

UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

E. A. P. DE FÍSICA

**Comportamiento crítico cuántico del modelo collar de
Kondo aperiódico**

TESIS

para optar el título de Licenciado en Física

AUTOR

Daniel Lorenzo Reyes López

Lima-Perú

2009

Tesis de Licenciatura presentada a la Facultad de Ciencias Físicas de la
Universidad Nacional Mayor de San Marcos
asesorado por el Profesor **Dr. Carlos Landauro Sáenz**
para la obtención del título de Licenciado en Física por
Daniel Lorenzo Reyes López.

2009

A mis padres y hermanos

Agradecimientos

Agradezco a mis padres y hermanos por el cariño y apoyo en mi educación.

A mi asesor, profesor Dr. Carlos Landauro Sáenz no sólo por su asesoría, sobre todo por brindarme su amistad sincera.

A mis amigos del *Colina apto 307* que convivieron conmigo cuando ésta tesis estaba siendo redactada: Sophie, Fernanda, Tchato y el gran Humberto, gracias por los gratos momentos vividos.

A mis amigos *sanmarquinos* Marisel, César, Vanesa, Luís, Richard, Tueros y a los profesores Bustamante, Peña y Medrano, por todas sus enseñanzas en la *Decana de América*.

A mis amigos de toda la vida Julian, Carlos, Miguel y Charon. Espero nos sigamos viendo en mi casa para Navidad.

Índice general

Dedicatoria	III
Agradecimientos	III
Resumen	IV
Abstract	v
1. Introducción	1
1.1. Conceptos básicos en transiciones de fase	5
1.2. Efectos cuánticos en la vecindad del punto crítico	8
1.3. Teoría de escala en las transiciones de fase cuánticas	11
2. Los Fermiones Pesados	16
2.1. Introducción	16
2.2. Fermiones pesados	17
2.3. Física de los fermiones pesados	18
2.4. Estados fundamentales de los fermiones pesados	21
3. Efectos de una modulación de intercambio aperiódica en redes de Kondo	26
3.1. Introducción	26
3.2. Aisladores de Kondo	27

3.2.1.	El modelo de Anderson	29
3.2.2.	El modelo de la red de Kondo	30
3.3.	El modelo collar de Kondo	31
3.4.	Comportamiento termodinámico crítico cuántico del modelo collar de Kondo aperiódico	35
3.4.1.	La cadena de Fibonacci	37
3.4.2.	El Hamiltoniano	38
3.5.	Representación en operadores de enlace	39
3.5.1.	Fase Paramagnética	42
3.6.	Efecto de la modulación aperiódica a $T = 0$	44
3.6.1.	Fase antiferromagnética	45
3.6.2.	Línea crítica de Néel	47
4.	Conclusiones y Perspectivas	50
A.	Operadores de espín de Sachdev	55
A.1.	Introducción	55
A.2.	Los operadores de enlace para espín-1/2	56
A.2.1.	Relaciones de conmutación entre los operadores de enlace para espín-1/2	61
B.	El Método de las Funciones de Green	63

Índice de figuras

1.1. Diagrama de fases temperatura T versus un parámetro externo no térmico r , para un sistema bidimensional.	11
1.2. Diagrama de fases temperatura T versus un parámetro externo no térmico r , para un sistema tridimensional.	12
2.1. Diagrama de fases del compuesto YbRh_2Si_2	22
2.2. Diagrama de fases del compuesto CePd_2Si_2	23
2.3. Diagrama de fases del compuesto $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$	24
3.1. Cadena collar de Kondo para cuatro sitios.	33
3.2. Diagrama de fases del modelo collar de Kondo en tres dimensiones, por el método de grupo de renormalización de campo medio.	35
3.3. Diagrama de fases del modelo collar de Kondo en tres dimensiones comparado con resultados experimentales para compuestos que contienen Ce	36
3.4. Arreglo esquemático para ocho sitios siguiendo la regla de sustitución de Fibonacci.	39
3.5. Energía del gap de espín en función de t/J_L para $1d$, $2d$, $3d$ y $\xi = 0.25$, 2.0	46

Índice de cuadros

A.1. Estados singlete y triplete para un par de partículas situados en un sitio de una red, cada partícula con espín-1/2.	57
---	----

Resumen

En este trabajo estudiamos el efecto de una modulación de intercambio aperiódica sobre el modelo del collar de Kondo. La relación de dispersión para las excitaciones del sistema es obtenida empleando una representación para los espines localizados y de conducción en términos de los operadores locales singlete y triplete. Esto es realizado en el marco de una aproximación Gaussiana, a temperatura cero y finita y para una dimensión arbitraria d . Los resultados permiten estudiar dos fases: una paramagnética a temperatura cero y otra antiferromagnética a temperatura finita, aunque con muy bajos valores (cerca del cero absoluto). En el primer caso se estudia la dependencia del gap de las energías del espín con la modulación de intercambio aperiódica, mientras que en el segundo caso se determina la línea de transición de Néel también como función de la modulación de intercambio aperiódica.

Abstract

In this work we have studied the aperiodic exchange modulation on the Kondo necklace model. The dispersion relation for the excitations of the system is obtained using a representation for the localized and conduction electrons in terms of local Kondo singlet and triplet operators. This result was obtained using a Gaussian approximation, at finite and zero temperature and arbitrary dimension, d .

Our results allowed the study of two phases: the paramagnetic at zero temperature and the antiferromagnetic at low finite temperature. In the first case, we studied the spin gap dependence on the aperiodic exchange modulation, whereas, in the second one we obtained the critical Néel line also as a function of the aperiodic exchange modulation.

Capítulo 1

Introducción

Physics is much too hard for physicists.

David Hilbert

El hecho de que las transiciones de fase a temperatura nula sean materia de estudio en revistas de prestigio como la *Nature Physics* [1], no hace más que reafirmar el grado de importancia que viene teniendo actualmente en la comunidad científica. Pero ¿Qué son las transiciones de fase a temperatura nula?, para responder debemos en primer lugar definir que es una transición de fase. Día a día observamos ejemplos de esto, el enfriamiento del agua hasta congelarse, o el calentamiento de la misma hasta evaporarse. Otro ejemplo es la transición de fase que sufre un metal para un estado superconductor cuando la temperatura es disminuida. El universo mismo, como lo conocemos, vino según la teoría del *Big-Bang* de diversas transiciones de fase enfriando el plasma que lo conformaba. Estas transiciones ocurren a temperatura finita, y cualquier orden macroscópica es destruida por las llamadas *fluctuaciones térmicas*. En años recientes un tipo diferente de transiciones de fase ha atraído la atención de los físicos, estas son las transiciones de fase que ocurren a temperatura nula, donde el punto crítico separando las fases es llamado de Punto Crítico Cuántico (QCP, del inglés “Quantum Critical Point”), y donde la orden es

destruida solamente por las *fluctuaciones cuánticas*, las cuales son regidas por el *principio de incertidumbre de Heisenberg*. Estas transiciones a temperatura nula, que llamaremos en adelante de Transiciones de Fase Cuánticas [2] (QFT, del inglés “Quantum Phase Transition”), se han tornado un tópico de gran interés en la física de la materia condensada, provocando un estudio constante en las últimas décadas tanto experimental como teórico. Ejemplos de transiciones de fase cuánticas suceden entre otros, en fermiones pesados [3], superconductores de alta temperatura crítica [4, 5, 6, 7], condensación de Bose-Einstein de gases diluidos [8] y condensación de Bose-Einstein de excitaciones elementales [9, 10]. A diferencia de las transiciones térmicas, éstas ocurren como consecuencia de la competencia entre las diferentes interacciones del sistema [11, 12, 13] siendo su estudio, en la actualidad, de extrema importancia para la comprensión de las propiedades *anómalas* de sistemas correlacionados en bajas temperaturas [13]. Ellas se distinguen, también, por el carácter cuántico de las fluctuaciones críticas, por el rol fundamental que el *tiempo* desempeña en estas transiciones [11, 14] y por el hecho que a temperatura nula, la estática y la dinámica del sistema están fuertemente correlacionadas [11, 13].

Entre los sistemas que presentan transiciones de fase cuánticas, que estaremos interesados en esta tesis, se encuentran los compuestos llamados fermiones pesados. En estos sistemas, se observan propiedades emergentes asociadas a una quiebra espontánea de simetría surgiendo como un fenómeno crítico al variar la intensidad de sus interacciones. En ellos, donde las correlaciones electrónicas desempeñan un papel crucial las propiedades físicas y el comportamiento universal, pueden ser atribuidos a la proximidad en estos materiales de una transición de fase cuántica [13].

Para hacer un estudio teórico de las transiciones de fase cuánticas envueltas en los sistemas de fermiones pesados, utilizamos aquí una aproximación Gaussiana, es decir, los exponentes críticos alrededor de la transición dependen de la dimensión. Ésta aproximación es desarrollada con una nueva representación de operadores de

espín [15] ampliamente usada en problemas de la materia condensada y de la cual haremos una breve introducción en el apéndice A. El método posee la ventaja de hacer más directa la relación entre los grados de libertad del problema y la red cristalina. Después de presentar el Hamiltoniano del sistema físico a ser estudiado, en la *forma efectiva*, diagonalizamos éste a través del método de las funciones de Green [16, 17], de la cual damos una breve introducción en el apéndice A, obteniéndose básicamente la energía interna del sistema, así como, las excitaciones elementales extraídas de los polos de las funciones de Green.

A seguir detallamos la estructura de esta tesis.

- En este primer capítulo hacemos una breve revisión de las transiciones de fase cuánticas y de la teoría de escala para este tipo de transiciones.
- En el capítulo 2, presentamos una breve revisión de las características experimentales, así como, la física de las interacciones envueltas en los fermiones pesados en la región crítica cuántica. Básicamente en esta región, las interacciones entre las excitaciones fundamentales de las quasi-partículas y las fluctuaciones de espín explican el desaparecimiento del magnetismo cuando varía la intensidad de sus interacciones.
- En el capítulo 3, estudiamos el efecto de una modulación de intercambio aperiódica sobre el modelo del collar de Kondo. Esto es realizado en el marco de una aproximación Gaussiana, a temperatura cero y finita y para una dimensión arbitraria d . Encontramos diversos diagramas de fases, tanto en el estado fundamental, como a bajas temperaturas. En la fase paramagnética y a temperatura nula estudiamos la dependencia del gap de las energías del espín con la modulación de intercambio aperiódica. Encontramos también una expresión para la línea crítica de Néel como función de la modulación de intercambio aperiódica. Esta línea de transición separa la fase ordenada de la fase

paramagnética.

- En el capítulo 4, presentamos las conclusiones generales de la tesis.
- En el apéndice A desarrollamos el formalismo que usamos para representar los operadores de espín, los llamados operadores de enlace (bond-operators) de Sachdev, con la finalidad de aplicarlos en el estudio de sistemas que presentan una transición de fase cuántica. Ese estudio es importante puesto que, como veremos en el capítulo 3, esta nueva representación ayuda a diagonalizar, mediante una aproximación Gaussiana, el Hamiltoniano presentado para el sistema a ser estudiado.

Finalmente en el apéndice B hacemos una breve introducción al método de las funciones de Green que usamos en esta tesis.

1.1. Conceptos básicos en transiciones de fase

Veremos a lo largo de esta tesis que nuestro objetivo de estudio es la física alrededor de una transición de fase cuántica en sistemas de fermiones pesados. Así, hacemos una breve introducción a las transiciones de fase cuánticas y transiciones de fase a temperatura finita. Para una revisión más detallada véase las referencias [13, 18, 19, 20]. Las Transiciones de Fase (TF) son tradicionalmente clasificadas en transiciones de primera orden y transiciones de segunda orden o continuas. Las transiciones de primera orden ocurren con una coexistencia de fases, ejemplos de esto son el hielo y el agua a 0°C , el agua y el vapor a 100°C . Por otro lado, en transiciones continuas las fases no coexisten, como por ejemplo la transición paramagnética-ferromagnética inducida por la temperatura. Ambas transiciones pueden ser estudiadas por la termodinámica y son caracterizadas por singularidades en las magnitudes físicas en el punto de transición, siempre y cuando, la transición sea continua. En lo que sigue estudiaremos este tipo de transición que puede ser caracterizada básicamente por un parámetro de orden¹. Frecuentemente la elección de un parámetro de orden para una transición en particular es obvia, un ejemplo es la transición ferromagnética, donde la magnetización total es el parámetro de orden. Sin embargo, en algunos casos esto es complicado y más aún en debate, como la transición metal-aislador en sistemas electrónicos (transición de Mott [21]) donde, aunque el valor medio del parámetro de orden es cero en la fase desordenada sus fluctuaciones no son cero.

Alrededor de una transición continua las correlaciones espaciales de sus fluctuaciones se tornan de largo alcance y próximo del Punto Crítico (PC) su longitud de

¹Esta es una magnitud termodinámica que es cero en una fase desordenada y diferente de cero en una fase ordenada.

escala típica ξ diverge como,

$$\xi \propto |t|^{-\nu}, \quad (1.1)$$

ξ es llamada la longitud de correlación, ν es el exponente crítico de éste, y t un parámetro adimensional que mide la distancia al punto crítico definido como,

$$t = \frac{(T_c - T)}{T_c}, \quad (1.2)$$

donde T_c es la temperatura crítica a la que ocurre la transición. Además de estas correlaciones espaciales de las fluctuaciones del parámetro de orden, existe también lo análogo en tiempo. La típica escala temporal para un decaimiento de las fluctuaciones es la correlación temporal, τ_c , que próximo del punto crítico diverge como,

$$\tau_c \propto \xi^z \propto |t|^{-\nu z}, \quad (1.3)$$

donde z es el exponente crítico dinámico, que describe la dinámica intrínseca (cuántica) del sistema [11]. Estas divergencias, Eq. (1.1) y Eq. (1.3), son las responsables de los llamados fenómenos críticos. Cuando el sistema está situado en el punto crítico de la transición ($T = T_c$), la longitud de correlación y la correlación temporal son infinitos, luego el sistema muestra invariancia de escala. Como consecuencia, todas las magnitudes del sistema dependen de parámetros externos mediante leyes de potencia. Para algunas magnitudes importantes el comportamiento asintótico es descrito como,

- Calor específico (campo nulo):

$$C \propto t^{-\alpha}. \quad (1.4)$$

- Susceptibilidad isotérmica:

$$\chi \propto t^{-\gamma}. \quad (1.5)$$

Definimos en muchos casos también, para caracterizar las transiciones, el parámetro de orden como ϕ , siendo que $\phi = 0$ corresponde a una fase desordenada y $\phi \neq 0$ a una fase ordenada. El comportamiento asintótico de este viene dado por

$$\phi \propto t^\beta, \quad (1.6)$$

en presencia de campos externos el comportamiento asintótico del parámetro de orden en relación al campo conjugado en la isoterma crítica es

$$\phi(t = 0) \propto |H|^{1/\tilde{\delta}} \text{sgn}(H), \quad (1.7)$$

donde H es un campo externo y $\text{sgn}(x)$ es la función signo. El conjunto de exponentes $\alpha, \beta, \gamma, \tilde{\delta}$, llamados de exponentes críticos, caracteriza completamente el comportamiento crítico próximo de la transición de fase. Estos exponentes no son independientes y están relacionados entre sí por algunas desigualdades como:

- Desigualdad de Rushbrooke

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2. \quad (1.8)$$

- Primera desigualdad de Griffiths

$$\alpha + \beta(1 + \tilde{\delta}) \geq 2. \quad (1.9)$$

- Segunda desigualdad de Griffiths

$$\gamma \geq \beta(\tilde{\delta} - 1). \quad (1.10)$$

- Desigualdad de Fisher

$$\gamma \geq (2 - \eta)\nu. \quad (1.11)$$

- Desigualdad de Josephson

$$d\nu \geq 2 - \alpha. \quad (1.12)$$

En las dos últimas relaciones, d es la dimensión espacial y η es el exponente referente al comportamiento asintótico de la función de correlación definida como,

- Función de correlación

$$\Gamma(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}. \quad (1.13)$$

Es interesante observar que en la criticalidad, es decir en $T = T_c$, estas desigualdades entre exponentes críticos son satisfechas como igualdades y conocidas como leyes de escala. Otro punto interesante es el tipo de universalidad² al cual estas transiciones continuas pertenecen, es decir, el hecho que diversos modelos, al principio muy diferentes, puedan presentar propiedades idénticas en el límite de longitudes de onda largas (es decir, bajas energías) y consecuentemente poseer los mismos exponentes críticos asociados. Sin embargo, la posición del punto crítico y las amplitudes asociadas a las formas de escala son en general no-universales [13] y dependen de las propiedades microscópicas de cada modelo.

1.2. Efectos cuánticos en la vecindad del punto crítico

Para investigar en que medida la mecánica cuántica afecta una transición de fase continua tenemos que comparar dos escalas de energía, a saber, $\hbar\omega_c$ que es la energía de las fluctuaciones asociadas a las frecuencias de interés y $k_B T$ que es la energía asociada a las fluctuaciones térmicas. Vimos en la sección anterior que la escala temporal típica, τ_c , diverge próxima de una transición continua, de ese modo, la escala de frecuencia típica ω_c diverge como,

$$\hbar\omega_c \propto |t|^{\nu_z}. \quad (1.14)$$

²El tipo de universalidad al cual un sistema pertenece es determinado solamente por las simetrías del parámetro de orden y por la dimensión del sistema.

