

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

TRABAJO DE DIPLOMA

**Fases magnéticas no triviales en el
modelo Kitaev-Heisenberg extendido
en la red panal de abejas**

Autor

Juan Ignacio PICCININI

Director

Dr. Héctor Diego ROSALES

Co-Directora

Dra. Flavia Gómez
ALBARRACÍN

Asesor Académico

Dr. Rodolfo BORZI

Facultad de Ciencias Exactas
Departamento de Física

Marzo de 2019

Agradecimientos

A toda mi familia, por el apoyo dado todos estos años. A mis amigos, en especial a los de la facultad que hicieron que la travesía académica se hiciera placentera. A Diego, mi director, por su paciencia, predisposición y su guía intelectual. A Flavia, mi co-directora, que tanto me ayudo con el trabajo y atendió incansablemente a cada una de mis dudas.

Índice

1	Introducción	1
1.1	Interacciones Magnéticas	2
1.2	Sistemas Frustrados	5
1.3	Estructura cristalina	8
1.4	Espacio Recíproco y zona de Brillouin	10
1.4.1	Factor de estructura de espín	12
1.5	Modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$	12
1.6	Modelo de Kitaev-Heisenberg	14
1.7	Métodos numéricos	17
2	Método de Luttinger-Tisza	19
2.1	Método General	19
2.1.1	Método de Luttinger-Tisza para el modelo de Kitaev-Heisenberg	22
2.2	Solución numérica y Diagrama de Fases	24
2.2.1	Kitaev Antiferromagnético: $K > 0$	25
2.2.2	Kitaev Ferromagnético: $K < 0$	27
2.3	Discusión	29
3	Método Autoconsistente	33
3.1	Fundamentos	33
3.2	Esquema de minimización iterativo	34
3.2.1	Resultados y Discusión	35
4	Conclusiones	39
4.1	Trabajo Futuro	39

Lista de Figuras

1.1	Estado de Néel en una red cuadrada. Cada espín se encuentra antialineado respecto de cada uno de sus primeros vecinos.	6
1.2	Esquema de un sistema simple triangular. Izquierda: Una de las interacciones antiferromagnéticas esta frustrada; no todos los espines pueden antialinearse con sus vecinos. Derecha: El estado que minimiza la energía del sistema es aquél en el cual los espines se ubican de manera que el ángulo relativo entre cada uno de ellos es 120°	7
1.3	Uno de los posibles estados fundamentales de la red de Kagomé.	7
1.4	Red panal de abejas. Los sitios que denotan los dos tipos de subred están marcados con diferentes grises. \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 son los vectores primitivos de la red.	9
1.5	Construcción de <i>Wigner-Seitz</i> para una red bidimensional. A la izquierda se muestran los bisectores perpendiculares a las líneas que unen los puntos de la red. La región encerrada por los bisectores define la <i>celda de Wigner-Seitz</i>	10
1.6	Izquierda: Red panal de abejas y los vectores primitivos de la red. A y B denotan los diferentes sitios de la red. Se muestran, además, las interacciones de Kitaev a primeros vecinos según la dirección (en color) y en líneas punteadas las interacciones de Heisenberg a segundos vecinos para el espín del sitio A . Derecha: Primera zona de Brillouin de la red panal de abejas junto con los vectores primitivos de la red recíproca y algunos puntos de alta simetría.	12
1.7	Esquema del espacio recíproco con ejemplos particulares de las regiones de mínimos para el modelo J_1/J_2 en la red panal de abejas. Con líneas sólidas roja se muestra el caso $1/6 < J_2/J_1 < 0.5$; con líneas punteadas azules el caso $J_2/J_1 = 0.5$ y con líneas punteadas rojas un ejemplo de $J_2/J_1 > 0.5$. Los puntos color púrpura son los k favorecidos por fluctuaciones cuánticas.	14
1.8	Desdoblamiento de los orbitales d debido al entorno (campo cristalino) y al acoplamiento espín-órbita.	15
1.9	Diagrama de fases del modelo Kitaev-Heisenberg cuántico obtenido por Jackeli y Khaliullin. Se observan dos fases de espín líquido y cuatro fases ordenadas. Al lado de cada fase ordenada se muestra la disposición de los espines en cada una de las fases con los círculos blancos y negros indicando espines “up” o “down”.	16
2.1	Bandas de más baja energía para el caso $J_2 = 0.3$ y $K = 0.5$	24
2.2	Diagrama de Fases J_2/J_1 vs K/J_1 obtenido con la técnica L-T para el para el modelo de Kitaev-Heisenberg extendido.	25

2.3	Mínimos de energía para casos particulares de $K \geq 0$ ($J_1 = 1$). En la figura (B) se agregó una línea como guía para señalar que los mínimos se encuentran sobre las rectas que une puntos de alta simetría; en el caso mostrado la línea es $\Gamma \rightarrow K_2$	26
2.4	Bandas por líneas para los casos con $K \geq 0$ ($J_1 = 1$).	27
2.5	Mínimos de energía para casos particulares de $K < 0$ ($J_1 = 1$). En la subfigura (A) se agregó una línea como guía para señalar que los mínimos se encuentran sobre las rectas que une puntos de alta simetría; en el caso mostrado la línea es $\Gamma \rightarrow M_x$	28
2.6	Bandas por líneas para los casos con $K < 0$ ($J_1 = 1$).	29
3.1	Energía en función del logaritmo del número de pasos. para el caso $J_2 = 0.3$ y $K = 0.5$ ($J_1 = 1$).	35
3.2	Factor de estructura para las fases del sistema ($J_1 = 1$).	36
3.3	Configuración de los espines en la fase Stripy	37

Capítulo 1

Introducción

Los sistemas fuertemente correlacionados constituyen un problema de vasta importancia para la física del estado sólido. Durante las últimas décadas, experimentos realizados con distintos tipos de materiales han evidenciado que las correlaciones fuertes son un ingrediente central para la comprensión de sus propiedades físicas. Entre estos materiales están los superconductores de alta temperatura, materiales que presentan magnetoresistencia colosal, efecto Hall cuántico fraccionario, nanotubos de carbono, una variedad de metales orgánicos, conductores y dieléctricos, entre otros.

En particular en los últimos años el estudio de sistemas magnéticos frustrados se ha convertido en un campo muy activo tanto teórica como experimentalmente. La razón de este interés radica en que este fenómeno se presenta como un excelente terreno para el descubrimiento de nuevas fases y propiedades exóticas de la materia [1]. Dentro de la problemática de los sistemas magnéticos frustrados aparece el modelo de Kitaev [2] propuesto y resuelto de manera exacta para una red panal de abeja por Alexei Kitaev en el año 2006. Este modelo, que propone interacciones a primeros vecinos anisotrópicas, provee un número de propiedades fascinantes tales como degeneración topológica o excitaciones anyónicas, que en la práctica se vuelven relevantes para desarrollos en el campo de la computación cuántica. El modelo de Kitaev, a pesar de ser en apariencia un poco artificial, tomó gran relevancia a partir del trabajo de Jackeli y Khaliullin [3] donde mostraron que este tipo de interacciones serían relevantes en materiales con un fuerte acoplamiento espín-órbita como el Sr_2IrO_4 . Desde entonces se hicieron grandes esfuerzos para sintetizar y estudiar materiales con este tipo de interacciones. Dado que el elemento clave de este modelo es la anisotropía de la interacción, una posibilidad es explorar materiales que contengan metales de transición $5d$, como el Iridio o el Osmio, donde el fuerte acoplamiento espín-órbita induce anisotropía magnética [4] que puede ser estudiada utilizando el modelo de Kitaev. No obstante, hasta el día de hoy no se ha encontrado evidencia de la existencia de materiales cuyas propiedades sean explicadas enteramente por el modelo de Kitaev [5]. Para materiales como el Na_2IrO_3 y el $\alpha - RuCl_3$, donde se han observado fases ordenadas, se han propuesto modelos con interacciones de Kitaev y de intercambio en una red panal de abejas [6]. A partir de los avances tanto teóricos como experimentales de trabajos recientes el modelo extendido de Kitaev-Heisenberg se transformó en un tópico de gran interés.

En el presente trabajo nos dedicaremos a estudiar el modelo de Kitaev-Heisenberg con interacciones tanto isotrópicas hasta segundos vecinos como anisotrópicas a primeros vecinos en la red de panal de abejas. Para explicar el comportamiento

experimental del Na_2IrO_3 un modelo similar fue investigado incluyendo interacciones de intercambio a terceros vecinos [7] con interacciones de Kitaev antiferromagnéticas y de Heisenberg ferromagnéticas. En este trabajo nos enfocaremos en el caso de interacción de intercambio antiferromagnética a primeros y segundos vecinos, donde el modelo isotrópico es degenerado, y agregaremos interacciones de Kitaev tanto ferromagnéticas como antiferromagnéticas.

1.1 Interacciones Magnéticas

A pesar de que el magnetismo se ha conocido desde la antigüedad, no fue hasta la formulación de la mecánica cuántica que se logró entender al fenómeno. Desde una perspectiva clásica, si se considera al electrón como una carga que está “circulando” alrededor del núcleo rápidamente, se lo puede describir como una corriente que genera un campo magnético [8]. Sin embargo, al calcular la energía de la interacción magnética entre dos dipolos a distancias atómicas, nos encontramos con una escala de energías del orden de la energía térmica ($k_B T$) a 1 Kelvin [9]. De acuerdo con el esquema clásico, entonces, tendríamos dificultades en explicar, por ejemplo, la transición de un sólido cuya transición ferromagnética se da a 10 Kelvin. Al tratar a los electrones como partículas cuánticas fue posible resolver este problema.

Consideremos dos átomos a los que etiquetaremos como 1 y 2, separados por una distancia $R_{12} = R_1 - R_2$; sean $\phi_1(\mathbf{r})$ y $\phi_2(\mathbf{r})$ las funciones de onda espaciales correspondiente a los electrones de las capas más externas del átomo 1 y 2 respectivamente (considerando que cada átomo tiene un solo electrón en la capa más externa). A una separación infinita el comportamiento de las partículas vendrá dado por cada una de las funciones de onda mencionada, pero al disminuir R_{12} entonces existirá un solapamiento entre las dos funciones de onda

$$I \equiv \left| \int d\mathbf{r} \phi_1^*(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2) \right| \quad (1.1)$$

que será distinto de cero solamente cuando los núcleos estén lo suficientemente cerca (y las funciones de onda no sean ortogonales).

Además de la función de onda espacial, los electrones tendrán un estado de espín que puede tener espín total $S = 0$ (singlete)

$$\chi_s = \frac{\chi_\uparrow(1)\chi_\downarrow(2) - \chi_\downarrow(1)\chi_\uparrow(2)}{\sqrt{2}} \quad (1.2)$$

o espín total $S = 1$ (triplete)

$$\chi_{t,1} = \chi_\uparrow(1)\chi_\uparrow(2) \quad (1.3)$$

$$\chi_{t,0} = \frac{\chi_\uparrow(1)\chi_\downarrow(2) + \chi_\downarrow(1)\chi_\uparrow(2)}{\sqrt{2}} \quad (1.4)$$

$$\chi_{t,-1} = \chi_\downarrow(1)\chi_\downarrow(2) \quad (1.5)$$

En esta notación $\chi_\uparrow(1)\chi_\downarrow(2)$ significa que el primer electrón tiene una componente $S_z = 1/2$ y el electrón en el segundo átomo una componente $S_z = -1/2$.

Dado que los electrones son fermiones, la función de onda total debe ser antisimétrica, con lo cual, dependiendo del estado de espín total tendremos una función de onda espacial antisimétrica (si tomamos uno de los estados de espín triplete) o simétrica (para el estado singlete). Con las dos funciones de onda descritas previamente podemos construir una función simétrica y una antisimétrica como se muestra a continuación

$$\phi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) + \phi_2(\mathbf{r}_1)\phi_1(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2 + 2I^2}} \quad (1.6)$$

$$\phi_t(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) - \phi_2(\mathbf{r}_1)\phi_1(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2 + 2I^2}} \quad (1.7)$$

El denominador de cada una de estas combinaciones sale de normalizar a cada uno de los estados. Llamemos ahora E_0 a la energía de cada átomo en el régimen en el que están infinitamente separados, es decir

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i|} \right] \phi_i(\mathbf{r}_i) = E_0 \phi_i(\mathbf{r}_i) \quad (1.8)$$

Donde $\hat{\mathbf{p}}_i$ es el operador momento de i -ésimo electrón, \mathbf{r}_i su vector posición y \mathbf{R}_i el vector posición del i -ésimo núcleo. Si entonces tomamos el Hamiltoniano para el sistema de dos átomos tendremos

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ & + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_1|} \end{aligned} \quad (1.9)$$

donde no solo aparece la interacción atractiva entre los electrones y los núcleos sino también la interacción repulsiva entre ambos electrones y ambos núcleos. Para poder calcular las energías de los posibles estados del sistema debemos calcular las siguientes cantidades

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_1^*(\mathbf{r}_1)\phi_2^*(\mathbf{r}_2) \hat{H} \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \\ & = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_2^*(\mathbf{r}_1)\phi_1^*(\mathbf{r}_2) \hat{H} \phi_2(\mathbf{r}_1)\phi_1(\mathbf{r}_2) \\ & = 2E_0 + U \end{aligned} \quad (1.10)$$

donde

$$U = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_2(\mathbf{r}_2)|^2 \times \left[\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_1|} \right] \quad (1.11)$$

Por otro lado tenemos que

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_2^*(\mathbf{r}_1) \phi_1^*(\mathbf{r}_2) \hat{H} \phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2) \\ &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_1^*(\mathbf{r}_1) \phi_2^*(\mathbf{r}_2) \hat{H} \phi_2(\mathbf{r}_1) \phi_1(\mathbf{r}_2) \\ &= 2E_0 l^2 + V \end{aligned} \quad (1.12)$$

siendo

$$\begin{aligned} V = & \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \phi_1^*(\mathbf{r}_1) \phi_2^*(\mathbf{r}_2) \phi_2(\mathbf{r}_1) \phi_1(\mathbf{r}_2) \times \\ & \left[\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_1|} \right] \end{aligned} \quad (1.13)$$

