



FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS
BIBLIOTECA DEL DEPARTAMENTO
DE FÍSICA

T. 159

24 JUN 2005

Tesis Doctoral

Magnetismo cuántico en sistemas de baja dimensionalidad

Marcelo J. F. Arlego

Director: Daniel C. Cabra
Co-director: Gerardo L. Rossini

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

Agosto de 2004

Índice general

1. Introducción	3
1.1. Sistemas de electrones altamente correlacionados	3
1.1.1. Peculiaridades en $1D$	3
1.1.2. Fenómenos críticos, grupo de renormalización e invarianza conforme	6
1.1.3. Técnicas diagramáticas y métodos numéricos	7
1.2. Magnetismo cuántico en bajas dimensiones	8
1.3. Objetivos y organización de esta tesis	10
2. Bosonización y Modelos efectivos	14
2.1. Introducción	14
2.2. Derivación de la identidad de bosonización	14
2.3. Hamiltoniano de Tomonaga-Luttinger	18
2.4. Modelos efectivos de electrones $1D$ sin espín	24
2.5. Correlaciones en Líquidos de Luttinger	26
2.6. Líquidos de Luttinger perturbados	29
3. Cadena de espín $1/2$	33
3.1. Interacción entre espines	33
3.2. Modelo XXZ	34
3.3. Transformación de Jordan-Wigner	35
3.4. Modelo XY . Fermiones libres	38
3.5. Modelo de Luttinger de la cadena XXZ	39
3.5.1. Caso perturbativo. $\Delta \ll 1$	39
3.5.2. Caso $ \Delta < 1$	40
3.6. Gaps en el modelo XXZ	40
3.7. Cadena XXZ en un campo magnético externo	41
3.8. Curva de magnetización de la cadena XXZ	44
3.9. Correlaciones en el modelo XXZ	45
4. Cadenas de espín cuasiperiódicas	48
4.1. Introducción	48
4.2. Hamiltoniano cuasiperiódico efectivo	48
4.3. Caso de una frecuencia racional	50
4.3.1. Verificación Numérica	51
4.4. Caso de varias frecuencias racionales	55
4.5. Cadena de Fibonacci	57
4.5.1. Definición y Propiedades de la Cadena de Fibonacci	57

4.5.2. Régimen de acoplamiento fuerte - Decimación	59
4.5.3. Análisis de la cadena de Fibonacci - Bosonización	61
4.6. Conclusiones	62
5. Cadenas de espín cuasiperiódicas desordenadas	64
5.1. Introducción	64
5.2. Modelo XXZ cuasiperiódico con desorden	65
5.3. Procedimiento de decimación	66
5.4. Diagonalización exacta en la cadena XX	67
5.5. Susceptibilidad a campos bajos	70
5.5.1. Tratamiento exacto de la cadena Fibonacci XX desordenada	70
5.6. Conclusiones	76
6. Interacciones competitivas en el modelo XYZ	77
6.1. Introducción	77
6.2. Caso XY . Fermiones libres	78
6.3. Bosonización de la cadena XYZ. Mapeo en fermiones de Majorana.	81
6.4. Resultados numéricos	85
6.4.1. Espectro del gap a $\langle M \rangle = 0$	85
6.4.2. Curva de magnetización del modelo XYZ	86
6.5. Conclusiones	90
7. Impurezas en escaleras de espín 1/2	92
7.1. Introducción	92
7.2. Modelo de escalera de dos patas de espín 1/2	93
7.2.1. Proyección sobre el subespacio de un triplete	94
7.3. Impureza aislada y pequeños agrupamientos de impurezas (clusters)	96
7.3.1. Problema de una impureza. Tratamiento en espacio real	96
7.3.2. Agrupamientos pequeños de impurezas (clusters)	98
7.3.3. Comparación con la diagonalización exacta	98
7.4. Concentración finita de impurezas	100
7.4.1. Aproximaciones Diagramáticas	102
7.4.2. Resultados numéricos y comparación	104
7.4.3. Resultados analíticos para arreglos pequeños de impurezas	107
7.5. Conclusiones	110
8. Conclusiones	113.
A. Teoría de Campos Conformes	116
A.1. Criticalidad del líquido de Luttinger	116
A.2. Invarianza conforme en el punto crítico	116
A.3. Transformación de las funciones de correlación	118
A.4. Representaciones del álgebra de Virasoro. Estados del espacio de Hilbert	120
A.5. Invarianza conforme en sistemas finitos	121
A.6. Determinación del parámetro de Luttinger en el modelo XXZ	122

