} S^+ &= S^x + iS^y \\ S^- &= S^x - iS^y \end{aligned} \quad (35)$$

ya que estos aumentan o disminuyen el momento angular⁵ según

$$\begin{aligned} S^+ |s, m\rangle &= \sqrt{s(s+1) - m(m+1)} |s, m+1\rangle \\ S^- |s, m\rangle &= \sqrt{s(s+1) - m(m-1)} |s, m-1\rangle \end{aligned} \quad (36)$$

⁵Parafreando, crean o destruyen unidades de momento angular.

Luego, el Hamiltoniano de Heisenberg en ausencia de campo magnético se escribe

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \left(\frac{S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+}{2} + S_i^z S_j^z \right) \quad (37)$$

y las relaciones de conmutación (34) pueden reescribirse como

$$\begin{aligned} [S_j^z, S_k^\pm] &= \pm \delta_{jk} S^\pm \\ [S_j^+, S_k^-] &= 2 \delta_{jk} S^z \end{aligned} \quad (38)$$

Excitaciones elementales magnéticas

Las excitaciones elementales se modelan con cuasipartículas, que dominan la física de bajas energías junto a la naturaleza del estado fundamental del sistema, y dan lugar a lo que se conoce como ondas de espín en materiales. Las cuasipartículas están caracterizadas por sus números cuánticos (espín, momento, etc) y su relación de dispersión, o relación energía-momento. Experimentalmente, se suelen detectar con scattering inelástico de neutrones.

Magnones

Los magnones son cuasipartículas de masa nula, carga nula y espín 1 (bosones). En la figura 7 se esquematiza la presencia de magnones en una cadena unidimensional ferromagnética de espines $\frac{1}{2}$. Considerando el Hamiltoniano de Heisenberg (37), se tiene un estado fundamental con espines alineados, $|0\rangle$ ⁶. Luego, aplicamos S_i^- para invertir un espín, obteniendo un estado excitado, $|i\rangle \equiv S_i^- |0\rangle$.⁷ El estado resultante no es autoestado del Hamiltoniano, ya que, por ejemplo, $S_i^+ S_{i+1}^- |i\rangle = |i+1\rangle$, es decir, al aplicar \mathcal{H} se generan estados donde traslada el espín invertido, con $\langle i|j\rangle = 0$ para $i \neq j$. Físicamente, al pasar el tiempo la perturbación del estado fundamental se mueve por la cadena.

La diferencia en la magnetización de la cadena entre el estado fundamental $|0\rangle$ y un estado excitado $|i\rangle$ es exactamente 1, el espín del magnón.

⁶En ausencia de campo magnético, el eje z se coloca en una dirección arbitraria. El estado fundamental en este caso está altamente degenerado, pues una rotación arbitraria de $SU(2)$ deja invariante el Hamiltoniano.

⁷Esto puede ocurrir, por ejemplo, por trabajar a temperatura finita ($T \neq 0$).

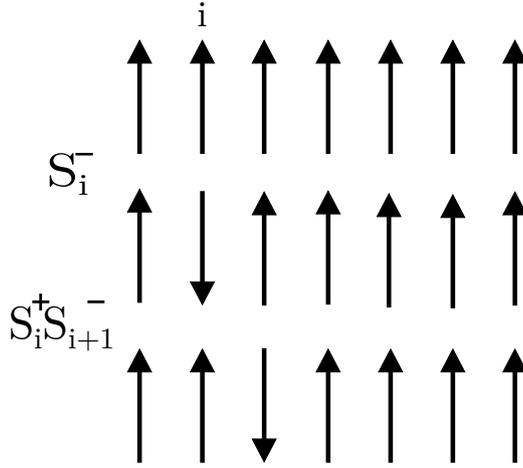


Figura 7: Esquema de una cadena ferromagnética 1D de espines 1/2. Al crearse una excitación (magnón) sobre el estado fundamental, los términos $S^+ S^-$ en el Hamiltoniano de Heisenberg se trasladan a lo largo de la cadena.

Espinones

Los espinones son cuasipartículas de masa nula y carga nula con espín 1/2 (fermiones)[4] que surgen de la fraccionización de magnones. En particular, aparecen en la cadena antiferromagnética 1D (figura 9, de la siguiente sección). En la figura 8 presentamos un esquema de un estado de Neel, o estado fundamental de Ising antiferromagnético, donde un magnón se fraccionaliza en dos paredes de dominio que se desplazan por la cadena al aplicar el Hamiltoniano de Heisenberg.

Es importante destacar que el estado de Neel no es el estado fundamental del Hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético (6) utilizado en este trabajo, con el eje z colocado en la dirección del campo magnético, ya que ni siquiera es un autoestado del mismo.

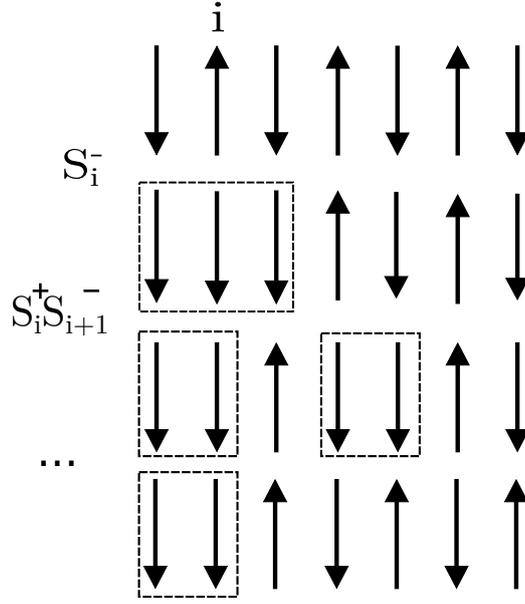


Figura 8: Esquema de una cadena antiferromagnética 1D de espines 1/2 en el estado de Neel, o estado fundamental clásico. Al crearse una excitación (magnón), debido a los términos S^+S^- en el Hamiltoniano de Heisenberg esta se fraccionaliza en dos paredes de dominio. En la última línea del esquema, las paredes de dominio se separaron en la cadena.

Bosones de Holstein-Primakov

Para estudiar excitaciones de baja energía al rededor del estado fundamental clásico en un sistema de espines, pueden utilizarse los bosones de Holstein-Primakov.

$$\begin{aligned}
 S_i^z &= s - a_i^\dagger a_i \\
 S_i^+ &= \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2s}} \sqrt{2s} a_i \\
 S_i^- &= \sqrt{1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2s}} \sqrt{2s} a_i^\dagger
 \end{aligned} \tag{39}$$

donde a^\dagger y a son operadores de creación y aniquilación, y satisfacen el álgebra de conmutación bosónica

$$\begin{aligned}
 [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij} \\
 [a_i, a_j] &= 0 \\
 [a_i^\dagger, a_j^\dagger] &= 0
 \end{aligned} \tag{40}$$

permitiendo que el mapeo preserve las relaciones de conmutación entre los operadores de espín (34). Los operadores a y a^\dagger actúan sobre estados $|n_1, \dots, n_N\rangle$, con $n_j = 0, 1, 2, \dots$

De los infinitos estados en el espacio de Fock, sólo $N(2s + 1)$ son físicos, aquellos que cumplen

$$n_j \leq 2s \quad (41)$$

En el límite de espín grande $s \gg N_i = a_i^\dagger a_i$, escribimos

$$\begin{aligned} S_i^z &= s - a_i^\dagger a_i \\ S_i^+ &\approx \sqrt{2s} a_i \\ S_i^- &\approx \sqrt{2s} a_i^\dagger \end{aligned} \quad (42)$$

y las relaciones de conmutación (34) se cumplen a orden $\frac{N_i}{s}$.

En el límite $s \gg 1$, se tiene que los operadores de espín conmutan entre sí, por lo que se interpreta como un límite de espines clásicos. Además, si $s \gg N_i = a_i^\dagger a_i$, se cumple el vínculo (41) y el mapeo es equivalente físicamente.

Ferromagneto

En esta sección estudiamos el mapeo (42) para una cadena unidimensional de N sitios equiespaciados y un espín por sitio, con condiciones periódicas de contorno. Si $J_{i,j} = -J < 0$, el Hamiltoniano de Heisenberg en ausencia de campo externo se escribe

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (43)$$

donde sumar sobre $\langle i, j \rangle$ significa que la interacción entre espines se considera sólo a primeros vecinos. Un estado fundamental de (43) resulta

$$|gs\rangle = \otimes_j |\uparrow\rangle_j \quad (44)$$

donde $|\uparrow\rangle_j$ representa un estado de máxima proyección del espín j a lo largo del eje z .

Este estado fundamental está altamente degenerado, ya que una rotación arbitraria de $SU(2)$ deja invariante el Hamiltoniano (43). Aplicando el mapeo (42) al Hamiltoniano ferromagnético (43) se obtiene

$$\mathcal{H} = -Js \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i - a_i^\dagger a_i - a_j^\dagger a_j + -J \sum_{\langle i,j \rangle} (s^2 + a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j) \quad (45)$$

Conservando sólo el término de orden dominante en s se excluye el término de interacción (por lo que la aproximación será válida para pocas excitaciones), y resulta, a menos de una constante:

$$\mathcal{H} = -Js \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i - a_i^\dagger a_i - a_j^\dagger a_j \quad (46)$$

Debido a la simetría de traslación en el sistema, el Hamiltoniano cuadrático (46) se diagonaliza pasando a la base de momentos según

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikx} a_k \\ a_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_x e^{-ikx} a_x \end{aligned} \quad (47)$$

Donde ahora x denota cada sitio de la cadena y $k = \frac{2\pi}{L}n$ con $L = Na$ y $n = 0, \dots, N-1$. Como la transformación es unitaria, los nuevos operadores a_k y a_k^\dagger también satisfacen las relaciones de conmutación bosónicas (40).

Como resultado, se obtiene

$$\mathcal{H} = 2sJ \sum_k (1 - \cos(k)) a_k^\dagger a_k \quad (48)$$

y a bajas energías, la relación de dispersión resulta parabólica⁸ (como quasipartículas no relativistas)

$$\epsilon(k) = 2sJ k^2 \quad (49)$$

Si bien en el modelo de spin-waves trabajamos en el límite de espines grandes, $s \gg 1$, al estudiar un sistema de espines $\frac{1}{2}$ se reemplaza $s = \frac{1}{2}$ en el resultado final.

Antiferromagneto

Si en la misma cadena unidimensional, se consideran acoplamientos antiferromagnéticos de la forma $J_{i,j} = J > 0$, el Hamiltoniano de Heisenberg \mathcal{H} ahora se escribe

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (50)$$

y el estado de mínima energía clásica se alcanza con una configuración alternada de espines (estado de Neel).

$$|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle \quad (51)$$

⁸Una excitación sin gap de este tipo, es decir, aquella con energía arbitrariamente pequeña en el límite de largas longitudes de onda se denomina en lenguaje de física de partículas ‘massless Goldstone mode’.

Sin embargo, este no es el estado fundamental de (50), ya que ni siquiera es un autoestado del mismo.