De acuerdo con estos resultados podemos entender porque las transiciones a temperatura nula son diferentes de las transiciones en temperatura finita. A temperatura finita, así consideremos modelos esencialmente cuánticos, las fluctuaciones importantes próximo del PC son bien descritas clásicamente cuando $\hbar\omega_c \ll k_B T$. En caso contrario, los efectos cuánticos serán relevantes para,

$$\hbar\omega_c \gg k_B T. \quad (1.15)$$

Así, para una transición a una temperatura T_c la mecánica cuántica será irrelevante para $|t| < T_c^{1/\nu z}$, es decir, el comportamiento crítico es enteramente clásico próximo de la transición. Esto justifica llamar toda transición de fase a temperatura finita de “clásica”, aunque envuelvan sistemas esencialmente cuánticos como helio líquido o superconductores, y pueden ser perfectamente explicadas por la mecánica estadística clásica. Por otro lado, para transiciones a temperatura nula en función de un parámetro no térmico r , como campo magnético o presión, el comportamiento es siempre determinado por las fluctuaciones cuánticas relevantes a $T = 0$. Esto torna este tipo de transición de fase diferente de la térmica y justifica su referencia como transición de fase cuántica³. La competencia entre estas fluctuaciones, clásicas y cuánticas, produce un diagrama de fases extremadamente rico en la vecindad del QCP, que llamaremos de r_c , siempre y cuando exista una orden de largo alcance sea a temperatura nula o finita. La Fig. (1.1) describe la situación donde solamente existe orden a $T = 0$, un ejemplo de esto son sistemas de espines cuánticos en dos dimensiones donde la orden es prohibida por el teorema de Mermin-Wagner [22]. En este caso, el comportamiento a temperatura finita es caracterizado por tres regiones bien diferentes, separados por *crossovers* dependiendo sí el comportamiento crítico es dominado por las fluctuaciones térmicas o cuánticas del parámetro de orden. En la región desordenada térmica, la orden es destruida principalmente por las

³Para temperaturas muy bajas los efectos cuánticos son observados experimentalmente e influyen también en las transiciones térmicas si $T_c \rightarrow 0$ [13].

fluctuaciones térmicas, mientras que, en la región desordenada cuántica la física es descrita esencialmente por las fluctuaciones cuánticas. Entre estas dos regiones se encuentra la llamada “región crítica cuántica” [23, 24]. La frontera de esta región es determinada por la condición $k_B T > \hbar \omega_c \propto \delta^{\nu z}$, donde $\delta = |r - r_c|$ mide la distancia al QCP, y donde la criticalidad es determinada por las fluctuaciones térmicas. Así, la física de la región crítica cuántica es controlada por las excitaciones térmicas de su estado fundamental, cuya principal característica es la ausencia de quasi-partículas convencionales. Esto causa que las magnitudes termodinámicas en esta región tengan un comportamiento no convencional como por ejemplo, comportamiento No Líquido de Fermi (NFL, del inglés “Non-Fermi Liquid”), etc.

Cuando la orden también existe a temperatura finita, el diagrama de fases es aún más rico. Esto se muestra en la Fig. (1.2), donde una transición de fase ocurre variando el parámetro r a bajas temperaturas. Como discutimos anteriormente las fluctuaciones clásicas dominaran en la vecindad de la transición a temperatura finita hasta tornarse despreciable conforme la temperatura disminuye hasta el QCP⁴ donde solamente fluctuaciones cuánticas sobreviven y son las que caracterizan el sistema.

⁴Este punto crítico a temperatura nula puede ser aproximado haciendo $r \rightarrow r_c$ en $T = 0$ o $T \rightarrow 0$ en $r = r_c$.

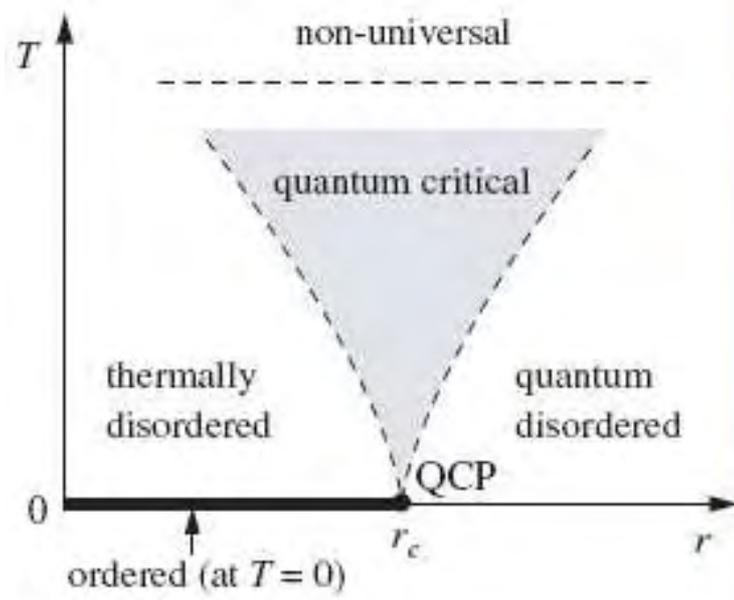


Figura 1.1: Diagrama de fases temperatura T versus un parámetro externo no térmico r , donde el orden solamente ocurre a temperatura nula [25]. Las líneas punteadas indican la frontera de la región crítica cuántica, llamada de *quantum critical*, que es regida por la relación $k_B T > \delta^{\nu z}$, de las regiones desordenada térmica y cuántica, llamadas de *thermally disordered* y *quantum disordered*, respectivamente. Se muestra también el QCP localizado en $r = r_c$.

1.3. Teoría de escala en las transiciones de fase cuánticas

Las transiciones de fase, como discutimos anteriormente son caracterizadas por divergencias de una longitud y un tiempo característicos,

$$\xi \sim \delta^{-\nu}, \quad (1.16)$$

$$\tau_c \sim \delta^{-\nu z}, \quad (1.17)$$

donde δ mide la distancia al QCP y z es definido como debido a la posible anisotropía entre la dimensión temporal y las dimensiones espaciales. En el caso isotrópico tenemos simplemente $z = 1$ y la divergencia de la “longitud de correlación temporal”

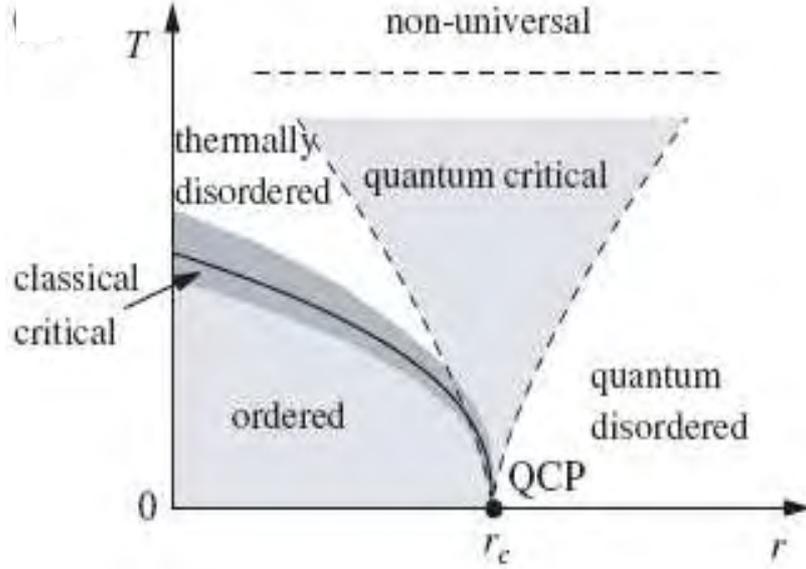


Figura 1.2: Diagrama de fases temperatura T versus un parámetro externo no térmico r , donde la orden existe a temperatura finita, así como, a temperatura nula. La línea gruesa separa la fase ordenada de largo alcance de la desordenada, llamadas de *ordered* y *thermally disordered*, respectivamente. Próximo de esta línea el comportamiento crítico es clásico. Se muestra también las regiones crítica cuántica (llamada de *quantum critical*), desordenada térmica y cuántica (llamadas de *thermally disordered* y *quantum disordered* respectivamente), y el QCP localizado en $r = r_c$. Figura reproducida de la referencia [25].

en la criticalidad ($\delta = 0$) es idéntica a la divergencia de la longitud de correlación espacial. Teniendo la distancia al QCP $\delta \propto (J - J_c)$ donde J es un parámetro del Hamiltoniano y de acuerdo con la hipótesis de Kadanoff [26] podemos reescalar:

$$J' = b^{-y} J, \quad (1.18)$$

$$\delta' = b^a \delta, \quad (1.19)$$

$$\tau' = b^z \tau, \quad (1.20)$$

donde el factor de escala es $b = (L/L')$, L y L' son las dimensiones lineales del sistema original y del sistema reescalado respectivamente. Podemos relacionar estos

exponentes y y a con los exponentes críticos, así la longitud de correlación escala como,

$$\xi'(|\delta'|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b}, \quad (1.21)$$

donde b es un valor arbitrario. Usando (1.19) tenemos,

$$\xi'(b^a|\delta|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b}, \quad (1.22)$$

y haciendo $b^a|\delta| = 1$ el $b = |\delta|^{-1/a}$ encontramos para el comportamiento de la longitud de correlación próximo de la criticalidad

$$\xi = |\delta|^{-1/a}\xi'. \quad (1.23)$$

Por tanto, de acuerdo con (1.16) el exponente ν es

$$\nu = \frac{1}{a}. \quad (1.24)$$

Para encontrar la relación con el exponente z basta exigir que la incertidumbre

$$\Delta y \Delta \tau \geq \hbar \quad (1.25)$$

sea invariante de escala. Observamos que Δy (una energía) debe escalar como J (otra energía) en (1.18) y el tiempo característico escala como (1.20) en la medida que podemos escribir:

$$\begin{aligned} \Delta y' \Delta \tau' &= \Delta y \Delta \tau \quad (\text{invariante de escala}) \\ \Rightarrow b^{(z-y)} \Delta y \Delta \tau &= \Delta y \Delta \tau \\ \Rightarrow z &= y. \end{aligned} \quad (1.26)$$

La parte singular de la energía libre a $T = 0$ se comporta como:

$$f_s = \frac{F_s}{L^d} = Jf(\delta), \quad (1.27)$$

y por eso reescalando por $L' = L/b$ obtenemos:

$$f'_s = \frac{F_s}{(L')^d} = b^d f_s = J'f(|\delta'|). \quad (1.28)$$

Usando (1.18) y (1.19) encontramos:

$$b^d f_s = b^{-y} J f(b^a |\delta|) \quad (1.29)$$

y haciendo $b = |\delta|^{-1/a}$ tenemos:

$$\frac{f_s}{J} = |\delta|^{\frac{y+d}{a}} f(1). \quad (1.30)$$

Pero la parte singular de la densidad de energía se comporta como

$$f_s \propto |\delta|^{2-\alpha}, \quad (1.31)$$

el que define el exponente α . Con el uso de las relaciones para z y ν dadas por las Eqs. (1.24) y (1.26) en Eq. (1.30) obtenemos que la densidad de energía libre escala como

$$f_s \propto |\delta|^{\nu(d+z)}, \quad (1.32)$$

y así, los exponentes satisfacen la igualdad

$$2 - \alpha = \nu(d + z). \quad (1.33)$$

Podemos observar que esta expresión es idéntica a la desigualdad de Josephson, dada por la Eq. (1.12), satisfecha como igualdad con dimensión efectiva $d_{eff} = d + z$. Esta relación ilustra, de forma bastante clara, el papel excepcional de la dinámica del sistema en este tipo de transiciones a temperatura nula. De hecho, una consecuencia de esto es que diversas transiciones cuánticas de interés tienen exponentes clásicos, pues $d_{eff} = d + z$ se torna en general mayor que la dimensión crítica superior d_{uc} . Por esta razón las fluctuaciones se tornan irrelevantes, y la criticalidad puede ser bien descrita por una teoría Gaussiana (criterio de Ginzburg), donde las fluctuaciones del sistema, pero no sus interacciones, son consideradas. De ese modo, si $z = 1$, tiempo y espacio son simétricos, y el modelo cuántico de d dimensiones puede ser tratado como un modelo clásico en $(d + 1)$ dimensiones. En el capítulo 3 encontramos el exponente

dinámico $z = 1$ para el modelo collar de Kondo. Formas de escala para temperatura finita y el estudio completo de la teoría de escala en transiciones cuánticas utilizadas en esta tesis puede ser encontradas en la referencia [13].

Capítulo 2

Los Fermiones Pesados

“That’s the whole problem with science. You’ve got a bunch of empiricists trying to describe things of unimaginable wonder.”

Calvin

2.1. Introducción

En los últimos años el estudio experimental y teórico de los sistemas fuertemente correlacionados, entre estos, los sistemas llamados Fermiones Pesados (HF, del inglés “Heavy Fermion”) causó un desmedido interés en la comunidad científica que aborda problemas en materia condensada [27, 28]. Principalmente por el atractivo que presentan al ser sistemas próximos de un punto crítico cuántico¹ [2, 29]. Este punto crítico a temperatura nula, separa una fase magnética con orden de largo alcance de una fase no magnética y es el responsable, a muy bajas temperaturas, de las propiedades *anómalas* que estos materiales presentan [13, 30, 31]. El atractivo científico que poseen estos sistemas se basa en poder entender la física por tras de

¹Veremos a lo largo de esta tesis que el descubrimiento de este punto es de crucial importancia para poder estudiar estos materiales.

los sistemas fuertemente correlacionados. En este capítulo presentamos, brevemente, aspectos teóricos y experimentales que motivaron nuestro estudio teórico de estos sistemas.

Desde el punto de vista experimental, la presión externa (P), sustitución química (x) y el campo magnético externo (H) son herramientas poderosas para investigar el comportamiento crítico cuántico en los HF. Las técnicas experimentales que usan estas magnitudes influyen las correlaciones electrónicas entre los iones f , consiguiendo tener un control sobre el parámetro J/W [32, 33], siendo J la constante de acoplamiento entre el espín de los iones f y el espín de los electrones de conducción, y W el ancho de banda de los electrones de conducción [34]. Desde el punto de vista teórico, esta *criticalidad cuántica* puede ser descrita por una teoría que propone nuevas excitaciones críticas inherentemente cuánticas [35, 36, 37], mientras que, otras siguen una teoría usual de transiciones de fase continuas pero a temperatura nula [11, 13, 30, 31, 38, 39]. En lo que sigue de la tesis enfatizaremos esta última abordaje. Comenzaremos con una descripción de los fermiones pesados, para después hacer una introducción básica de la física por tras de estos compuestos. Finalmente mostramos los diversos estados fundamentales que estos presentan.

2.2. Fermiones pesados

Fermiones pesados son materiales intermetálicos conteniendo elementos metálicos y Tierras Raras (TR), como el Cerio (Ce) e Iterbio (Yb), en el inicio y en el fin de la serie de las tierras raras respectivamente, o Uranio (U) en la serie de los Actínidos (Ac). Estos presentan, generalmente una configuración del tipo $4f^n 5d^1 6s^2$ para las TR ($5f^n 6d^1 7s^2$ en el caso de los Ac) con la camada f incompleta, mientras que los electrones de las capas mas externas (d y s) forman una banda de conducción. Por un lado, la inestabilidad en las capas f de los elementos de TR (o Ac) proporciona

un carácter ambiguo para los electrones f , en la frontera entre ser considerados como localizados o itinerantes [32, 40, 41, 42]. Por otro lado, los electrones de conducción suministrados por los elementos metálicos aumentan la interacción electrón-electrón en estos materiales y, como consecuencia, un alto valor de la masa efectiva (m_{eff}) de sus electrones de conducción será observada. El orden de magnitud de la m_{eff} de las quasi-partículas (de los HF) se encuentra entre 100-1000 m_e ($m_e \sim$ masa del electrón) [40] de un metal normal como el *Cobre* (*Cu*). El hecho de considerar la masa de las nuevas quasi-partículas renormalizada a una escala mayor, explica muchas de las propiedades anómalas observadas experimentalmente en estos materiales, particularmente en el estado líquido de Fermi [13]. Una característica común de los sistemas de fermiones pesados es el comportamiento magnético a altas temperaturas, descrito por una susceptibilidad magnética uniforme que es proporcional al inverso de la temperatura T . Este comportamiento tipo Curie está asociado con la presencia de un momento magnético en el ion f . Sin embargo, al reducirse la temperatura del sistema la susceptibilidad se torna independiente de la temperatura, es decir tipo Pauli [31], lo que supone un aniquilamiento o blindaje del momento magnético del ion en analogía con lo que ocurre en el efecto Kondo [43]. Este *crossover*, desde un comportamiento magnético a altas temperaturas para otro no magnético, cuando se disminuye la temperatura del sistema, a pesar de remanente del problema Kondo de una impureza en una matriz metálica, contiene de hecho una física enteramente original [30, 31, 44] como veremos después en el capítulo 3.

2.3. Física de los fermiones pesados

De una manera general, las propiedades físicas de los fermiones pesados son descritas por la competencia entre dos interacciones ²: el blindaje parcial de los mo-

²Siempre que despreciemos las fluctuaciones de carga.

mentos magnéticos por los electrones de conducción (efecto Kondo) [43, 45, 46] y la interacción magnética colectiva de largo alcance entre los momentos localizados (interacción Ruderman-Kittel-Kosiy-Yosida - RKKY) [47, 48, 49]. Estas interacciones escalan dos energías diferentes, cuyas temperaturas características, T_K y T_{RKKY} , dependen de la intensidad del parámetro de control (J/W). El estado magnético de los HF es definido cuando la interacción RKKY es mayor que la interacción Kondo, y el estado no magnético es definido en la situación contraria. La cuestión más interesante sucede cuando la competencia entre ambas interacciones es balanceada.

Muchos de estos sistemas de HF se distinguen, como dijimos anteriormente, por presentar a bajas temperaturas una susceptibilidad de Pauli aumentada en relación a los metales normales. Según la teoría propuesta por Landau [50], la susceptibilidad magnética $\chi(T)$ y el calor específico dividido por la temperatura $C(T)/T$, tienden a una constante en el límite en que $T \rightarrow 0$. Con relación al transporte eléctrico, el comportamiento previsto para la resistencia en función de la temperatura es dado por $\rho(T) = \rho_0 + AT^2$, donde ρ_0 es una resistencia residual extrínseca y $A > 0$. Vale la pena enfatizar que estas propiedades renormalizadas son encontradas cuando la temperatura es inferior que una escala de energía llamada de temperatura de coherencia³ (T_{coh}) [13, 31], que marca el inicio del régimen Líquido de Fermi (FL, del inglés “Fermi Liquid”).

Otro grupo de compuestos de HF presenta en general, sobre presión campo magnético o dopaje, un comportamiento diferente del descrito por la teoría de Landau. Este es designado como comportamiento no líquido de Fermi (NFL). En este régimen, $\chi(T)$ y $C(T)/T$ divergen de forma logarítmica o como ley de potencia cuando $T \rightarrow 0$ y $\rho(T)$ varia con ley de potencia T^β , $1 < \beta < 2$ [32, 33]. De todas estas características del estado NFL, la divergencia de $C(T)/T$ cuando $T \rightarrow 0$ es

³Esta temperatura es difícil de ser visualizada en los tratamientos usuales de muchos cuerpos. Sin embargo, usando la teoría de escala se demuestra la existencia de esta nueva escala de energía, basicamente como resultado de la competencia entre el efecto Kondo y la interacción RKKY, y siendo inferior a la escala de energía representada por la temperatura Kondo.

la más importante pues la densidad de estados en la superficie de Fermi diverge, motivo por el cual difícilmente la física de estos materiales puede ser entendida en el contexto de la teoría de Landau. Este comportamiento NFL es observado para determinadas concentraciones de los elementos químicos que forman los compuestos o para determinados valores de parámetros externos, como presión o campo magnético. Diferentes teorías fueron propuestas para explicar este comportamiento. En la literatura científica encontramos básicamente tres grupos [32]: (1) modelos basados en la presencia de desorden [51, 52, 53], (2) modelos de Kondo multicanales [54, 55], y (3) modelos basados en la proximidad de una transición magnética [30, 35, 38, 56, 57].