Capítulo 1

Introducción

1.1. Sistemas de electrones altamente correlacionados

Los sistemas de electrones (o generalmente fermiones) altamente correlacionados son un problema central en la física de materia condensada. En las últimas décadas, el desarrollo y los experimentos sobre gran variedad de materiales han dado evidencia de que las correlaciones entre electrones son un ingrediente relevante en la descripción de sus propiedades físicas. Entre estos sistemas podemos mencionar a los superconductores de alta temperatura crítica, sistemas magnéticos, heteroestructuras semiconductoras, para nombrar algunos representativos. En los metales normales, a pesar que las interacciones entre electrones son moderadamente intensas las correlaciones entre los mismos usualmente son mucho menores que en aquellos. Por esta razón, en los metales normales tradicionalmente han sido aplicadas con gran éxito las teorías de partícula independiente o de campo medio [1, 2, 3, 4, 5], que no incorporan en forma directa las interacciones entre electrones.

La descripción teórica de los sistemas de electrones altamente correlacionados es un problema muy complejo. No existen soluciones exactas en general, salvo para ciertos modelos unidimensionales ($1D$) que discutiremos posteriormente. Sin embargo, la mayoría de las mediciones sólo testean correlaciones sobre escalas de energía que son pequeñas comparadas con el nivel de Fermi. Esto es debido a que en los sistemas de materia condensada típicamente el nivel de Fermi es del orden de $10^4 K$ mientras que el rango en el que la temperatura no enmascara los efectos cuánticos es del orden de $1 - 100 K$. De modo que sólo el sector de bajas energías de un modelo dado es de importancia práctica.

1.1.1. Peculiaridades en $1D$

El problema de fermiones interactuantes en tres dimensiones ($3D$) fue resuelto por Landau en su teoría del líquido de Fermi. Esta teoría ha sido uno de los elementos centrales para nuestra comprensión de los sistemas correlacionados durante los últimos cincuenta años y está explicada en detalle en muchos libros de texto (por ej. [6]). Indicaremos sólo los resultados principales de la misma. A $T = 0$ en el sistema no interactivo (gas de Fermi) se tienen todos los estados

de menor energía ocupados, siendo el mayor de ellos, por definición, el nivel de Fermi. Los estados de mayor energía están desocupados, por lo cual en el nivel de Fermi (que llamaremos vacío) existe una discontinuidad. Las excitaciones del sistema respecto del vacío consisten en partículas con momento bien definido k y energía $\epsilon(k)$. El remarcable resultado de la teoría del líquido de Fermi es que cuando se consideran las interacciones entre electrones, las propiedades del sistema permanecen esencialmente equivalentes a las del sistema no interactivo. Sin embargo ahora, las excitaciones elementales no son los electrones no interactivos sino estos mismos rodeados de excitaciones hueco-partícula del estado fundamental (fluctuaciones de vacío). Por lo tanto, estos objetos individuales, llamados cuasipartículas tienen carácter fermiónico y se comportan como partículas libres con una masa efectiva m^* que difiere de la masa m no interactiva (bare) debido a los efectos de las interacciones. En principio, m^* podría calcularse a partir de la teoría microscópica del sistema. Por supuesto ésta es una imagen sobresimplificada y de hecho pueden existir interacciones residuales entre las cuasipartículas, dando lugar a otros tipos de excitaciones colectivas. En la teoría de Landau, la imagen de cuasipartícula evoluciona a partir de la de partícula no interactiva con el encendido adiabático de la interacción; la teoría puede chequearse orden a orden perturbativamente.