Para estudiar el antiferromagneto utilizando los resultados del caso ferromagnético, debe observarse que en el estado de Neel (51) hay dos subredes de espines alineados, digamos subred A, de espines up, y B, de espines down. Entonces, si se realiza una rotación de una subred (por ejemplo, la B) que lleve S^z a $-S^z$, se obtiene que en término de estos operadores transformados que el estado fundamental del sistema rotado tiene todos los espines alineados.

Una rotación posible corresponde a rotar la subred B al rededor del eje x en π , según

$$\mathbf{S}'_B = R_x(\pi)\mathbf{S}_B R_x(\pi) \quad (52)$$

con $R_x(\pi) = e^{i\frac{\sigma_x}{2}\pi}$, de manera tal que

$$\begin{aligned} S'_B{}^x &= S_B^x \\ S'_B{}^y &= -S_B^y \\ S'_B{}^z &= -S_B^z \end{aligned} \quad (53)$$

Por lo tanto, se tiene que para espines vecinos

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}'_j = \frac{S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^-}{2} - S_i^z S_j^z \quad (54)$$

Aplicando el mapeo bosónico (42) al sistema rotado, despreciando el término $\mathcal{O}(s^0)$ de forma análoga al caso ferromagnético, se obtiene

$$\mathcal{H} = Js \sum_{\langle i,j \rangle} a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j \quad (55)$$

Luego, pasando a la base de momentos según (47), se obtiene

$$\mathcal{H} = Js \sum_k e^{ik} a_k a_{-k} + e^{-ik} a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + 2a_k^\dagger a_k \quad (56)$$

Donde, si se toma a k en la primera zona de Brillouin, la suma es simétrica con respecto al límite superior e inferior, entonces

$$\mathcal{H} = Js \sum_k \cos(k) (a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) + a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k} \quad (57)$$

el cual no es diagonal. Para diagonalizar (57) es necesario realizar una transformación de Bogoliubov, de la forma

$$\begin{aligned}
b_k &= \alpha_k a_k + \beta_k a_{-k}^\dagger \\
c_k &= \beta_k a_k + \alpha_k a_{-k}^\dagger
\end{aligned}
\tag{58}$$

donde pueden elegirse por simplicidad α y β reales. Para que esta transformación preserve el álgebra bosónica (40), debe ser unitaria. Es decir $\alpha_k^2 - \beta_k^2 = 1$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = Js \sum_k [\cos(k)(\alpha_k^2 + \beta_k^2) - 2\alpha_k\beta_k] (b_k^\dagger c_k^\dagger + b_k c_k) + 2(\beta_k^2 - \alpha_k\beta_k \cos(k)) + \\
[-2\alpha_k\beta_k \cos(k) + \alpha_k^2 + \beta_k^2] (c_k^\dagger c_k + b_k^\dagger b_k)
\end{aligned}
\tag{59}$$

Si se impone la condición adicional $[\cos(k)(\alpha_k^2 + \beta_k^2) - 2\alpha_k\beta_k] = 0$, entonces el Hamiltoniano (59) conserva el número de partículas y se fijan los valores de α y β en términos de k .

Finalmente, se obtiene

$$\mathcal{H} = Js \sum_k |\sin(k)| (1 + c_k^\dagger c_k + b_k^\dagger b_k)
\tag{60}$$

la relación de dispersión resulta entonces

$$\epsilon(k) = Js |\sin(k)|
\tag{61}$$

y a bajas energías, es lineal en k , como quasipartículas ultra-relativistas

$$\epsilon(k) \sim |k|
\tag{62}$$

En la figura 9 mostramos resultados experimentales [5] de la relación de dispersión de espinones comparados con el resultado teórico obtenido por des Cloizeaux y Pearson [6] (dCP), $\hbar\omega = \frac{\pi}{2} J |\sin(q)|$, modelando la cadena antiferromagnética 1D de espín 1/2 de Heisenberg, para el compuesto $KCuGaF_6$, utilizando scattering inelástico de neutrones, a campo magnético nulo.

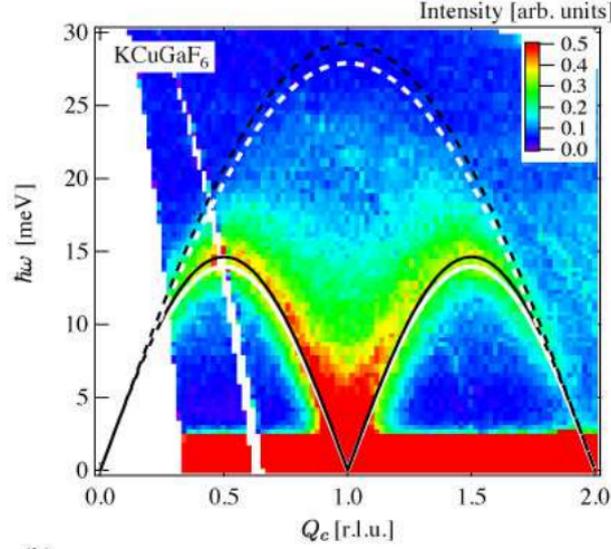


Figura 9: Relación de dispersión $\hbar\omega(Q_c)$ de espinores y comparación con modelo dCP, a temperatura $T = 5.8K$ utilizando AMATERAS con $E_{incidente} = 34.9 meV$, a campo magnético nulo. La línea blanca (negra) expresa el modo dCP con $J = 8.87 meV$ ($J = 9.31 meV$).

Fermiones de Jordan-Wigner

En este caso estudiamos la misma cadena unidimensional, pero pasando a una representación fermiónica. Identificamos al i -ésimo espín en el estado $|\uparrow\rangle$ ($|\downarrow\rangle$) con la presencia (ausencia) un fermión sin espín en el i -ésimo sitio. Los estados resultan entonces

$$|n_1, \dots, n_N\rangle \quad (63)$$

donde $n_j=0,1$ por la estadística fermiónica, y el mapeo se escribe

$$\begin{aligned} S_j^z &= n_j - \frac{1}{2} \\ S_j^+ &= c_j^\dagger e^{i\pi\phi_j} \\ S_j^- &= e^{-i\pi\phi_j} c_j \end{aligned} \quad (64)$$

donde c^\dagger y c son operadores de creación y aniquilación, y satisfacen el álgebra de conmutación fermiónica

$$\begin{aligned} \{c_i, c_j^\dagger\} &= \delta_{ij} \\ \{c_i, c_j\} &= 0 \\ \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} &= 0 \end{aligned} \quad (65)$$

Para que al realizar el mapeo se siga satisfaciendo el álgebra (34) en término de estos operadores fermiónicos, es necesario introducir al ‘operador de cadena’

$$\phi_j = \sum_{l=1}^{j-1} n_l \quad (66)$$

donde $n_j = c_j^\dagger c_j$.

Puede probarse por aplicación directa sobre estados $|n_1, \dots, n_N\rangle$ que

$$\begin{aligned} c_j e^{i\pi n_j} &= -c_j \\ c_j^\dagger e^{i\pi n_j} &= c_j^\dagger \end{aligned} \quad (67)$$

Si tomamos el modelo de Heisenberg XXZ,

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{J_i}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+ + 2\Delta S_i^z S_{i+1}^z) \quad (68)$$

donde Δ es el parámetro de anisotropía del modelo, al realizar el mapeo (64), se obtiene

$$\mathcal{H} = \sum_n \frac{J_n}{2} \left\{ c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n + 2\Delta \left(c_n^\dagger c_n - \frac{1}{2} \right) \left(c_{n+1}^\dagger c_{n+1} - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} J_n \right\} \quad (69)$$

Luego, en el límite $\Delta = 0$ (o modelo XX), el término de interacciones se desprecia y el Hamiltoniano anterior se diagonaliza pasando a la base de momentos, obteniéndose

$$\sum_k c_k^\dagger c_k (J \cos(k) - h) \quad (70)$$

Se obtiene así un hamiltoniano de fermiones sin espín no interactuantes, moviéndose por la cadena y el campo magnético en el problema de espines ahora se interpreta como un potencial químico en el sistema fermiónico.

Bosones de Schwinger

Los bosones de Schwinger constituyen una representación muy utilizada por su simplicidad, por ejemplo para estudiar sistemas 2D en campo medio, y son parte de la formulación de teorías en términos de integrales de camino y estados coherentes de espín. El mapeo consiste en escribir

a los operadores de espín en términos de dos operadores bosónicos a y b según

$$\begin{aligned} S^+ &= a^\dagger b \\ S^- &= b^\dagger a \\ S^z &= \frac{a^\dagger a - b^\dagger b}{2} \end{aligned} \quad (71)$$

donde los operadores a y b satisfacen el álgebra (40), y entre ellos cumplen $[a, b] = 0$. En esta representación, los autoestados de S^z son de la forma

$$|n_a, n_b\rangle = \frac{(a^\dagger)^{n_a}}{\sqrt{(n_a)!}} \frac{(b^\dagger)^{n_b}}{\sqrt{(n_b)!}} |0\rangle \quad (72)$$

donde de los infinitos estados posibles en la ecuación anterior, sólo $2s + 1$ son físicos.

En esta base, se tiene

$$\begin{aligned} S^+ |n_a, n_b\rangle &= \sqrt{(n_a + 1)n_b} |n_a + 1, n_b - 1\rangle \\ S^- |n_a, n_b\rangle &= \sqrt{n_a(n_b + 1)} |n_a - 1, n_b + 1\rangle \end{aligned} \quad (73)$$

donde puede observarse que en el subespacio físico, $n_a + n_b = cte$.

Para hallar el valor de esta constante, puede por ejemplo considerarse un estado de máxima proyección $|s, m = s\rangle$, actuar sobre él con S^z y obtener

$$n_a + n_b = 2s \quad (74)$$

Además, según (71) y (72), se tiene

$$n_a - n_b = 2m \quad (75)$$

Entonces resulta $n_a = s + m$ y $n_b = s - m$.

Por lo tanto, podemos escribir los estados $|s, m\rangle$ en la nueva representación según

$$|s, m\rangle = \frac{(a^\dagger)^{s+m}}{\sqrt{(s+m)!}} \frac{(b^\dagger)^{s-m}}{\sqrt{(s-m)!}} |0\rangle \quad (76)$$

Esta ecuación es importante en teoría de grupos y momento angular, pues muestra que un objeto complejo con momento angular s esta compuesto por $2s$ momentos angulares $1/2$. Como simple ejemplo, para espines $1/2$ se los estados se escriben

$$\begin{aligned} |+\rangle &= a^\dagger |0\rangle \\ |-\rangle &= b^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (77)$$

Los bosones de Schwinger y los de Holstein-Primakov están cercanamente relacionados. Al eliminar el bosón a usando el constrain (74), la correspondencia resulta

Schwinger		Holstein-Primakov
b	\Leftrightarrow	b
a	\Leftrightarrow	$\sqrt{2s - b^\dagger b}$

Técnicas numéricas

Con el desarrollo de las memorias de estado sólido y el avance en la potencia de cálculo de los procesadores de última generación los cálculos numéricos han cobrado un rol fundamental en física teórica. En particular, en el estudio de materiales magnéticos en bajas dimensiones algunas técnicas numéricas como Montecarlo, Lanczos y DMRG se han vuelto una herramienta fundamental.