A partir de esto podemos escribir a las energías de los estados singlete y triplete como

$$E_s = \langle \phi_s | \hat{H} | \phi_s \rangle = 2 \frac{2E_0 + U + 2l^2 E_0 + V}{2 + 2l^2} = 2E_0 + \frac{U + V}{1 + l^2} \quad (1.14)$$

$$E_t = \langle \phi_t | \hat{H} | \phi_t \rangle = 2 \frac{2E_0 + U - 2l^2 E_0 - V}{2 - 2l^2} = 2E_0 + \frac{U - V}{1 - l^2} \quad (1.15)$$

siendo entonces la diferencia entre estas dos energías

$$E_t - E_s = 2l^2 \frac{U - V}{1 - l^4} \equiv -J \quad (1.16)$$

El valor de esta cantidad impone la manera en que se dispondrán los espines. Para $J > 0$ el estado triplete es de menor energía que el singlete, por lo tanto los espines tenderán a ubicarse paralelos (ferromagnetismo). Para $J < 0$ el estado singlete es el de menor energía y los electrones se ubicarán de forma antiparalela (antiferromagnetismo). Se puede demostrar que el Hamiltoniano de la ecuación 1.9, que solo actúa sobre la parte espacial de la función de onda total, puede reemplazarse por un Hamiltoniano que solo actúa sobre los grados de libertad de espín sin afectar los resultados encontrados [9]. Con esto en mente, el Hamiltoniano utilizando operadores de espín se puede escribir

$$\hat{H} = 2E_0 + \frac{U - V}{1 - l^2} + \left(\frac{1}{4} - \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \right) \quad (1.17)$$

donde \hat{S}_i es el operador de espín actuando sobre el i -ésimo electrón. Si utilizamos la ecuación 1.16 podemos reescribirlo de la siguiente forma

$$\hat{H} = \frac{1}{4}(E_s + 3E_t) - (E_s - E_t) \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \quad (1.18)$$

Esta expresión es la suma de un término constante y un término que depende del espín. La constante puede ser eliminada por medio de una redefinición del cero de energía, por lo que solo conservaremos el segundo término y diremos que

$$\hat{H}^{spin} = -(E_s - E_t)\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = -J\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 \quad (1.19)$$

Este Hamiltoniano describe la interacción entre dos electrones y puede proponerse para describir interacciones entre átomos vecinos. Esto constituye el modelo de Heisenberg cuyo Hamiltoniano es

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (1.20)$$

donde J_{ij} es la constante de intercambio entre los espines i -ésimo y j -ésimo. Si consideramos $J_{ij} = J$ (que corresponde al caso de un sistema isótropo y homogéneo) entonces

$$\hat{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (1.21)$$

Es válido preguntarse en este punto por qué, siendo el espín un concepto que surge en mecánica cuántica, hablamos de espines clásicos. Acá daremos una respuesta parcial. Consideremos una partícula cuántica de espín S , sabemos entonces que la componente S_z del espín puede tomar cualquier valor m tal que $-S \leq m \leq S$. Si esta partícula se encontrase en el autoestado χ_m entonces la proyección del espín en el espacio ortogonal a S_z deberá cumplir que $\sqrt{S(S+1) - m^2}$.

Si tomamos en particular el autoestado del espín tal que $m = S$, entonces la condición anterior será $\sqrt{S(S+1) - m^2} = \sqrt{S}$ y la razón entre la proyección del espín en el espacio ortogonal a la componente S_z y la magnitud del espín, S , será $1/\sqrt{S}$. Si tomamos el límite $S \rightarrow \infty$, la razón tenderá a cero y el espín, entonces, apuntará a una dirección completamente definida del espacio. Por lo tanto, los espines clásicos, que son con los que trabajaremos, pueden pensarse como el autoestado de mayor componente en la dirección z de una partícula cuántica con espín S en el límite $S \rightarrow \infty$. Llamaremos, entonces, espín clásico (o de Heisenberg) a un vector en el espacio tridimensional de longitud fija.

El estudio clásico de sistemas magnéticos frustrados es de gran importancia ya que nos permite encontrar las diferentes fases posibles y la estructura del diagrama de fases de ciertos sistemas sin tener la necesidad de entrar terreno de la mecánica cuántica.

1.2 Sistemas Frustrados

Los sistemas magnéticamente frustrados son aquellos en los cuales los momentos magnéticos locales, o espines, interactúan entre sí a través de interacciones que no pueden satisfacerse simultáneamente, dando lugar a estados fundamentales altamente degenerados [10].

Para tener una idea clara del fenómeno será útil comenzar recordando el comportamiento de un antiferromagneto. Consideremos el modelo de Heisenberg clásico con interacciones $J_1 > 0$ a primeros vecinos en una red bidimensional cuadrada. El Hamiltoniano vendrá dado por la ecuación

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.22)$$

donde \mathbf{S}_i denota al espín ubicado en el sitio i de la red y $\langle i,j \rangle$ indica que i y j son vecinos.

Dado que la red es bipartita (es decir que puede ser separada entre dos subredes interpenetradas, de manera que cada sitio de cada subred tenga como primeros vecinos a sitios de la otra subred), el estado fundamental es aquél en el cuál en cada subred todos los espines tienen la misma dirección y dicha dirección es opuesta entre una subred y la otra tal como muestra la figura 1.1. A esta configuración se le conoce como estado de Néel. Dicho estado es único a menos de rotaciones globales de los espines, que son una simetría del modelo. Los sistemas frustrados tienen la posibilidad de sortear el orden presentado en el estado de Néel.

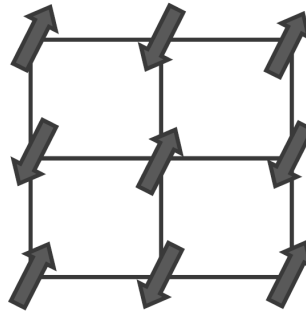


FIGURA 1.1: Estado de Néel en una red cuadrada. Cada espín se encuentra antialineado respecto de cada uno de sus primeros vecinos.

Dado que el término *frustración* es utilizado en diferentes contextos, vale la pena hacer algunas distinciones. En términos generales los sistemas frustrados clásicos (hablando de aquellos en los que no consideramos efectos de tipo cuántico) presentan Hamiltonianos con interacciones que compiten entre sí y cuya contribución a la energía del sistema no puede ser minimizada simultáneamente.

Existen dos tipos de frustración: una debido a la geometría de la red (llamada *frustración geométrica*) y la otra debido a la competencia entre interacciones existentes en el sistema. La *frustración geométrica* ocurre como resultado de la estructura de red bajo estudio; es decir, debido a la topología de la misma, las interacciones no pueden ser minimizadas en su totalidad, lo cual deriva en un estado fundamental altamente degenerado. Para ilustrar esto consideremos espines de Heisenberg en los vértices de un triángulo con interacciones antiferromagnéticas, tal como se esquematiza en la figura 1.2. Una vez que dos de los espines se alinean en sentidos opuestos, independientemente de la dirección en que se coloque al tercer espín, este no podrá ser antiparalelo a los otros dos simultáneamente. Resulta entonces que el estado fundamental de este pequeño sistema es aquél que se muestra también en la figura 1.2. Se ve que los espines no están perfectamente alineados entre sí, sin embargo dicha configuración es la que minimiza la energía.

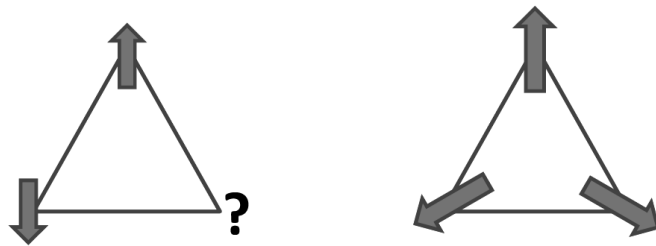


FIGURA 1.2: Esquema de un sistema simple triangular. **Izquierda:** Una de las interacciones antiferromagnéticas está frustrada; no todos los espines pueden antialinearse con sus vecinos. **Derecha:** El estado que minimiza la energía del sistema es aquél en el cual los espines se ubican de manera que el ángulo relativo entre cada uno de ellos es 120° .

Un caso típico de un sistema extendido que presenta este tipo de frustración (y que ha sido y es investigado activamente) es el de la red de Kagomé, que no es otra cosa que un sistema de triángulos unidos por los vértices. El estado fundamental de este sistema es altamente degenerado. En la figura 1.3 se muestra una posible configuración de los espines en el estado fundamental.

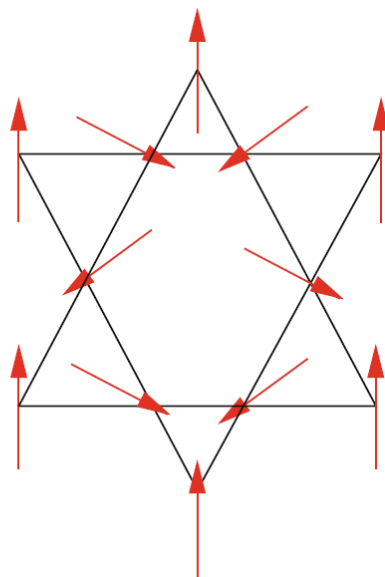


FIGURA 1.3: Uno de los posibles estados fundamentales de la red de Kagomé.

En el presente trabajo, sin embargo, nos ocuparemos de la frustración que surge de interacciones que compiten entre sí. De hecho la red panal de abejas (que se discutirá en la sección siguiente) no presenta frustración geométrica ya que es una red bipartita. En este caso, para comprender más claramente el concepto, consideremos nuevamente la red cuadrada pero agregando al modelo interacciones a segundos vecinos con constante $J_2 > 0$. Dicho sistema viene descrito por el siguiente Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.23)$$

donde $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ denota la interacción entre segundos vecinos. En este modelo, al existir una segunda interacción entre espines, ya no es posible satisfacer todos los enlaces entre espines, con lo cual el estado fundamental dependerá de la relación entre J_1 y J_2 .

1.3 Estructura cristalina

Un concepto fundamental en la descripción de sólidos con estructura cristalina es la *red de Bravais*, que se define como un arreglo infinito de puntos discretos donde si se analiza el entorno de un punto cualquiera, este debe ser equivalente al de cualquier otro. Una definición equivalente, y quizás más útil, establece a la *red de Bravais* como un conjunto infinito de puntos cuyas posiciones en el espacio tridimensional vienen dadas por

$$\mathbf{r} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.24)$$

donde n_1, n_2 y n_3 son enteros y $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ y \mathbf{a}_3 , son los *vectores primitivos* que generan la red.

La estructura del sistema bajo estudio en este trabajo es el de una red de panal de abejas (honeycomb lattice en inglés) como se muestra en la figura 1.4. Esta red tiene la particularidad de que es una red de *No-Bravais*, es decir, los puntos de la misma no son todos equivalentes. Por ejemplo, el entorno de los puntos P_1 y P_2 son diferentes: el punto P_1 tiene un vecino directamente sobre él (el punto P_2) mientras que el punto P_2 no tiene un sitio vecino sobre él [11]. Es posible pensar a la red panal de abejas como una red triangular con una base; es decir, para definirla en todo el espacio tendremos que dar dos números, uno que denote la posición de la red triangular y otro al espín dentro de la misma. Para esto necesitamos utilizar el concepto de *celda primitiva*, definida como la porción más simple de la estructura cristalina que al repetirse mediante traslación reproduce todo el cristal. Esta celda debe contener exactamente un punto de la red directa.

No existe una única forma de construir la celda primitiva de una *red de Bravais*. Una manera posible es utilizando los *vectores primitivos* definiendola como el conjunto de todos los puntos \mathbf{x} tal que

$$\mathbf{x} = x_1 \mathbf{a}_1 + x_2 \mathbf{a}_2 + x_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.25)$$

para todo $x_i \in [0, 1]$; es decir, la *celda primitiva* queda definida como el paralelepípedo formado por los vectores $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ y \mathbf{a}_3 .

Retomando la red panal de abejas (la cual es bidimensional) elegimos $\mathbf{a}_1 = a\hat{x}$ y $\mathbf{a}_2 = -a\hat{x}/2 + a\hat{y}(\sqrt{3}/2)$, donde a es el parámetro de red (constante que hace referencia a las dimensiones de la *celda primitiva*). Por simplicidad elegiremos a este parámetro igual a uno. De esta manera la posición de todo punto de la red triangular está dada por

$$\mathbf{r} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (1.26)$$

donde n_1 y n_2 son enteros. Estos vectores primitivos nos definirán la *celda primitiva*. Con la celda definida, podemos describir a la red panel de abejas dando la *red de Bravais* junto con la descripción de los espines dentro de la celda. En otras palabras, la posición de cada punto de la red panel de abejas queda definido por dos índices: (r, n) donde r denota la posición de la *celda primitiva* y $n = 1, 2$ es el índice del espín dentro de la misma.

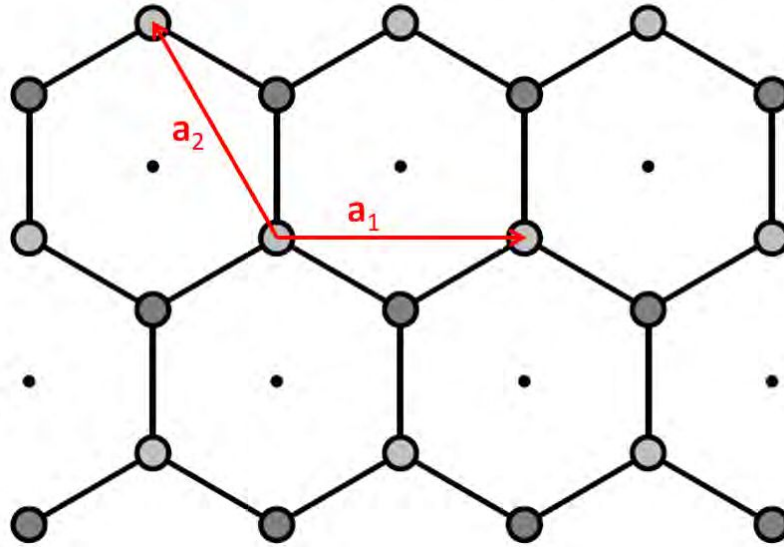


FIGURA 1.4: Red panel de abejas. Los sitios que denotan los dos tipos de subred están marcados con diferentes grises. \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 son los vectores primitivos de la red.