La imagen de líquido de Fermi no es posible en $1D$. Desde un punto de vista formal esto se refleja en las divergencias que aparecen al tratar perturbativamente el problema en términos de los fermiones originales. Esto es una indicación de que las propiedades del sistema interactivo son muy diferentes del sistema libre tomado como base para la perturbación. Figurativamente esto puede interpretarse como una consecuencia de la restricción en el movimiento. Como en $1D$ no es posible un desplazamiento individual, cualquier excitación del sistema debe considerarse necesariamente como colectiva. Otra particularidad en $1D$, la cual será crucial para obtener una imagen mucho más simple de estos sistemas, es la naturaleza hueco-partícula de las excitaciones en el gas $1D$. En las mismas, un electrón con momento k es aniquilado debajo de la superficie de Fermi ($\epsilon_F = 0$) y otro con momento $k + q$ es creado sobre el nivel de Fermi ($k = k_F$). El momento de la excitación tiene entonces un valor q bien definido. La energía de tal excitación, sin embargo, depende en general de k y de q . Si se considera la excitación hueco-partícula en función de q se tiene un continuo de energías. En $D = 2$ o 3 para $k < k_F$ pueden crearse pares hueco-partícula de energía arbitrariamente pequeña como se muestra en la Fig. 1.1(a). Las excitaciones dan lugar entonces a un continuo que se extiende desde $-k_F$ hasta k_F . En $1D$ la superficie de Fermi está formada por dos puntos $\pm k_F$ por lo tanto los únicos lugares donde la energía de la excitación es igual a cero es para $q = \pm k_F$, como se muestra en la Fig. 1.1(b). Alrededor de $\pm k_F$ la relación de dispersión de las excitaciones es aproximadamente lineal y las mismas se propagan coherentemente. Ya que estas excitaciones están formadas a partir de la creación y destrucción de un fermión, poseen un carácter bosónico. Esta observación es la clave para la solución del problema mediante la técnica de bosonización en el Capítulo siguiente.

Para analizar las propiedades de baja energía del sistema, sólo deben considerarse las excitaciones alrededor del nivel de Fermi. En dicho caso la relación de dispersión puede linealizarse alrededor de $\pm k_F$. Al linealizar estamos reemplazando una relación de dispersión no relativista $\epsilon \propto k^2$ por una relativista $\epsilon \propto k$. De esta forma las teorías de campos relativistas se incorporan a la des-