En esta sección damos una pequeña introducción a las técnicas numéricas utilizadas en este trabajo. Para más información sobre ellas, puede consultarse la bibliografía [7] [8].

Método Lanczos

Esta técnica permite determinar numéricamente el estado fundamental y algunos estados excitados para Hamiltonianos correspondientes a un número finito de sitios. La idea principal del método es construir una base (base de Krylov) donde el Hamiltoniano tiene una representación tridiagonal:

$$H = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & \dots & 0 \\ b_1 & a_1 & \ddots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & a_{n-1} & b_{n-2} \\ 0 & \dots & & b_{n-2} & a_n \end{pmatrix} \quad (78)$$

La base de Krylov se construye a partir un vector arbitrario $|\psi_0\rangle$, aplicando reiteradas veces el operador hermítico H para formar el conjunto $\{|\psi_0\rangle, H|\psi_0\rangle, H^2|\psi_0\rangle, \dots, H^{n-1}|\psi_0\rangle\}$ y ortogonalizarlo usando Gram-Schmidt. Si alguna información del estado fundamental es conocida, como su espín, se inicia la iteración con un estado que contenga ese número cuántico, para reducir la dimensión del espacio de Hilbert de trabajo.

Luego, el estado fundamental puede obtenerse a partir de subrutinas estándar⁹ y se retorna a la base original. Es por esta razón que la limitación principal de la técnica Lanczos es el tamaño de H . En general, debido al error numérico los autoestados calculados no son ortogonales entre

⁹por ejemplo, factorización QR.

sí, por lo que puede utilizarse el estado fundamental obtenido como nuevo vector inicial $|\psi_0\rangle$ y recomenzar para lograr mejor precisión.

Una aproximación importante, aplicable cuando la dimensión n del espacio de Hilbert es muy grande consiste en truncar la base de Krylov y conservar sólo $m \ll n$ estados. En ese caso, los autovalores de mayor módulo de la matriz representada en la base truncada convergen a aquellos de (78), y es por ello que esta aproximación se utiliza para calcular energías del estado fundamental y de los primeros estados excitados.

DMRG

DMRG (density matrix renormalization group) es un conjunto de algoritmos que permite estudiar sistemas cuánticos¹⁰ 1D que poseen un número de sitios grande, limitando la dimensión del espacio de Hilbert, d , a un valor determinado.

El algoritmo consiste en construir una cadena de sitios, descrita por d estados, que puede ser diagonalizada exactamente con Lanczos (o cualquier otro método de diagonalización). Luego, para aumentar el tamaño del sistema se agrega un sitio a la cadena y se cambia de base a aquella de la matriz densidad, utilizando sólo los d autovectores de esta que posean los autovalores más grandes. Así, puede describirse un sistema más grande sin aumentar la dimensión del espacio de hilbert de trabajo.

Puede optarse por trabajar con un algoritmo de tamaño infinito, agregando un número arbitrariamente grande de sitios o con un algoritmo de tamaño finito, en el cual se fija el número de sitios de la cadena, pudiendo elegir en ambos casos condiciones de contorno periódicas o abiertas. En este trabajo elegimos utilizar el algoritmo de tamaño finito (con un número par de celdas unidad) y condiciones de contorno periódicas, asegurando la simetría de traslación en el sistema.

Curvas de magnetización con DMRG

Utilizando DMRG podemos obtener la energía del estado fundamental para cada autovalor de S^z , es decir, para cada magnetización posible del sistema. Para sistemas finitos la cantidad de sectores de magnetización dependerá del número N de celdas y de la cantidad de celdas por sitio¹¹. Al aplicar un campo magnético, la energía del estado fundamental correspondiente a cada sector se modifica, debido al término Zeeman, en una cantidad $-\hbar S^z$ dependiente de la magnetización. Por lo tanto, al considerar los estados fundamentales en cada sector de magnetización se tiene un conjunto de rectas análogo a aquél de la ecuación (29), graficado en

¹⁰En todos los cálculos realizados con DMRG en este trabajo utilizamos el Hamiltoniano de Heisenberg a $T = 0$.

¹¹En el caso de la cadena Kagomé, dado un número par N de celdas, los valores posibles son $S^z = 0, 1, \dots, m_{sat}$, donde $m_{sat} = N \times \frac{5}{2}$ es la magnetización de saturación.

la figura 2 para el caso particular de una sola celda unidad. Al igual que en la plaqueta, la magnetización del sistema será aquella que, dado un valor de h , determine la mínima energía.

Montecarlo

En el algoritmo Montecarlo clásico, a diferencia de DMRG, no se recorta el espacio de Hilbert del sistema, y puede aplicarse también en dos y tres dimensiones. Para implementarlo, modelamos la cadena Kagomé en el límite clásico de Ising, con condiciones de contorno periódicas y utilizamos la dinámica de Metrópolis-Hasting, que consiste en:

1. Sortear un espín en la cadena
2. Calcular la diferencia de energía ΔE correspondiente a si el espín fuese invertido
3. Si $\Delta E < 0$ entonces se invierte el espín.
4. Si $\Delta E > 0$ entonces se invierte con probabilidad $e^{-\beta\Delta E}$
5. Repetir desde 1 hasta alcanzar el equilibrio.

Realizamos un proceso de Annealing, que consiste en tomar un estado inicial aleatorio para la configuración de espines, termalizar el sistema a alta temperatura¹² y luego bajarla gradualmente hasta llegar a la temperatura deseada. El proceso de Annealing es importante pues a altas temperaturas las grandes fluctuaciones térmicas permiten que el sistema no se quede atorado en mínimos locales de energía. Para obtener valores medios, realizamos 1500 veces cada simulación, exportando cada configuración final de espines, creando así ensambles de sistemas independientes.

Es importante remarcar que para esta simulación utilizamos siempre un campo magnético $h \neq 0$, condición necesaria para que el sistema se ordene magnéticamente, debido a su dimensionalidad.

¹²Temperatura alta, en este contexto, significa una temperatura para la cual el sistema se encuentre en la fase paramagnética. Dado que absorbimos la constante de Boltzmann, k_B , en T; altas temperaturas son aquellas donde $\frac{T}{\max(|J_{ij}|)} > 1$.

Resultados y Discusión

Cálculos numéricos

Para estudiar las propiedades magnéticas del sistema a $T = 0$ construimos curvas de magnetización mediante la técnica DMRG. En la figura 10 se muestra el diagrama de fases obtenido utilizando cadenas de 60 sitios, con condiciones de contorno periódicas, para un conjunto de pares de acoplamientos (J_3, J_2) , fijando¹³ $J_1 = 1$ y $J_4 = 0.8$. La región azul simboliza la presencia de un plateau de magnetización en $m_S = 1/2$ en la curva de magnetización correspondiente, con m_S la magnetización por celda unidad. La región roja corresponde a la presencia de un plateau en $m_S = 3/2$, mientras que en la región verde se evidencia la presencia de ambos plateaux.

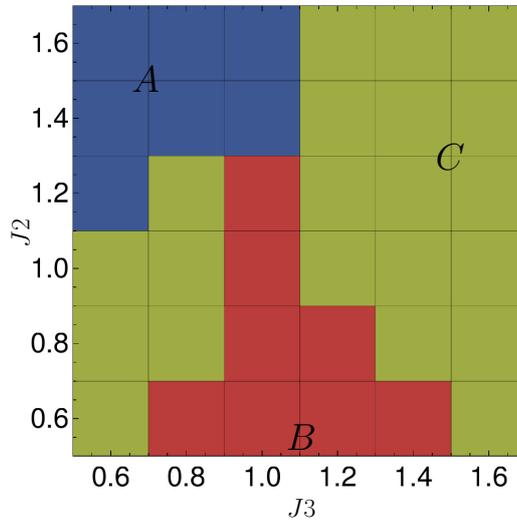


Figura 10: Diagrama de fases magnéticas observadas al construir las curvas de magnetización de la cadena Kagomé variando los acoplamientos J_3 y J_2 , fijando $J_1 = 1$ y $J_4 = 0.8$. La región azul simboliza la presencia de un plateau de magnetización en $m_S = 1/2$ en la curva de magnetización correspondiente, con m_S la magnetización por celda unidad. La región roja corresponde a la presencia de un plateau en $m_S = 3/2$, mientras que en la región verde se evidencia la presencia de ambos plateaux. Los puntos A, B y C se eligieron como representativos de cada fase para mostrar sus curvas de magnetización (figuras 11, 13 y 14).

¹³Con esta convención, el campo magnético $h = g\mu_B H$ tiene las mismas unidades que los acoplamientos J_{ij}

El valor de m_S en cada plateau observado se corresponde con los valores predichos por el criterio de Oshikawa-Yamanaka-Affleck [9], el cual establece que para una cadena antiferromagnética de espín S y magnetización por celda m_S , la presencia de gap en el espectro de energías sólo es posible si¹⁴

$$(S - m_S) \in \mathbb{N}$$

La figura 11 muestra la curva de magnetización correspondiente al punto A del diagrama de fases (figura 10), es decir $(J_3, J_2) = (0.7, 1.5)$, $J_1 = 1$ y $J_4 = 0.8$. Normalizamos m su valor de saturación $m_{sat} = N \times \frac{5}{2}$, con $N = 12$, el número de celdas unidad.

El carácter escalonado de la curva es debido a que el sistema es finito, y tiene por lo tanto un número también finito de magnetizaciones accesibles. En el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, m se torna una variable continua en el intervalo $[0, 1]$.

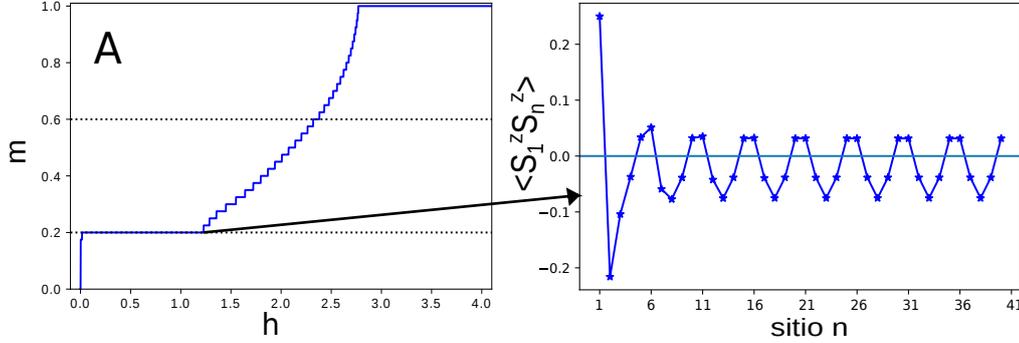


Figura 11: Curva de magnetización (normalizada a la magnetización de saturación) y correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ sobre el plateau inferior, para $(J_3, J_2) = (0.7, 1.5)$. El apartamiento de las correlaciones con respecto a $\pm 1/4$ corresponde a que el sistema está lejos del régimen tipo Ising que, sin embargo puede reproducir este plateau y la signatura de estas correlaciones como mostramos en la figura 5 a).

Complementariamente, calculamos sobre el plateau de magnetización las correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ para identificar el ordenamiento de los espines.