Una forma de construir la *celda primitiva*, y que nos será de utilidad más adelante, es utilizando la llamada *construcción de Wigner-Seitz*. La idea detrás de este procedimiento es elegir un punto de la red y dibujar líneas hacia todos los vecinos más cercanos (no solamente a los primeros vecinos); luego se dibujan bisectores perpendiculares a todas las líneas. La región encerrada por todas las líneas bisectoras constituyen la llamada *celda de Wigner-Seitz*. En la figura 1.5 se muestra la construcción de una de estas celdas para una red bidimensional.

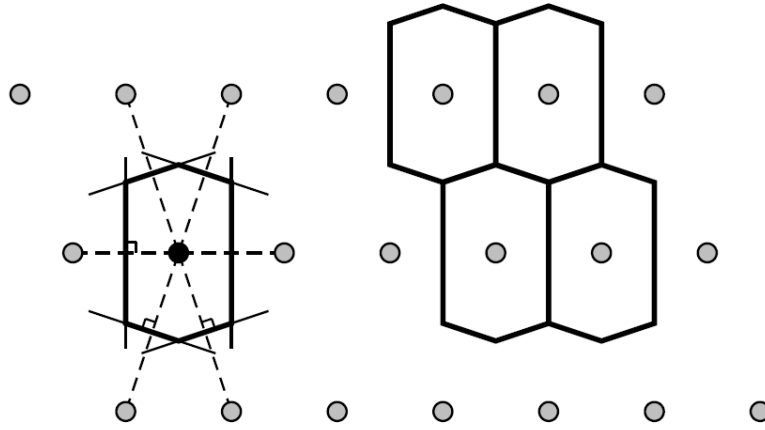


FIGURA 1.5: Construcción de *Wigner-Seitz* para una red bidimensional. A la izquierda se muestran los bisectores perpendiculares a las líneas que unen los puntos de la red. La región encerrada por los bisectores define la *celda de Wigner-Seitz*.

1.4 Espacio Recíproco y zona de Brillouin

Dada una red en el espacio real (también llamada red directa) en 3D definida por puntos en las posiciones $\mathbf{r} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, un punto Q es un punto de la red recíproca sí y solo sí se cumple

$$e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} = 1 \quad (1.27)$$

para todo \mathbf{r} perteneciente a la red directa. Para generar la red recíproca necesitamos determinar los vectores primitivos de la misma (que llamaremos \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 y \mathbf{b}_3). A estos se los definen de manera que cumplan con la siguiente propiedad:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (1.28)$$

donde δ_{ij} es el delta de Kronecker.

Una forma de contruir los vectores \mathbf{b}_i con la propiedad 1.28 es realizando productos vectoriales entre los vectores primitivos de la red directa; es decir, si escribimos

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (1.29)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (1.30)$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (1.31)$$

dichos vectores tendrán la propiedad deseada. Así, todo punto de la red recíproca podrá escribirse como una combinación lineal de estos 3 vectores

$$\mathbf{Q} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3 \quad (1.32)$$

con m_1, m_2, m_3 enteros (de no serlo no se cumpliría la relación 1.28). Para nuestro sistema basta con elegir $\mathbf{a}_3 = \hat{z}$ obteniendo

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi\hat{x} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\hat{y} \quad (1.33a)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}}\hat{y} \quad (1.33b)$$

Debido a que nuestra red es bidimensional no haremos uso de \mathbf{b}_3 , por lo tanto no nos preocuparemos por su valor.

A partir de todo lo visto en este apartado podemos definir un concepto importante en la física del estado sólido: la **primera zona de Brillouin**. Dado un punto de la red recíproca, el conjunto de todos los puntos del espacio recíproco que se encuentran más cercanos a este punto que a cualquier otro de la red se define como la **primera zona de Brillouin**. En otras palabras, la **primera zona de Brillouin** no es otra cosa que una *celda de Wigner-Seitz* del espacio recíproco. Como el nombre sugiere, existen **zonas de Brillouin** de mayor orden, que se definen de forma similar [11]. Con esta definición y con los vectores primitivos del espacio recíproco nos es posible describir la red en el espacio recíproco y, haciendo uso de la *construcción de Wigner-Seitz* (ver sección 1.3), construir la **primera zona de Brillouin** para nuestra red. En la figura 1.6 se ilustra la **primera zona de Brillouin** de nuestro modelo junto los los vectores primitivos del espacio recíproco y los llamados *puntos de alta simetría* de la **zona de Brillouin**. Éstos serán de utilidad más adelante en la descripción del estado fundamental del sistema. Las coordenadas de dichos puntos son

$$\Gamma = (0,0) \quad \begin{array}{lll} K_1 = \left(\frac{4\pi}{3}, 0\right) & K_2 = \left(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right) & K_3 = \left(\frac{-2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right) \\ M_x = \left(\pi, \frac{\pi}{\sqrt{3}}\right) & M_y = \left(-\pi, \frac{\pi}{\sqrt{3}}\right) & M_z = \left(0, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right) \end{array} \quad (1.34)$$

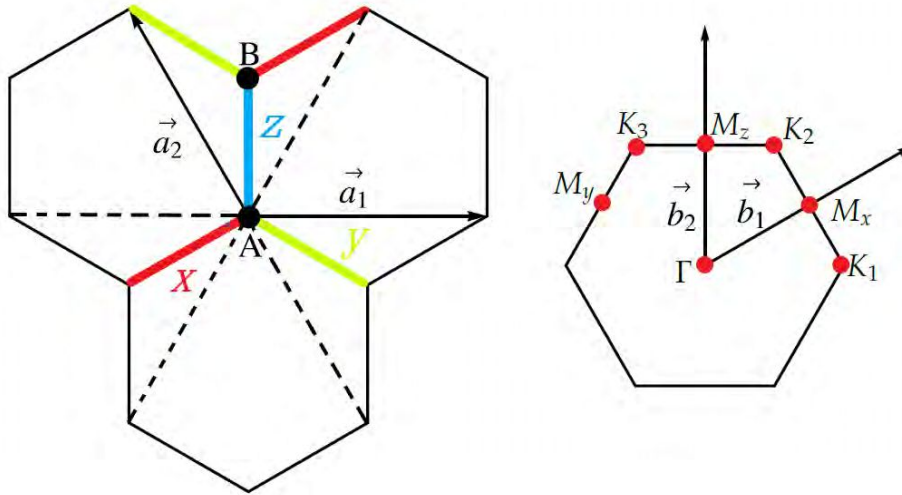


FIGURA 1.6: **Izquierda:** Red panal de abejas y los vectores primitivos de la red. A y B denotan los diferentes sitios de la red. Se muestran, además, las interacciones de Kitaev a primeros vecinos según la dirección (en color) y en líneas punteadas las interacciones de Heisenberg a segundos vecinos para el espín del sitio A . **Derecha:** Primera zona de Brillouin de la red panal de abejas junto con los vectores primitivos de la red recíproca y algunos puntos de alta simetría.

1.4.1 Factor de estructura de espín

Para poder definir al *factor de estructura de espín* de una dada configuración de espines lo que se debe hacer en primera instancia es calcular la transformada de Fourier de dicha configuración. Sean $S_A(\mathbf{r})$ y $S_B(\mathbf{r})$ las funciones que representan la configuración de los espines en las dos subredes de la red panal del abejas. La transformada de Fourier de la configuración viene dada por la ecuación

$$S_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}, \alpha} S_{\mathbf{r}, \alpha} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (1.35)$$

donde \mathbf{k} es un vector en la zona de Brillouin de la red panal de abejas y la suma está hecha sobre todos los sitios en la red; N es el número de espines en la red. El *factor de estructura de espín*, $\mathcal{S}(\mathbf{k})$, de una dada configuración se puede escribir entonces como

$$\mathcal{S}(\mathbf{k}) = ||S_{\mathbf{k}}||^2 \quad (1.36)$$

Esta cantidad de información sobre el posible ordenamiento magnético y puede ser contrastado con medidas experimentales de dispersión de neutrones.

1.5 Modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$

Como se mencionó previamente el modelo $J_1 - J_2$ en la red de panal de abejas es un sistema frustrado. Para comenzar nuestro estudio en esta sección recordaremos sus

principales características. Matemáticamente el modelo viene dado por la ecuación 1.23. Para atacar el problema, se propuso una solución coplanar de tipo espiral [12],

$$S_A = S[\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})\hat{z} + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})\hat{x}] \quad (1.37)$$

$$S_B = -S[\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \phi)\hat{z} + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \phi)\hat{x}] \quad (1.38)$$

Donde \mathbf{k} es el vector de onda, \mathbf{r} es el sitio de la red triangular en el que están los espines y $\phi + \pi$ es el ángulo entre espines ubicados en el mismo sitio pero en diferente subred.

El sistema presenta un rico diagrama de fases tal como esquematiza la figura 1.7. Para la región $J_2/J_1 < 1/6$ el punto de mínima energía corresponde a $\mathbf{k} = (0,0)$ denotando una fase de Néel (este punto no aparece ilustrado en la figura). Para $1/6 < J_2/J_1 < 0.5$ (líneas punteadas verdes) las soluciones presentan una gran degeneración formando un contorno cerrado alrededor de $\mathbf{k} = (0,0)$. Este contorno está siempre contenido dentro de la zona de Brillouin (línea sólida roja). Para $J_2/J_1 > 0.5$ se encontró que las soluciones degeneradas conforman contornos alrededor de los puntos $\mathbf{k} = \pm(2\pi/3, 2\pi/\sqrt{3})$, que no son otra cosa que los *puntos de alta simetría* K_2, K_3, K_5 y K_6 . En el caso $J_2/J_1 = 0.5$ se observan soluciones degeneradas por líneas que cortan al borde de Brillouin en los *puntos de alta simetría* M (líneas punteadas azules). Se encontró utilizando la teoría de Ondas de Espín de Holstein-Primakoff (HP) que las correcciones cuánticas seleccionan estados fundamentales específicos (puntos púrpura) entre el conjunto de estados degenerados [12]. Veremos en el siguiente capítulo que la anisotropía de la interacción de Kitaev también selecciona estados particulares, de los infinitos posibles, que guardan relación con los encontrados en [12].

Para poder ser más precisos a la hora de hablar de las fases es posible hacer una distinción de acuerdo con los valores de \mathbf{k} de los mínimos que aparecen en las mismas. Podemos clasificar a las fases magnéticas en dos tipos:

- Fase **Commensurada**: los \mathbf{k} están ubicados en puntos de alta simetría.
- Fase **Incommensurada**: los \mathbf{k} no están ubicados en puntos de alta simetría.

En este modelo, entonces, para $J_2/J_1 > 1/6$ se encontró una familia de estados espirales degenerados incommensurados.

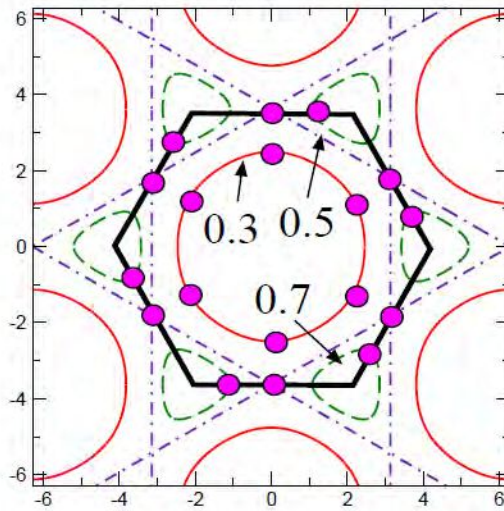


FIGURA 1.7: Esquema del espacio recíproco con ejemplos particulares de las regiones de mínimos para el modelo J_1/J_2 en la red panal de abejas. Con líneas sólidas roja se muestra el caso $1/6 < J_2/J_1 < 0.5$; con líneas punteadas azules el caso $J_2/J_1 = 0.5$ y con líneas punteadas rojas un ejemplo de $J_2/J_1 > 0.5$. Los puntos color púrpura son los k favorecidos por fluctuaciones cuánticas.

1.6 Modelo de Kitaev-Heisenberg

Los óxidos de metales de transición con capas $4d$ y $5d$ parcialmente ocupadas exhiben comportamientos complejos dictados por las interacciones electrónicas, el campo cristalino al que están sometidos y el acoplamiento espín-órbita. Jackeli y Khaliullin [3] estudiaron las interacciones magnéticas de materiales con iones que contuviesen orbitales d^5 en un entorno octaédrico; en la figura 1.8 mostramos un esquema de dichos orbitales. En dichos orbitales, inicialmente degenerados, el campo cristalino rompe la degeneración de los orbitales d generando dos orbitales vacíos y tres orbitales degenerados de más baja energía. Como se observa en la figura uno de los orbitales de menor energía queda parcialmente lleno, es entonces que el acoplamiento espín-órbita puede generar una brecha energética entre dichos estados, rompiendo nuevamente la degeneración.