En el primer caso, uno de los primeros compuestos que sugiere la presencia de desorden es $\text{UCu}_{5-x}\text{Pd}_x$ con $x = 1,0$ y $x = 1,5$ [58], donde x representa la concentración química que induce el desorden. Con base en esos resultados Bernal *et al.* [51, 58] propusieron el *modelo de desorden de Kondo*, en que las ligaduras de HF son descritas en términos de un conjunto de espines independientes acoplados a una nube de electrones de conducción. Después de propuesto este modelo, Miranda *et al.* [52, 59, 60, 61], consideraron el papel de la interacción electrón-electrón y de desorden en el surgimiento de comportamiento NFL. Otro tratamiento fue presentado por Castro Neto *et al.* [53] donde además del desorden, es considerado una competencia entre el efecto Kondo y la interacción RKKY. Otros compuestos en que el desorden desempeña un rol importante pueden ser encontrados en las referencias [32, 33].

En el segundo caso, con respecto a los modelos de multicanales, son considerados diferentes tipos de electrones de conducción en el blindaje de los momentos localizados, es decir, de bandas diferentes las cuales son asociadas con diferentes canales. Un ejemplo de compuesto descrito dentro de esta teoría es el UBe_{13} . Una revisión de este modelo puede ser encontrada en las referencias [62, 63].

Finalmente en el tercer caso, el parámetro de control J/W lleva al sistema a un

punto crítico cuántico que fija la transición de fase a temperatura nula. Alrededor de este punto las fluctuaciones del parámetro de orden son determinadas por la mecánica cuántica. En este contexto, se espera que las interacciones entre las excitaciones fundamentales de las quasi-partículas y las fluctuaciones de espín expliquen el desaparecimiento del magnetismo en el QCP⁴ [11, 30, 32, 38, 39]. Un compuesto descrito por esta teoría es YbRh₂Si₂, que presenta un comportamiento NFL cuando un campo magnético transversal-*z* le es aplicado [64]. La Fig. (2.1) muestra el diagrama de fases, temperatura versus campo magnético, para este compuesto. Se observa que el comportamiento NFL es encontrado en la región de color laranja, y es definido por la relación $\Delta\rho \equiv (\rho(T) - \rho_0)\alpha T^\alpha$ donde $\alpha = 1$. La región de color azul define el comportamiento FL y la fase antiferromagnética (AF) con $\alpha = 2$. Como nuestro interés está direccionado para esta última abordaje, nos restringiremos a el a partir de aquí, enfatizando siempre que estamos en la proximidad de una transición magnética, con temperatura de ordenamiento próxima de 0° K.

2.4. Estados fundamentales de los fermiones pesados

En general los fermiones pesados pueden ser encontrados en una variedad de estados fundamentales: (1) superconductor en coexistencia (o próxima) con la fase antiferromagnética [65, 66], (2) antiferromagnético [67], (3) líquido de Fermi, y (4) aislador de Kondo [68]. En el primer caso, tenemos compuestos como UPt₃ [69], UBe₁₃ [70, 71], CeCu₂Si₂ [65, 72], CePd₂Si₂, CeCu₂Ge₂ [73], URu₂Si₂ [74], CeRhIn₅ [75, 76] y CeCoIn₅ [77, 78, 79] siendo que la transición puede ser inducida por sustitución química de uno de sus constituyentes, campo magnético [75, 76, 77, 78, 79] o presión [72, 73, 80]. En este caso, la inestabilidad para este estado se da luego del

⁴En este punto crítico dinámica y estática están acopladas, es decir, el QCP será afectado de la misma manera por una frecuencia o temperatura finita, como dijimos en el capítulo 1.

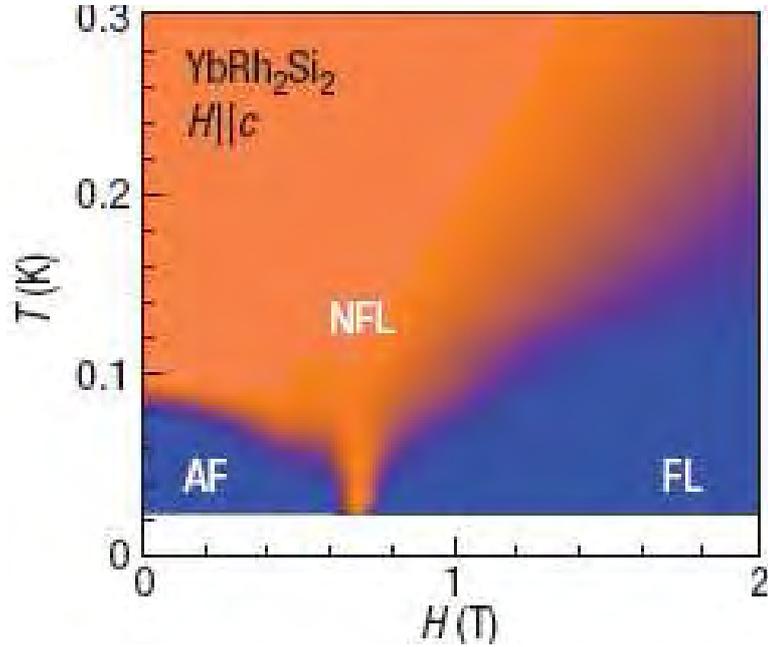


Figura 2.1: Diagrama de fases temperatura T en unidades Kelvin (K) versus campo magnético en unidades Tesla (T) del compuesto YbRh_2Si_2 . Se muestra la supresión del ordenamiento magnético por un campo magnético transversal, $H \parallel c$. Se muestra también la ley de potencia $\Delta\rho \equiv (\rho(T) - \rho_0)\alpha T^\alpha$ donde la región de color naranja muestra el comportamiento NFL a temperaturas muy bajas y alrededor del QCP $H_{c1} = 0,66$ T, con $\alpha = 1$. La región de color azul indica un comportamiento metálico normal. Esta región corresponde a la fase AF y al comportamiento FL con $\alpha = 2$. Figura reproducida de la referencia [64].

sistema entrar en el régimen líquido de Fermi. Hasta nuestros días el mecanismo responsable para la superconductividad, no está entendida en detalle [81], sin embargo, diversas teorías postulan que las fluctuaciones magnéticas juegan un papel fundamental en la aparición de la propiedad superconductor [82]. La Fig. (2.2) es mostrada como ejemplo de un diagrama de fases temperatura versus presión, para el compuesto CePd_2Si_2 [80], que ilustra el surgimiento de una fase superconductor alrededor del QCP cuando la temperatura está próxima del cero absoluto.

En el segundo caso, tenemos sistemas como U_2Zn_{17} , UCd_{11} y UCu_5 , que cuando sometidos a presión, dejan de presentar orden magnética de largo alcance y así que-

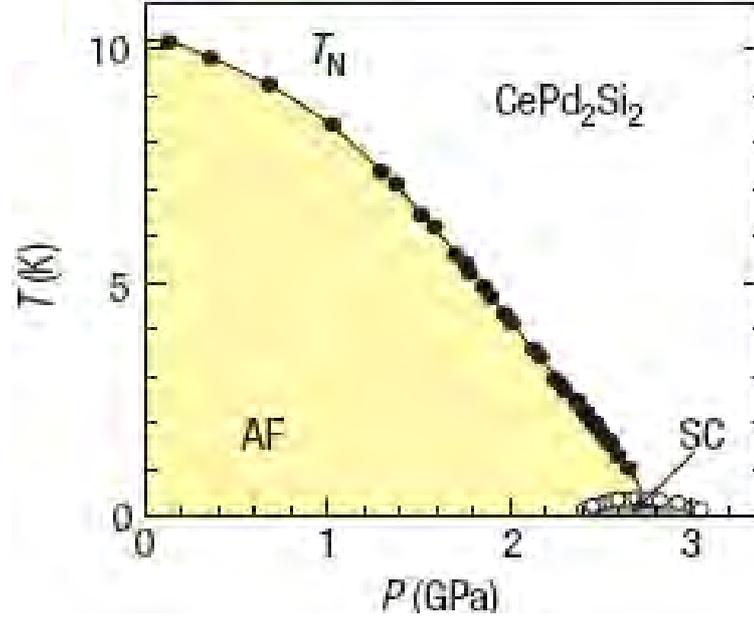


Figura 2.2: Diagrama de fases temperatura T en Kelvin (K) versus presión en unidades Gigapascal (GPa), para el compuesto CePd_2Si_2 . Se muestra el estado superconductor surgiendo próximo del QCP a temperaturas muy bajas. La temperatura de Néel T_N y la temperatura crítica superconductora son indicados por círculos llenos y vacíos, respectivamente. Se muestra también la fase ordenada antiferromagnética denotada como AF y la fase superconductora denotada como SC . Figura reproducida de la referencia [80].

da más evidente la existencia de un régimen líquido de Fermi. Es interesante notar que en el caso opuesto de aplicar *presión negativa*, a través de sustitución química, en un fermión pesado no magnético como CeRu_2Si_2 puede inducirse antiferromagnetismo en el sistema. Estos resultados muestran que los fermiones pesados están próximos de una inestabilidad magnética. Un ejemplo de compuesto que presenta estado fundamental AF es $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$, que presenta una fase antiferromagnética para $x > 0,1$. Para $x = 0,1$ la temperatura de Néel se anula. El comportamiento del sistema pasa a ser dominado por el punto crítico cuántico y la resistencia se comporta como $\rho(T) \approx \rho_0 + AT$ con $A > 0$ en la región NFL [67]. En $\text{CeCu}_{5,8}\text{Au}_{0,2}$ ($T_N = 0,25\text{K}$) encima de una presión de 9Kbar el AF es suprimido. Un análisis si-

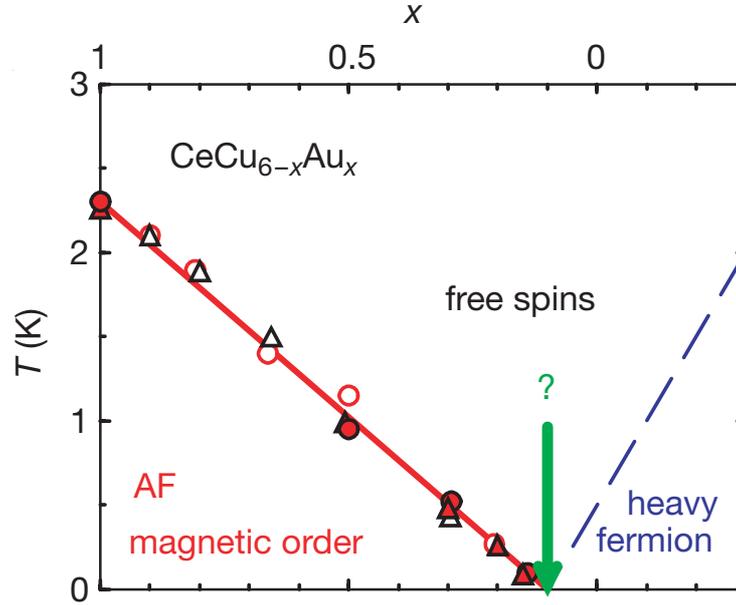


Figura 2.3: Diagrama de fases, del compuesto $CeCu_{6-x}Au_x$, temperatura en unidades (K) versus el dopaje definido como x . Véase que aumentando la concentración de Au lleva al sistema a un orden AF. El QCP está en $x = 0,1$. Se muestra también la fase AF llamada de *AF magnetic order*, el estado líquido de Fermi, llamado de *heavy fermion*, la región crítica cuántica en temperaturas *altas*. En esta última región, los espines están descorrelacionados y pueden ser considerados como *libres*, llamada de *free spins*. Finalmente, se muestra también una flecha indicando que conforme la temperatura disminuye en el QCP, nuestro conocimiento de la física próximo de la criticalidad también disminuye. Figura reproducida de la referencia [67].

milar es hecho para el compuesto $CeCu_{5,7}Au_{0,3}$ ($T_N = 0,5K$). La Fig. (2.3) muestra el diagrama de fases temperatura versus dopaje x de este sistema.

En el tercer caso, para sistemas que presentan un estado fundamental líquido de Fermi, tenemos los compuestos $CeCu_6$, $CeRu_2Si_2$ y UAl_2 que no sufren ninguna inestabilidad hasta temperaturas muy bajas. Vale resaltar que la propia existencia de un régimen líquido de Fermi, en sistemas fuertemente correlacionados ya es un hecho sorprendente.

Finalmente en el cuarto grupo, un ejemplo de aislador de Kondo es el compuesto $Ce_3Bi_4Pt_3$ [83, 84]. Anticipando nuestro estudio de los aisladores de Kondo, que ve-

remos en el capítulo 3, mencionaremos que la razón de incluirlos entre los fermiones pesados es que a temperaturas suficientemente altas, las propiedades termodinámicas de estos materiales son descritas por un modelo de gas de electrones con masa renormalizada. Para el lector interesado en más detalles sobre la física de los fermiones pesados, así como otros datos experimentales, lo direccionamos a leer los artículos de revisión [32, 42, 85, 86].

En resumen en este capítulo introducimos básicamente los conceptos envueltos en la física de los fermiones pesados y algunos comportamientos de estos sistemas cuando sufren una transición de fase cuántica. Esto ayudará a comprender los modelos propuestos para estudiar estos compuestos, entre ellos el modelo collar de Kondo, que será introducido en el capítulo 3. También en este capítulo, dedicaremos un estudio aparte de los aisladores de Kondo en un función de un parámetro de modulación aperiódica, debido a su naturaleza especial y de cierta forma contradictoria con la noción original de fermiones pesados como sistemas metálicos.

Capítulo 3

Efectos de una modulación de intercambio aperiódica en redes de Kondo

“Ô insensé qui croit que je ne suis pas toi!”

V. Hugo

3.1. Introducción

En este capítulo discutiremos el *modelo collar de Kondo* para comprender a fenomenología básica de un tipo de fermión pesado llamado aisladores de Kondo, de la cual comenzamos a hablar en el capítulo 2. Mostraremos también el efecto de una modulación de intercambio aperiódica en este modelo. Aunque nos restringiremos a estudiar modelos con carácter “aislante”, nuestros resultados describen también los grados de libertad magnéticos de los fermiones pesados metálicos, próximos de una transición de fase cuántica magnética.

Estos estudios comenzaron en las décadas del 50 y 60, y fueron realizados en sistemas de impurezas en matrices metálicas que llevaron a identificar las ideas básicas

aplicadas a compuestos que contenían Ce, Y y La. Las cuestiones fundamentales se basaron en los mecanismos necesarios para la formación de momentos magnéticos localizados estables en las impurezas, con una descripción del ion magnético tomada de los compuestos aisladores, y considerando su efecto sobre los electrones de conducción [87].

3.2. Aisladores de Kondo

En esta sección estudiaremos una nueva familia de fermiones pesados descubierta pocos años atrás y que se caracteriza por presentar un comportamiento tipo semiconductor [83]. Estos sistemas, a pesar de ser aisladores a temperatura nula, tienen diversas propiedades físicas en común con los fermiones pesados metálicos que abordamos en el capítulo 2. Por ejemplo, la susceptibilidad magnética a altas temperaturas tiene un comportamiento tipo Curie-Weiss pero, a medida que el sistema es enfriado ella tiende a un valor constante, y podría hasta tornarse nula. Tenemos, por tanto, nuevamente el *crossover* característico de los fermiones pesados de una situación magnética a altas temperaturas para una no magnética a temperaturas bajas.

Físicamente, los iones f de la tierra rara, responsables por la dependencia de la susceptibilidad con la temperatura, son blindados por los electrones tipo s de la banda de conducción formando con estos un estado singlete no magnético, tipo Kondo, a bajas temperaturas. Sin embargo, contrariamente a lo que ocurre con los fermiones pesados metálicos, los electrones de la banda de conducción en aisladores de Kondo quedan aparentemente localizados en los sitios de las tierras raras al formar un par singlete con los momentos localizados, dando origen así a un estado aislador. Para que esto ocurra es necesario dos electrones por celda unitaria: un electrón f y un electrón de conducción. A temperaturas altas, $k_B T \gg \Delta$ donde Δ es el gap extraído,

por ejemplo, del comportamiento exponencial de la resistividad a bajas temperaturas, se puede determinar una región donde el calor específico electrónico γ tiene un comportamiento aproximadamente lineal, el que permite definir una masa térmica ($m_T \propto \gamma$). El hecho que el valor de esta masa sea considerablemente aumentada y el comportamiento de la susceptibilidad magnética, descrito líneas arriba, con su física subyacente, justifican incluir estos sistemas en la categoría de los fermiones pesados, a pesar de su estado fundamental aislador.

En relación a los compuestos que están dentro de este grupo de aisladores de Kondo se incluyen, $\text{Ce}_3\text{Bi}_4\text{Pt}_3$ ($\Delta = 3,6\text{meV}$), SmB_6 ($\Delta = 2,3\text{meV}$), CeNiSn ($\Delta = 0,3\text{meV}$), YbB_{12} ($\Delta = 5,3\text{meV}$), donde meV significa milielectrón Volts. También, Aeppli y Fisk [68] señalaron que el sistema FeSi (el cual es un metal de transición), posee propiedades físicas muy semejantes a este tipo de fermión pesado. Este compuesto es un semiconductor de estructura cúbica y presenta la susceptibilidad magnética y la resistividad tendiendo a cero exponencialmente con la temperatura. De hecho, este compuesto tiene todas las propiedades físicas que caracterizan a los aisladores de Kondo, presentando la ventaja de no tener las complicaciones debidas al campo cristalino presente en los sistemas de tierras raras (por ejemplo en el $\text{Ce}_3\text{Bi}_4\text{Pt}_3$ la susceptibilidad decrece con la temperatura pero satura en un valor finito debido a una contribución de Van Vleck [68]).

Diversos modelos han sido propuestos a fin de explicar la física presentada por estos compuestos a bajas temperaturas, aunque, ninguno de ellos se muestra completamente satisfactorio. A continuación describiremos brevemente los modelos más usados para estudiar los aisladores de Kondo, ellos son el modelo de Anderson y el modelo de la red de Kondo. Debemos resaltar también, que el modelo de dos bandas fue usado para describir la transición metal-aislador en aisladores de Kondo [88, 89, 90, 91]. Dejaremos para la próxima sección 3.3 el modelo collar de Kondo que básicamente puede ser obtenida del modelo de la red de Kondo cuando despre-

ciamos el grado de libertad de carga de los electrones de conducción.