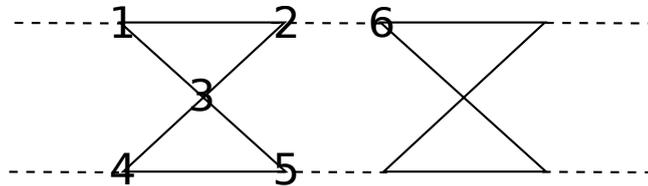


Figura 12: Esquema de la cadena Kagomé con la numeración utilizada para referenciar cada sitio.

¹⁴Para la cadena Kagomé, considerando que la celda unidad está conformada por 5 espines, como se hizo en este trabajo, se tiene $S = \frac{5}{2}$. Entonces los plateaux permitidos poseen magnetizaciones por celda $m_S = \frac{3}{2}$ y $m_S = \frac{1}{2}$. En cambio, si se toma como celda unidad un conjunto de 10 espines, entonces $S = 5$, dando lugar a valores diferentes de m_S sobre los cuales puede darse un plateau de magnetización.

Para graficar las correlaciones numeramos a los sitios según se indica en la figura 12. Puede observarse en la figura 11 que la autocorrelación del espín 1 con sí mismo es máxima e igual a $\frac{1}{4}$, como es de esperarse pues es un espín $\frac{1}{2}$. Luego, si $\langle S_1^z S_n^z \rangle = \pm \frac{1}{4}$ se entiende semi-clásicamente que los espines están dispuestos paralelos (+) o antiparalelos (-). El apartamiento de $\langle S_1^z S_n^z \rangle = \pm \frac{1}{4}$ se debe a la presencia de fluctuaciones cuánticas e indica que hay componentes no nulas en las correlaciones en el plano xy y que el sistema se aleja del límite de Ising. Sin embargo, la configuración de espines de Ising de la figura 5 a) reproduce correctamente la signatura de las correlaciones observadas en la figura 11.

En las figuras 13 y 14 mostramos análogamente las curvas de magnetización correspondientes a las regiones B y C del diagrama de fases (figura 10), y las correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ sobre cada plateau de magnetización.

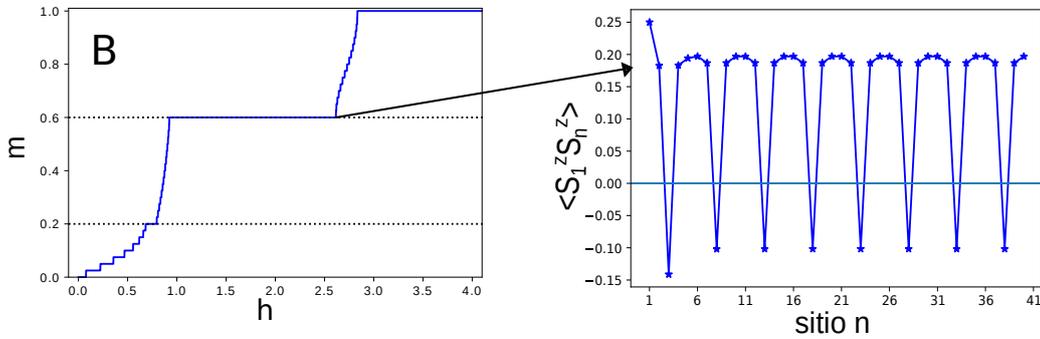


Figura 13: Curva de magnetización (normalizada a la magnetización de saturación) y correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ sobre el plateau superior, para el punto B del diagrama de fases, es decir $(J_3, J_2) = (1.1, 0.5)$. Clásicamente, pueden obtenerse este plateau y la signatura de estas correlaciones como mostramos en la figura 6.

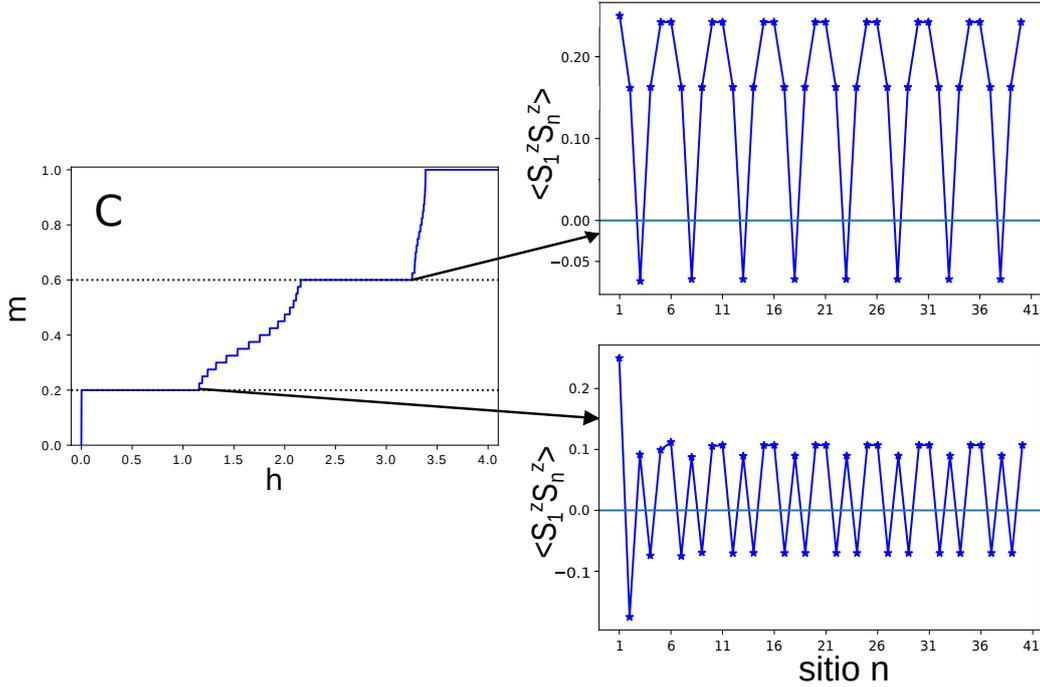


Figura 14: Curva de magnetización (normalizada a la magnetización de saturación) y correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ sobre ambos plateaux, para el punto C del diagrama de fases, es decir $(J_3, J_2) = (1.5, 1.5)$. En el plateau inferior las correlaciones no coinciden en signatura con aquellas de la figura 11. Entendemos esto clásicamente, ya que en este caso el acoplamiento que no minimiza su energía es J_1 , pues $J_1 < J_3 = J_2$. En la figura 11, en cambio, $J_3 < J_1$.

Montecarlo

Se realizaron simulaciones de tipo Montecarlo clásico de un modelo de Ising en presencia de campo magnético, con $L = 100$ celdas y condiciones de contorno periódicas, para $J_1 = 1$, $J_2 = J_3 = 1.5$, y $J_4 = 0.8$ (correspondiente a la región C de la figura 10). Al fijar los acoplamientos de esta manera, fijamos la escala de energías del problema y el sistema de unidades. Con esta convención, la temperatura¹⁵ T y el campo magnético h tienen las mismas unidades que los acoplamientos J_{ij} .

En la figura 15 se muestra una curva de Energía versus Temperatura, en la cual puede verse que al rededor de $T = 1$ hay un punto de inflexión. Para $T < 0.5$ se alcanza la energía clásica del sistema $E_{clásica} = 2s^2(J_1 - J_2 - J_3 - J_4) - hs$ y el sistema está perfectamente ordenado; no hay más fluctuaciones térmicas, lo que puede observarse con una ‘tasa de aceptación’ nula en el algoritmo.

En la figura 16 se presentan curvas de magnetización calculadas para diferentes temperaturas. Puede verse que para $T > 1$, gobierna el régimen clásico, donde el sistema es paramagnético. Al bajar la temperatura, se forman los plateaux de magnetización en $m = 1/5$ y $m = 3/5$ vistos

¹⁵absorbemos en T a la constante de Boltzman, k_B .

con DMRG (figura 14).

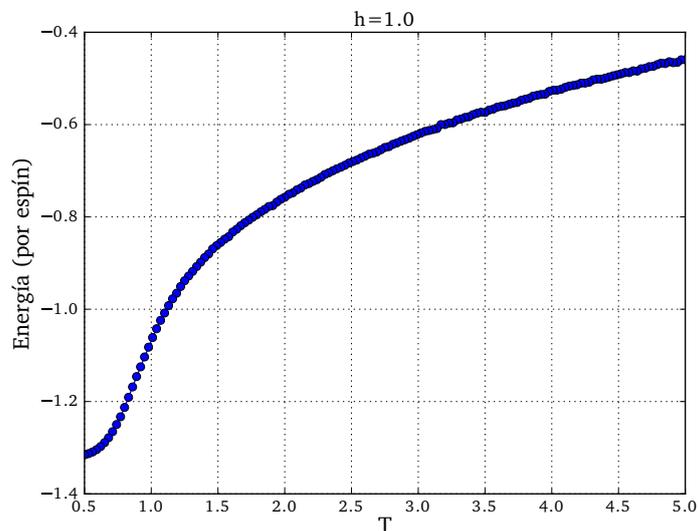


Figura 15: Curva de Energía por espín versus Temperatura. Para $T < 1$ el sistema se ordena magnéticamente. Para $T < 0.5$ no hay más fluctuaciones térmicas, y se alcanza la energía clásica del sistema $E_{clásica} = 2s^2(J_1 - J_2 - J_3 - J_4) - hs$. En este gráfico $s = 1$. Como la simulación montecarlo es clásica, el valor de s no cambia la física del sistema.

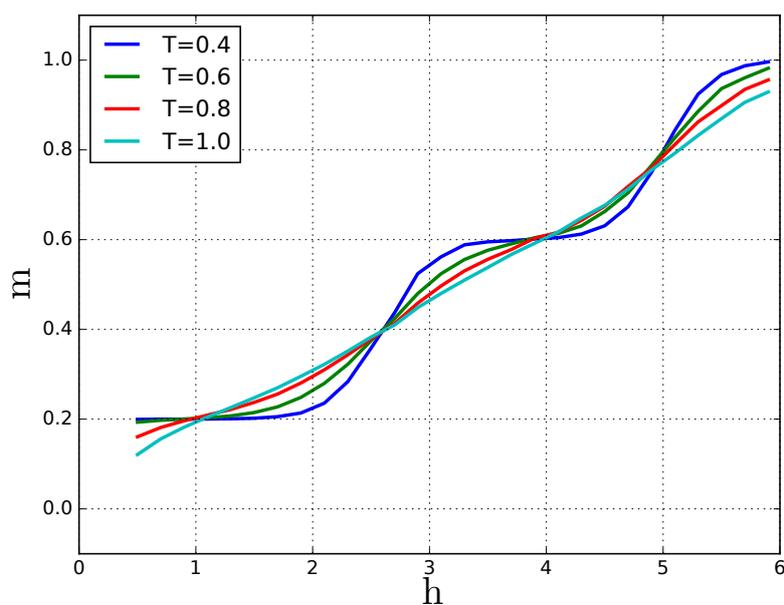


Figura 16: Curvas de magnetización a diferentes temperaturas. Para $T > 1$ el sistema se encuentra en la fase paramagnética. Para $T < 1$ comienzan a formarse los plateaus de magnetización en $m = 1/5$ y $m = 3/5$.