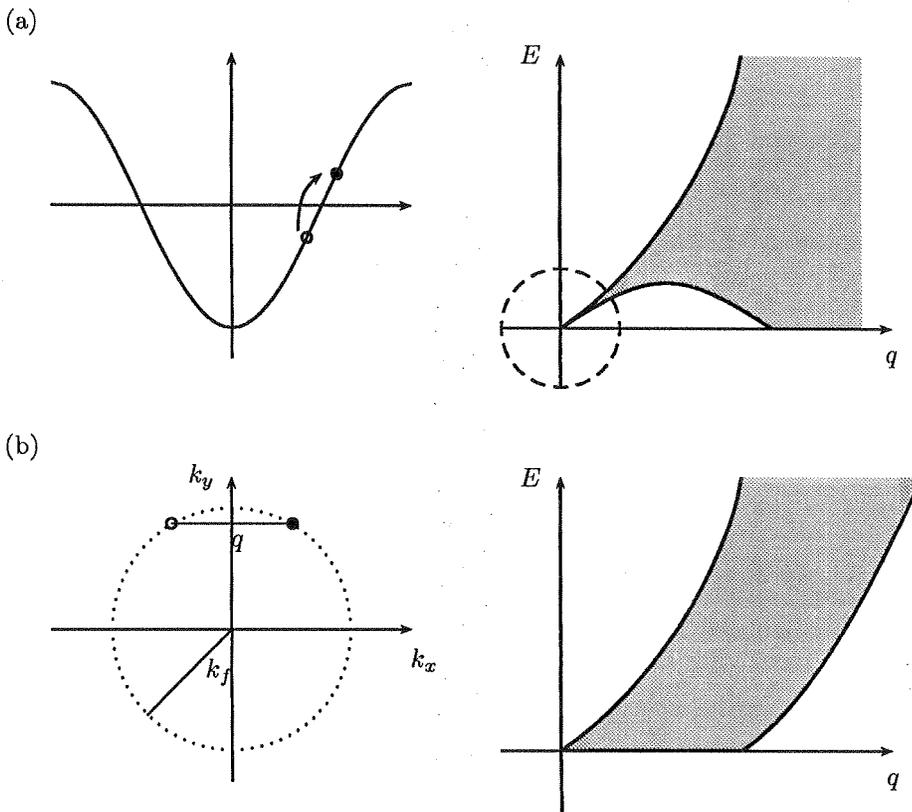


Figura 1.1: Superficies de Fermi y excitaciones accesibles para sistemas de electrones en 1D (a) y 2D (b).

cripción de bajas energías de un sistema que originalmente no lo es. El modelo de fermiones interactivos en una dimensión con una dispersión puramente lineal se conoce como **modelo de Tomonaga-Luttinger** [7, 8]. Utilizando la técnica de bosonización, en el Capítulo 2 veremos que este modelo de fermiones altamente interactivos puede mapearse en un modelo de bosones no interactivos sin masa (en el límite termodinámico es un campo de Klein-Gordon). Este es el logro principal y la razón de implementar la bosonización. A diferencia del líquido de Fermi, el modelo de Tomonaga-Luttinger exhibe una distribución de momentos continua alrededor del nivel de Fermi (no posee gap de energía en su espectro).

1.1.2. Fenómenos críticos, grupo de renormalización e invarianza conforme

La longitud de escala a la cual las propiedades en conjunto de un sistema comienzan a ser independientes de las de sus constituyentes se denomina **longitud de correlación** (ξ). Es la distancia hasta la cual las fluctuaciones entre los grados de libertad del sistema están significativamente correlacionados. Usualmente ξ suele del orden de unos pocos espaciamentos atómicos y este decaimiento abrupto se refleja en hecho de que las funciones de correlación (que miden las correlaciones entre dichos grados de libertad) poseen una dependencia $e^{-\xi}$. En el modelo de Tomonaga-Luttinger a $T = 0$, sin embargo las funciones de correlación decaen como leyes de potencia de la distancia ($\xi \rightarrow \infty$). En el lenguaje de la teoría de las transiciones de fase, el modelo de Tomonaga-Luttinger es crítico (asociado a transiciones de fase de segundo orden) con un temperatura crítica $T_c = 0$. Como todas las distancias son importantes el sistema crítico es invariante de escala. Esta simetría sumada a la invarianza de Lorentz de la teoría de campos correspondiente (que en $D = 1$ se reduce a rotaciones en el plano (x, t)), implica que el sistema es invariante bajo un grupo más amplio de transformaciones denominado grupo conforme.

En general para sistemas críticos, la importancia de las correlaciones a grandes distancias (o bajas energías respecto del nivel de Fermi) enmascara los aspectos microscópicos asociados a distancias cortas. Por lo tanto una variedad de modelos microscópicos diferentes coinciden en su comportamiento a grandes distancias. Estas características comunes dan lugar a **clases de universalidad**. La técnica adecuada para reducir un modelo a su clase de universalidad es el análisis mediante **grupo de renormalización** (RG) (ver por ej. [9]). La eliminación de los grados de libertad a cortas distancias provee, por invarianza de escala, una teoría equivalente a la anterior pero con los parámetros renormalizados. Estos nuevos parámetros efectivos en general dependerán de la escala de longitud a la cual se está haciendo la transformación y del límite inferior de distancias (superior de energía o momentos) en que el modelo original está definido (cutoff). Para sistemas de materia condensada el cutoff natural es el espaciamento de los átomos en la red. La dependencia de los parámetros con la escala está gobernada por ecuaciones diferenciales llamadas ecuaciones de grupo de renormalización. Distintos modelos microscópicos pueden poseer uno o más puntos críticos (puntos fijos en el flujo RG).