3.2.1. El modelo de Anderson

Como los aisladores de Kondo son sistemas electrónicos fuertemente correlacionados, los modelos propuestos usan Hamiltonianos que son utilizados en el estudio de los fermiones pesados intermetálicos, una de ellos es el Hamiltoniano del modelo de Anderson [92]. Este modelo, considerado en el estudio de aisladores de Kondo [84], describe una colección de estados f , creados en los sitios de una red cristalina y correlacionados con una banda de conducción. El Hamiltoniano es dado por,

$$\mathcal{H}_A = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^s c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + E_f \sum_{i,\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^f n_{i-\sigma}^f + V \sum_{i,\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \quad (3.1)$$

donde $t_{i,j}^s$ representa la *probabilidad* de un electrón en la banda de conducción *saltar* de un sitio i para otro j . Los operadores $c_{i\sigma}^\dagger$, $c_{i\sigma}$ crean y destruyen electrones en la banda de conducción, $f_{i\sigma}^\dagger$, $f_{i\sigma}$ son operadores de creación y destrucción de los electrones en los niveles f localizados en la tierra rara, V es el término de hibridación entre la banda de conducción y el orbital del ion¹, E_f la energía de los estados f y $n_{i\sigma}^f = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$ el operador número de los electrones localizados. Las correlaciones Coulombianas de intensidad U , entre electrones f de spins opuestos en un mismo sitio, tornan el Hamiltoniano de la Eq. (3.1) un problema de muchos cuerpos extremadamente complicado y para tratarlo algunas aproximaciones deben ser introducidas. Entre ellas está el método de *bosones esclavos* que fue aplicado a los aisladores Kondo por Riseborough [84] y Sanchez-Castro *et al.* [93]. Sin embargo, a pesar de incorporar de forma bien simple aspectos de correlaciones fuertes, este método tiene la desventaja de producir una transición de fase espuria, a una tempe-

¹Aunque \mathcal{H}_A fue descrito para tratar impurezas d , podemos considerar que la impureza tiene un único orbital f , desconsiderando la degenerencia del orbital. Anderson trató el caso de dos niveles d degenerados donde se considera un término de intercambio entre los orbitales. El resultado muestra que el término de intercambio favorece la aparición de un momento local [92].

ratura dada, desde una fase aisladora para otra metálica en que el gap de excitación de las quasi-partículas se anula [94].

3.2.2. El modelo de la red de Kondo

Este modelo emerge del Modelo Periódico de Anderson (PAM, del inglés “Periodic Anderson Model”) dado por el Hamiltoniano de la Eq. (3.1), en el límite $U \rightarrow \infty$ y expandiendo V hasta segunda orden via la transformación Schrieffer-Wolff, que elimina las fluctuaciones de carga de los momentos f [95]. Así, el régimen de bajas energías del modelo periódico de Anderson es bien descrita por el modelo de la red de Kondo [96],

$$\mathcal{H}_{KLM} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i,v}^\dagger c_{j,v} + h.c.) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot c_{i,\alpha}^\dagger v_{\alpha\beta} c_{i,\beta}, \quad (3.2)$$

donde los electrones f son reducidos a los momentos localizados \mathbf{S}_i . El primer término representa la banda de conducción ($c_{i,v}^\dagger$ es el operador de creación de un electrón de conducción, t es el hopping entre vecinos más próximos). La hibridación del PAM es substituida por el segundo término, que es la interacción entre los electrones de conducción y los momentos localizados \mathbf{S}_i via la interacción intra-sitio J , y v son matrices de Pauli. Este modelo fue usado para estudiar aisladores de Kondo, ($J > 0$) [68, 97], y manganitas, ($J < 0$) [98].

Básicamente, este modelo (que llamaremos en adelante KLM, del inglés “Kondo Lattice Model”) contiene dos escalas de energía: la interacción RKKY y el blindage Kondo. La primera tiende a establecer un estado magnético, en general antiferromagnético de largo alcance² y la última un estado líquido de espín sin ordenamiento magnético.

²Um estado ordenado de largo alcance es aquel en el cual espines infinitamente distantes permanecen correlacionados.

Este modelo fue estudiado en una dimensión [99] y una fase desordenada, tipo líquido de espín³, es establecida para cualquier valor de la razón J/t produciendo un gap de energía finito en las excitaciones de carga y de espín (siendo el gap de espín siempre menor que el gap de carga ⁴ [100]). Sin embargo, estas peculiaridades del modelo unidimensional se tornan de poca relevancia para entender sistemas reales, bidimensionales y tridimensionales, que estamos interesados en estudiar.

En dos y tres dimensiones, diversas aproximaciones [100, 101, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 109, 110] sugieren que la fase desordenada, tipo líquido de espín, debe mudar a bajas temperaturas, para un estado ordenado de largo alcance, es decir, para valores de J/t menores que un valor crítico $(J/t)_c$.

Existen muchas dificultades en estudiar el modelo de la red de Kondo próximo de una inestabilidad magnética en dimensiones $d \geq 2$ y temperaturas finitas, por lo que diversas aproximaciones fueron implementadas. En lo que resta del capítulo estudiaremos un modelo simplificado del KLM, el llamado modelo collar de Kondo, cuando un parámetro de anisotropía tipo Ising es introducida separadamente en su Hamiltoniano. Utilizaremos una aproximación Gaussiana, dependiente de la dimensión, con la representación de los espines a través de los operadores de enlace que discutiremos con más detalle en el apéndice A.

3.3. El modelo collar de Kondo

En 1977, Doniach propuso un modelo para el Hamiltoniano de la red de Kondo unidimensional pensando estudiar la competición entre el blindaje Kondo y la in-

³El estado ordenado AF desaparece debido a que, en una dimensión, las fluctuaciones cuánticas aumentan mucho, y las correlaciones magnéticas decaen exponencialmente con la distancia entre los espines.

⁴De esa manera, las propiedades en el régimen de bajas energías del KLM será bien descritas por excitaciones de espines en vez de carga. Ese fue el raciocinio de Doniach para postular el modelo collar de Kondo que veremos en la siguiente sección 3.3.

teracción RKKY, la que llamó de Modelo collar de Kondo (KNM, del inglés “Kondo Necklace model”) [34]. En ese modelo, la banda de electrones de conducción es substituida por una cadena de espines acoplados XY y el grado de libertad de carga de los electrones de conducción es omitido, asumiendo que no es esencial para el proceso de esta competición. Esto permite, que las propiedades críticas sean solamente descritas por excitaciones de espines. El modelo es como sigue:

$$\mathcal{H}_{KNM} = t \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \tau_i, \quad (3.3)$$

donde σ y S son operadores de espín-1/2, actuando en el sitio i , del electrón de conducción y del momento localizado, respectivamente, t son acoplamientos entre espines σ de primeros vecinos y $\langle ij \rangle$ representa la suma entre los vecinos más próximos. El primer término reproduce electrones propagándose en una red. En el caso unidimensional debe ser substituido, después de una transformación de Jordan-Wigner, por una banda de fermiones sin espines [111]. El segundo término es la interacción magnética entre el espín de los electrones de conducción σ_i y el momento localizado S_i , via la interacción espín-espín AF, $J > 0$. La Fig. (3.1) muestra un arreglo esquemático de un collar de Kondo para cuatro sitios en una banda semi-llena.

A primera vista podríamos decir que el KLM y el KNM se diferencian básicamente en que el primer modelo sirve para describir sistemas *isotrópicos* tipo Heisenberg, y el segundo describe sistemas tipo- XY . Sin embargo, la principal diferencia está en que el primero considera grados de libertad de espín y de carga (del electrón de conducción), mientras que, el segundo es formulado solamente en términos de operadores de espín. Esto excluye los comportamientos electrónicos anómalos, presentes en la física Kondo próximo de una inestabilidad magnética, desde que excitaciones electrón-hueco desaparecen cuando el grado de libertad de carga del electrón de conducción es dejado de lado. La justificación de excluir grados de libertad de carga está en que ellos son irrelevantes en la física Kondo de bajas energías [113, 114].

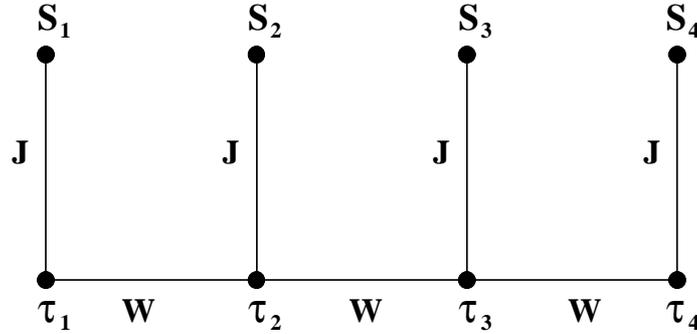


Figura 3.1: Cadena collar de Kondo para cuatro sitios, τ y S denotan los operadores de espín del electrón de conducción y del momento localizado, respectivamente. El término J es el parámetro de intercambio AF ($J > 0$) y W es la longitud de la banda de conducción. Note que, como el KNM es definido con dos espines en cada sitio, la menor representación de la celda del sistema está descrita por cuatro estados, que como veremos en el apéndice A son el estado singlete y los tres estados tripletes. Figura reproducida de la referència [112].

Notemos también que el KNM incorpora un único aspecto del KLM: la competencia entre el blindaje Kondo y la interacción RKKY, que en una banda semi-llena genera un estado fundamental aislador. Así, teóricamente parece haber consenso en estudiar esta competencia usando solamente grados de libertad de espín [115, 116]. Esto es evidente experimentalmente del hecho que pequeñas presiones, es decir, pequeños cambios en los parámetros J y t , pueden inducir o destruir un estado fundamental magnético en esos sistemas [13]. Por tanto, esperaríamos que las propiedades físicas básicas del modelo de la red de Kondo, en una banda semi-llena, sean conservadas y el análisis de los sistemas aisladores de Kondo con el modelo collar de Kondo sería apropiada [117].

Además, estudios parecen sugerir que el KLM y KNM pertenecen al mismo tipo de universalidad en una dimensión [118]. Otra justificación es que, en general, los

fermiones pesados están próximos de una inestabilidad magnética y una abordaje de esto en términos de un modelo que considera solamente fluctuaciones de espín es adecuada⁵ [67]. Por ejemplo, en el trabajo de Rappoport y Continentino [119], se obtuvo el diagrama de fases (T/W) versus (J/W) del modelo collar de Kondo en tres dimensiones por el método de grupo de renormalización de campo medio. La Fig. (3.2) presenta este diagrama de fases y está en excelente concordancia con resultados experimentales en compuestos de Ce , como es mostrado en la Fig. (3.3).

En una dimensión el modelo collar de Kondo fue extensivamente estudiado por una variedad de métodos: campo medio variacional [34], campo medio con operadores de enlace [120, 121], simulación Monte-Carlo cuántico [118], expansión en series de J/t [123, 124], técnica de grupo de renormalización en el espacio real [125, 126, 127, 128, 129], diagonalización numérica exacta [130], cálculos en grupo de renormalización en el espacio real matriz densidad [131, 132], bosonización [115, 133] y diagonalización exacta [134, 135]. También las propiedades de su estado fundamental han sido estudiadas por una variedad de métodos [115, 118, 120, 121, 124, 125, 131, 132, 133, 136]. No obstante en dimensiones mayores ($d > 1$), la termodinámica y las propiedades críticas a temperatura finita de este modelo, próximo de una inestabilidad magnética, permanecen desconocidas [137]. Esta es la motivación para el estudio a ser presentado en esta sección, donde la influencia de un parámetro de modulación aperiódica es investigada.

⁵Esto no es el caso para todos los fermiones pesados, sin embargo sabemos también que la clase de universalidad de las transiciones cuánticas de los fermiones pesados aun no ha sido totalmente determinada, y no debe ser única.

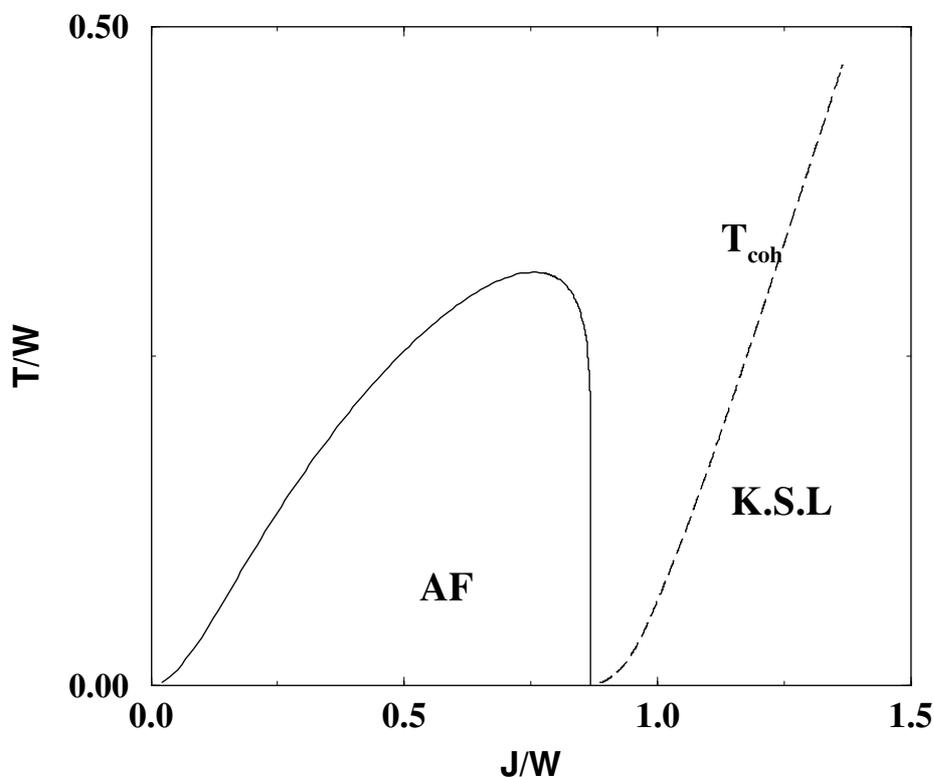


Figura 3.2: Diagrama de fases temperatura como T/W versus la razón J/W del modelo collar de Kondo en tres dimensiones obtenido por el método de grupo de renormalización de campo medio. La línea trazada representa la temperatura de coherencia (T_{coh}), AF la fase antiferromagnética y KSL el régimen Líquido de espín Kondo (KSL, del inglés “Kondo spin Liquid”). Figura reproducida de la referencia [119].

3.4. Comportamiento termodinámico crítico cuántico del modelo collar de Kondo aperiódico

En física de estado sólido se tienen dos tipos de sistemas bien definidos: los ordenados ó los desordenados. Los primeros están relacionados con regularidad mientras que los segundos con irregularidad (o a lo mucho con orden local, como en el caso de los sistemas amorfos). Más aún regularidad ha sido, por lo general, asociado a periodicidad. En 1984, sin embargo, había una controversia en la teoría de la cris-

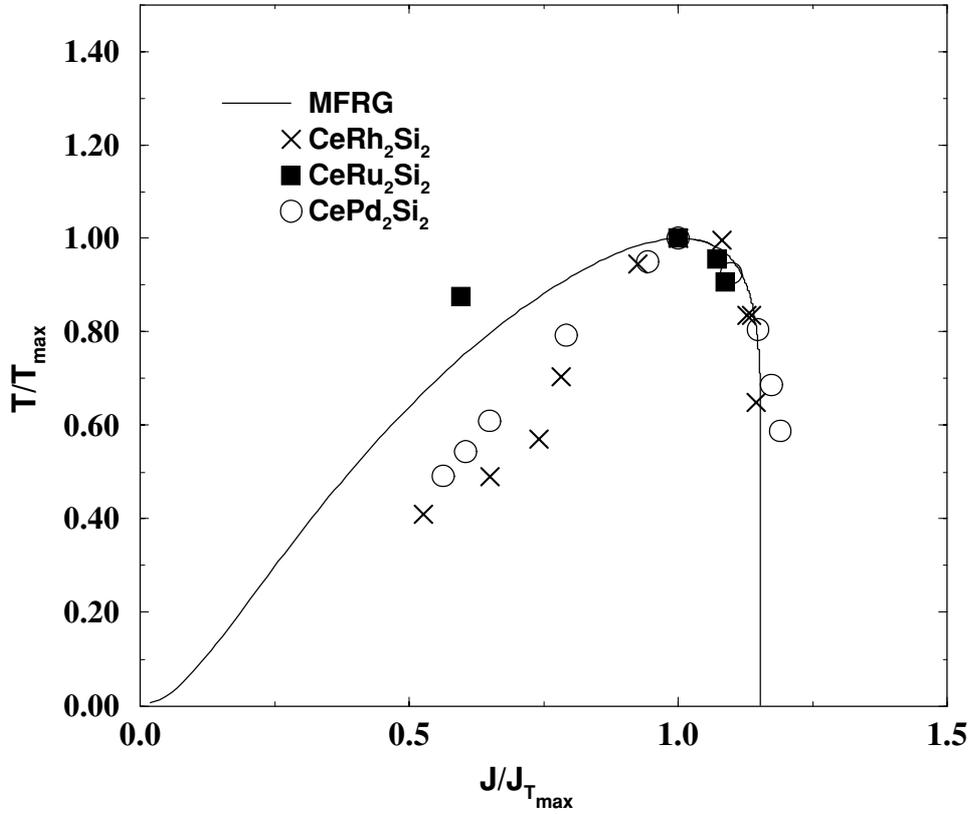


Figura 3.3: Diagrama de fases del modelo collar de Kondo en tres dimensiones de la referencia [119] comparado con resultados experimentales para compuestos de *Ce* [122].

talografía. Textos antiguos en física del estado sólido mostraban que los cristales sólo podían ser construidos por bloques iguales llamadas celdas unitarias, los cuales podrían ser repetidas periódicamente en la estructura. Esta estructura era limitada por un número limitado de simetrías rotacionales, como por ejemplo, simetrías 2-3-4 y 6, mientras que las simetrías 5 y 10 no eran permitidas. En ese año Shechtman, Blech, Gratias y Cahn [138] reportó un compuesto AlMn , el cual mostraba una simetría prohibida, a saber la 10. Esta estructura es también ordenada, no obstante, pierde el típico orden periódico presentada por cristales ordinarios. Esto significa que existen sistemas que siguen reglas bien definidas (orden) pero sin llegar a tener un patrón repetitivo (periodicidad). Un ejemplo sencillo de ello son los números de

Fibonacci o la respectiva secuencia de Fibonacci de la cual hablamos a continuación.