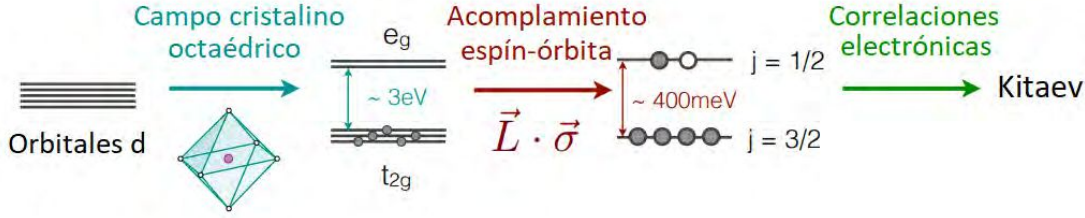


FIGURA 1.8: Desdoblamiento de los orbitales d debido al entorno (campo cristalino) y al acoplamiento espín-órbita.

En el límite del modelo efectivo lo que obtenemos entonces son interacciones magnéticas altamente anisotrópicas. El modelo general viene dado por [13]

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) + S_i \cdot \Gamma_{ij} \cdot S_j \quad (1.39)$$

donde J_{ij} es la interacción isotrópica de Heisenberg, Γ_{ij} es el pseudo-tensor dipolar simétrico y D_{ij} es el vector de Dzyaloshinskii-Moriya (DM). En el caso ideal estudiado por Jackeli y Khaliullin se obtiene el modelo de Kitaev que requiere $J_{ij} D_{ij} \rightarrow 0$, mientras que las únicas componentes del pseudo-tensor no nulas se encuentran en la diagonal. No obstante, hasta el día de hoy no se ha encontrado evidencia de la existencia de materiales cuyas propiedades sean explicadas enteramente por el modelo de Kitaev [5], donde la fase fundamental es un líquido de espín. Es entonces que surgen posibles materiales como el Na_2IrO_3 y el $\alpha - RuCl_3$, cuyas fases indican tanto la presencia de interacciones anisotrópicas como interacciones isotrópicas en una red panal de abejas y que son potenciales candidatos a ser explicados utilizando modelos que combinen interacciones de Kitaev así como de intercambio. En un trabajo posterior al citado anteriormente, Jackeli y Khaliullin estudiaron el diagrama de fases del modelo de Kitaev-Heisenberg [14]. Para esto escribieron a la interacción entre espines vecinos de la siguiente forma

$$\mathcal{H}_{ij}^\gamma = A(2 \sin(\phi) S_i^\gamma S_j^\gamma + \cos(\phi) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \quad (1.40)$$

donde $A = \sqrt{K^2 + J^2}$ con J y K las interacciones de Heisenberg y Kitaev respectivamente y ϕ sale de la parametrización $J = A \cos(\phi)$ y $K = A \sin(\phi)$. γ denota la dirección de la interacción de Kitaev (x , y o z). Variando al parámetro ϕ entre 0 y 2π y teniendo en cuenta el caso cuántico encontraron el diagrama ilustrado en la figura 1.9. Se pueden observar 6 fases diferentes al barrer el parámetro ϕ entre 0 y 2π . Además de la fase de Néel, la fase Stripy-AF y el líquido de espín ubicados en $\phi = 0$, $-\pi/4$ y $-\pi/2$ que habían sido estudiados con anterioridad [15], se observan otras tres fases. Una es un líquido de espín en $\phi = \pi/2$, la otra una fase Ferromagnética y por último una fase Zig-Zag.

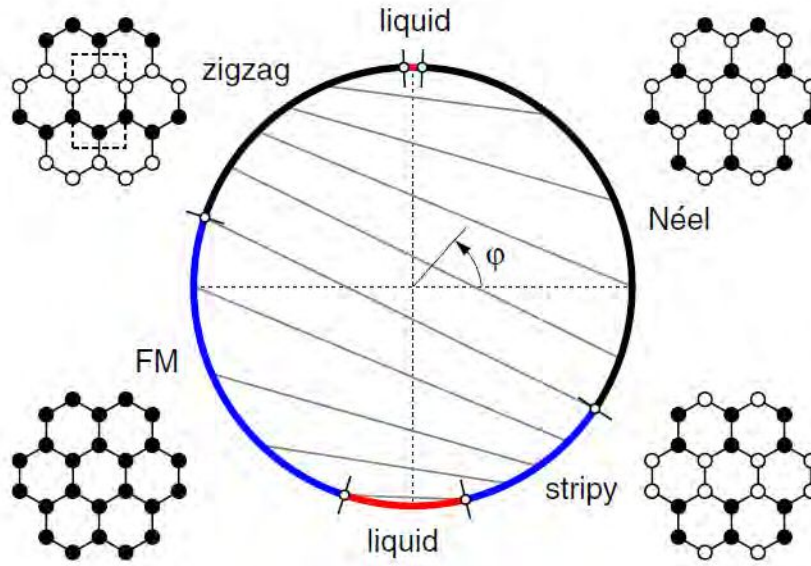


FIGURA 1.9: Diagrama de fases del modelo Kitaev-Heisenberg cuántico obtenido por Jackeli y Khaliullin. Se observan dos fases de espín líquido y cuatro fases ordenadas. Al lado de cada fase ordenada se muestra la disposición de los espines en cada una de las fases con los círculos blancos y negros indicando espines “up” o “down”.

Se sabe, sin embargo, que el modelo de Kitaev-Heisenberg no explica por completo el comportamiento experimental de los materiales; surge entonces la necesidad de agregar otras interacciones. En este trabajo estudiaremos el modelo de Kitaev-Heisenberg extendido, es decir, con interacciones de Heisenberg tanto a primeros como segundos vecinos e interacciones de Kitaev a primeros vecinos. Analizaremos que es lo que sucede cuando en un sistema que presenta soluciones degeneradas por líneas (ver sección 1.5) se le agrega una interacción altamente anisotrópica.

El modelo de Kitaev-Heisenberg extendido puede escribirse como

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + K \sum_{\gamma} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{\gamma} S_j^{\gamma} \quad (1.41)$$

donde $\gamma = x, y, z$ define el tipo de acomplamiento de Ising entre dos espines vecinos. Es sencillo ver que los elementos del Hamiltoniano pertenecientes a las interacciones de Heisenberg son invariantes ante rotaciones de todos los espines. Para esto supongamos que aplicamos una rotación R a cada espín S_i ; entonces tenemos que $S_i \cdot S_j \rightarrow (RS_i) \cdot (RS_j)$ y utilizando las conocidas propiedades de matrices obtenemos

$$\begin{aligned} (RS_i) \cdot (RS_j) &= (R^T RS_i) \cdot S_j \\ &= (IS_i) \cdot S_j \\ &= S_i \cdot S_j \end{aligned} \quad (1.42)$$

donde se utilizó el hecho de que $R^T R = I$ dado que R es una matriz ortogonal. Por lo tanto la energía total del sistema no cambia si se aplica la misma rotación a todos los espines. La interacción de Kitaev, en cambio, es una interacción altamente anisotrópica con lo cual rompe con la simetría del Hamiltoniano introduciendo un nuevo tipo de frustración (ya que no todas las interacciones de Kitaev pueden ser minimizadas simultáneamente). Esto da como resultado el surgimiento de novedosas fases magnéticas.

Ya que estamos trabajando en particular en la red de panal de abejas, es posible expandir el Hamiltoniano de la ecuación 1.41 utilizando lo establecido en la sección anterior, obteniendo

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & J_1 \sum_r \mathbf{S}_{r,1} \cdot \mathbf{S}_{r,2} + \mathbf{S}_{r+a_2,1} \cdot \mathbf{S}_{r,2} + \mathbf{S}_{r+a_1+a_2,1} \cdot \mathbf{S}_{r,2} \\
& + J_2 \sum_{r,n} \mathbf{S}_{r,n} \cdot \mathbf{S}_{r+a_1,n} + \mathbf{S}_{r,n} \cdot \mathbf{S}_{r+a_2,n} + \mathbf{S}_{r,n} \cdot \mathbf{S}_{r+a_1+a_2,n} \\
& + K \sum_r [S_{r,1}^z S_{r,2}^z + S_{r+a_2,1}^y S_{r,2}^y + S_{r+a_1+a_2,1}^x S_{r,2}^x]
\end{aligned} \tag{1.43}$$

1.7 Métodos numéricos

Los sistemas de muchos cuerpos con interacciones son en general muy difíciles de resolver. A pesar de que el modelo de Kitaev en una red panal de abejas es un problema que puede ser resuelto de manera exacta [2], esto no es posible al pasar al modelo de Kitaev-Heisenberg. Afortunadamente, existe un gran número de métodos aproximados y numéricos que sirven para poder estudiar el estado fundamental y diferentes propiedades de aquellos sistemas que no pueden ser resueltos de manera exacta. Entre éstos se destacan el método de *Monte Carlo*, la *Teoría de Campo Medio*, *Ondas de espín* y *Diagonalización Exacta* por mencionar algunos. En este trabajo hemos utilizado dos métodos que encaran al sistema desde dos enfoques diferentes: el *Método de Luttinger-Tisza* y *Método Autoconsistente*. El *Método de Luttinger-Tisza* es un método analítico que se utiliza para determinar cuáles son los vectores de onda que caracterizan a un determinado estado fundamental. La idea central detrás del *Método Autoconsistente* es reemplazar a las interacciones existentes sobre cada una de las partículas o cuerpos por una interacción promedio o efectiva mediante la elección de un campo auxiliar, el campo efectivo, que permita suplir la falta del resto del sistema. La ventaja de este enfoque es que, a un bajo costo, podemos tener cierto conocimiento acerca del sistema. En los capítulos siguientes se detallará los fundamentos de estos métodos y la manera en que fueron aplicados a nuestro sistema.

Capítulo 2

Método de Luttinger-Tisza

2.1 Método General

El Método de Luttinger-Tisza (L-T) es una técnica analítica que permite determinar al vector de ordenamiento de un Hamiltoniano a $T = 0$. Nuestro objetivo es encontrar dicho estado para nuestro modelo; es decir, hallar el conjunto de N espines S_i que minimizarán la energía total sujetos a la condición de que todos los espines tienen longitud fija S . Esta condición se escribe

$$S_i^2 = S^2 \quad (2.1)$$

Para ilustrar como funciona el método de L-T tomemos como ejemplo un sistema de espines con interacciones de Heisenberg. Consideremos espines $S_{i,\alpha}$ y $S_{j,\beta}$, ubicados en $r_{i,\alpha}$ y $r_{j,\beta}$ respectivamente con α y β indicando la subred a la que pertenece el espín (o lo que es lo mismo identificando al espín dentro de la celda unidad) y consideremos en forma general M de dichas subredes. Tomemos a la interacción entre dichos espines tal que la misma dependa de su posición relativa, es decir

$$J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}) S_{i,\alpha} \cdot S_{j,\beta} \quad (2.2)$$

donde $\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta} = \mathbf{r}_{i,\alpha} - \mathbf{r}_{j,\beta}$ denota la separación entre el i -ésimo espín en la subred α y el j -ésimo espín en la subred β ; asumiremos, además, que $J(-\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}) = J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta})$. Hagamos ahora un desarrollo de Fourier para los espines en el espacio recíproco de manera de escribirlos como

$$S_{l,\gamma} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k},\gamma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{l,\gamma}} \quad (2.3)$$

donde $n = N/M$ denota el número de espines en la subred particular γ . Imponiendo que $S_{l,\gamma}$ sea real es fácil ver se cumple la condición $S_{-k,\gamma} = S_{k,\gamma}^*$ donde $S_{k,\gamma}^*$ es el complejo conjugado de $S_{k,\gamma}$. De esta forma, el Hamiltoniano del sistema dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_i \sum_j J(\mathbf{r}_{ij,\alpha\beta}) S_{i,\alpha} \cdot S_{j,\beta} \quad (2.4)$$

puede expresarse de la siguiente forma

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_i \sum_j J(\mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}) \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}, \alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{i, \alpha}} \right) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{\mathbf{k}'} \mathbf{S}_{\mathbf{k}', \beta} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_{j, \beta}} \right) \quad (2.5)$$

Las sumas sobre el Hamiltoniano están sujetas a la condición que $i \neq j$ si $\alpha = \beta$, de manera que los espines no interactuen con si mismos. Reescribiendo $\mathbf{r}_{j, \beta} = \mathbf{r}_{i, \alpha} - \mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}$ y reacomodando las sumas obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{n} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_i \sum_j \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} J(\mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}, \alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{i, \alpha}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}', \beta} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_{i, \alpha} - \mathbf{r}_{ij, \alpha\beta})} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_i \sum_j \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} J(\mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}, \alpha} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{i, \alpha}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}', \beta} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Dado que hicimos el cambio $\mathbf{r}_{j, \beta} = \mathbf{r}_{i, \alpha} - \mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}$, la suma sobre j equivale ahora a la suma sobre las separaciones entre todos los espines; esto significa que podemos efectuar la suma sobre i dejando todas las otras variables constantes. Esta sumatoria solamente afecta al término que contiene en el exponencial a $(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$ y su resultado no es otra cosa que

$$\sum_i e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{i, \alpha}} = n \delta_{-\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (2.7)$$

donde $\delta_{-\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ es el delta de Kronecker. De esta manera, usando este resultado en 2.6 y haciendo la suma sobre \mathbf{k}' obtenemos

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_j \sum_{\mathbf{k}} J(\mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}, \alpha} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k}, \beta} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}} \quad (2.8)$$

Si ahora definimos a la cantidad $J_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ (la transformada de Fourier de $J(\mathbf{r}_{ij, \alpha\beta})$) como

$$J_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_j J(\mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij, \alpha\beta}} \quad (2.9)$$

entonces finalmente el Hamiltoniano nos queda expresado en el espacio recíproco de la siguiente manera

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}, \alpha} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k}, \beta} \quad (2.10)$$

El sumando de la sumatoria sobre \mathbf{k} en la expresión anterior no es otra cosa que la forma cuadrática sobre una matriz cuyos elementos son $J_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$. Llamaremos a esta matriz $\Lambda(\mathbf{k})$ y a partir de esta podremos escribir al Hamiltoniano como una forma cuadrática

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \Lambda(\mathbf{k}) \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \quad (2.11)$$

siendo $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}$ el vector cuyos elementos son

$$\mathbf{S}_k = (S_{A,x}, S_{B,x}, S_{A,y}, S_{B,y}, S_{A,z}, S_{B,z}) \quad (2.12)$$

con $S_{A,\gamma}(S_{B,\gamma})$ la componente $\gamma = x, y, z$ del espín en la subred $A(B)$.