En la figura 17 se muestran curvas de susceptibilidad magnética por espín

$$\chi = \frac{5L}{T}(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (79)$$

y calor específico por espín

$$Cv = \frac{1}{5LT^2}(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (80)$$

como función de la temperatura a campo magnético $h = 1$, pudiendo observarse la transición entre la fase paramagnética y la fase ordenada magnéticamente al bajar la temperatura. Introducir un campo magnético es necesario para que el sistema se ordene magnéticamente debido a su dimensionalidad¹⁶.

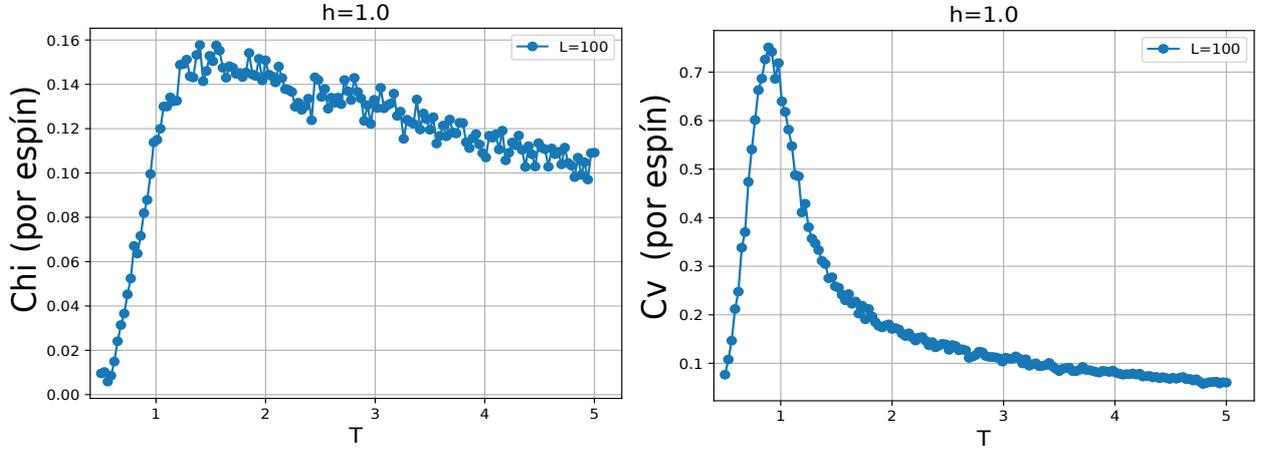


Figura 17: Susceptibilidad magnética y calor específico (por espín) como función de la temperatura calculados con simulación montecarlo, para $L=100$ celdas unidad. Se observa que alrededor de $T = 1$ hay una transición desde la fase sin orden magnético hacia la fase ordenada magnéticamente al bajar la temperatura.

En la figura 18 se presentan los resultados de las correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ calculadas a diferentes temperaturas. Observamos que al bajar lo suficiente la temperatura, no hay fluctuaciones térmicas y se obtiene una configuración de espines de Ising perfectamente ordenada a lo largo de la cadena (curva roja). En cambio, elevando la temperatura se observa que, en valor medio en el ensamble, los espines no están ya paralelos o antiparalelos entre sí. Además, comparamos estos resultados con los obtenidos utilizando DMRG (que utiliza el modelo de Heisenberg) y destacamos la similitud entre los efectos de las fluctuaciones de origen térmico y las fluctuaciones de origen cuántico sobre las correlaciones $\langle S^z S^z \rangle$.

¹⁶El modelo de Ising no presenta simetría continua de rotación en el plano xy , por lo tanto no está en las hipótesis del teorema de Mermin y Wagner, como puede observarse en la magnetización espontánea en la red cuadrada en 2D (Resultado de Onsanger).

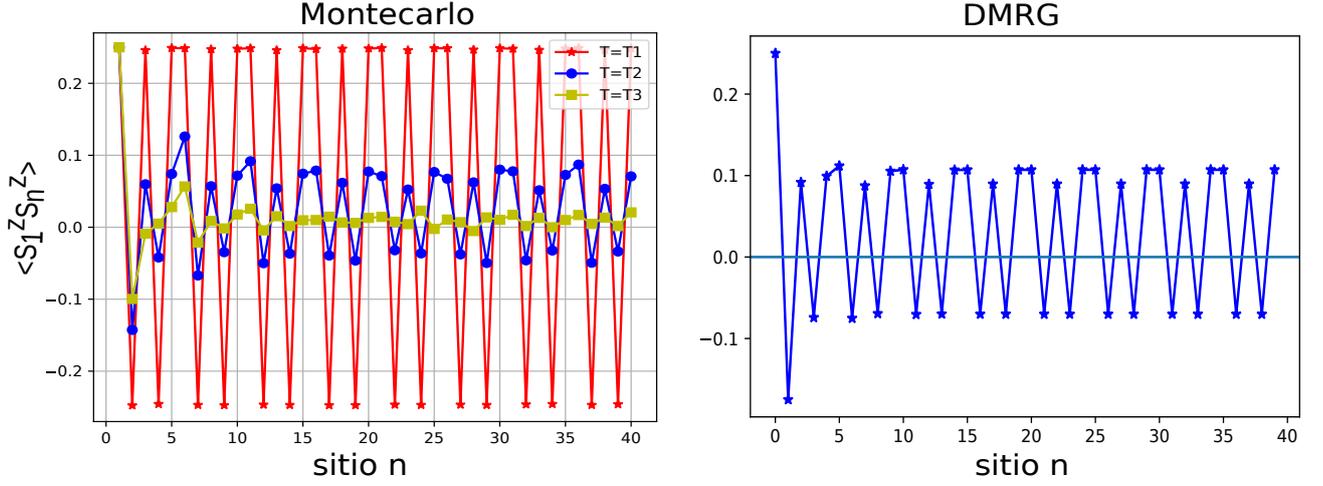


Figura 18: A la izquierda, mostramos las correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ calculadas a partir de una simulación montecarlo (en el límite de Ising), a diferentes temperaturas. $T_1 = 0.5$ es suficientemente pequeña para que no haya fluctuaciones térmicas. Para $T_2 = 1.1$ y $T_3 = 1.7$ se pierde progresivamente el orden magnético. A derecha, de forma comparativa, mostramos las mismas correlaciones calculadas con DMRG (espines de Heisenberg a $T = 0$). Destacamos la similitud de los efectos en las fluctuaciones térmicas y cuánticas sobre las correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$.

Bosones de Holstein Primakov (spin waves)

Usando el mapeo de Holstein Primakov presentado en la introducción para el caso antiferromagnético, estudiamos las correcciones cuánticas al estado fundamental clásico de Ising sobre el plateau de $m = \frac{1}{5}$, para el caso $J_2, J_3 > J_1$ (figura 19), que puede inferirse a partir de las correlaciones calculadas con DMRG, Montecarlo (figura 18), o bien puede construirse disponiendo espines up/down que minimicen la energía clásica de Ising en la cadena como desarrollamos en la sección ‘límites del modelo’.

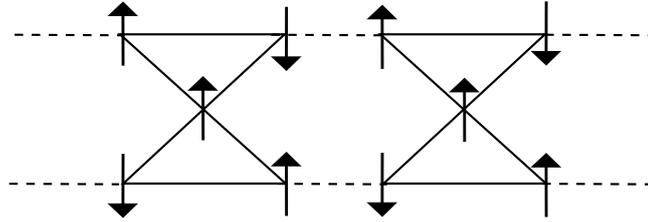


Figura 19: Estado fundamental clásico de Ising sobre el plateau inferior, con $m = 1/5$, inferido a partir de las correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ de la figura 18 para el caso $J_2, J_3 > J_1$.

Para ello, escribimos

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_{int} + \mathcal{H}_h \quad (81)$$

donde \mathcal{H}_c corresponde al Hamiltoniano de una celda unidad, \mathcal{H}_{int} corresponde al Hamiltoniano de interacción entre celdas unidades y \mathcal{H}_h corresponde al término Zeeman.

Indexando los sitios de la cadena según la figura 12, escribimos

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_c &= \sum_n J_1 (\mathbf{S}_{n1} \cdot \mathbf{S}_{n3} + \mathbf{S}_{n3} \cdot \mathbf{S}_{n5}) + J_2 (\mathbf{S}_{n1} \cdot \mathbf{S}_{n2} + \mathbf{S}_{n4} \cdot \mathbf{S}_{n5}) + \\
&\quad J_3 (\mathbf{S}_{n2} \cdot \mathbf{S}_{n3} + \mathbf{S}_{n3} \cdot \mathbf{S}_{n5}) \\
\mathcal{H}_{int} &= \sum_n J_4 (\mathbf{S}_{n5} \cdot \mathbf{S}_{n+1,4} + \mathbf{S}_{n2} \cdot \mathbf{S}_{n+1,1}) \\
\mathcal{H}_h &= -h \sum_{n,i} S_{ni}^z
\end{aligned} \tag{82}$$

Para obtener un estado fundamental con todos los espines alineados, partimos de la configuración de espines de Ising con mínima energía sobre el plateau (figura 19) y rotamos los espines en los sitios 2 y 4, indexados según la figura 12.

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_c &= \sum_n J_1 \left(\frac{S_{n1}^+ S_{n3}^- + S_{n1}^- S_{n3}^+}{2} + S_{n1}^z S_{n3}^z + \frac{S_{n3}^+ S_{n5}^- + S_{n3}^- S_{n5}^+}{2} + S_{n3}^z S_{n5}^z \right) + \\
&\quad J_2 \left(\frac{S_{n1}^+ S_{n2}^+ + S_{n1}^- S_{n2}^-}{2} - S_{n1}^z S_{n2}^z + \frac{S_{n2}^+ S_{n4}^+ + S_{n2}^- S_{n4}^-}{2} - S_{n2}^z S_{n4}^z \right) + \\
&\quad J_3 \left(\frac{S_{n2}^+ S_{n3}^+ + S_{n2}^- S_{n3}^-}{2} - S_{n2}^z S_{n3}^z + \frac{S_{n3}^+ S_{n4}^+ + S_{n3}^- S_{n4}^-}{2} - S_{n3}^z S_{n4}^z \right) \\
\mathcal{H}_{int} &= J_4 \sum_n \frac{S_{n5}^+ S_{n+1,4}^+ + S_{n5}^- S_{n+1,4}^-}{2} - S_{n5}^z S_{n+1,4}^z + \frac{S_{n2}^+ S_{n+1,1}^+ + S_{n2}^- S_{n+1,1}^-}{2} - S_{n2}^z S_{n+1,1}^z \\
\mathcal{H}_h &= -h \sum_n S_{n1}^z - S_{n2}^z + S_{n3}^z - S_{n4}^z + S_{n5}^z
\end{aligned} \tag{83}$$

Realizando el mapeo a operadores bosónicos y escribiéndolos en la base de momentos k , se sigue