En particular en $D = 1$ ($1 + 1$ en el lenguaje de teoría de campos) la **teoría de campos conformes**, que explota la simetría conforme (local) de las teorías críticas, es extremadamente útil para la clasificación de los modelos críticos en

clases de universalidad. Para cada punto fijo se tiene una teoría de campos conformes asociada, caracterizada por un parámetro c denominado **carga central**. Ésta permite determinar los exponentes (críticos) de las funciones de correlación (para $c < 1$). En el caso $c = 1$ es necesario un parámetro adicional. En el Apéndice comentaremos brevemente los resultados más importantes de la teoría de campos conformes, en relación a los modelos críticos.

Cuando un modelo no está en un punto crítico, la operación RG lo modifica y en general lo lleva a un punto fijo. Un caso importante que analizaremos reiteradas veces en esta tesis es el de un hamiltoniano crítico más una perturbación. Si ante la operación RG el modelo evoluciona (fluye en la terminología de RG) al hamiltoniano crítico, se dice que la perturbación es **irrelevante**, en cambio si se aleja, dirigiéndose hacia otro punto crítico o a un régimen no crítico, se dice que es **relevante**. Las perturbaciones que a primer orden en las ecuaciones RG no determinan el flujo de RG se denominan **marginales**.

Es importante destacar que el método de grupo de renormalización no resuelve un hamiltoniano dado, sino que permite relacionar uno con otro equivalente en relación a sus propiedades de baja energía. La ventaja de esto es que a veces uno de los hamiltonianos es exactamente soluble (particularmente en $1D$) o en uno de ellos es admisible un tratamiento perturbativo de las interacciones.

Específicamente en relación a los sistemas unidimensionales en los años ochenta Haldane [10] propuso el nombre de **Líquidos de Luttinger** para describir las propiedades comunes de los sistemas sin gap $1D$, y para enfatizar que la descripción asintótica (de bajas energías) de los mismos puede ser basada en el modelo de Luttinger de la misma manera que en $3D$ la teoría del líquido de Fermi puede basarse en el modelo de gas de Fermi libre. Los líquidos de Luttinger, independientemente de los grados de libertad del sistema (bosones, fermiones, espines) en el lenguaje de campos conformes, pertenecen a una misma clase de universalidad, un bosón libre sin masa con carga central $c = 1$. Como mencionamos, en este caso los exponentes críticos no pueden ser calculados sólo a partir de c . En cambio, aparece otro parámetro (una dimensión anómala) no universal. Ver Apéndice.

1.1.3. Técnicas diagramáticas y métodos numéricos

En los casos en que desde el punto de vista de grupo de renormalización es admisible un tratamiento perturbativo las técnicas de **diagramas de Feynman** y **funciones de Green**, son de gran utilidad. El método de las funciones de Green consiste esencialmente en reescribir la ecuación de Schrödinger en una forma muy conveniente para el tratamiento diagramático y la implementación de otros esquemas de aproximación. El conocimiento de la función de Green de un sistema permite calcular la **densidad de estados** (DOS) y en principio las funciones termodinámicas y demás observables. De más está decir que no es posible obtener dichas funciones salvo en los casos más simples. Sin embargo en sistemas desordenados, por ejemplo, donde la pérdida de simetría hace más difícil aplicar otras técnicas, los métodos que emplean funciones de Green resultan muy útiles. En estos casos pueden emplearse técnicas de resumación de clases de diagramas (ecuación de Dyson) a bajas concentraciones de impurezas, o eventualmente alguna clase de teoría de campo medio, donde las propiedades del sistema en conjunto se determinan a partir de comportamiento del mismo en una región localizada. A esta clase de teorías pertenece la **aproximación**

del potencial coherente (*CPA*). Todas estas técnicas son estándar y están cubiertas en detalle en libros de texto (por ej. [6, 11, 12]).