3.4.1. La cadena de Fibonacci

La cadena de Fibonacci es un ejemplo de un quasicristal unidimensional el cual puede ser construido por dos diferentes segmentos, uno largo y otro corto el cual es representado en la literatura como L (del inglés “large”) y S (del inglés “short”), respectivamente. La regla de construcción es reemplazar S con L y L con LS , de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 &S \\
 &LS \\
 &LSL \\
 &LSLLS \\
 &LSLLSLSL \\
 &LSLLSLSLLSLLS
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Los quasicristales [138] son materiales que tienen orden aperiódico de largo alcance pero sin simetría de traslación.

Existen además otras fases cristalinas, llamados aproximantes, que están formadas por celdas gigantes donde el orden interno (dentro de la celda elemental) es similar al de los quasicristales. Entonces, dentro de este contexto es relevante investigar la influencia de este nuevo tipo de orden sobre las propiedades magnéticas de sistemas cerca del cero absoluto. A continuación estudiamos el efecto de una modulación aperiódica del término de intercambio sobre las propiedades del collar de Kondo.

3.4.2. El Hamiltoniano

En esta parte del trabajo consideramos el modelo collar de Kondo, basado en el trabajo [139], con un parámetro de modulación de intercambio aperiódica (empleando la secuencia de Fibonacci, descrita abajo) para estudiar la influencia de la aperiodicidad en la escala de energía del gap de espín, así como, en la línea crítica de Néel próxima del QCP. Usamos la representación de espines en operadores de enlace que estudiamos en en el apéndice A, y que fue aplicada previamente al KLM [101] y al KNM [120], sin embargo, a temperatura nula y para una red periódica. Encontramos que el método permite calcular el exponente de corrimiento que caracteriza la forma de la línea crítica. Consideramos el siguiente Hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sum_i J_i \mathbf{S}_i \cdot \sigma_i, \quad (3.5)$$

donde t es el acoplamiento entre los operadores de espín de los electrones de conducción, σ y S son operadores de espín-1/2 actuando en el sitio i , y la notación $\langle ij \rangle$ representa la suma entre los vecinos más próximos. El primer término reproduce procesos de propagación de los electrones de conducción. El segundo término es la interacción magnética entre el espín del electrón de conducción y el momento localizado de la tierra rara, mediante la interacción AF, $J_i > 0$. Una modulación aperiódica de esa interacción de intercambio es obtenida considerando sólo dos valores diferentes de J_i (J_L o J_S) colocados siguiendo la secuencia generada por la regla de sustitución (secuencia de Fibonacci),

$$L \rightarrow LS, S \rightarrow L. \quad (3.6)$$

Vale la pena mencionar que los valores de J_L y J_S son relacionados (mediante esta regla de sustitución) con los números de Fibonacci F_i los cuales son construidos de las relaciones $F_0 = F_1 = 1$ y $F_{n+1} = F_n + F_{n-1}$. De ese modo, para un red de

estructura periódica de N espines localizados en cada uno de sus sitios tendremos mF_n (mF_{n-1}) espines localizados interactuando con los electrones de conducción a través del acoplamiento de intercambio J_L (J_S) tal que $N = m(F_n + F_{n-1})$. Mostramos en la Fig. (3.4) un arreglo esquemático para ocho sitios considerando esta regla de sustitución.

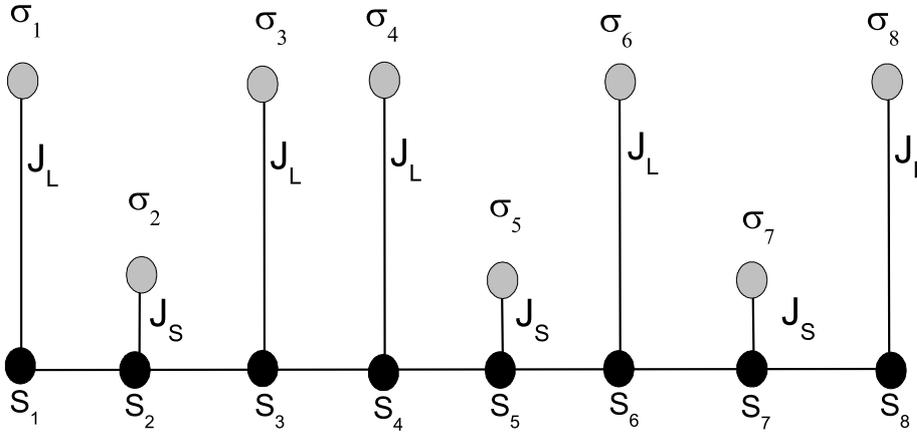


Figura 3.4: Arreglo esquemático para ocho sitios siguiendo la regla de sustitución de Fibonacci.

3.5. Representación en operadores de enlace

Considerando la representación en operadores de enlace para espín-1/2, desarrollada en el apéndice A, en el límite de acoplamiento fuerte, es decir $J/t \rightarrow \infty$, el estado fundamental está compuesto de pares de espín (σ, S) llamados de singletes. El espacio de Hilbert de este par de espines consiste de cuatro estados que pueden ser representados en términos de un estado singlete $|s\rangle$ y tres estados tripletes $|t_x\rangle$,

$|t_y\rangle$ y $|t_z\rangle$, los cuales son creados del vacío por los operadores de creación singlete y triplete: $|s\rangle = s^\dagger |0\rangle$, $|t_\alpha\rangle = t_\alpha^\dagger |0\rangle$, ($\alpha = x, y, z$). En términos de estos operadores, los operadores de espín-1/2 del electrón de conducción y del momento localizado son, respectivamente,

$$\begin{aligned}\sigma_{i,\alpha} &= \frac{1}{2}(-s_i^\dagger t_{i,\alpha} - t_{i,\alpha}^\dagger s_i - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{i,\beta}^\dagger t_{i,\gamma}), \\ S_{i,\alpha} &= \frac{1}{2}(s_i^\dagger t_{i,\alpha} + t_{i,\alpha}^\dagger s_i - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{i,\beta}^\dagger t_{i,\gamma}),\end{aligned}\quad (3.7)$$

donde α , β y γ representan componentes a lo largo de los ejes x , y y z , respectivamente, y $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ es el tensor antisimétrico de Levi-Civita, como definimos en el apéndice A.

Reemplazando la nueva representación de operadores de espín para los momentos localizados y los electrones de conducción, dada por la Eq. (3.7) en el Hamiltoniano Eq. (3.5) encontramos:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2$$

donde

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 &= \frac{1}{4} \sum_i^{mF_n} (-3s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}) \\ &+ \frac{\xi}{4} \sum_i^{mF_{n-1}} (-3s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha}) \\ &+ \sum_i \mu_i (s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha} - 1), \\ \mathcal{H}_1 &= \frac{t}{4J_L} \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} [s_i^\dagger s_j^\dagger t_{i,\alpha} t_{j,\alpha} + s_i^\dagger s_j t_{i,\alpha} t_{j,\alpha}^\dagger + h.c.], \\ \mathcal{H}_2 &= -\frac{t}{4J_L} \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} [t_{i,z}^\dagger t_{j,z}^\dagger t_{i,\alpha} t_{j,\alpha} - t_{i,z}^\dagger t_{j,z} t_{i,\alpha} t_{j,\alpha}^\dagger + h.c.],\end{aligned}\quad (3.8)$$

donde $\xi = J_S/J_L$ y hemos introducido J_L en \mathcal{H} es decir, fijamos J_L como nuestra energía de referencia. El término \mathcal{H}_0 representa la interacción entre los operadores de espín S y σ en el sitio i . El potencial químico μ_i , dependiente del sitio, fue introducido

para imponer la condición de único estado físico posible⁶, $s_i^\dagger s_i + \sum_\alpha t_{i,\alpha}^\dagger t_{i,\alpha} = 1$. Los términos \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 representan la propagación de los tripletes. Debido a la simetría de translación del sistema, hacemos el valor medio del operador singlete $\langle s_i^\dagger \rangle = \langle s_i \rangle = \bar{s}$. Esto corresponde a una condensación Bose-Einstein del estado singlete local Kondo en cada sitio, en el límite de acoplamiento fuerte $J/t \rightarrow \infty$. En este límite, el modelo se torna trivial ya que cada operador de espín S , captura el operador de espín de un electrón de conducción σ , para formar un singlete⁷ y conformando así un estado fundamental que corresponde a un producto directo de singletes. Además, la simetría traslacional del problema implica que debemos asumir $\mu_i = \mu$. Por tanto, con estas consideraciones el Hamiltoniano dado por la Eq. (3.8) considerando solamente un electrón de conducción por sitio (banda semi-llena) puede ser simplificada y obtenemos el Hamiltoniano efectivo, \mathcal{H}_{mf} . Este Hamiltoniano, expresado solamente en operadores cuadráticos será suficiente para describir la transición de fase cuántica desde la fase desordenada tipo líquido de espín para la fase ordenada AF⁸. Después de una transformación de Fourier usando los operadores,

$$t_{i,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad t_{i,\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad (3.9)$$

este Hamiltoniano efectivo, en el espacio de momentos, es representado como,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mf} = & N \left(-\frac{3}{4} \bar{s}^2 G_n(\xi) + \frac{\mu}{J_L} \bar{s}^2 - \frac{\mu}{J_L} \right) + \left(\frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L} \right) \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},z}^\dagger t_{\mathbf{k},z} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \left[\Lambda_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k},\gamma}^\dagger t_{\mathbf{k},\gamma} + \Delta_{\mathbf{k}} \left(t_{\mathbf{k},\gamma}^\dagger t_{-\mathbf{k},\gamma}^\dagger + t_{\mathbf{k},\gamma} t_{-\mathbf{k},\gamma} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde $\gamma = x, y$, $\Lambda_{\mathbf{k}} = \omega_0 + 2\Delta_{\mathbf{k}}$, $\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{s=1}^d \cos k_s$, $\Delta_{\mathbf{k}} = t\bar{s}^2\lambda(\mathbf{k})/4J_L$, \bar{s} es el parámetro de orden singlete, N es el número de sitios de la red y Z el número

⁶Si pensásemos en partículas, esta sería la condición de ocupación única de una quasi-partícula en cada sitio.

⁷Tornando así la densidad de tripletes *baja*, permitiendo despreciar las interacciones triplete-triplete, dado por \mathcal{H}_2 , en la Eq. (3.8).

⁸Los demás términos es decir, la interacción entre los tripletes y la interacción entre tres tripletes y un singlete serán desconsiderados. El primero, porque tendrá efectos despreciables en el Hamiltoniano efectivo cuadrático y el segundo, por no tener ninguna contribución en la energía del estado fundamental, en el senso de la aproximación Gaussiana usada aquí [121, 140, 141].

total de vecinos más próximos en una red hiper-cúbica. Los vectores de onda \mathbf{k} son tomados en la primera zona de Brillouin y el parámetro de red $a = |\mathbf{a}| = 1$. En la Eq. (3.10) consideramos,

$$G_n(\xi) = \frac{F_n + \xi F_{n-1}}{F_n + F_{n-1}} = \frac{\tau_n + \xi}{\tau_n + 1}, \quad (3.11)$$

donde $\tau_n = F_n/F_{n-1}$. En el límite $n \rightarrow \infty$ $\tau_n \rightarrow \tau^* = (\sqrt{5} + 1)/2$ (regla de oro) y $G_n(\xi) \rightarrow G^*(\xi) = (\tau^* + \xi)/(\tau^* + 1)$.

Para diagonalizar el Hamiltoniano de la Eq. (3.10) calculamos las ecuaciones de movimiento para las funciones de Green del problema (ver apéndice A) obteniendo así,

$$\begin{aligned} \ll t_{\mathbf{k},\gamma}; t_{\mathbf{k},\gamma}^\dagger \gg_\omega &= \frac{(\omega + \Lambda_{\mathbf{k}})}{2\pi(\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2)}, \\ \ll t_{\mathbf{k},z}; t_{\mathbf{k},z}^\dagger \gg_\omega &= \frac{1}{2\pi(\omega - \omega_0)} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Los polos de los propagadores dados por la Eq. (3.12) determinan las excitaciones del sistema $\omega_0 = \left(\frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L}\right)$, la cual es el espectro sin dispersión del estado triplete longitudinal y $\omega_k = \pm \sqrt{\Lambda_{\mathbf{k}}^2 - (2\Delta_{\mathbf{k}})^2} = \omega_0 \sqrt{1 + t\bar{s}^2 \lambda(k)/(J_L \omega_0)}$ correspondiente al estado triplete transversal para ambas ramas $\omega_x = \omega_y$. Note que si $G_n(\xi) = 1$ ambos espectros de excitación, longitudinal y transversal, corresponden al modelo collar de Kondo periódico [139].

3.5.1. Fase Paramagnética

Para obtener la energía interna paramagnética (y con esto la energía libre), obtenemos el valor medio del Hamiltoniano efectivo $U = \langle \mathcal{H}_{mf} \rangle$ con ayuda del teorema del salto [16]. Por tanto, la energía interna en la fase paramagnética (PARA) es dada como [139, 142, 143],

$$U = \langle \mathcal{H}_{mf} \rangle = \varepsilon_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_0 \eta(\omega_0) + \omega_{\mathbf{k}} \eta(\omega_{\mathbf{k}})), \quad (3.13)$$

donde

$$\varepsilon_0 = N \left(-\frac{3}{4} \bar{s}^2 G_n(\xi) + \frac{\mu}{J_L} \bar{s}^2 - \frac{\mu}{J_L} \right) + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0) \quad (3.14)$$

es la energía del estado fundamental en la fase PARA tipo líquido de espín, $\eta(\omega) = \frac{1}{2} (\coth \frac{\beta\omega}{2} - 1)$ es el factor de Bose con $\beta = 1/k_B T$, k_B la constante de Boltzman y T la temperatura. Siguiendo las relaciones termodinámicas usuales [144], con la idea que las excitaciones del sistema son quasi-partículas, construimos la energía libre. Para esto usamos la expresión del potencial termodinámico de un gas de partículas obedeciendo la estadística de Bose-Einstein. Esta energía libre es dada por $F = U - TS$ y la entropía de los bosones viene dado por:

$$S = k_B \sum_{\mathbf{k}} [(\eta(\omega_{\mathbf{k}}) + 1) \ln(\eta(\omega_{\mathbf{k}}) + 1) - \eta(\omega_{\mathbf{k}}) \ln(\eta(\omega_{\mathbf{k}}))]. \quad (3.15)$$

Así, usando la Eq. (3.13) y la Eq. (3.15) obtenemos la energía libre en la fase paramagnética tipo líquido de espín como,

$$F = \varepsilon_0 - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln[1 + \eta(\omega_{\mathbf{k}})] - \frac{N}{\beta} \ln[1 + \eta(\omega_0)]. \quad (3.16)$$

Esta energía libre permite obtener el comportamiento termodinámico en la proximidad de la inestabilidad magnética, viniendo desde la fase desordenada paramagnética. Para obtener los parámetros introducidos, \bar{s}^2 y μ , minimizamos la energía libre mediante las ecuaciones de punto de silla $(\partial F/\partial \mu, \partial F/\partial \bar{s}) = (0, 0)$ obteniendo así,

$$\begin{aligned} 2 \left(\frac{3}{4} G_n(\xi) - \frac{\mu}{J_L} \right) &= \frac{t}{N J_1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega_0}{\omega_{\mathbf{k}}} \lambda(\mathbf{k}) \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2}, \\ 2 - \bar{s}^2 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Lambda_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} \coth \frac{\beta \omega_{\mathbf{k}}}{2}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Cuando $T = 0$ y $J_S = J_L$ ($G_n(\xi) = 1$) estas ecuaciones auto-consistentes son equivalentes a las encontradas en el estado líquido de espín para el modelo collar de Kondo periódico [120].

3.6. Efecto de la modulación aperiódica a $T = 0$

A $T = 0$ es decir, sin fluctuaciones térmicas las ecuaciones auto-consistentes de la Eq. (3.17) pueden ser simplificadas como,

$$\begin{aligned} 2(2 - \bar{s}^2) &= I_1(y) + I_2(y) \\ 2y \frac{J_L}{t} \left(\frac{3}{4} G_n(\xi) - \frac{\mu}{J_L} \right) &= I_2(y) - I_1(y), \end{aligned} \quad (3.18)$$

con

$$\begin{aligned} I_1(y) &= \frac{1}{\pi^d} \int_0^\pi \frac{d^d k}{\sqrt{1 + y\lambda(\mathbf{k})}}, \\ I_2(y) &= \frac{1}{\pi^d} \int_0^\pi d^d k \sqrt{1 + y\lambda(\mathbf{k})}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde introducimos el parámetro adimensional $y = t\bar{s}^2/J_L\omega_0$. Por tanto, una ecuación para y puede ser obtenida:

$$y = 2 \left(\frac{t}{J_L} \right) \frac{1}{G_n(\xi)} \left(1 - \frac{I_1(y)}{2} \right). \quad (3.20)$$

Así, para caracterizar la transición de fase cuántica obtenemos las soluciones numéricas de las ecuaciones auto-consistentes en la Eq. (3.18) usando la Eq. (3.20). En este caso, paramagnético, tenemos que el espectro de excitación longitudinal es $\omega_z(k) = \omega_0$ sin dispersión, mientras que, los transversales $\omega_x(k) = \omega_y(k)$ muestran una dispersión la cual tiene un mínimo en el vector recíproco AF $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ en tres dimensiones. Por tanto, el mínimo valor das excitaciones define el gap de espín como

$$\frac{\Delta}{J_L} = \left(\frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L} \right) \sqrt{1 - \frac{Z}{2} \left(\frac{t}{J_L} \right) \frac{\bar{s}^2}{\left(\frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L} \right)}}. \quad (3.21)$$

La energía del gap de espín Δ/J_L define la escala de energía para la fase paramagnética desordenada tipo líquido de espín Kondo. Nuevamente, si hacemos $J_S = J_L$ ($G_n(\xi) = 1$) obtenemos el gap de espín original del modelo collar de Kondo periódico [120] mostrando así que nuestro análisis es una generalización del modelo

collar de Kondo periódico y donde, este último es meramente un caso particular del modelo collar de Kondo con modulación de intercambio aperiódica.