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_c &= s \sum_k J_1 \left(a_{k1} a_{k3}^\dagger + a_{k1}^\dagger a_{k3} - (N_{k1} + N_{k3}) + a_{k3} a_{k5}^\dagger + a_{k1}^\dagger a_{k5} - (N_{k3} + N_{k5}) \right) + \\
&\quad J_2 \left(a_{k1} a_{-k2} + a_{k1}^\dagger a_{-k2}^\dagger + (N_{k1} + N_{k2}) + a_{k4} a_{-k5} + a_{k4}^\dagger a_{-k5}^\dagger + (N_{k4} + N_{k5}) \right) + \\
&\quad J_3 \left(a_{k2} a_{-k3} + a_{k2}^\dagger a_{-k3}^\dagger + (N_{k2} + N_{k3}) + a_{k3} a_{-k4} + a_{k3}^\dagger a_{-k4}^\dagger + (N_{k3} + N_{k4}) \right) \\
\mathcal{H}_{int} &= s J_4 \sum_k e^{-ik} a_{k5}^\dagger a_{-k4}^\dagger + e^{ik} a_{k5} a_{-k4} + (N_{k5} + N_{k4}) + e^{-ik} a_{k2}^\dagger a_{-k1}^\dagger + e^{ik} a_{k2} a_{-k1} + (N_{k2} + N_{k1}) \\
\mathcal{H}_h &= -h \sum_k (N_{k1} - N_{k2} + N_{k3} - N_{k4} + N_{k5})
\end{aligned} \tag{84}$$

Al realizar el mapeo de Holstein Primakov surge además un término constante por cada celda unidad, igual a la energía clásica de Ising del sistema.

$$E_{clásica} = 2s^2 (J_1 - J_2 - J_3 - J_4) - hs \tag{85}$$

Diagonalización

El Hamiltoniano (84) puede diagonalizarse por una transformación de Bogoliubov. Sin embargo, para calcular el espectro de energías decidimos utilizar un método equivalente presente en la bibliografía [10], y desarrollado en el apéndice. Para diagonalizar \mathcal{H} , simetrizamos¹⁷ la suma en k y escribimos

$$\mathcal{H} = \sum_k \left\{ \begin{pmatrix} a_{\lambda k}^\dagger & a_{\lambda - k} \end{pmatrix} \mathcal{D}_k \begin{pmatrix} a_{\lambda k} \\ a_{\lambda - k}^\dagger \end{pmatrix} + E_{clásica} + C_1 \right\} \tag{86}$$

donde compactamos la notación con $\lambda = 1, \dots, 5$, y la llamada matriz dinámica, \mathcal{D}_k , resulta

¹⁷Dado que k está en la primera zona de Brillouin, puede escribirse $\sum_k f(k) = \sum_k \frac{f(k) + f(-k)}{2}$ para una función arbitraria f .

$$\mathcal{D}_k = \begin{pmatrix} \frac{h}{2} + \beta & 0 & \frac{J_1}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{J_2}{4} + \frac{J_4\gamma}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha - \frac{h}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{J_2}{4} + \frac{J_4\gamma^*}{4} & 0 & \frac{J_3}{4} & 0 & 0 \\ \frac{J_1}{4} & 0 & \frac{h}{2} + \frac{J_3}{2} - \frac{J_1}{2} & 0 & \frac{J_1}{4} & 0 & \frac{J_3}{4} & 0 & \frac{J_3}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha - \frac{h}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{J_3}{4} & 0 & \frac{J_2}{4} + \frac{J_4\gamma}{4} \\ 0 & 0 & \frac{J_1}{4} & 0 & \frac{h}{2} + \beta & 0 & 0 & 0 & \frac{J_2}{4} + \frac{J_4\gamma^*}{4} & 0 \\ 0 & \frac{J_2}{4} + \frac{J_4\gamma}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{h}{2} + \beta & 0 & \frac{J_1}{4} & 0 & 0 \\ \frac{J_2}{4} + \frac{J_4\gamma^*}{4} & 0 & \frac{J_3}{4} & 0 & 0 & 0 & \alpha - \frac{h}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{J_3}{4} & 0 & \frac{J_3}{4} & 0 & \frac{J_1}{4} & 0 & \frac{h}{2} + \frac{J_3}{2} - \frac{J_1}{2} & 0 & \frac{J_1}{4} \\ 0 & 0 & \frac{J_3}{4} & 0 & \frac{J_2}{4} + \frac{J_4\gamma}{4} & 0 & 0 & 0 & \alpha - \frac{h}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J_2}{4} + \frac{J_4\gamma^*}{4} & 0 & 0 & 0 & \frac{J_1}{4} & 0 & \frac{h}{2} + \beta \end{pmatrix} \quad (87)$$

Con $\alpha = \frac{J_2 + J_3 + J_4}{4}$, $\beta = \frac{-J_1 + J_2 + J_4}{4}$ y $\gamma = e^{ik}$, habiendo reemplazado $s = \frac{1}{2}$.

Según el orden de los operadores bosónicos que aparece en (86), al simetrizar los términos diagonales N_{ki} surgen nuevos términos constantes, ya que, usando el álgebra (40),

$$\sum_k N_{ki} = \sum_k a_{ki}^\dagger a_{ki} = \frac{1}{2} \sum_k \left(a_{ki}^\dagger a_{ki} + a_{-ki}^\dagger a_{-ki} \right) = \sum_k \left(\frac{a_{ki}^\dagger a_{ki} + a_{-ki}^\dagger a_{-ki}}{2} - \frac{1}{2} \right) \quad (88)$$

agrupando estos términos constantes, definimos

$$C_1 = -\frac{h}{2} + 2s (J_1 - J_2 - J_3 - J_4) \quad (89)$$

La matriz a diagonalizar, según el método, es $\sigma \mathcal{D}_k$, con

$$\sigma = \text{Diag}(1, 1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1, -1) \quad (90)$$

Luego de la diagonalización (numérica), se obtiene

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} b_{\lambda k}^\dagger & b_{\lambda - k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_\lambda(k, h) & 0 \\ 0 & -\epsilon_\lambda(k, h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\lambda k} \\ b_{\lambda - k}^\dagger \end{pmatrix} \quad (91)$$

donde la $\epsilon_\lambda(k, h) > 0$, y el signo negativo no es físico; aparece debido a la introducción de σ .

Finalmente, obtenemos un Hamiltoniano diagonal de bogoliuvones bosónicos no interactuantes

$$\mathcal{H} = \sum_k \left\{ E_0 + \sum_\lambda 2\epsilon_\lambda(k, h) b_{\lambda k}^\dagger b_{\lambda k} \right\} \quad (92)$$

Con $E_0 = E_{\text{clásica}} + C_1 + C_2$ la energía del estado fundamental por celda unidad, donde $C_2 =$

$$\frac{1}{N} \sum_{k,\lambda} \epsilon_\lambda(k, h).$$

En la figura 20 se muestran los resultados obtenidos para las bandas de energía $\epsilon(k, h)$, para el caso particular de $J_1 = 0.7$, $J_2 = 1.5$, $J_3 = 1.2$, $J_4 = 1$ y $h = 0.3$.

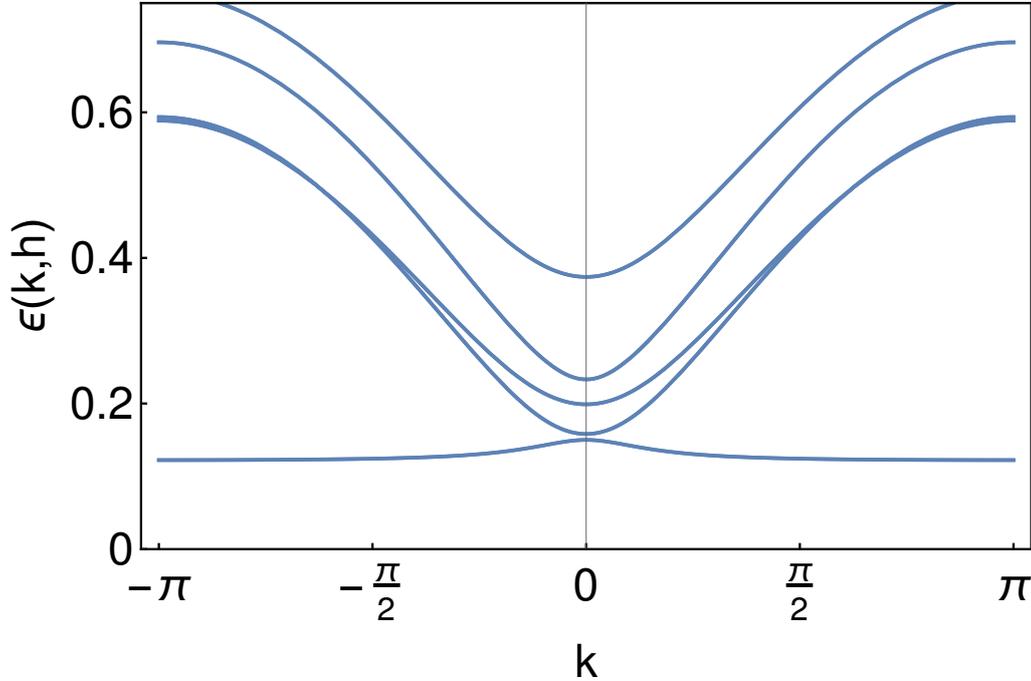


Figura 20: Bandas de energía en la aproximación de spin-waves, para $J_1 = 0.7$, $J_2 = 1.5$, $J_3 = 1.2$, $J_4 = 1$ y $h = 0.3$. La presencia de gap y el signo positivo de las bandas es consistente con el hecho de tener excitaciones bosónicas sobre el plateau de magnetización.

Puede observarse en las bandas la validez de la aproximación (de forma básica) de spin-waves, ya que al mover el valor de los acoplamientos y del campo magnético, se pueden obtener bandas sin gap, energías negativas o con parte imaginaria no nula, indicando que la aproximación dejó de ser válida.

En la figura 21 se muestra la comparación entre las energías del estado fundamental (por celda unidad) que se obtienen según (i) Modelo de Ising (o energía clásica), (ii) Spin-waves, (iii) DMRG, como función de J_1 , con $J_2 = 1.5$, $J_3 = 1.2$, $J_4 = 0.8$ y $h = 0.3$. Puede verse que al aumentar J_1 la aproximación de spin-waves se aleja del valor que arroja el cálculo numérico utilizando DMRG. Para $J_1 = 0.8$, la aproximación de spin-waves deja de valer, pues la relación de dispersión perdió el gap. Una interpretación intuitiva de la figura 21 consiste en notar que cuanto más distintos entre sí son los acoplamientos, menor es la competencia para minimizar la energía de una única forma (en contra de la frustración geométrica), por eso es de esperar que la aproximación semiclásica de spin waves funcione mejor para acoplamientos muy distintos entre sí.