Recordemos que lo que estamos buscando es el mínimo de la ecuación 2.4 o, lo que es lo mismo, de la ecuación 2.10 sujeto a la condición $S_{l,\alpha}^2 = S^2 = 1$ para todo l . Este problema no se puede resolver de manera exacta. Podemos, entonces, como primera aproximación relajarla imponiendo que se cumpla

$$\sum_{\alpha} \sum_l S_{l,\alpha}^2 = NS^2 \quad (2.13)$$

Si ahora la escribimos en el espacio recíproco obtenemos

$$\sum_{k,\alpha} \mathbf{S}_{k,\alpha} \cdot \mathbf{S}_{-k,\alpha} = NS^2 \quad (2.14)$$

Tenemos entonces un problema de optimización con una restricción dada por la ecuación 2.1, para resolverlo utilizamos el método de multiplicadores de Lagrange definiendo

$$F = \mathcal{H} - \lambda \left(\sum_{\alpha} \sum_i S_{i,\alpha}^2 - NS^2 \right) \quad (2.15)$$

donde λ es el multiplicador de Lagrange. Escribiendo esta última ecuación en el espacio de momentos el problema de optimización nos queda

$$F = \mathcal{H} - \lambda \left(\sum_{k,\alpha} \mathbf{S}_{k,\alpha} \cdot \mathbf{S}_{-k,\alpha} - NS^2 \right) \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial F}{\partial S_{-k,\alpha}} = 0 \quad (2.17)$$

Reemplazando ahora a \mathcal{H} por el resultado encontrado en la ecuación 2.10, la ecuación 2.16 tendrá la forma

$$F = \sum_k \sum_{\alpha} \sum_{\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \mathbf{S}_{k,\alpha} \cdot \mathbf{S}_{-k,\beta} - \lambda \left(\sum_{k,\alpha} \mathbf{S}_{k,\alpha} \cdot \mathbf{S}_{-k,\alpha} - NS^2 \right) \quad (2.18)$$

Al tomar la derivada 2.17 obtenemos entonces

$$\frac{\partial F}{\partial S_{-k,\alpha}} = \sum_{\alpha} (J_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) - \lambda) \mathbf{S}_{k,\alpha} = 0 \quad (2.19)$$

$$\sum_{\alpha} J_{\beta\alpha}(-\mathbf{k}) \mathbf{S}_{k,\alpha} = \lambda \mathbf{S}_{k,\alpha} \quad (2.20)$$

donde se utilizó el hecho de que $J_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = J_{\beta\alpha}(-\mathbf{k})$. Esta ecuación representa nada menos que una ecuación de autovalores con $J_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ los elementos de una matriz, que llamaremos $\Lambda(\mathbf{k})$. A partir de esta ecuación es fácil ver que, entonces, para hallar el mínimo de energía, es necesario encontrar el menor autovalor de la ecuación 2.20. Esto se logra resolviendo el polinomio característico que sale de calcular

$$\det(\Lambda(-\mathbf{k})\mathbf{S}_k - \lambda I\mathbf{S}_k) = 0 \quad (2.21)$$

con I denotando la matriz identidad. Los vectores de onda (puede existir más de uno) asociados a la mínima autoenergía, λ_{min} , cumplirán

$$\Lambda(-\mathbf{k})\mathbf{S}_k = \lambda_{min}\mathbf{S}_k \quad (2.22)$$

y serán los únicos vectores de onda que contribuirán a la energía del estado fundamental; por lo tanto, la energía dada por el Hamiltoniano 2.11 vendrá dada por

$$E = \lambda_{min} \sum_k \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{-k} \quad (2.23)$$

y utilizando la condición 2.14 obtenemos finalmente que

$$\epsilon = \lambda_{min} S^2 \quad (2.24)$$

con $\epsilon = E/N$ la energía por espín del estado fundamental.

Este método permite determinar el estado fundamental en redes de *Bravais* en donde se satisface la condición $S^2 = S$, llamada condición fuerte, trivialmente. En una red de *No-Bravais*, en cambio, puede ocurrir que la solución encontrada no satisfaga la condición anterior. No obstante, incluso en estos casos, el método nos provee un marco para construir estados fundamentales aproximados. El punto clave del procedimiento está en minimizar la energía de un sistema de N espines bajo la condición

$$\sum_i ||S_i||^2 = NS^2 \quad (2.25)$$

en oposición a la condición $S^2 = S$ establecida por ser espines de Heisenberg. A la condición 2.25 se la llama condición débil. Si es posible encontrar una solución que además cumpla con la condición fuerte entonces habremos encontrado una solución exacta del problema.

2.1.1 Método de Luttinger-Tisza para el modelo de Kitaev-Heisenberg

Si escribimos ahora el Hamiltoniano dado por la ecuación 1.43 en el espacio recíproco, utilizando su expansión de Fourier, obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_1 \sum_k (1 + e^{ik \cdot a_2} + e^{ik \cdot (a_1 + a_2)}) \mathbf{S}_{k,1} \cdot \mathbf{S}_{-k,2} \\ & + J_2 \sum_{k,n} [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)] \mathbf{S}_{k,n} \cdot \mathbf{S}_{-k,n} \\ & + K \sum_k [S_{k,1}^z S_{-k,2}^z + S_{k,1}^y S_{-k,2}^y e^{ik \cdot a_2} + S_{k,1}^x S_{-k,2}^x e^{ik \cdot (a_1 + a_2)}] \end{aligned} \quad (2.26)$$

donde $S_{k,n}^{(\gamma)}$ con $\gamma = x, y, z$ denota cada una de las componentes del espín. Utilizando los conceptos de la sección anterior podemos reescribir al Hamiltoniano de forma compacta similar a la ecuación 2.11 de la siguiente forma

$$\mathcal{H} = \sum_{k,n,m} \sum_{\gamma} S_{k,n}^{\gamma} \Lambda_{m,n}^{(\gamma)}(\mathbf{k}) S_{-k,m}^{\gamma} \quad (2.27)$$

donde en este caso utilizamos a los índices $m(n) = 1, 2$ para denotar a la subred y siendo las matrices $\Lambda^{(\gamma)}$ (todas ellas hermíticas) matrices de 2×2 definidas como

$$\Lambda^{(x)} = \begin{pmatrix} J_2 A(\mathbf{k}) & \frac{J_1}{2} B(\mathbf{k}) + \frac{K}{2} e^{ik \cdot (a_1 + a_2)} \\ \frac{J_1}{2} B(-\mathbf{k}) + \frac{K}{2} e^{-ik \cdot (a_1 + a_2)} & J_2 A(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

$$\Lambda^{(y)} = \begin{pmatrix} J_2 A(\mathbf{k}) & \frac{J_1}{2} B(\mathbf{k}) + \frac{K}{2} e^{ik \cdot a_2} \\ \frac{J_1}{2} B(-\mathbf{k}) + \frac{K}{2} e^{-ik \cdot a_2} & J_2 A(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

$$\Lambda^{(z)} = \begin{pmatrix} J_2 A(\mathbf{k}) & \frac{J_1}{2} B(\mathbf{k}) + \frac{K}{2} \\ \frac{J_1}{2} B(-\mathbf{k}) + \frac{K}{2} & J_2 A(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

con $A(\mathbf{k})$ y $B(\mathbf{k})$ funciones definidas por comodidad como

$$\begin{aligned} A(\mathbf{k}) &= \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)) \\ B(\mathbf{k}) &= 1 + e^{ik \cdot a_2} + e^{ik \cdot (a_1 + a_2)} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Si ahora aplicamos el método de L-T a nuestro modelo, llegamos a una ecuación análoga a la ecuación 2.20

$$\sum_{m=1,2} \Lambda_{m,n}^{(\gamma)}(-\mathbf{k}) S_{k,n}^{(\gamma)} = \lambda S_{k,n}^{(\gamma)} \quad (2.32)$$

es decir, obtenemos la ecuación de autovalores que debemos resolver para hallar los vectores de onda vinculados a los mínimos de energía.

Como se mencionó al estudiar el caso general, a la ecuación 2.32 podemos identificarla con un problema típico de autovalores; es decir que para poder resolverla deberíamos encontrar las soluciones del polinomio característico de las matrices $\Lambda^{(\gamma)}$. Por cada una de las matrices obtendremos dos autovalores que sumarán un total de seis. Para estudiar nuestro modelo se generó un grillado en el espacio recíproco y para cada vector \mathbf{k} de dicho espacio se resolvió la ecuación característica. En la figura 2.1 se ilustran las autoenergías encontradas para todos los puntos del mencionado grillado del espacio recíproco. Se puede ver que las energías forman diferentes bandas en el espacio recíproco, siendo aquellas zonas donde se encuentran los mínimos las que queremos estudiar. Sin embargo, este tipo de diagramas no resulta muy claro a la hora de querer analizar los mínimos. Ya que se busca la energía del estado fundamental del sistema lo que se hizo fue tomar solamente la menor autoenergía solución de la ecuación 2.32 para cada valor de \mathbf{k} y luego, de este conjunto de autoenergías, se filtraron los mínimos absolutos. A continuación se procedió a analizar con que vectores de onda se correspondían.

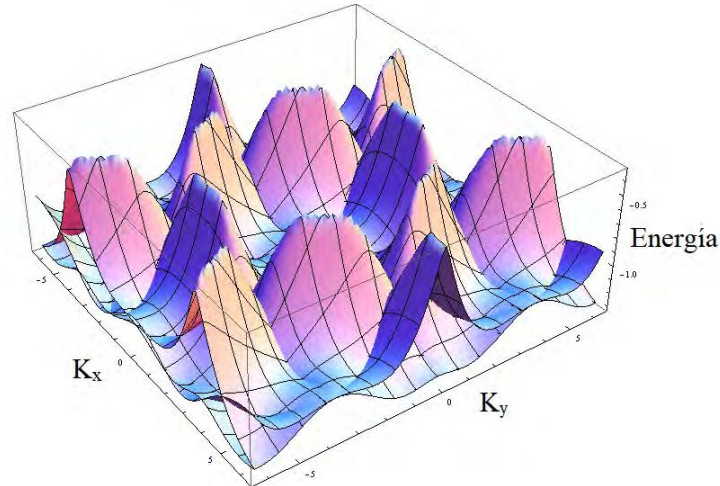


FIGURA 2.1: Bandas de más baja energía para el caso $J_2 = 0.3$ y $K = 0.5$.

El procedimiento discutido en el párrafo anterior fue realizado para valores de $J_1 = 1$ fijo, $0 \leq J_2 \leq 1$ y $-1 \leq K \leq 1$, tomando a J_2 y K en pasos de 0.1 tal como se discute en la próxima sección.

2.2 Solución numérica y Diagrama de Fases

En la figura 2.2 mostramos el principal resultado de este trabajo, el diagrama de fases, al cual llegamos utilizando el método de Luttinger-Tisza. Se pueden observar un total de siete fases. Además de la fase de Néel, encontramos cinco fases incommensuradas y una commensurada que describiremos en las siguientes subsecciones.

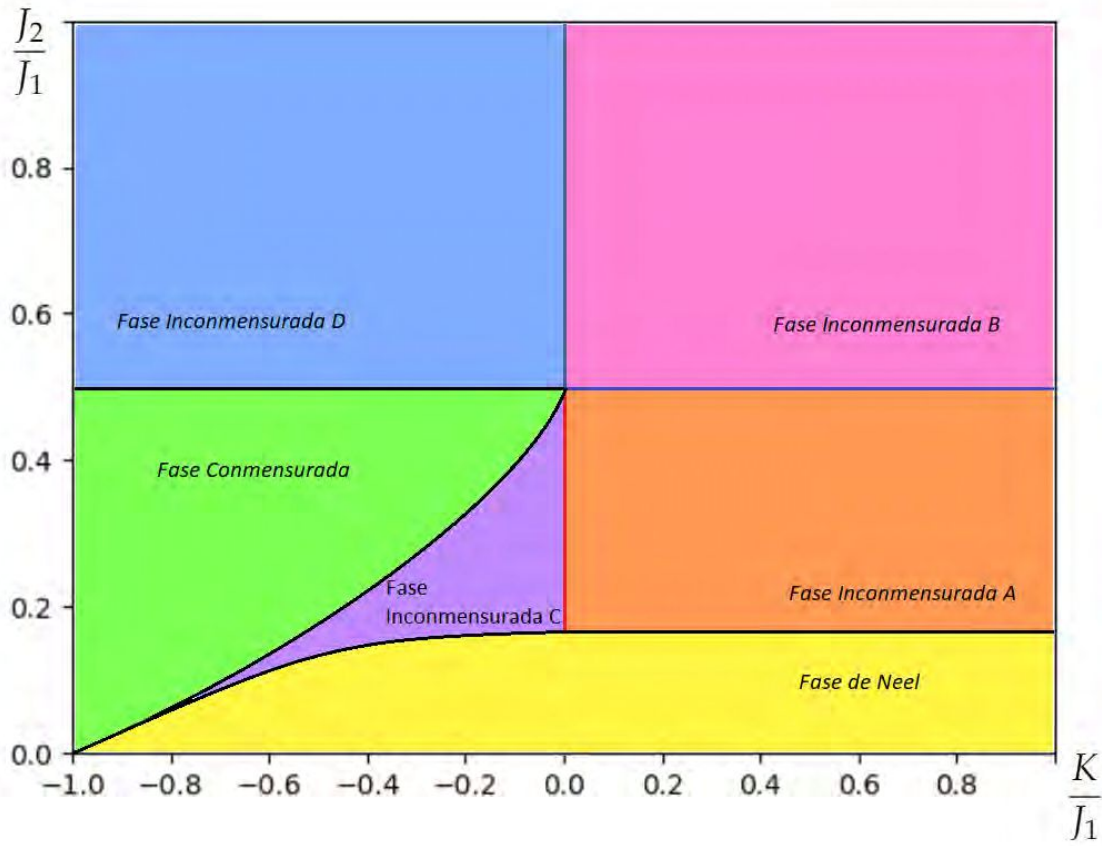


FIGURA 2.2: Diagrama de Fases J_2/J_1 vs K/J_1 obtenido con la técnica L-T para el para el modelo de Kitaev-Heisenberg extendido.