Por otro lado, debido al incremento en la potencia de cómputo, métodos numéricos sofisticados tales como el de diagonalización exacta de **Lanczos** y **DMRG** (Density Matrix Renormalization Group) se han convertido en herramientas útiles en el tratamiento de sistemas de electrones altamente correlacionados [13].

1.2. Magnetismo cuántico en bajas dimensiones

El interés por los sistemas cuasi unidimensionales de electrones altamente correlacionados ha crecido en los últimos años debido a la síntesis de materiales que en un rango amplio de temperaturas pueden ser modelados mediante sistemas de cadenas y escaleras. Otra razón importante que ha puesto estos sistemas en escena es su posible relación con materiales de alto impacto desde un punto de vista tecnológico, tales como los cupratos superconductores de alta temperatura crítica (*high- T_C*) [14], materiales con magnetoresistencia colosal (manganitas)[15], por citar algunos ejemplos.

En particular se conoce como magnetismo cuántico al área de la materia condensada que estudia los sistemas altamente correlacionados de bajas dimensiones en los que las variables relevantes son los espines. La mayoría de estos sistemas toman como punto de partida un modelo llamado **Modelo de Heisenberg anisotrópico** o **Modelo XXZ** que consiste en una cadena de espines $1/2$ acoplados con sus vecinos inmediatos [16] y con un **parámetro de anisotropía Δ** . En realidad en el dominio no relativista en el cual estos modelos se definen la interacción electrostática no depende del espín. Pero el efecto combinado del principio de exclusión con la interacción coulombiana da lugar a la posibilidad de una interacción efectiva entre espines denominada de intercambio.

El modelo XXZ , para $|\Delta| < 1$ y en ausencia de un campo magnético externo (h) fue resuelto analíticamente en los años treinta por Bethe, mediante una parametrización ingeniosa de la función de onda, que tradicionalmente se la conoce como **Ansatz de Bethe** [17]. La ecuación de Schrödinger lleva entonces a un sistema de ecuaciones en los parámetros del Ansatz. La solución permite obtener el espectro y la distribución de momentos, pero el cálculo de las funciones de correlación resulta imposible, incluso numéricamente. En este trabajo no expondremos el procedimiento de Bethe explícitamente, aunque en el Capítulo 3 y en el Apéndice analizaremos la forma en que el mismo (o generalizaciones directas de éste que incluyen el tratamiento para Δ arbitrario y en presencia de un campo magnético externo h) se combinan con otras técnicas como la Teoría de campos conformes para obtener una imagen completa del diagrama de fases de la cadena XXZ . En la aproximación continua de bajas energías el modelo XXZ se comporta como líquido de Luttinger. En particular para $\Delta \ll 1$ esto se muestra explícitamente en el Capítulo 3 a partir de la bosonización. Para casos más generales la región del diagrama de fases (Δ, h) donde el sistema se sigue comportando como líquido de Luttinger se obtiene indirectamente a través de la combinación de las técnicas antes mencionadas (ver Apéndice).

La primera parte de esta tesis se centra en el estudio teórico de la estructura de las curvas de magnetización para diferentes modelos de magnetismo cuántico en una dimensión. Este problema está íntimamente relacionado con las dife-

rentes perturbaciones sobre un sistema crítico, capaces de llevar a éste a una fase con gap. En particular se ha puesto énfasis en la búsqueda de condiciones para la aparición de **plateaux**¹ en las curvas de magnetización a $T = 0$. Es decir, regiones donde la magnetización (definida como el valor medio de vacío de la componente del espín total en la dirección del campo externo aplicado) permanece constante al variar dicho campo.