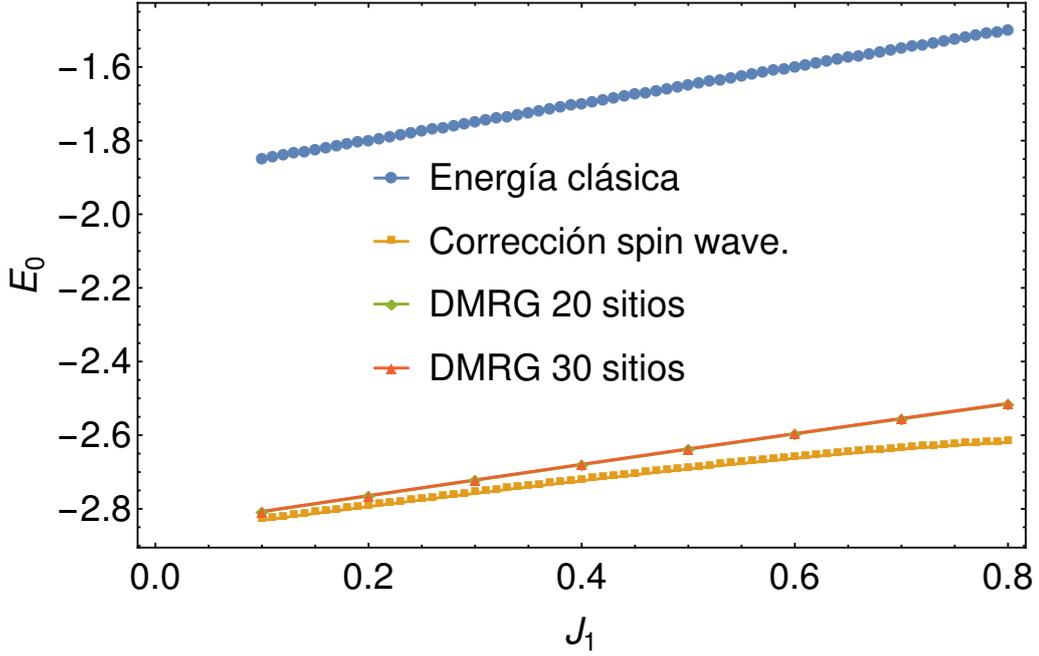


Figura 21: Comparación de la energía del estado fundamental del sistema según el cálculo clásico (Ising), DMRG (dos resultados superpuestos para 20 y 30 sitios) y aproximación de spin-waves, para $h = 0.3$, $J_2 = 1.5$, $J_3 = 1.2$, $J_4 = 0.8$. Al aumentar J_1 la aproximación spin-waves se aleja del valor arrojado por DMRG. Para $J_1 = 0.8$ se pierde el gap en el espectro de energías, indicando que la aproximación dejó de ser válida.

Excitaciones localizadas en la cadena Kagomé

Siguiendo la línea de un trabajo reciente de la bibliografía [11], consideramos el Hamiltoniano de Heisenberg XXZ

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left\{ \Delta S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right\} - h S^z \quad (93)$$

Para campo magnético h suficientemente grande, el estado fundamental del Hamiltoniano (93) es el vacío de magnones:

$$|0\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle \quad (94)$$

Las excitaciones de menor energía sobre (94) serán estados de un magnón, $|1\rangle$, de la forma:

$$|1\rangle = \frac{1}{c} \sum_l a_l S_l^- |0\rangle \quad (95)$$

donde c es una constante de normalización, que asegura $\langle 1|1\rangle = 1$.

Para ciertas combinaciones de J_{ij} en el Hamiltoniano (93), la mínima relación de dispersión de los magnones, $\epsilon_0(k)$, resulta independiente de k (flat dispersion). En ese caso, los magnones pueden localizarse en una región finita de la cadena. Estas excitaciones localizadas pueden tener N posiciones diferentes, donde N es el número de celdas unidad en la cadena. Luego, puede construirse un estado que contenga n excitaciones localizadas no interactuantes, siempre que estén suficientemente lejos entre sí, todas con la misma energía. El número máximo de excitaciones no interactuantes en la cadena Kagomé es $n_{m\acute{a}x} = \frac{N}{2}$. Es posible entonces que este conjunto de $n_{m\acute{a}x}$ excitaciones localizadas constituya la excitación de menor energía.

En ese caso, se espera un salto en la magnetización $\delta m = \frac{1}{n_s} = 0.2$ (con $n_s = 5$ el número de sitios en la celda unidad) justo antes de llegar a la saturación, para un número par de celdas en la cadena Kagomé.

Denotando L a la región donde se localiza un magnón aislado, esquematizada en la figura 22, entonces en (95) $a_l \neq 0$ sólo para $l \in L$.

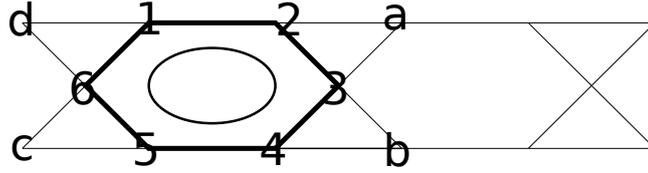


Figura 22: Esquema de la cadena Kagomé donde se señala con trazo grueso la zona L donde se localiza el magnón, simbolizado por la elipse. Los números simbolizan la indexación de los sitios de la zona L. Las letras simbolizan la indexación de los sitios que están en interacción con la zona L.

Para hallar el estado $|1\rangle$, descomponemos el Hamiltoniano en tres partes

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{L-R} + \mathcal{H}_R \quad (96)$$

donde \mathcal{H}_L corresponde a la parte local, \mathcal{H}_{L-R} corresponde a interacción de la parte local con el resto de la cadena y \mathcal{H}_R corresponde al resto de la cadena. Luego, obtuvimos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_L |1\rangle = & \left\{ \frac{\Delta}{4} \left(\sum_{l \in L} J_l \right) + h \left(1 - \frac{N_L}{2} \right) \right\} |1\rangle + \\ & \left(-\frac{\Delta}{2c} \right) \sum_{l \in L} a_l (J_l + J_{l-1}) S_l^- |0\rangle + \frac{1}{2c} \sum_{l \in L} (a_{l-1} J_{l-1} + a_{l+1} J_l) S_l^- |0\rangle \end{aligned} \quad (97)$$

donde $N_L = 6$ y J_l es la constante de acoplamiento entre el espín l -ésimo y el espín $(l + 1)$ -ésimo. Y por otra parte:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{L-R} |1\rangle = & \left\{ -\frac{h}{2} N_\alpha + \frac{\Delta}{4} \left(\sum_{\langle l, \alpha \rangle} J_{l\alpha} \right) \right\} |1\rangle + \\ & \left(\frac{-\Delta}{2c} \right) \sum_{\langle l, \alpha \rangle} J_{l\alpha} a_l S_l^- |0\rangle + \frac{1}{2c} \sum_{\langle l, \alpha \rangle} J_{l\alpha} a_l S_\alpha^- |0\rangle \end{aligned} \quad (98)$$

Con $\alpha = a, b, c, d$ (ver figura 22) y $N_\alpha = 4$. Para que $|1\rangle$ sea autoestado de \mathcal{H} es necesaria, según (98), la condición

$$\sum_{\langle l, \alpha \rangle} J_{l\alpha} a_l = 0, \quad \forall \alpha \quad (99)$$

Para satisfacer la condición (99), elegimos

$$\begin{cases} a_l = (-1)^l \\ J_{l\alpha} = J \end{cases} \quad (100)$$

Fijando (100), $|1\rangle$ es autoestado de \mathcal{H} si y sólo si

$$J' = J \frac{2\Delta + 1}{\Delta + 1} \quad (101)$$

Donde llamamos J' al acoplamiento que conecta dos celdas contiguas (llamado J_4 en el resto del trabajo) y J todo otro acoplamiento.

Con el objetivo de observar el salto en la curva de magnetización predicho analíticamente calculamos las curvas de magnetización utilizando DMRG para tres anisotropías distintas, $\Delta = 0, 1/2, 1$ con $J = 1$ y $J' = J \frac{2\Delta+1}{\Delta+1}$, es decir, satisfaciendo la condición (101) y observamos el salto en la magnetización de magnitud $\delta m = 0.2$ justo antes de llegar a la saturación (figura 23).

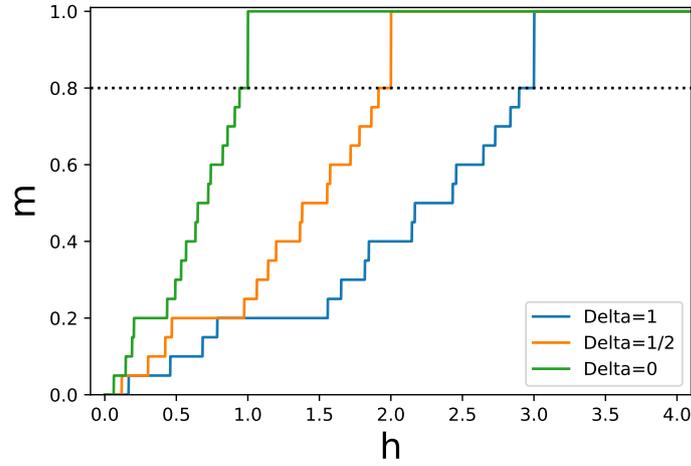


Figura 23: Curvas de magnetización para distintas anisotropías $\Delta = 0, 1/2, 1$, utilizando $J = 1$ y $J' = J \frac{2\Delta+1}{\Delta+1}$ (satisfaciendo la condición (101)). En los tres los casos puede apreciarse el salto de amplitud $\delta m = 0.2$ justo antes de llegar a la saturación.

Conclusiones

En este trabajo estudiamos el diagrama de fases magnético de un modelo de Heisenberg de espín $1/2$ sobre la cadena Kagomé mediante cálculos numéricos utilizando DMRG. Se encontró que el diagrama presenta tres fases magnéticas caracterizadas por la presencia de plateaux de magnetización con $m = 1/5$, $m = 3/5$ o ambos (con m normalizada a la magnetización de saturación). Además, con la misma técnica calculamos las correlaciones $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ sobre cada plateau para encontrar el orden magnético en cada caso.

Por otra parte, utilizando simulaciones montecarlo obtuvimos curvas de magnetización que a bajas temperaturas presentan los mismos plateaux de magnetización que en el caso cuántico. Además, comparando los resultados de $\langle S_1^z S_n^z \rangle$ obtenidos usando DMRG y montecarlo resaltamos la similitud entre fluctuaciones de origen cuántico y térmico.

Luego, partiendo del estado fundamental clásico sobre un plateau de magnetización estudiamos la aproximación semiclásica de spin-waves, utilizando bosones de Holstein Primakoff. A partir de la aproximación de partículas independientes calculamos las bandas de energía de los magnones y comparamos la energía del estado fundamental calculada según DMRG, spin-waves y límite de Ising (energía clásica), observando que la aproximación semi-clásica se acerca más al resultado arrojado por DMRG cuanto mayor es la diferencia entre acoplamientos en la plaqueta.

Por otra parte, estudiamos de manera analítica excitaciones localizadas en la cadena que dan lugar a un salto en la magnetización justo antes de llegar a la saturación, si se cumple una condición adecuada de los acoplamientos (ecuación (99)), como verificamos numéricamente.

Como continuación de este trabajo, buscaremos formular una teoría en términos de integrales de camino y estados coherentes de espín para sistemas frustrados en 1 y 2 dimensiones que nos permita comprender la formación de mesetas de magnetización y su relación con términos topológicos en la acción del modelo sigma no lineal.