2.2.1 Kitaev Antiferromagnético: $K > 0$

Para la región $J_2/J_1 < 1/6$ encontramos que el mínimo de energía se encuentra en $k = (0,0)$ (figura 2.3a) que corresponde a un fase de Néel tal como muestra la figura 2.2. Esta fase es análoga a la encontrada en [12] con interacciones $J_1 - J_2$ con $K = 0$.

Es interesante ver que al "prender" la interacción de Kitaev $K > 0$ para $1/6 < J_2/J_1 < 1/2$ y para $1/2 < J_2/J_1$ lo que se observa es que se rompe la degeneración infinita existente, deviniendo en una degeneración discreta que es independiente del valor que tome K . En las figuras 2.3b y 2.3c se observan que para cada una de esas fases (fase **Inconmensurada A** e **Inconmensurada B**) tenemos seis mínimos distribuidos simétricamente alrededor del punto $k = (0,0)$. Es importante destacar que los mínimos "seleccionados" por la interacción son puntos que eran parte de los contornos degenerados del caso $J_1 - J_2$. Otra característica a remarcar es que en ambas regiones los mínimos se encuentran en el interior de la zona de Brillouin; es decir, las fases son inconmensuradas.

El caso $J_2/J_1 = 0.5$ tiene la particularidad de que $K > 0$ no levanta la degeneración de las soluciones de mínima energía. En la figura 2.3b se observan las mismas soluciones por líneas que para el caso $K = 0$ mostradas en la sección 1.5.

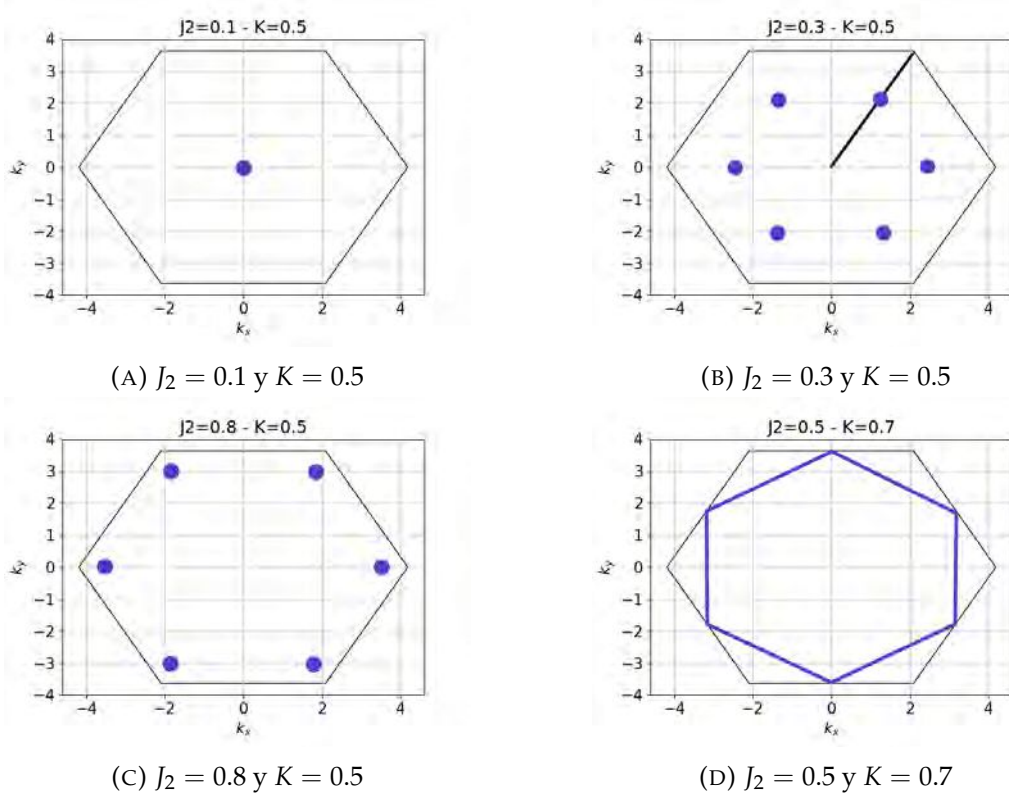


FIGURA 2.3: Mínimos de energía para casos particulares de $K \geq 0$ ($J_1 = 1$). En la figura (B) se agregó una línea como guía para señalar que los mínimos se encuentran sobre las rectas que unen los puntos de alta simetría; en el caso mostrado la línea es $\Gamma \rightarrow K_2$.

Como se muestra en la figura 2.3b, los mínimos seleccionados de todo el conjunto posible no tienen cualquier valor k si no que se encuentran sobre líneas simétricas que unen el punto de alta simetría Γ con los puntos simétricos K de la zona de Brillouin. En la figura 2.4 mostramos las bandas que surgen al calcular las autoenergías del modelo a través de rectas que unen diferentes *puntos de alta simetría* del primer cuadrante de la zona de Brillouin (ver sección 1.4). De los gráficos se puede observar como al entrar en juego K la degeneración existente se rompe.

Para $1/6 < J_2/J_1 < 1/2$ y $K > 0$ uno de los mínimos de energía corresponden a k tal que

$$k_x = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos^{-1} \left(\frac{J_1^2}{16J_2^2} - \frac{5}{4} \right) \quad (2.33a)$$

$$k_y = 0 \quad (2.33b)$$

Para $1/2 < J_2/J_1 < 1$ y $K > 0$ uno de los vectores de ordenamiento correspondiente viene dado por

$$k_x = 2 \cos^{-1} \left(\frac{J_1}{4J_2} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.34a)$$

$$k_y = 0 \quad (2.34b)$$

Existen otros cinco mínimos simétricos a los mínimos dados para cada régimen tal como se mostró en la figura 2.3; éstos se encuentran rotando al k dado en múltiplos de $\frac{\pi}{3}$.

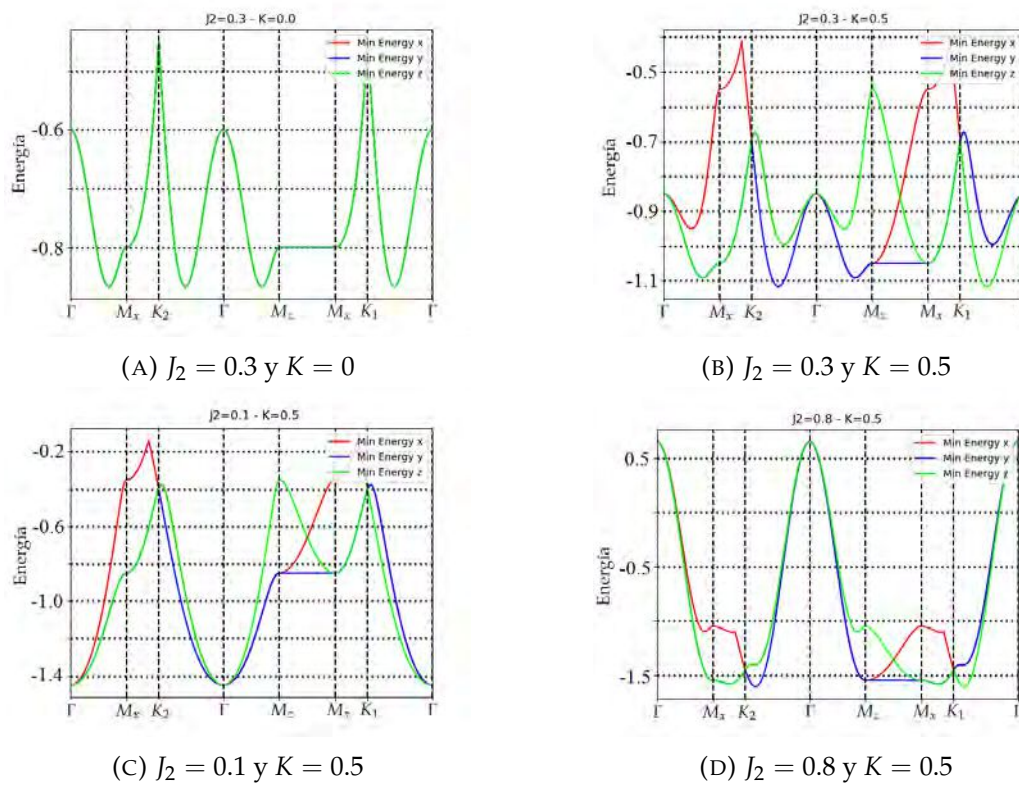


FIGURA 2.4: Bandas por líneas para los casos con $K \geq 0$ ($J_1 = 1$).

2.2.2 Kitaev Ferromagnético: $K < 0$

Al observar que sucede con las soluciones cuando introducimos $K < 0$, encontramos que la fase de Néel también está presente en esta región; sin embargo, la línea que divide esta fase de la otras dos existentes para el régimen $0 < J_2/J_1 < 0.5$ es un $J_2(K)$. Partiendo de $J_2/J_1 = 0$ (fase de Néel) si vamos aumentando J_2/J_1 para valores de $K/J_1 < 0.8$ nos encontramos con una fase incommensurada (fase **Incommensurada C**). Cabe destacar que esta fase discrepa de las otras dos descritas en el caso $K > 0$ en que los mínimos "seleccionados" se encuentran ahora sobre las líneas $\Gamma \rightarrow M_i$ con $i = x, y, z$. En la figura 2.5a se muestra una de esas líneas.

Si ahora observamos el extremo inferior izquierdo del diagrama de fases encontramos una nueva fase (fase **Commensurada**). A diferencia de las descritas con anterioridad, esta fase es commensurada, estando sus mínimos ubicados sobre los puntos de alta simetría M tal como se muestra en la figura 2.5b. Nuevamente una línea que es función de K divide esta fase de la de Néel y la **Incommensurada C**. La línea $J_2/J_1 = 1/2$ para K ferromagnético también pertenece a la fase **Commensurada**). A diferencia del caso $K < 0$, la interacción de Kitaev rompe la degeneración por líneas.

Para el régimen $J_2/J_1 > 1/2$ encontramos otra fase incommensurada (fase **Incommensurada D**). En este caso los vectores de onda que minimizan la energía son doce y se encuentran en puntos sobre el borde de Brillouin posicionados simétricamente respecto de los puntos de alta simetría M (figura 2.5c).

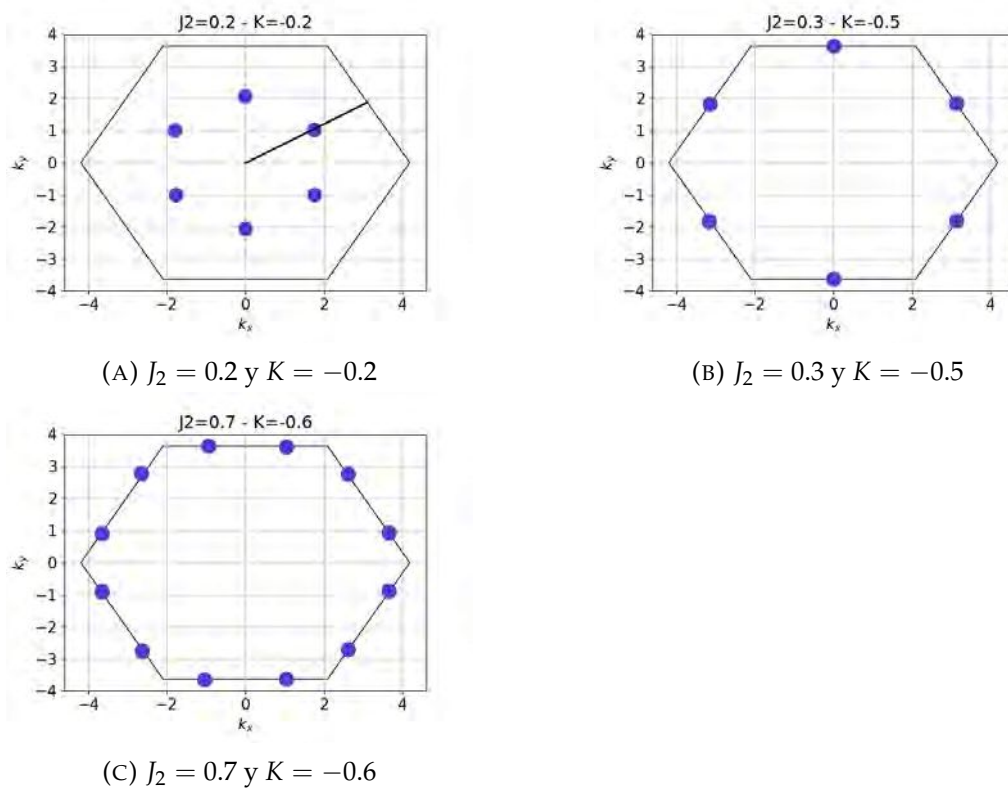


FIGURA 2.5: Mínimos de energía para casos particulares de $K < 0$ ($J_1 = 1$). En la subfigura (A) se agregó una línea como guía para señalar que los mínimos se encuentran sobre las rectas que unen puntos de alta simetría; en el caso mostrado la línea es $\Gamma \rightarrow M_x$.

En la figura 2.6 se muestran las estructuras de bandas para el caso de K ferromagnético. En la subfigura 2.6 se pueden ver dos mínimos sobre el borde de Brillouin: uno en la región $M_x \rightarrow K_2$ y otro en $M_x \rightarrow K_1$.