Vale la pena resaltar que el análisis del gap de espín es importante porque del hecho que este se anule, y de la aparición de modos lentos con posible condensación de los tripletes, se define la transición de fase cuántica en el QCP, $(J_L/t = (J_L/t)_c, T = 0)$. Esta transición va de la fase paramagnética tipo líquido de espín Kondo para la fase ordenada de largo alcance antiferromagnética. De nuestro estudio numérico de la Eq. (3.21) podemos ver que la influencia de la modulación aperiódica de la interacción de intercambio en el gap de espín es controlada por $G_n(\xi)$. La Fig. (3.6) muestra estos los resultados para una, dos y tres dimensiones en función de ξ y n (es decir los pares (F_n, F_{n-1}) que son necesarios para calcular τ_n), corresponden a $G_n(\xi)$. Observamos que no existe un cambio cualitativo en el comportamiento de Δ/J_L para todos los casos estudiados, es decir, la modulación aperiódica solamente renormaliza la energía del gap de espín manteniendo el valor finito de este en una dimensión y, mostrando que va a cero en dos y tres dimensiones.

3.6.1. Fase antiferromagnética

La aproximación Gaussiana puede ser extendida a la fase antiferromagnética haciendo una condensación del triplete $t_{\mathbf{k},x}$ en el vector recíproco \mathbf{Q} . Así hacemos $t_{\mathbf{k},x} = \sqrt{N}\bar{t}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{Q}} + \eta_{\mathbf{k},x}$, donde \bar{t} es el valor medio del bosón t_x en el estado fundamental. Este valor medio, puede ser considerado como el parámetro de orden antiferromagnético y el operador $\eta_{\mathbf{k},x}$ representa la fluctuación del triplete- x . Siguiendo los mismos pasos como en el caso paramagnético encontramos la energía interna en este caso como, donde

$$U' = \varepsilon'_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_0 n(\omega_0) + \omega_{\mathbf{k}} n(\omega_{\mathbf{k}})), \quad (3.22)$$

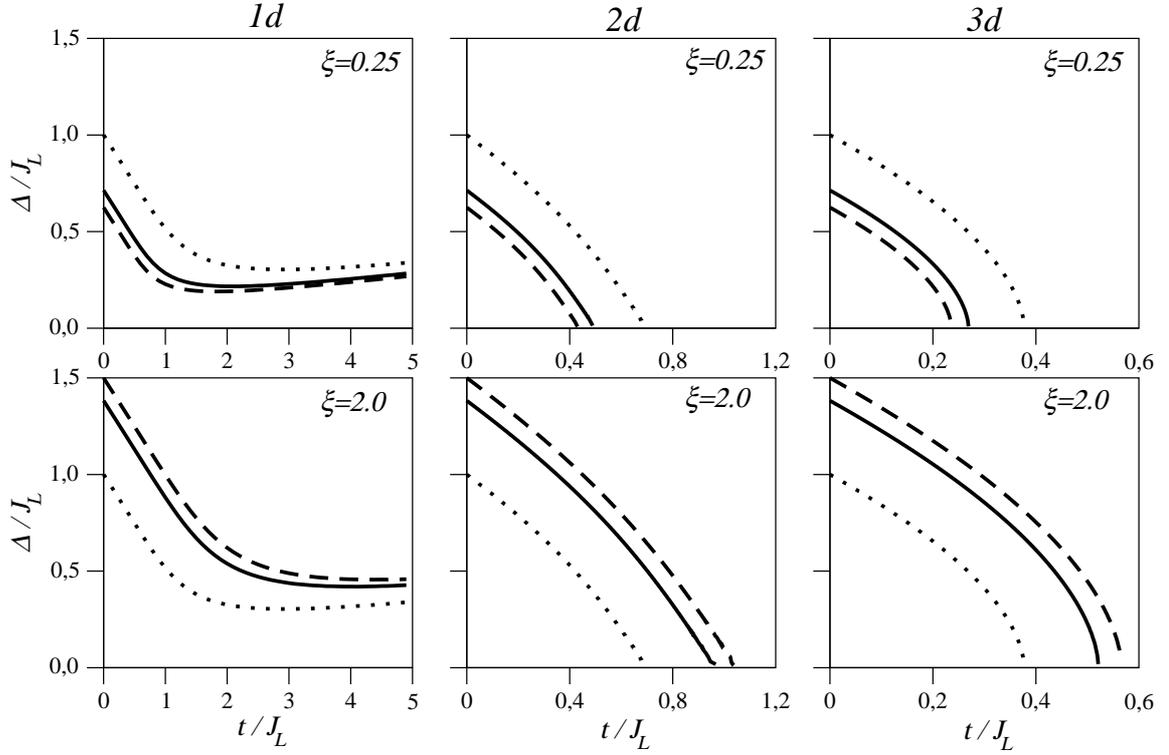


Figura 3.5: Energía del gap de espín en función de t/J_L para $1d$, $2d$, $3d$ (de izquierda a derecha, respectivamente) para dos valores diferentes de $\xi = 0.25$ (superior) o 2.0 (inferior). Tres casos son considerados: $G_n = G^*$ (líneas sólidas), $G_n = G_1$ (líneas discontinuas), y comparadas con la referencia [120] cuando $G_n = 1$ (puntos).

donde

$$\begin{aligned} \varepsilon'_0 &= N \left[-\frac{3}{4} \bar{s}^2 G_n(\xi) + \frac{\mu}{J_L} \bar{s}^2 - \frac{\mu}{J_L} + \left(\left(\frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L} \right) - \frac{t}{2J_L} Z \bar{s}^2 \right) \bar{t}^2 \right] \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_0) \end{aligned} \quad (3.23)$$

es el estado fundamental en la fase antiferromagnética. La energía libre en este caso será,

$$F' = \varepsilon'_0 - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln[1 + n(\omega_{\mathbf{k}})] - \frac{N}{\beta} \ln[1 + n(\omega_0)]. \quad (3.24)$$

Minimizando la energía libre en la fase antiferromagnética, dada por la Eq. (3.24), usando $(\partial F'/\partial \mu, \partial F'/\partial \bar{s}, \partial F'/\partial \bar{t}) = (0, 0, 0)$, obtenemos las siguientes ecuaciones

auto-consistentes,

$$\begin{aligned}\bar{s}^2 &= 1 + \frac{J_L}{Zt} G_n(\xi) - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2}, \\ \bar{t}^2 &= 1 - \frac{J_L}{Zt} G_n(\xi) - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} \coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2},\end{aligned}\quad (3.25)$$

donde el espectro de excitación del estado triplete transversal es dado ahora por, $\omega_{\mathbf{k}} = \frac{t}{2J_L} Z \bar{s}^2 \sqrt{1 + 2\lambda(\mathbf{k})/Z}$. Alternativamente, podríamos obtener los parámetros \bar{s} y \bar{t} en la Eq. (3.25), calculando los valores medios a través de los saltos de las funciones de Green apropiadas [17].

En esta fase ordenada la condensación de los tripletes y de los singletes surge de la interacción RKKY y del efecto Kondo, respectivamente. A temperatura finita, la condensación de singletes ocurre en una escala de temperatura similar a la escala de energía del parámetro de intercambio J_L y J_S . De otro lado, la escala de energía por debajo del cual las excitaciones del estado triplete transversal- x condensan, es dada por la temperatura crítica de Néel (T_N) que será calculada en la próxima sub-sección 3.6.2. Por tanto, el hecho que \bar{s} y \bar{t} sean finitas en esta fase, debe ser interpretado, usando la aproximación Gaussiana, como la coexistencia de blindaje Kondo y antiferromagnetismo en la fase ordenada [101, 120, 139].

3.6.2. Línea crítica de Néel

Siguiendo el estudio de la sub-sección anterior 3.6.1, la línea crítica dando la inestabilidad de la fase AF para $J_L/t < (J_L/t)_c$ es obtenida haciendo el parámetro de orden antiferromagnético $\bar{t} = 0$. Así, de la Eq. (3.25) obtenemos la frontera de la fase AF próxima del QCP como,

$$\frac{|g|}{Z} G_n(\xi) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{k})}{Z}}} \left(\coth \frac{\beta\omega_{\mathbf{k}}}{2} - 1 \right), \quad (3.26)$$

donde $g = |(J_L/t)_c - (J_L/t)|$ mide la distancia al QCP. Este punto crítico cuántico $(J_L/t)_c$ viene dado por,

$$\left(\frac{J_L}{t}\right)_c = \frac{Z}{G_n(\xi)} \left[1 - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 + 2\lambda(\mathbf{k})/Z}} \right] \quad (3.27)$$

que separa, a temperatura nula, la fase ordenada AF de la fase desordenada tipo líquido de espín Kondo caracterizada por el gap de espín finito. Expandiendo el espectro de excitación dispersivo (el transversal) alrededor del vector de onda recíproco $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ en tres dimensiones, escribiendo $k = Q + q$, y expandiendo para pequeños q obtenemos,

$$\lambda(\mathbf{q}) = -d + \frac{q^2}{2} + O(q^4). \quad (3.28)$$

Con esta aproximación, válida próximo de la transición cuántica, encontramos que el espectro de excitación transversal viene dado como

$$\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 \sqrt{1 + \frac{2\lambda(\mathbf{q})}{Z}} \approx \sqrt{D}q. \quad (3.29)$$

donde $\sqrt{D} = \omega_0/\sqrt{Z}$, con $\omega_0 = \left(\frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L}\right)$ el espectro de excitación sin dispersión y d la dimensión euclídeana. Reemplazado la Eq. (3.29) en la Eq. (3.26) obtenemos,

$$\frac{|g|}{Z} G_n(\xi) = \frac{2^{d-2} S_d Z^{d/2}}{\pi^d} \left(\frac{k_B T}{\omega_0}\right)^{d-1} \int_0^{\frac{\beta\omega_0\pi}{2\sqrt{Z}}} u^{d-2} (\coth u - 1) du, \quad (3.30)$$

donde S_d es el ángulo sólido e hicimos el cambio de variables $u = \beta\omega_0 q/2\sqrt{Z}$. Esta Eq. (3.30) permite obtener la línea crítica de Néel en función del parámetro $G_n(\xi)$ y de la distancia al QCP, $|g|$. Para temperaturas $k_B T \ll \omega_0$ la integral en la Eq. (3.30) puede ser calculada y obtenemos,

$$\frac{|g|}{Z} G_n(\xi) = \frac{2^{d-2} S_d Z^{d/2}}{\pi^d \omega_0^{d-1}} (k_B T_N)^{d-1} \Upsilon(d), \quad (3.31)$$

donde $\Upsilon(d) = \int_0^\infty u^{d-2} (\coth u - 1) du$. La solución de esta expresión nos da la forma de la línea crítica de Néel para temperaturas menores que $k_B T \ll \omega_0$ y donde

$\omega_0 = \left(\frac{G_n(\xi)}{4} + \frac{\mu}{J_L} \right)$ conlleva en si la modulación aperiódica del sistema. Observamos que la integral $\Upsilon(d)$ diverge para $d < 3$ mostrando que no existe línea de transición en una o dos dimensiones a temperatura finita, un resultado encontrado para la red periódica del collar de Kondo [139], y que está en concordancia con el teorema de Mermin-Wagner [22]. Sin embargo, para $d \geq 3$, $\Upsilon(d)$ tiene un valor finito y la relación para la línea crítica viene dado como,

$$T_N \propto (|g|G_n(\xi))^{\frac{1}{d-1}}, \quad (3.32)$$

el cual define el exponente de corrimiento $\psi = 1/(d-1)$. En particular para $3d$, $\Upsilon(3) = \pi^2/12$ y la línea crítica de Néel es dado por,

$$k_B T_N = \sqrt{\frac{\sqrt{6}}{144}} \omega_0 (|g|G_n(\xi))^{1/2}. \quad (3.33)$$

Si escribimos la ecuación para la línea crítica, $f(g, T_N) = 0$, en la forma, $(J_L/t)_c(T) - (J_L/t)_c(0) + v_0 T_N^{1/\psi} = 0$, donde v_0 está relacionado con a interacción entre las fluctuaciones del espín, identificamos el exponente de corrimiento, $\psi = z/(d+z-2)$ [38]. Comparando este último con ϕ obtenemos el exponente dinámico $z = 1$, un resultado Gausiano, ya que la línea crítica sólo existe para $d > 2$.

En resumen, en esta sección obtuvimos analíticamente una expresión para la línea de Néel próxima del QCP. Mostramos que esta línea no existe en $d = 2$ para cualquier valor del parámetro $G_n(\xi)$, mientras que, para $d \geq 3$ la ley de potencia entre $|g|$ y la línea crítica para el modelo collar de Kondo con modulación periódica y aperiódica es la *misma* por lo tanto, la *criticalidad* próxima del QCP es gobernada por los *mismos* exponentes críticos en ambos casos.

Capítulo 4

Conclusiones y Perspectivas

It would be possible to describe everything scientifically, but it would make no sense; it would be without meaning, as if you described a Beethoven symphony as a variation of wave pressure.

Albert Einstein

El objetivo de esta tesis fue el estudio de una modulación intercambio aperiódica sobre el modelo del collar de Kondo.

En el capítulo 1, hicimos básicamente una breve introducción a los conceptos y métodos envueltos en esta tesis. Describimos que es una transición de fase cuántica y las diferencias con respecto a las transiciones de fase a temperatura finita. También describimos la teoría de escala para las transiciones de fase cuánticas.

En el capítulo 2, presentamos una breve revisión de las características experimentales así como, la física de las interacciones envueltas en los fermiones pesados próxima de una inestabilidad magnética.

En el capítulo 3, desarrollamos propiamente nuestro trabajo en el modelo collar de Kondo a temperatura nula y finita. Estudiamos los efectos de una modulación de intercambio aperiódica sobre este modelo. Para eso resolvemos el modelo a bajas temperaturas usando una aproximación Gaussiana utilizando el método de las

funciones de Green presentado en el apéndice B. De los polos de los propagadores obtuvimos las excitaciones elementales del sistema y usamos el teorema del salto para obtener la energía interna del sistema. Utilizando las relaciones termodinámicas para un sistema de bosones, calculamos la energía libre del sistema y con ella los diagramas de fases tanto en estado fundamental como a bajas temperaturas. En la fase paramagnética a temperatura nula, derivamos y resolvemos ecuaciones auto-consistentes. Esto permite calcular la dependencia del gap de espín con el parámetro de modulación periódica para $d = 1, 2, 3$. En una dimensión, la energía del gap cae linealmente para pequeños valores de (t/J_L) y se desvía considerablemente del comportamiento lineal a medida que (t/J_L) aumenta. Así, la energía del gap de espín siempre será finita para cualquier valor del parámetro de modulación aperiódica. Sin embargo, en $d = 2, 3$, para valores de la modulación aperiódica existe un valor crítico $(t/J_L)_c$ donde el gap de espín desaparece como $\Delta/J_1 \propto |(t/J_L)_c - (t/J_L)|^{\nu z}$, con exponente $\nu z \approx 0,5$ en dos dimensiones, y $\nu z \approx 1$ en tres dimensiones, respectivamente. En particular en tres dimensiones, el exponente $\nu z \approx 0,5$ es consistente con el exponente dinámico $z = 1$ y con la longitud de correlación $\nu = 1/2$, este último en concordancia con la aproximación Gaussiana usada para resolver el Hamiltoniano.

Obtuvimos, también, la dependencia de la línea de Néel con la distancia al QCP $g = |(J_L/t)_c - (J_L/t)|$, en presencia de un parámetro de modulación aperiódica. En dos dimensiones, y para ξ encontramos que no existe línea de transición a temperatura finita. No obstante, para $d \geq 3$ la línea de transición existe y va para el QCP siguiendo una ley de potencia que es la *misma* que para el modelo collar de Kondo periódico. Esto implica que los exponentes críticos controlando la transición próximo del QCP, para el modelo aperiódico son los mismos que para el caso periódico.

En consecuencia, la presente aproximación Gaussiana produce la descripción correcta del QCP en redes de Kondo para $d \geq 3$, aunque en $3d$ no reproduzca las correcciones logarítmicas propias de sistemas con dimensión efectiva d_{eff} igual a la

dimensión crítica superior d_{uc} , $d_{eff} = d_{uc}$. Por tanto, las características más esenciales de las redes de Kondo, es decir, la competencia entre la interacción RKKY y el efecto Kondo, la cual produce un estado fundamental magnético o no es claramente retenida en modelo para valores finitos del parámetro de modulación aperiódica.

Discutimos ahora el hecho de haber estudiado los aisladores de Kondo utilizando el modelo collar de Kondo. En el capítulo 3 usamos el Hamiltoniano del modelo collar de Kondo para interpretar la desestabilización de la fase magnética en aisladores de Kondo cuando un parámetro de modulación aperiódica es introducido. En este Hamiltoniano existe solamente un único parámetro, J_L/t , del cual dependen las dos escalas de energía relevantes en esta descripción: la energía de Kondo $K_B T_K$, que describe el blindage de los momentos magnéticos localizados, y la energía relacionada con el orden magnético de largo alcance, $k_B T_{RKKY}$. La competencia entre estas dos escalas de energía resulta en un diagrama de fases, conocido como “diagrama de Doniach”. Este describe correctamente algunos diagramas de fases obtenidos experimentalmente [145, 146]. Considerando tres magnitudes físicas relevantes: la susceptibilidad magnética, el calor específico y la resistencia eléctrica, que aportan información básica para determinar las fases existentes y sus límites. A partir de estas magnitudes se obtienen otras propiedades como la energía interna magnética, la entropía o la energía libre. Sin embargo, como relatamos en el capítulo 2, en la región donde se produce la inestabilidad magnética, otros efectos que no son considerados por este Hamiltoniano adquieren mayor relevancia. Estos efectos pueden conducir a la aparición de nuevas fases y fenómenos físicos, como coexistencia entre superconductividad y magnetismo o comportamiento “No-líquido de Fermi”. Debemos decir también que en la comparación entre diagramas de fases experimentales y modelos como el de Doniach, se acostumbra considerar de forma implícita una relación unívoca entre el parámetro de control empleado, por ejemplo el dopaje o la presión hidrostática aplicada, y el parámetro J_L/t . Esta relación puede ser justi-

ficada en algunos casos particulares, en los cuales el volumen de información sobre el sistema en cuestión es suficiente. No obstante, en general se debe considerar la posibilidad de que cambios en el parámetro de control no resulten en variaciones (lineales) del parámetro J_L/t .

Artículos producto de la tesis

1. D. Reyes y C. V. Landauro, Quantum critical behavior of the Kondo necklace model with aperiodic exchange modulation, enviado al Physical Review B (2009).