Además, estudiaremos los estados de tipo líquido de espín presentes en el diagrama de fases del compuesto $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$ [12] [13] [14] [15], desarrollando modelos efectivos de baja energía que permiten estudiar las características del diagrama de fases y las transiciones correspondientes, utilizando la transformación de Holstein-Primakov, la representación en términos de bosones de Schwinger, operadores de bond, la integral de caminos, Bethe Ansatz, DMRG, etc.

Apéndice

Diagonalización del Hamiltoniano bosónico

Al realizar la transformación de Holstein-Primakov en la cadena Kagomé, obtuvimos un Hamiltoniano de la forma

$$\mathcal{H} = \sum_k \mathcal{H}_k = \sum_k A^\dagger \mathcal{D}_k A \quad (102)$$

donde

$$A = \begin{pmatrix} a_{k\alpha} \\ a_{-k\alpha}^\dagger \end{pmatrix} \quad (103)$$

con $\alpha = 1, \dots, m$ y \mathcal{D} es una matriz hermítica definida positiva. Buscamos un nuevo conjunto de operadores bosónicos, que se obtienen como combinación lineal de $a_{k\alpha}$ y $a_{-k\alpha}$, y diagonalizan \mathcal{H}_k . Escribimos entonces

$$B = \begin{pmatrix} b_{k\alpha} \\ b_{-k\alpha}^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{T} A \quad (104)$$

con $\mathcal{T} \in \mathbb{C}^{2m \times 2m}$ tal que

$$\mathcal{H}_k = A^\dagger \mathcal{T}^\dagger (\mathcal{T}^\dagger)^{-1} \mathcal{D}_k \mathcal{T}^{-1} \mathcal{T} A = B^\dagger \eta_k B \quad (105)$$

donde

$$\eta_k = \text{diag}(\omega_{k\alpha}, \omega_{-k\alpha}) \quad (106)$$

Entonces el Hamiltoniano \mathcal{H}_k en (102) se escribe

$$\mathcal{H}_k = \sum_\alpha (\omega_{k\alpha} b_{k\alpha}^\dagger b_{k\alpha} + \omega_{-k\alpha} b_{k\alpha} b_{k\alpha}^\dagger) = \sum_\alpha 2\omega_{k\alpha} b_{k\alpha}^\dagger b_{k\alpha} + \sum_\alpha \omega_{k\alpha} \quad (107)$$

donde asumimos $\omega_{k\alpha} = \omega_{-k\alpha}$.

Para que los operadores $b_{k\alpha}$ satisfagan el álgebra bosónica (40), se tiene que

$$[B_{\rho'}, B_\rho^\dagger] = \sigma_{\rho'\rho} \quad (108)$$

con $\rho, \rho' = 1, \dots, 2m$; donde definimos

$$\sigma_{\rho'\rho} = \begin{cases} 1 & \text{si } \rho = \rho' \quad \text{y} \quad 1 \leq \rho \leq m \\ -1 & \text{si } \rho = \rho' \quad \text{y} \quad m+1 \leq \rho \leq 2m \\ 0 & \text{caso contrario.} \end{cases} \quad (109)$$

que cumple $\sigma^2 = \mathbb{1}$. Luego, se sigue

$$\sigma_{\rho'\rho} = [(\mathcal{T}A)_{\rho'}, (A^\dagger \mathcal{T}^\dagger)_\rho] \quad (110)$$

de donde resulta una condición para \mathcal{T} , que matricialmente se escribe

$$\sigma = \mathcal{T}^\dagger \sigma \mathcal{T} \quad \text{o bien} \quad \mathcal{T}^\dagger \sigma = \sigma \mathcal{T}^{-1} \quad (111)$$

y se dice que \mathcal{T} es una transformación para-unitaria.

Por otra parte, según (105),

$$(\mathcal{T}^\dagger)^{-1} \mathcal{D}_k \mathcal{T}^{-1} = \eta_k \quad (112)$$

y usando (111) en (112),

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_k \mathcal{T}^{-1} &= \mathcal{T}^\dagger \eta_k = \mathcal{T}^\dagger \sigma \sigma \eta_k = \sigma \mathcal{T}^{-1} \sigma \eta_k \\ \sigma \mathcal{D} \mathcal{T}^{-1} &= \mathcal{T}^{-1} \sigma \eta_k \end{aligned} \quad (113)$$

donde

$$\sigma \eta_k = \text{diag}(\omega_{k\alpha}, -\omega_{-k\alpha}) \quad (114)$$

Si c_ρ es la columna ρ -ésima de \mathcal{T}^{-1} , entonces

$$(\sigma \mathcal{D}) c_\rho = \sigma_{\rho\rho} \omega_\rho c_\rho \quad (115)$$

o bien

$$(\sigma \mathcal{D} - \sigma_{\rho\rho} \omega_\rho \mathbb{1}) c_\rho = 0 \quad (116)$$

es decir, c_ρ es autovector de $\sigma \mathcal{D}$ con autovalor $\sigma_{\rho\rho} \omega_\rho$, obteniéndose así el espectro de energías del problema.

DMRG

Definición de la red

```
<LATTICE name="chain lattice" dimension="1">
  <PARAMETER name="a" default="1"/>
  <BASIS><VECTOR>a</VECTOR></BASIS>
  <RECIPROCALBASIS><VECTOR>2*pi/a</VECTOR></RECIPROCALBASIS>
</LATTICE>
```

Definición de la celda unidad

```
<UNITCELL name="cincos" dimension="1" vertices="5">
  <VERTEX/>
  <VERTEX/>
  <VERTEX/>
  <VERTEX/>
  <VERTEX/>
<!-- Interacciones -->

  <EDGE type="1"><SOURCE vertex="1" offset="0"/><TARGET vertex="3" offset="0"/></EDGE>
  <EDGE type="2"><SOURCE vertex="1" offset="0"/><TARGET vertex="2" offset="0"/></EDGE>
  <EDGE type="4"><SOURCE vertex="2" offset="0"/><TARGET vertex="1" offset="1"/></EDGE>
  <EDGE type="3"><SOURCE vertex="2" offset="0"/><TARGET vertex="3" offset="0"/></EDGE>
  <EDGE type="3"><SOURCE vertex="3" offset="0"/><TARGET vertex="4" offset="0"/></EDGE>
  <EDGE type="1"><SOURCE vertex="3" offset="0"/><TARGET vertex="5" offset="0"/></EDGE>
  <EDGE type="2"><SOURCE vertex="4" offset="0"/><TARGET vertex="5" offset="0"/></EDGE>
  <EDGE type="4"><SOURCE vertex="5" offset="0"/><TARGET vertex="4" offset="1"/></EDGE>

</UNITCELL>
```

```
<!-- type define el tipo de enlace -->
<!-- offset indexa la celda -->
```

Características del sistema

```
<LATTICEGRAPH name = "five-periodic">
  <FINITELATTICE>
    <LATTICE ref="chain lattice"/>
    <EXTENT dimension="1" size ="L"/>
    <BOUNDARY type="periodic"/>
  </FINITELATTICE>
```

```
<UNITCELL ref="cincos"/>
</LATTICEGRAPH>
```

Modelo

```
<SITEBASIS name="spin">
  <PARAMETER name="local_spin" default="local_S"/>
  <PARAMETER name="local_S" default="1/2"/>
  <QUANTUMNUMBER name="S" min="local_spin" max="local_spin"/>
  <QUANTUMNUMBER name="Sz" min="-S" max="S"/>
  <OPERATOR name="Splus" matrixelement="sqrt(S*(S+1)-Sz*(Sz+1))">
    <CHANGE quantumnumber="Sz" change="1"/>
  </OPERATOR>
  <OPERATOR name="Sminus" matrixelement="sqrt(S*(S+1)-Sz*(Sz-1))">
    <CHANGE quantumnumber="Sz" change="-1"/>
  </OPERATOR>
  <OPERATOR name="Sz" matrixelement="Sz"/>
</SITEBASIS>
```

Bibliografía

- [1] N. D. Mermin and H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. Phys. Rev. Lett., 17:1133–1136, Nov 1966.
- [2] Steven R. White. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. Phys. Rev. B, 48:10345–10356, Oct 1993.
- [3] Yingying Tang, Wenbin Guo, Hongping Xiang, Suyun Zhang, Ming Yang, Meiyang Cui, Nannan Wang, and Zhangzhen He. Synthesis, structure, and magnetic properties of $\text{a}_2\text{cu}_5(\text{teo}_3)(\text{so}_4)_3(\text{oh})_4$ ($a = \text{na}, \text{k}$): The first compounds with a 1d kagomé strip lattice. Inorganic Chemistry, 55(2):644–648, 2016. PMID: 26741164.
- [4] L.D. Faddeev and L.A. Takhtajan. What is the spin of a spin wave? Physics Letters A, 85(6):375 – 377, 1981.
- [5] Izumi Umegaki, Hidekazu Tanaka, Nobuyuki Kurita, Toshio Ono, Mark Laver, Christof Niedermayer, Christian Rüegg, Seiko Ohira-Kawamura, Kenji Nakajima, and Kazuhisa Kakurai. Spinon, soliton, and breather in the spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnetic chain compound kcugaf_6 . Phys. Rev. B, 92:174412, Nov 2015.
- [6] Jacques des Cloizeaux and J. J. Pearson. Spin-wave spectrum of the antiferromagnetic linear chain. Phys. Rev., 128:2131–2135, Dec 1962.
- [7] André Luiz Malvezzi. An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems. Brazilian Journal of Physics, 33:55 – 72, 03 2003.
- [8] M.E.J. Newman & G.T. Barkema. Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Oxford University Press, 1999.
- [9] Masaki Oshikawa, Masanori Yamanaka, and Ian Affleck. Magnetization plateaus in spin chains: “haldane gap” for half-integer spins. Phys. Rev. Lett., 78:1984–1987, Mar 1997.
- [10] J.H.P. Colpa. Diagonalization of the quadratic boson hamiltonian. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 93(3):327 – 353, 1978.

- [11] J. Schulenburg and J. Richter. Macroscopic magnetization jumps in strongly frustrated quantum spin lattices. pages 29–33, 2003.
- [12] O. Smirnova, M. Azuma, N. Kumada, Y. Kusano, M. Matsuda, Y. Shimakawa, T. Takei, Y. Yonesaki, and N. Kinomura. J. Am. Chem. Soc., 131:8313, 2009.
- [13] Hao Zhang and CA Lamas. Exotic disordered phases in the quantum j_1 - j_2 model on the honeycomb lattice. Phys. Rev. B, 87(2):024415, 2013.
- [14] Hao Zhang, M. Arlego, and C. A. Lamas. Quantum phases in the frustrated heisenberg model on the bilayer honeycomb lattice. Phys. Rev. B, 89:024403, 2014.
- [15] Hao Zhang, Carlos A. Lamas, Marcelo Arlego, and Wolfram Brenig. Quantum phase diagram of a frustrated antiferromagnet on the bilayer honeycomb lattice. Phys. Rev. B, 93:235150, Jun 2016.