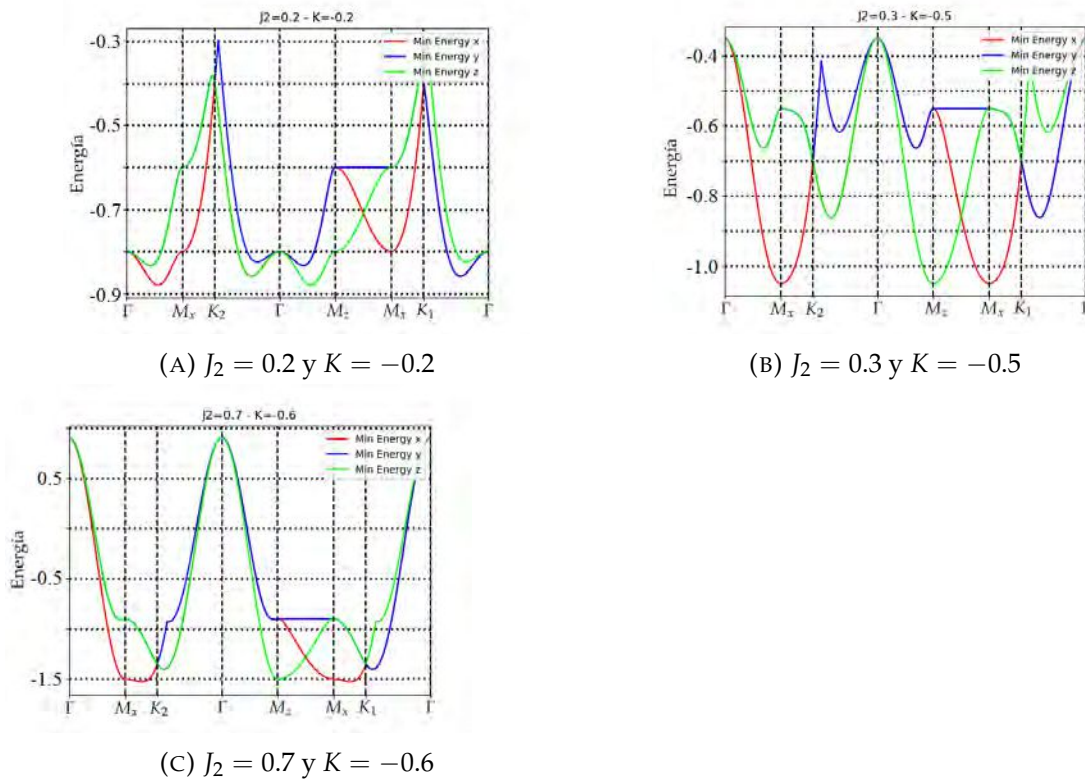


FIGURA 2.6: Bandas por líneas para los casos con $K < 0$ ($J_1 = 1$).

Tal como para el caso con K antiferromagnético, aquí también pudimos encontrar una forma analítica para los vectores de ordenamiento. Para la región $1/2 < J_2/J_1 < 1$ con K ferromagnético tenemos doce mínimos, estando uno de ellos en k tal que cumple

$$k_x = 2 \cos^{-1} \left(\frac{J_1}{4J_2} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.35a)$$

$$k_y = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \quad (2.35b)$$

En este caso para hallar el resto de los vectores de onda asociados a los mínimos debemos rotar el punto anterior en múltiplos de $\frac{\pi}{6}$.

2.3 Discusión

Para finalizar este capítulo discutiremos que información sobre las configuraciones de mínima energía podemos extraer a partir de los autovectores correspondientes a cada fase. Como mencionamos en la sección 2.1 para que las fases encontradas mediante L-T correspondan a soluciones reales del problema, es necesario que se satisfaga la condición fuerte $S^2 = S^2$. Esto es factible en redes de Bravais como la red cuadrada o red triangular; sin embargo en redes con motivo (de *No-Bravais*)

es posible que soluciones tipo onda plana (con un determinado k) no cumplan la condición fuerte.

Comencemos con la fase de **Néel** (por ejemplo el caso $J_1 = 1, J_2 = 0.1, K = 0.5$). Allí las soluciones son triplemente degeneradas, con autovectores $v_1 = (1, -1, 0, 0, 0, 0)$, $v_2 = (0, 0, 1, -1, 0, 0)$ y $v_3 = (0, 0, 0, 0, 1, -1)$ cuyas componentes están dadas por la ecuación 2.12. En este caso la configuración magnética corresponde a una subred en una dada dirección y la otra en la dirección opuesta como se espera en un estado de **Néel**.

Veamos un caso más elaborado. En la fase de **Commensurada** (por ejemplo $J_1 = 1, J_2 = 0.3, K = -0.5$) los mínimos corresponden a los puntos M de la zona de Brillouin. Para cada punto el autovalor de mínima energía es único. Por ejemplo, para el punto M_y el autovector está dado por

$$v = (0, 0, e^{i\frac{2\pi}{3}}, 1, 0, 0) \quad (2.36)$$

Vemos, entonces, que cada uno de los espines tiene solamente una componente no nula, en este caso la S_y . Si consideramos la expansión en el espacio recíproco de los espines de las subredes A y B (ecuación 2.3) obtenemos

$$S_A = \left(A e^{i\frac{2\pi}{3}} e^{iM_y \cdot r} + A^* e^{-i\frac{2\pi}{3}} e^{-iM_y \cdot r} \right) \hat{y} = 2|A| \cos \left(M_y \cdot r + \frac{2\pi}{3} \right) \hat{y} \quad (2.37a)$$

$$S_B = \left(B e^{iM_y \cdot r} + B^* e^{-iM_y \cdot r} \right) \hat{y} = 2|B| \cos(M_y \cdot r) \hat{y} \quad (2.37b)$$

con A y B constantes. Para este punto, sin embargo, el argumento dentro de la función trigonométrica es $M_y \cdot r = n\pi$ con n entero, con lo cual los espines, luego de ser normalizados, quedarán

$$S_A = -\cos(n\pi) \hat{y} \quad (2.38a)$$

$$S_B = \cos(n\pi) \hat{y} \quad (2.38b)$$

Observemos, entonces, que esta fase corresponde a una configuración tipo Néel en cada celda y que va cambiando de manera alternada a lo largo de la dirección del vector primitivo a_1 . Esto corresponde a una fase tipo **Stripy** a lo largo de los "bonds" de Kitaev tipo y . Si observamos los otros vectores de ordenamiento k , obtendremos fases **Stripy** en la dirección x y z .

Por último analizamos la fase **Incommensurada A** (por ejemplo el caso $J_2/J_1 = 0.3$ y $K = 0.5$). El autovector correspondiente al vector de onda k sobre la línea $\Gamma \rightarrow K_2$ es

$$v = (0, 0, e^{i\delta}, 1, 0, 0) \quad (2.39)$$

donde δ es una fase. Vemos entonces que cada uno de los espines tiene solamente una componente no nula, en este caso la S_y . Si consideramos la expansión en el espacio recíproco del espín de la subred B (ecuación 2.3) obtendríamos

$$S_B = Be^{ik \cdot r} + B^* e^{-ik \cdot r} = 2|B| \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \alpha_1) \quad (2.40)$$

siendo α_1 una fase arbitraria que sale de la constante compleja B . De la ecuación anterior queda claro que la norma del espín no es igual a 1 con lo cual el espín no cumple con la condición fuerte para este \mathbf{k} particular.

De manera análoga, podríamos elegir la solución de misma energía correspondiente a otro de los vectores \mathbf{k} y obtendríamos un resultado similar pero con el espín en otra componente no nula "x" o "z". Esto quiere decir que para esta fase, según L-T la configuración de un solo \mathbf{k} no es la solución de mínima energía. Una posibilidad es que la solución corresponda a una superposición de todos los vectores de ordenamiento \mathbf{k} no equivalentes, dando una solución de más alta energía que la calculada con esta técnica.

El análisis anterior revela que en las fases inconmensuradas, en el modelo con $K \neq 0$ no se cumple la condición fuerte. Veamos cómo en el caso $K = 0$ se pueden construir a partir de los autovectores obtenidos con L-T los estados coplanares discutidos en la sección 1.5. En este caso, para las fases inconmensuradas la banda de mínima energía es tríplemente degenerada (figura 2.4a) y encontraríamos 3 autovectores como los siguientes

$$\mathbf{v}_x = (e^{i\delta}, 1, 0, 0, 0, 0) \quad (2.41)$$

$$\mathbf{v}_y = (0, 0, e^{i\delta}, 1, 0, 0) \quad (2.42)$$

$$\mathbf{v}_z = (0, 0, 0, 0, e^{i\delta}, 1) \quad (2.43)$$

En este caso, entonces, vemos que es posible construir una combinación lineal de los autovectores como

$$S_B = 2|B| \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \alpha_1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + 2|B| \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \alpha_2) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

donde se eligió la componente $S_z = 0$. Como las fases α_1 y α_2 son arbitrarias, entonces podemos elegir las tal que $\alpha_1 = 0$ y $\alpha_2 = \frac{\pi}{2}$ con lo cual obtenemos

$$S_B = 2|B| \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + 2|B| \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

y si ahora tomamos $|A| = |B| = \frac{1}{2}$ vemos que la norma del spin puede ser igual a 1 para este caso.

Capítulo 3

Método Autoconsistente

En este capítulo presentaremos estudio del modelo empleando el método numérico autoconsistente de minimización de la energía. Éste método es un algoritmo de "fuerza bruta" que nos permite encontrar estados fundamentales aproximados.

3.1 Fundamentos

Si tomamos al Hamiltoniano del sistema (ecuación 1.41) podemos reordenarlo de la siguiente manera

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + K \sum_{\gamma} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{\gamma} S_j^{\gamma} \quad (3.1a)$$

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + K \sum_{i,j,\gamma} S_i^{\gamma} S_j^{\gamma} \quad (3.1b)$$

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \left(\sum_{j \text{ nn}(\text{nnn})i} J_{ij} \mathbf{S}_j + K \sum_{j \text{ nn}(\text{nnn})i} M_{ij} \mathbf{S}_j \right) \quad (3.1c)$$

donde en la ecuación 3.1c las sumas $\sum_{j \text{ nn}(\text{nnn})i}$ denotan una suma sobre los sitios j primeros vecinos ("nearest neighbors") o segundos vecinos ("next nearest neighbors"), según corresponda, del sitio i . M_{ij} es una matriz de 3×3 con todos sus elementos no diagonales nulos y los elementos $M_{ii} = 1$.

Cada espín interactúa con un campo local (o efectivo)

$$\mathbf{H}_{eff,i} = \sum_{j \text{ nn}(\text{nnn})i} J_{ij} \mathbf{S}_j + K \sum_{j \text{ nn}(\text{nnn})i} M_{ij} \mathbf{S}_j \quad (3.2)$$

generado por los espines de tu entorno (tanto primeros como segundos vecinos). Por lo cual la ecuación 3.1a puede reescribirse como

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_{eff,i} \quad (3.3)$$

De la ec. 3.3 es sencillo ver que para minimizar la energía del sistema, $\mathbf{H}_{eff,i}$ debe estar antiparalelo con respecto a \mathbf{S}_i . Es decir, el mínimo se da cuando se cumple

$$\mathcal{H} = - \sum_i \|\mathbf{S}_i\| \|\mathbf{H}_{eff,i}\| \quad (3.4)$$

3.2 Esquema de minimización iterativo

A partir de lo estudiado en la sección anterior se propuso escribir un programa que simulara un sistema de espines clásicos en una red panal de abejas. A este proceso se lo llama *simulación de minimización iterativa* [16]. El fin de este método es buscar la configuración de mínima energía a partir de una inicial aleatoria, utilizando lo establecido en la sección 3.1. Basicamente el procedimiento consiste en los siguientes pasos:

- Se crea una configuración aleatoria inicial de N espines de Heisenberg (que cumplieran $\|S_i\| = 1 \forall i$);
- se elige aleatoriamente un espín S_l de la red y se calculó el campo efectivo, $H_{eff,l}$, alrededor del mismo;
- se define $S_l = H_{eff,l}/\|H_{eff,l}\|$ de manera de minimizar la interacción entre el espín y su respectivo campo efectivo;
- se procede a realizar los pasos (2) y (3) un número de veces equivalente a la cantidad de espines presentes en la red generada.

Estas iteraciones se realizan un número de veces determinada de manera tal que la diferencia en la energía calculada entre una iteración y la siguiente sea menor a cierto valor especificado. En la figura 3.1 se muestra la energía en función del números de pasos de la simulación para un caso particular; se observa claramente como la energía del primer estado aleatorio decae rápidamente en los primeros pasos y luego la energía va convergiendo hacia un valor específico. Es importante aclarar que en este proceso surgen problemas de borde ya que los espines de los extremos de la red carecen de alguno o varios de sus vecinos. Es por esto que se plantearon en el código condiciones de contorno periódicas de manera de sortear este problema.

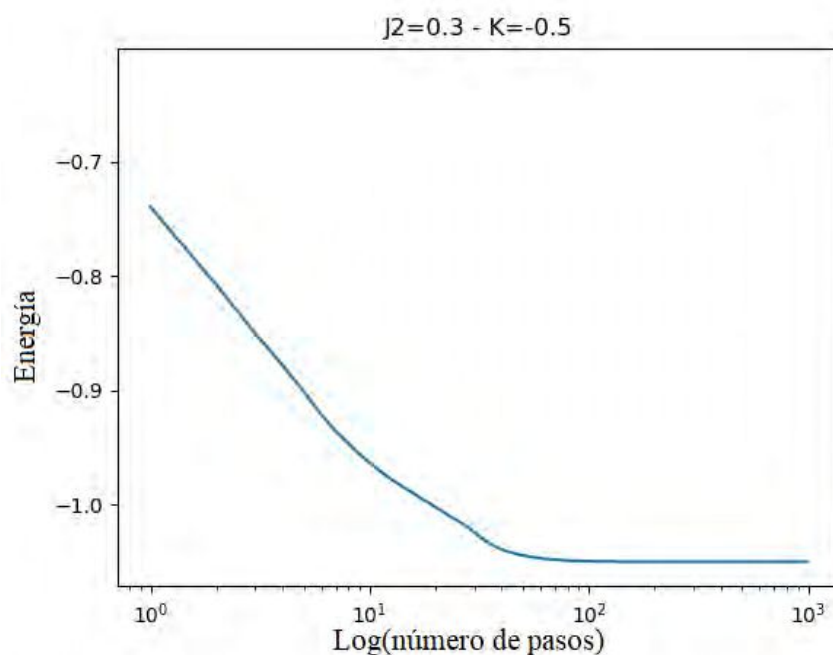


FIGURA 3.1: Energía en función del logaritmo del número de pasos. para el caso $J_2 = 0.3$ y $K = 0.5$ ($J_1 = 1$).