Apéndice A

Operadores de espín de Sachdev

A.1. Introducción

En 1989, S. Sachdev y N. R. Bhatt introdujeron una nueva representación para operadores de espín-1/2, llamados de operadores de enlace (bond-operators) [15]. Esta representación fue usada en el estudio de las propiedades del estado dimerizado¹ aplicándolo al Hamiltoniano de Heisenberg cuántico AF bi-dimensional frustrado propuesto por Gelfand *et al.* [147]. Básicamente se trataba del estudio en sistemas aisladores, pero ha sido aplicado con éxito al estudio en: *spins ladders* y compuestos relacionados [123, 140, 148, 149, 150, 151, 152, 153, 154, 155], en sistemas que presentan el efecto Hall cuántico de dos capas [156, 157], anti-ferromagnetos dopados para describir la fase aisladora de Mott y superconductora [158], descripción del efecto Kondo en cupratos superconductores [159], sistemas que presentan condensación Bose-Einstein de magnons [160, 161, 162, 163], para sistemas aisladores como TlCuCl_3 [164, 165], $\text{BaCuSi}_2\text{O}_6$ [166], en redes de Kondo [101, 120, 121, 139, 142, 143, 167, 168], y también en el Hamiltoniano de Heisen-

¹Un estado dimerizado consiste en una cobertura de la red con singletes formados por pares de espines.

berg cuántico AF frustrado [169]. La principal utilidad de este método está en tratar sistemas donde exista un estado fundamental natural desordenado, impuesto por el Hamiltoniano, o por quiebra espontánea de simetría². El objetivo de este apéndice es mostrar como estos nuevos operadores surgen en el caso de espín-1/2 y de espín-1, así como, las propiedades que satisfacen. El método permite también el cálculo directo de la energía del estado fundamental y las propiedades termodinámicas del sistema.

A.2. Los operadores de enlace para espín-1/2

En el lenguaje de la mecánica cuántica un espín es un operador vectorial cuyas componentes son los generadores del grupo $SU(2)$. Por ejemplo; un operador de espín \mathbf{S} puede ser expresado en términos de sus componentes S_x , S_y y S_z y estos mismos satisfacen las reglas de conmutación de un momento angular³:

$$\begin{aligned} [\mathbf{S}^2, S_x] &= [\mathbf{S}^2, S_y] = [\mathbf{S}^2, S_z] = 0 \\ [S_\alpha, S_\beta] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_\gamma, \quad \mathbf{S}^2 = S(S+1), \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

donde $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ es el tensor completamente anti-simétrico y los sub-índices α , β y γ se refieren a las componentes x , y y z de los operadores de espines. Considerando dos partículas situadas en un sitio de una red⁴, distinguiremos sus operadores de espines \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 por los índices 1 y 2. En lo que se refiere al sistema compuesto (llamado generalmente de sitio i) este no llevará índice de sitio (a menos que especifiquemos lo

²Esta representación puede ser considerada como análoga a la transformación de Holstein-Primakov para una fase con quiebra de simetría rotacional de los espines.

³Donde estamos usando la convención $\hbar = \mu_B = 1$ con μ_B el magnetón de Bohr y \hbar la constante de Planck.

⁴No obstante, podríamos considerar dos espines interactuando entre dos sitios diferentes. De hecho, los operadores de enlace fueron inicialmente introducidos por Sachdev y Bhatt [15] para estudiar sistemas de dímeros con espín-1/2 situados en sitios diferentes de una red. Sin embargo, debido a que nuestro estudio a lo largo de esta tesis envuelve sistemas donde dos partículas por sitio describen inicialmente la física, comenzamos con esta consideración.

contrario), y sí aquel que identifique la componente cartesiana. Consideremos ahora que cada operador del par tiene espín-1/2, tal que su Hamiltoniano es descrito por:

$$\mathcal{H} = J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (\text{A.2})$$

donde $J < 0$ en el caso ferromagnético (FR) y $J > 0$ cuando tenemos el caso antiferromagnético (AF). Así, existen cuatro estados, $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$ y $|\downarrow\uparrow\rangle$, propios del Hamiltoniano dado por la Eq. (A.2)⁵ y donde, $|\downarrow\uparrow\rangle$ denota el estado en el cual la primera partícula tiene una componente- z de espín- $-1/2$ y la segunda partícula una componente- z de espín- $+1/2$ usando la base de S_z . Cualquier combinación de estos estados tendrá la misma energía. Sin embargo, si queremos tener valores definidos del espín total S y sus componentes a lo largo del eje- z , S_z , deberíamos escoger cuatro combinaciones apropiadas:

Estado		S	S_z
Singlete	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$	0	0
Triplete	$ \uparrow\uparrow\rangle$	1	1
Triplete	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	1	0
Triplete	$ \downarrow\downarrow\rangle$	1	-1

Cuadro A.1: Estados singlete y triplete para un par de partículas situados en un sitio de una red, cada partícula con espín-1/2.

De esa manera, estos estados pueden ser mezclados para formar, en el espacio de Hilbert, el estado singlete $|s\rangle$ ($S = 0$) y los tres estados excitados (considerando $J > 0$) que forman los tripletes ($S = 1$) $|t_x\rangle, |t_y\rangle$ y $|t_z\rangle$. Por tanto, podemos definir operadores de creación que crean los estados singlete y triplete a partir del vacío $|0\rangle$,

⁵Desde el punto de vista matemático, el problema del acoplamiento entre dos espines S_1 y S_2 corresponde a la construcción del espacio de Hilbert producto $\mathcal{H}_{S_1} \otimes \mathcal{H}_{S_2}$ y su descomposición en sub-espacios invariantes ante rotaciones.

mediante:

$$\begin{aligned}
 |s\rangle &= s^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \\
 |t_x\rangle &= t_x^\dagger|0\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle), \\
 |t_y\rangle &= t_y^\dagger|0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle), \\
 |t_z\rangle &= t_z^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle),
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

donde las flechas del lado izquierdo y derecho en el ket representa la componente- z del operador de espín \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 respectivamente. Si el gap entre la energía del estado singlete $E_s = -\frac{3}{4}J$ y la energía del estado triplete $E_t = \frac{1}{4}J$ es pequeña comparada con los otros niveles de energía del sistema, la física a bajas temperaturas será determinada solamente por estos cuatro estados. Consecuentemente, el sistema será correctamente descrito solamente por el grado de libertad espín.

La condición que el estado físico, en el espacio de Hilbert, de cada par de espines es singlete o uno de los tres estados tripletes lleva a considerar que los operadores deben satisfacer la relación,

$$s^\dagger s + \sum_{\alpha} t_{\alpha}^\dagger t_{\alpha} = 1, \tag{A.4}$$

donde $\alpha = x, y, z$; $s^\dagger s$ cuenta cuantos estados singlete tenemos y $t_{\alpha}^\dagger t_{\alpha}$ cuenta cuantos estados triplete tenemos. Demostraremos en la siguiente sección que estos operadores representados en función de los estados singlete y triplete satisfacen las mismas reglas de conmutación especificadas en la Eq. (A.1). El objetivo ahora es demostrar que podemos escribir los operadores de espín \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 en términos de los operadores s , t_x , t_y y t_z . Para esto vamos a considerar la aplicación de estos en los estados $|s\rangle$,

$|t_x\rangle$, $|t_y\rangle$ y $|t_z\rangle$. Recordando que:

$$\begin{aligned} S_x |\uparrow\rangle &= \frac{1}{2} |\downarrow\rangle, & S_x |\downarrow\rangle &= \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, \\ S_y |\uparrow\rangle &= \frac{i}{2} |\downarrow\rangle, & S_y |\downarrow\rangle &= \frac{-i}{2} |\uparrow\rangle, \\ S_z |\uparrow\rangle &= \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, & S_z |\downarrow\rangle &= \frac{-1}{2} |\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Ahora por razones didácticas consideramos solamente la componente x de \mathbf{S}_1 : S_{1x} , y lo aplicaremos a los estados singlete $|s\rangle$ y tripletes $|t_x\rangle$, $|t_y\rangle$ y $|t_z\rangle$.

- Para el estado singlete $|s\rangle$:

$$S_{1x}|s\rangle = S_{1x}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)\right] = -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle)\right] = \frac{1}{2}|t_x\rangle, \quad (\text{A.6})$$

entonces,

$$S_{1x}|s\rangle = S_{1x}s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|t_x\rangle. \quad (\text{A.7})$$

Por otro lado:

$$\frac{1}{2}t_x^\dagger s s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|t_x\rangle, \quad (\text{A.8})$$

luego:

$$S_{1x} \propto \frac{1}{2}t_x^\dagger s. \quad (\text{A.9})$$

- Para el estado excitado $|t_x\rangle$:

$$S_{1x}|t_x\rangle = S_{1x}\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle)\right] = \frac{1}{2}|s\rangle, \quad (\text{A.10})$$

entonces,

$$S_{1x}|t_x\rangle = S_{1x}t_x^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|s\rangle. \quad (\text{A.11})$$

Por otro lado:

$$\frac{1}{2}s^\dagger t_x t_x^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2}|s\rangle, \quad (\text{A.12})$$

luego:

$$S_{1x} \propto \frac{1}{2}s^\dagger t_x. \quad (\text{A.13})$$

- Para el estado excitado $|t_y\rangle$:

$$S_{1x}|t_y\rangle = S_{1x}\left[\frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)\right] = \frac{i}{2}|t_z\rangle, \quad (\text{A.14})$$

entonces,

$$S_{1x}|t_y\rangle = S_{1x}t_y^\dagger |0\rangle = \frac{i}{2}|t_z\rangle. \quad (\text{A.15})$$

Por otro lado:

$$\frac{i}{2}t_z^\dagger t_y t_y^\dagger |0\rangle = \frac{i}{2}|t_z\rangle, \quad (\text{A.16})$$

luego:

$$S_{1x} \propto \frac{i}{2}t_z^\dagger t_y. \quad (\text{A.17})$$

- Para el estado excitado $|t_z\rangle$:

$$S_{1x}|t_z\rangle = S_{1x}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)\right] = -\frac{i}{2}|t_y\rangle, \quad (\text{A.18})$$

entonces,

$$S_{1x}|t_z\rangle = S_{1x}t_z^\dagger |0\rangle = -\frac{i}{2}|t_y\rangle. \quad (\text{A.19})$$

Por otro lado:

$$-\frac{i}{2}t_y^\dagger t_z t_z^\dagger |0\rangle = -\frac{i}{2}|t_y\rangle, \quad (\text{A.20})$$

luego:

$$S_{1x} \propto -\frac{i}{2}t_y^\dagger t_z. \quad (\text{A.21})$$

Así, considerando las Eqs. (A.9), (A.13), (A.17) y (A.21), S_{1x} puede ser escrito como:

$$S_{1x} = \frac{1}{2}(s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i(t_y^\dagger t_z - t_z^\dagger t_y)). \quad (\text{A.22})$$

Recordando que el tensor completamente anti-simétrico en este caso es dado por:

$$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma = (\epsilon_{xyz}t_y^\dagger t_z + \epsilon_{xzy}t_z^\dagger t_y), \quad (\text{A.23})$$

obtenemos finalmente una relación entre el operador de espín S_{1x} y los operadores singlete y triplete:

$$S_{1x} = \frac{1}{2}(s^\dagger t_x + t_x^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_\beta^\dagger t_\gamma). \quad (\text{A.24})$$

De la misma forma se demuestra para las otras componentes S_{1y} y S_{1z} teniendo así la generalización,

$$S_{1,\alpha} = \frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \quad (\text{A.25})$$

donde $\alpha = x, y, z$. Finalmente usando el mismo raciocinio para el operador de espín \mathbf{S}_2 podemos mostrar que la acción de los operadores de espín \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 en los estados singlete y triplete nos lleva a la representación:

$$\begin{aligned} S_{1,\alpha} &= \frac{1}{2}(s^\dagger t_\alpha + t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \\ S_{2,\alpha} &= \frac{1}{2}(-s^\dagger t_\alpha - t_\alpha^\dagger s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_\beta^\dagger t_\gamma), \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

donde α, β, γ toman los valores de x, y, z y $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ es el tensor totalmente anti-simétrico.

A.2.1. Relaciones de conmutación entre los operadores de enlace para espín-1/2

Como las relaciones de conmutación bosónicas o de anticonmutación fermiónicas reproducen de forma correcta el álgebra de los operadores de espines \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 podríamos adoptar cualquier una de las dos [170]. Así, por una cuestión de conveniencia hemos adoptado las relaciones de conmutación bosónicas, ya que considerar los operadores como fermiónicos no provee ningún significado físico en senso de la aproximación Gaussiana que usamos en esta tesis. Por tanto, los operadores singlete y triplete satisfacen las relaciones de conmutación:

$$[s, s^\dagger] = 1, \quad [t_\alpha, t_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta}, \quad [s, t_\alpha^\dagger] = 0. \quad (\text{A.27})$$

donde la última relación indica que los operadores s y t_α conmutan es decir, actúan en espacios diferentes. Por último, verificaremos si el álgebra de \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 es satisfecha. Por ejemplo, vamos a calcular la identidad $[S_{1x}, S_{1y}] = iS_{1z}$. Usando la representación de s y t_α , tenemos:

$$\begin{aligned}
 [S_{1x}, S_{1y}] = & \frac{1}{4} \left([s^\dagger t_x, s^\dagger t_y] + [s^\dagger t_x, t_y^\dagger s] + i[s^\dagger t_x, t_x^\dagger t_z] - i[s^\dagger t_x, t_z^\dagger t_x] \right. \\
 & + [t_x^\dagger s, s^\dagger t_y] + [t_x^\dagger s, t_y^\dagger s] + i[t_x^\dagger s, t_x^\dagger t_z] - i[t_x^\dagger s, t_z^\dagger t_x] \\
 & - i[t_y^\dagger t_z, s^\dagger t_y] - i[t_y^\dagger t_z, t_y^\dagger s] + [t_y^\dagger t_z, t_x^\dagger t_z] - [t_y^\dagger t_z, t_z^\dagger t_x] \\
 & \left. + i[t_z^\dagger t_y, s^\dagger t_y] + i[t_z^\dagger t_y, t_y^\dagger s] - [t_z^\dagger t_y, t_x^\dagger t_z] + [t_z^\dagger t_y, t_z^\dagger t_x] \right), \quad (\text{A.28})
 \end{aligned}$$

usando la identidad:

$$[AB, CD] = -[C, A]BD - A[C, B]D - C[D, A]B - CA[D, B]$$

encontramos:

$$\begin{aligned}
 [S_{1x}, S_{1y}] &= \frac{1}{4} (-t_y^\dagger t_x + i s^\dagger t_z + t_x^\dagger t_y + i t_z^\dagger s + i s^\dagger t_z - t_y^\dagger t_x + i t_z^\dagger s + t_x^\dagger t_y) \\
 &= \frac{i}{2} (s^\dagger t_z + t_z^\dagger s - i(t_x^\dagger t_y - t_y^\dagger t_x)) = i S_{1z}. \quad (\text{A.29})
 \end{aligned}$$

El mismo raciocinio puede ser usado para mostrar:

$$\begin{aligned}
 [S_{1\alpha}, S_{1\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{1\gamma}, & [S_{2\alpha}, S_{2\beta}] &= i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{2\gamma}, \\
 [S_{1\alpha}, S_{2\beta}] &= 0, & \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 &= -\frac{3}{4} s^\dagger s + \frac{1}{4} t_\alpha^\dagger t_\alpha, \\
 \mathbf{S}_1^2 &= \frac{3}{4}, & \mathbf{S}_2^2 &= \frac{3}{4}. \quad (\text{A.30})
 \end{aligned}$$

puede ser provado (y es físicamente obvio) que la condición $\mathbf{S}_{1(2)}^2 = \frac{3}{4}$ es equivalente a exigir que cada sitio este ocupado por un único tipo de operador de espín $\mathbf{S}_{1(2)}$. Estas relaciones, dadas por la Eq. (A.30), son exactamente las propiedades esperadas no comienzo de esta sección para los operadores de espín-1/2 del grupo $SU(2)$. Por tanto, los operadores de espín que corresponden a los sitios de la red de un sistema estudiado pueden ser ahora expresados en términos de los nuevos operadores bosónicos singlete y triplete.

En conclusión, vimos en este capítulo una nueva representación para operadores de espín-1/2 que fue usada en el capítulo 3.

Apéndice B

El Método de las Funciones de Green

En este apéndice presentamos brevemente las definiciones básicas de la técnica de las funciones de Green descritas por Zubarev [16]. El empleo de este método en los problemas de la mecánica estadística y estado sólido, es adecuado cuando es utilizado en modelos que envuelven operadores cuánticos y nos permite el cálculo de diversos valores medios de esos operadores. Comenzamos definiendo un operador cualquiera Y , que puede escribirse como,

$$\langle Y \rangle = \frac{1}{Z} \text{tr} \{ Y e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu N)} \}; Z = \text{tr} \{ e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu N)} \}, \quad (\text{B.1})$$

donde $\langle \dots \rangle$ indica la media estadística usual, \mathcal{H} es el Hamiltoniano del sistema, N el operador número total de electrones, $\beta = 1/k_B T$ (k_B la constante de Boltzmann, T la temperatura absoluta) y μ el potencial químico. Consideremos ahora dos operadores $A(t)$ y $B(t')$ en la representación de Heisenberg ($\hbar = 1$):

$$A(t) = e^{i\mathcal{H}t} A(0) e^{-i\mathcal{H}t}, \quad (\text{B.2})$$

$$B(t) = e^{i\mathcal{H}t} B(0) e^{-i\mathcal{H}t}. \quad (\text{B.3})$$

Las funciones de Green retardada (+) y avanzada (-) son definidas por:

$$\ll A(t); B(t') \gg_{\pm} = \mp \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\eta} \rangle, \quad (\text{B.4})$$

donde $[A(t), B(t')]_{\eta} = A(t)B(t') - \eta B(t')A(t)$, y $\eta = 1$ el -1 si los operadores son bosónicos o fermiónicos respectivamente; y $\theta(t)$ es la función escalón de Heavyside:

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{si } t > 0 \\ 0 & \text{si } t < 0 \end{cases} . \quad (\text{B.5})$$

Las funciones de Green (A.4) satisfacen la ecuación de movimiento,

$$i \frac{d}{dt} \ll A(t); B(t') \gg_{\pm} = \delta(t - t') < [A(t), B(t')]_{\eta} > + \ll [A(t), \mathcal{H}]_{-}; B(t') \gg_{\pm} . \quad (\text{B.6})$$

Como $\ll A(t); B(t') \gg_{\pm}$ son funciones de $(t - t')$, puede definirse para z real, la transformada de Fourier:

$$\ll A(t); B(t) \gg_{\pm, z} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \ll A(t); B(0) \gg_{\pm} e^{izt} dt. \quad (\text{B.7})$$

En el caso de la función de Green retardada, la integral (A.7) converge también para valores complejos de z , siempre que $\text{Im}(z) > 0$. De esta manera, la definición de $\ll A; B \gg_{+}$ puede ser extendida para el plano complejo y es una función regular en la parte superior del plano complejo z . De manera análoga, $\ll A; B \gg_{-}$ es regular en la parte inferior del plano. Podemos, por tanto introducir la definición:

$$\ll A; B \gg_z = \begin{cases} \ll A; B \gg_{+, z} & \text{si } \text{Im}(z) > 0 \\ \ll A; B \gg_{-, z} & \text{si } \text{Im}(z) < 0 \end{cases} , \quad (\text{B.8})$$

que es regular en todo el plano complejo z , excepto sobre el eje real. A partir de las ecuaciones (A.7) y (A.8) se obtiene la ecuación de movimiento de los propagadores:

$$z \ll A(t); B(t') \gg_z = \frac{1}{2\pi} < [A, B]_{\eta} > + \ll [A(t), \mathcal{H}]_{-}; B(t') \gg_z; \quad (\text{B.9})$$

y la expresión fundamental de Zubarev que relaciona la media térmica $< BA >$ con las funciones de Green:

$$< B(t')A(t) > = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dz [\ll A; B \gg_{z+i\delta} - \ll A; B \gg_{z-i\delta}] \left\{ \frac{e^{iz(t-t')}}{e^{\beta(z-\mu)} - \eta} \right\}. \quad (\text{B.10})$$

Utilizando a notación de Hamann, el resultado anterior puede ser escrito como,

$$\langle BA \rangle = F_z[\ll A; B \gg_z]. \quad (\text{B.11})$$

En el caso en que los operadores A y B sean adjuntos hermitianos puede escribirse:

$$\langle B(t)A(t) \rangle = -2Im \int_{-\infty}^{\infty} \ll A; B \gg_z f(z) dz, \quad (\text{B.12})$$

donde

$$f(z) = \frac{1}{e^{\beta(z-\mu)} - \eta} \quad (\text{B.13})$$

es la función de Fermi-Dirac.