3.2.1 Resultados y Discusión

Al correr la *simulación de minimización iterativa* en las distintas fases del sistema se encuentran resultados compatibles con lo hallado por el método de L-T. En las figuras 3.2 se muestran las zonas de Brillouin extendida de cada una de las fases. La zona de Brillouin extendida posee la periodicidad de la red de panal de abejas. Si observamos, por ejemplo, la figura 3.2a podemos ver que su factor de estructura es compatible con la fase de Néel. El hecho de que no se observe un pico en $k = 0$ se debe a que este punto corresponde al valor de la magnetización, que en la fase de Néel es cero.

Salvo por el hecho de que los puntos aparecen en la zona de Brillouin extendida, se ve entonces que con la *simulación de minimización iterativa* fuimos capaces de reproducir las fases encontradas utilizando el método de Luttinger-Tisza. Existe, no obstante, un detalle no menor al observar la figura 3.2e. Este factor de estructura pertenece a la fase **Inconmensurada D**, sin embargo no se observan los 12 mínimos de la figura 2.5c. Esta discrepancia surge debido a la finitud de la red utilizada en la simulación. Además, observando la figura 2.5c, vemos que el mínimo absoluto tiene un valor muy cercano a un mínimo local en los puntos M , que es donde se observan los picos con este método. Entonces, podría esperarse que si el tamaño de la red no fuese el adecuado, el sistema se acomode en los puntos M , de mayor simetría.

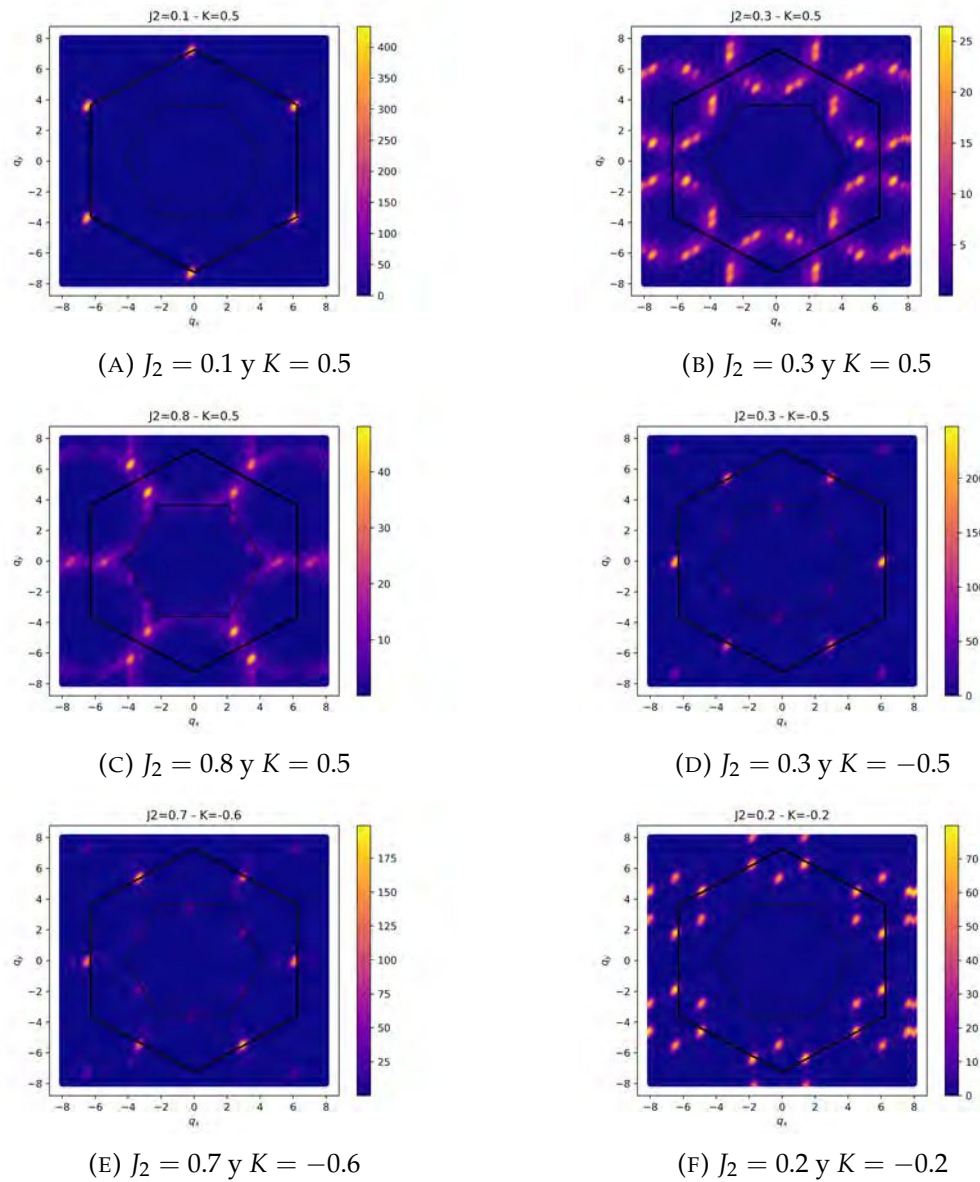


FIGURA 3.2: Factor de estructura para las fases del sistema ($J_1 = 1$).

Al comparar los resultados obtenidos en este trabajo con aquellos hallados para el modelo de Kitaev-Heisenberg a primeros vecinos [14] (mostrados en la sección 1.6), podemos ver que las fases encontradas son compatibles. Esto lo podemos ver analizando la región del diagrama de fases de la figura 1.9 con $\pi/2 < \phi < \pi/2$ (que es la región que se corresponde con nuestro trabajo). En ese régimen se observan tanto la fase de Néel como una fase llamada **Stripy**. Claramente en nuestro diagrama de fases también surge la fase Néel. Según lo analizado en el capítulo anterior, también surge la fase **Stripy**. Consideremos un arreglo de spines como el mostrado en la figura 3.3 que corresponde a la fase **Stripy**. Si analizamos las interacciones a primeros y segundos vecinos del espín A dentro de la celdad unidad marcada vemos que hay dos interacciones J_1 antiferromagnéticas y una ferromagnética, que la interacción de Kitaev a lo largo de la dirección z es ferromagnética y que además hay 4 interacciones a segundos vecinos que son antiferromagnéticas y 2

que son ferromagnéticas. Si entonces tomamos el Hamiltoniano 1.41 y lo aplicamos a esta celda unidad obtenemos

$$\epsilon = \frac{K - J_1 - 2J_2}{2} \quad (3.5)$$

Al introducir los valores de J_1 , J_2 y K correspondientes a algún punto de la fase **Commensurada**, el valor hallado coincide con el encontrado utilizando tanto el método de L-T como el método autoconsistente. Como ejemplo particular tomemos el caso $J_1 = 1$, $J_2 = 0.3$ y $K = -0.5$, entonces la ecuación 3.5 nos da que la energía por espín de la fase **Stripy** es $\epsilon = -1.05$. Si observamos la figura 2.6b vemos que el valor de los mínimos es efectivamente -1.05 . Por otra parte en la figura 3.1 se puede ver que en la *simulación de minimización iterativa* la energía converge a ese mismo valor. Sin embargo, es importante destacar que la fase **Stripy** es un caso particular de la fase **Commensurada**, ya que está degenerada clásicamente. Es de esperar que fluctuaciones cuánticas seleccionen los casos **Stripy** (franjas polarizadas en x , y o z), como en el modelo de Kitaev-Heisenberg a primeros vecinos.

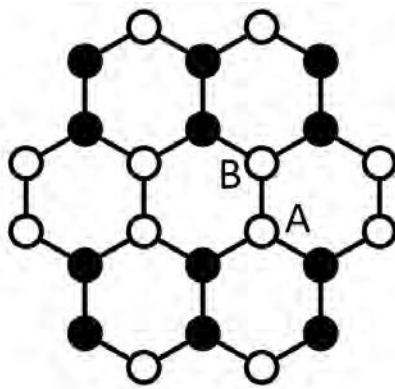


FIGURA 3.3: Configuración de los espines en la fase **Stripy**.

Capítulo 4

Conclusiones

Este trabajo estuvo centrado en el modelo de Kitaev-Heisenberg extendido en la red panal de abejas. En este modelo las interacciones tanto de Kitaev como las de Heisenberg a segundos vecinos introducen frustración al sistema, fenómeno que desempeña un rol fundamental en los estados de mínima energía.

Para estudiar al sistema utilizamos dos métodos independientes y complementarios. Inicialmente se utilizó el método de Luttinger-Tisza (L-T) que se basa en relajar el vínculo de módulo fijo en cada espín por uno global, permitiendo así analizar de manera sistemática las bandas de energía y en muchos casos determinar las configuraciones magnéticas del estado fundamental. Este método nos permitió tener una idea clara de la estructura general del estado fundamental del sistema, señalando la existencia de siete fases. Dentro de esta aproximación se encontraron fases conmensuradas e inconmensuradas. Analizando los autovectores pudimos inferir el estado fundamental de la fase de Néel y observamos que los estados tipo **Stripy** son soluciones en la fase **Conmensurada**. Por último, mostramos que en las fases inconmensuradas no es posible satisfacer el vínculo fuerte del espín en cada sitio al construir una solución para un único vector k . Esto es debido al carácter anisotrópico de la interacción de Kitaev.

Por otro lado, implementamos un método numérico autoconsistente en el espacio real que permite encontrar la configuración de espines de mínima energía en redes de tamaño finito. A partir de las configuraciones obtenidas calculamos el factor de estructura para las diferentes fases. De esta manera pudimos contrastar ambas técnicas encontrando resultados compatibles.

4.1 Trabajo Futuro

El estudio del presente trabajo ofrece varias perspectivas. Entre ellas, las más importantes consisten en analizar la estabilidad de las diferentes fases en presencia de fluctuaciones térmicas y cuánticas.

En el primer caso se propone estudiar las posibles selecciones y/o estados no triviales tipo multiple- k como consecuencia del fenómeno de orden por desorden. Para ello hemos comenzado a estudiar el problema mediante simulaciones de Monte-Carlo clásico.

Para el caso cuántico utilizaremos dos métodos de bosonización: la transformación de Holstein-Primakoff y el mapeo de Bosones de Schwinger.

Bibliografía

- [1] Lacroix, Claudine, Philippe Mendels, and Frédéric Mila, eds. *Introduction to frustrated magnetism: materials, experiments, theory*. Springer Science and Business Media, 2011.
- [2] Kitaev, Alexei. *Anyons in an exactly solved model and beyond*. *Annals of Physics* 321.1 (2006): 2-111.
- [3] Jackeli, G., and G. Khaliullin. *Mott insulators in the strong spin-orbit coupling limit: from Heisenberg to a quantum compass and Kitaev models*. *Physical review letters* 102.1 (2009): 017205.
- [4] Singh, Avinash, et al., *Spin-orbit coupling induced magnetic anisotropy and large spin wave gap in NaOsO₃*. *Journal of Physics Communications* 2.11 (2018): 115016
- [5] Joshi, Darshan G. *Topological excitations in the ferromagnetic Kitaev-Heisenberg model*. *Physical Review B* 98.6 (2018): 060405.
- [6] Chaloupka, Jiří, George Jackeli, and Giniyat Khaliullin. *Kitaev-Heisenberg model on a honeycomb lattice: possible exotic phases in iridium oxides A₂IrO₃*. *Physical Review Letters* 105.2 (2010): 027204.
- [7] Kimchi, Itamar, and Yi-Zhuang You. *Kitaev-Heisenberg-J 2-J 3 model for the iridates A₂IrO₃*. *Physical Review B* 84.18 (2011): 180407
- [8] D. Griffith *Introduction to Electrodynamics*. (Prentice-Hall, Upper Saddle River, 1999).
- [9] M. Marder *Condensed Matter Physics*. (Wiley, New York, 2000).
- [10] Balents, Leon. *Spin liquids in frustrated magnets*. *Nature* 464.7286 (2010): 199.
- [11] Steven H. Simon *The Oxford Solid State Basics*. (Oxford University Press)
- [12] Mulder, A., Ganesh, R., Capriotti, L., Paramakanti, A. *Spiral order by disorder and lattice nematic order in a frustrated Heisenberg antiferromagnet on the honeycomb lattice*. *Physical Review B*, 81.21(2010): 214419
- [13] Winter, Stephen M., et al. *Models and materials for generalized Kitaev magnetism*. *Journal of Physics: Condensed Matter* 29.49 (2017): 493002.
- [14] Chaloupka, Jiří, George Jackeli, and Giniyat Khaliullin. *Zigzag magnetic order in the iridium oxide Na₂IrO₃*. *Physical review letters* 110.9 (2013): 097204.

- [15] Jiang, Hong-Chen, et al. *Possible proximity of the Mott insulating iridate Na_2IrO_3 to a topological phase: Phase diagram of the Heisenberg-Kitaev model in a magnetic field*. *Physical Review B* 83.24 (2011): 245104.
- [16] Sklan, Sophia R., and Christopher L. Henley. *Nonplanar ground states of frustrated antiferromagnets on an octahedral lattice*. *Physical Review B* 88.2 (2013): 024407.