OBSERVACIÓN: Este apéndice fue totalmente basado en la referencia [17].

Bibliografía

- [1] *Nature Physics*, Focus Vol. 4 No.3 March 2008.
- [2] S. Sachdev, *Quantum phase transitions*, Cambridge Univ. Press, New York, (1999).
- [3] H. von Löhneysen, *J. Phys. Condens. Matter* **8**, 9689 (1996).
- [4] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- [5] M. B. Maple, *J. Magn. Magn. Mater.* **177**, 18 (1998).
- [6] J. Orenstein y A. J. Millis, *Science* **288**, 475 (2000).
- [7] S. Sachdev, *Science* **288**, 475 (2000).
- [8] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Mathews, C. E. Wieman, y E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [9] T. Nikuni, M. Oshikawa, A. Oosawa y H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5868 (2000).
- [10] F. S. Nogueira y K. H. Bennemann, *Europhys. Lett.* **67**, 620 (2004).
- [11] J. A. Hertz, *Phys. Rev. B* **14**, 1165 (1976).
- [12] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many Body Systems*, Physics Reports, HOLANDA, v. **239**, n. 3, p. 179 (1994).

- [13] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, Ed. World Scientific (2001).
- [14] S. Chakravarty, B. I. Halperin, y D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **39**, 2344 (1989).
- [15] S. Sachdev y N. R. Bhatt, *Phys. Rev. B* **41**, 9323 (1990).
- [16] D. N. Zubarev, *Usp. Fiz. Nauk.* **71**, 71 (1960).
- [17] A. Troper, *Notas sobre funções de Green*, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-CBPF.
- [18] M. E. Fisher, *Critical Phenomena*, Editora Springer-Verlag (1982).
- [19] S. Ma y S.-K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Perseus Books Group; 1^{ra} edição (2000).
- [20] J. Cardy *et al.*, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge Lecture Notes in Physics), Cambridge University Press (1996).
- [21] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (London: Taylor y Francis) (1990).
- [22] N. D. Mermin y H Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [23] S. Chakravarty, B. I. Halperin, y D. R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1057 (1998).
- [24] S. Chakravarty, B. I. Halperin, y D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **39**, 2344 (1989).
- [25] Mathias Vojta, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 2069 (2003).
- [26] L. P. Kadanoff *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 395 (1967).
- [27] Philipp Gegenwart, Qimiao Si, y Frank Steglich, *Nature Physics* **4**, 186 (2008).
- [28] H. v. Löhneysen, A. Rosch, M. Vojta, y P. Wölfle, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1015 (2007).

- [29] P. Coleman y A. J. Schofield, *Nature* **433**, 226-229 (2005).
- [30] M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **47**, 11587 (1993).
- [31] M. A. Continentino, G. M. Japiassu, y A. Troper, *Phys. Rev. B* **39**, 9734 (1989).
- [32] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 797 (2001).
- [33] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 743 (2006).
- [34] S. Doniach, *Physica B* **91**, 231 (1977).
- [35] Q. Si, S. Rabello, K. Ingersent, y J. L. Smith, *Nature* **413**, 804 (2001).
- [36] P. Coleman, C. Pépin, Q. Si, y R. Ramazashvili, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, R723 (2001).
- [37] T. Senthil, M. Vojta, y S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **69**, 035111 (2004).
- [38] J. A. Millis, *Phys. Rev. B* **48**, 7183 (1993).
- [39] T. Moriya y T. Takimoto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 960 (1995).
- [40] F. Steglich *et al.*, *J. Low. Temp. Phys.* **99**, 267 (1995).
- [41] F. Steglich *et al.*, *J. Phys. Chem. Solids* **59**, 2190 (1998).
- [42] J. Flouquet, cond-mat/0501602 (2005).
- [43] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [44] M. A. Continentino, *J. de Physique I* **1**, 693 (1991).
- [45] J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964).
- [46] J. Kondo, *Solid. Stat. Phys.* **23**, 183 (1969).
- [47] M. A. Ruderman y C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954).

- [48] T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956).
- [49] K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 895 (1957).
- [50] E. M. Lifshitz y L. P. Pitaevskii, *Statistical Physics-Part 2: Theory of the Condensed State*, Butterworth-Heineman, (1995).
- [51] O. O. Bernal, D. E. MacLaughlin, H. G. Lukefahr, y B. Andracka, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2023 (1995).
- [52] E. Miranda, V. Dobrosavljević, y G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 290 (1997).
- [53] A. H. Castro Neto, G. Castilla, y B. A. Jones, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3531 (1978).
- [54] P. Nozières y A. Blandin, *J. Physique* **41**, 193 (1980).
- [55] D. L. Cox, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1240 (1987).
- [56] A. M. Tsvelik y M. Reizer, *Phys. Rev. B* **48**, 9887 (1993).
- [57] A. Schröder, G. Aeppli, E. Bucher, R. Ramazashvili, y P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5693 (1998).
- [58] D. E. MacLaughlin, O. O. Bernal, y H. G. Lukefahr, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 9855 (1996).
- [59] E. Miranda, V. Dobrosavljević, y G. Kotliar, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 9871 (1996).
- [60] E. Miranda y V. Dobrosavljević, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 264 (2001).
- [61] E. Miranda y V. Dobrosavljević, *J. Magn. Magn. Mat* **226-230**, 110 (2001).
- [62] D. L. Cox y M. Jarrell, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 9825 (1996).
- [63] D. L. Cox y A. Zawadowski, *Adv. Phys.* **47**, 599 (1998).

- [64] J. Custers *et al.*, *Nature* **424**, 524 (2003).
- [65] F. Steglich *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1892 (1979).
- [66] S. Raymond y D. Jaccard, *Phys. Rev. B* **61**, 8679 (2000).
- [67] A. Schröder *et al.*, *Nature* **407**, 351 (2000).
- [68] G. Aeppli y Z. Fisk, *Comments Cond. Mat. Phys.* **16**, 155 (1992).
- [69] G. R. Stewart, Z. Fisk, J. O. Willis, y J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 679 (1984).
- [70] H. R. Ott, H. Rudigier, Z. Fisk, y J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1595 (1983).
- [71] P. Gegenwart *et al.*, *Physica C* **408-410**, 157 (2004).
- [72] H. Q. Yuan *et al.*, *Science* **302**, 2104 (2003).
- [73] D. Jaccard, K. Behnia, y J. Sierro, *Phys. Lett. A* **163**, 475 (1992).
- [74] W. Schlabitz *et al.*, *Z. Phys. B* **62**, 171 (1986).
- [75] T. Park, *et al.*, *Nature* **440**, 65-68 (2006).
- [76] G. Knebel, D. Aoki, D. Braithwaite, B. Salce, y J. Flouquet, *Phys. Rev. B* **74**, 020501 (2006).
- [77] J. Paglione *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 246405 (2003).
- [78] A. Bianchi, R. Movshovich, I. Vekhter, P. G. Pagliuso, y J. L. Sarrao, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 257001 (2003).
- [79] S. Singh *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 057001 (2007).
- [80] N. D. Mathur *et al.*, *Nature* **394**, 39 (1998).

- [81] P. W. Anderson, *Science* **316**, 1705-1707 (2007).
- [82] P. Monthoux, G. G. Lonzarich, y D. Pines, *Nature* **450**, 1177-1183 (2007).
- [83] M. F. Hundley *et al.*, *Phys. Rev. B* **42**, 6842 (1990).
- [84] P. Riseborough, *Phys. Rev. B* **45**, 13984 (1992).
- [85] P. Coleman, arXiv:cond-mat/0612006 (2007).
- [86] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **56**, 755 (1984).
- [87] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge Studies in Magnetism (Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom), (1997).
- [88] M. A. Continentino, G. M. Japiassú, y A. Troper, *Phys. Rev. B* **49**, 4432 (1994).
- [89] M. V. Tovar Costa, N. A. de Oliveira, G. M. Japiassú, y M. A. Continentino, *J. Mag. Mat. Mag* **177**, 331 (1998).
- [90] M. V. Tovar Costa, A. Troper, N. A. de Oliveira, G. M. Japiassú, y M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **57**, 6949 (1998).
- [91] N. A. de Oliveira, Marcus V. Tovar Costa, A. Troper, Gloria M. Japiassú, y M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **60**, 1444 (1999).
- [92] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [93] C. Sanchez-Castro, K. S. Bedell, y B. R. Cooper, *Phys. Rev. B* **47**, 6879 (1993).
- [94] Tatiana Rappoport, *Correlações antiferromagnéticas de curto alcance em isolantes Kondo* Disertação de Mestrado, Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense (1999).

- [95] J. R. Schrieffer y P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- [96] P. Sinjukow y W. Nolting, *Phys. Rev. B* **65**, 212303 (2002).
- [97] P. Riseborough, *Adv. Phys.* **49**, 257 (2000).
- [98] E. Dagotto *et al.*, *Phys. Rev. B* **58**, 6414 (1998).
- [99] Tsunetsugu Hirokazu, Manfred Sigrist, y Ueda Kazuo *Rev. Mod. Phys.* **69**, 809 (1997).
- [100] N. Shibata, T. Nishino, K. Ueda, y C. Ishii, *Phys. Rev. B* **53**, 828 (1996).
- [101] C. Jurecka y W. Brenig, *Phys. Rev. B* **64**, 092406 (2001).
- [102] C. Lacroix y M. Cyrot, *Phys. Rev. B* **20**, 1969 (1979).
- [103] Z. P. Shi, R. R. Singh, M. P. Gelfand, y Z. Wang, *Phys. Rev. B* **51**, 15630 (1995).
- [104] Z. Wang, X. P. Li, y D. H. Lee, *Physica B* **199-200**, 463 (1984).
- [105] F. F. Assaad, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 796 (1999).
- [106] S. Capponi y F. F. Assaad, *Phys. Rev. B.* **63**, 155114 (2001).
- [107] M. Vekic, J. W. Cannon, D. J. Scalapino, R. T. Scalettar, y R. L. Sugar, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2367 (1995).
- [108] M. Jarrel, *Phys. Rev. B* **51**, 7429 (1995).
- [109] Weihong Zheng y J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **67**, 214406 (2003).
- [110] Yasuhiro Saito, Akihisa Koga, y Norio Kawakami, *J. Phys. Soc. Jpn.* **72**, 1208 (2003).
- [111] A. Luther y I. Peschel, *Phys. Rev. B* **12**, 3908 (1975).

- [112] A. Saguia y M. S. Sarandy, *quant-ph* 0208133, (2004).
- [113] P. Fazekas y Hae-Young Lee, *Mod. Phys. Lett. B* **6**, 1681 (1992).
- [114] P. Fazekas y Hae-Young Lee, *Phys. Rev. B* **48**, 7274 (1993).
- [115] S. P. Strong y A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **50**, 9911 (1994).
- [116] V. L. Líbero y D. L. Cox, *Phys. Rev. B* **48**, 3783 (1993).
- [117] C. Godart, L. C. Gupta, C. V. Tomy, J. D. Thompson, y R. Vijayaraghavan, *Europhys. Lett.* **8**, 375 (1989).
- [118] R. T. Scalettar, D. J. Scalapino., y R. J. Sugar, *Phys. Rev. B* **31**, 7316 (1985).
- [119] M. A. Continentino y T. G. Rappoport, *J.Phys. A: Math. Gen.* **34**, 10829 (2001).
- [120] G. M. Zhang, Q. Gu, y L. Yu, *Phys. Rev. B* **62**, 76 (2000).
- [121] A. Langari y P. Thalmeier, *Phys. Rev. B* **74**, 024431 (2006).
- [122] A. L. Cornelius y J. S. Schilling, *Phys. Rev. B* **49**, 3955 (1994).
- [123] V. N. Kotov, O. Sushkov, Z. Weihong, y J. Oitmaa, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5790 (1998).
- [124] Y. Matsushita, M. P. Gelfand, y C. Ishii, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 3648 (1997).
- [125] R. Jullien, J. N. Fields, y S. Doniach, *Phys. Rev. B* **16**, 4889 (1977).
- [126] R. Jullien, P. Pfeuty, A. K. Batthacharjee, y Coqblin, *J. Appl. Phys.* **50**, 7555 (1979).
- [127] W. Hanke y J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **25**, 6748 (1982).

- [128] T. G. Rappoport, A. Saguia, B. Boechat, y M. A. Continentino, *Europhys. Lett.* **61** (6), 831 (2003).
- [129] T. G. Rappoport, A. Saguia, B. Boechat, y M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **64**, 140402(R) (2001).
- [130] P. Santini y J. Solyom, *Phys. Rev. B* **46**, 7422 (1992).
- [131] S. Moukouri, L. G. Caron, C. Bourbonnais, y L. Hubert, *Phys. Rev. B* **51**, 15920 (1995).
- [132] H. Otsuka y T. Nishino, *Phys. Rev. B* **52**, 15066 (1995).
- [133] M. N. Kiselev, D. N. Aristov, y K. Kikoin *Phys. Rev. B* **71**, 092404 (2005).
- [134] Takahiro Yamamoto, Masanari Asano, y Chikara Ishii, *J. Phys. Soc. Jp.* **70**, 3678 (2001).
- [135] Takahiro Yamamoto, Kôichirô Ide, y Chikara Ishii, *Phys. Rev. B* **66**, 104408 (2002).
- [136] P. Santini y J. Solyom *Phys. Rev. B* **46**, 7422 (1992).
- [137] Wolfram Brenig, *Phys. Rev. B* **73**, 104450 (2006).
- [138] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, y J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [139] D. Reyes y M. A. Continentino, *Phys. Rev. B*, **76** 075114 (2007).
- [140] S. Gopalan, T. M. Rice, y M. Sigrist *Phys. Rev. B* **49**, 8901 (1994).
- [141] B. Normand y T. M. Rice *Phys. Rev. B* **54**, 7180 (1996).
- [142] D. Reyes *et al.*, *Physica B* **359**, 714 (2005).

- [143] D. Reyes y M. A. Continentino, *J. Phys.:Condens. Matter* **19**, 714 (2007).
- [144] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics, Second Edition*, Elsevier Ltd., (1996).
- [145] J. G. Sereni *et al.*, *Phys. Rev. B* **48**, 3747 (1993).
- [146] H. Wilhelm y D. Jaccard, *Phys. Rev. B* **66**, 064428 (2002).
- [147] M. P. Gelfand, R. R. Singh, y D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **40**, 10801 (1989).
- [148] T. M. Rice, S. Gopalan, y M. Sigrist, *Europhys. Lett.* **23**, 445 (1993).
- [149] J. Piekarewicz y J. R. Shepard, *Phys. Rev. B* **60**, 9456 (1999).
- [150] V. N. Kotov, J. Oitmaa, O. Sushkov, y Zheng Weihong, *Phil. Mag. B* **80**, 1483 (2000).
- [151] Y. Matsushita, M. P. Gelfand, y C. Ishii, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 247 (1999).
- [152] K. Totsuka, S. Miyahara, y K. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 520 (2001).
- [153] D. Carpentier y L. Balents, *Phys. Rev. B* **65**, 024427 (2002).
- [154] R. Eder, A. Dorneich, M. G. Zacher, W. Hanke, y S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **59**, 561 (1999).
- [155] A. Furusaki y S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **60**, 1175 (1999).
- [156] E. Demler y S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3895 (1999).
- [157] T. Sommer, M. Vojta, y K. W. Becker, *Eur. Phys. J. B* **23**, 329 (2001).
- [158] S. Sachdev y K. Park, *Phys. Rev. B* **64**, 184510 (2001).
- [159] Kwon Park, *Phys. Rev. B* **67**, 094513 (2003).
- [160] Hang-Ting Wang y Yupeng Wang, *Phys. Rev. B* **71**, 104429 (2005).

- [161] Haruhiko Kuroe *et al.* *Phys. Rev. B* **77**, 41956887 (2008).
- [162] Bao Xu, Han-Ting Wang, y Yupeng Wang, *Phys. Rev. B* **77**, 014401 (2008).
- [163] D. Reyes, A. Paduan-Filho, y M. A. Continentino *Phys. Rev. B*, **77** 052405 (2008).
- [164] Masashige Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, y Manfred Sigrist, *Phys. Rev. B* **69**, 054423 (2004).
- [165] M. Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, y M. Sigrist, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 077203 (2002).
- [166] Kwai-Kong Ng y Ting-Kuo Lee, *Phys. Rev. B* **73**, 014433 (2006).
- [167] P. Thalmeier y A. Langari *Phys. Rev. B* **75**, 174426 (2007).
- [168] H. Rezanía, A. Langari, y P. Thalmeier, *Phys. Rev. B* **77**, 094438 (2008).
- [169] Rakesh Kumar y Brijesh Kumar, *Phys. Rev. B* **77**, 144413 (2008).
- [170] Takahiro Yamamoto, Rumi Manago, Yoshihiro Mori, y Chikara Ishii, *J. Phys. Soc. Jp.* **72**, 3204 (2003).