Los primeros estudios sobre plateaux en sistemas de electrones altamente correlacionados fueron llevados a cabo por Okamoto [18] en un intento por describir algunos compuestos orgánicos con acoplamientos periódicos. El primer tratamiento sistemático del problema, utilizando métodos no perturbativos fue realizado por Oshikawa y colaboradores [19], quienes extendieron el teorema de Lieb-Schultz-Mattis [20] (que caracteriza el estado fundamental del modelo XXZ como no degenerado y sin gap) a sistemas en un campo magnético. En este trabajo, se obtiene una condición necesaria para la aparición de un plateau en la curva de magnetización en sistemas $1D$. Cuando la magnetización (estrictamente su valor medio de vacío) $\langle M \rangle$ es normalizada a su valor de saturación ± 1 dicha condición puede ser escrita como

$$SV(1 - \langle M \rangle) \in \mathbb{Z}, \quad (1.1)$$

donde S es el espín local y V el número de espines en la celda unidad.

Otro resultado muy importante referente a cadenas de espín $1D$, es la llamada **conjetura de Haldane** [21]. La misma está basada en el hecho de que la descripción de bajas energías de las cadenas con espín S entero puede llevarse a cabo mediante un modelo de teoría de campos llamado **sigma no lineal**, del cual se conoce que tiene una longitud de correlación finita y posee gap. Para espín S semientero, además del modelo sigma hay un término extra que cambia la física drásticamente. Este término es proporcional a un invariante topológico, el índice de Pontryagin de la configuración de espín. El resultado de esto es que para espín semientero el sistema no posee gap, como verificaremos en el caso $S = 1/2$. Esta diferencia entre los casos S entero-semientero es el contenido de la conjetura de Haldane (ver también [22] para un tratamiento alternativo). Como evidencia experimental podemos citar el compuesto CsNiCl_3 , el cual puede ser modelado mediante una cadena $1D$ de espines $S = 1$ (el Ni^{-3} porta dicho espín) [23]. El mismo exhibe un gap entre el estado fundamental y el primer estado excitado y es un ejemplo donde se verifica la conjetura de Haldane.

Existen también compuestos que pueden modelarse mediante cadenas XXZ , con modulaciones periódicas en los acoplamientos entre espines de período q (llamadas cadenas q -merizadas). Esto ha motivado el estudio teórico de los procesos de magnetización en estos sistemas [24, 25, 26]. En particular se ha estudiado el efecto del desorden sobre la estructura de plateaux en estas cadenas q -merizadas utilizando métodos numéricos y de grupo de renormalización [27]. Se encuentra que bajo un desorden binario, es decir con una probabilidad p los acoplamientos toman valores aleatorios (en cierto rango predeterminado) y con probabilidad $(1-p)$ se tiene una cadena q -merizada, la condición necesaria para la aparición de un plateau está dada por

$$\langle M \rangle = 1 + \frac{2}{q}(p - 1). \quad (1.2)$$

¹Utilizamos la palabra original del francés, que traduciríamos como meseta, porque es estándar en este campo.

Contrariamente, las distribuciones continuas de desorden eliminan totalmente la estructura de plateaux.

A pesar que en esta tesis nos concentraremos en cadenas y escaleras de espín $1/2$ vale la pena comentar brevemente sobre las peculiaridades de la transición de $1D$ a $2D$. Un aspecto sorprendente es que esta transición dista de ser suave. El descubrimiento de la superconductividad de alta temperatura [28] en estructuras planas de espín $1/2$ dopadas, ha generado gran interés por estos sistemas. Los cupratos aislantes son compuestos relacionados que se consideran los mejores ejemplos de modelos planos de espín $S = 1/2$. En una red cuadrada bidimensional estos últimos exhiben orden de largo alcance a bajas temperaturas, de acuerdo a la teoría, que predice un estado fundamental ordenado para el modelo Heisenberg $2D$ de espín $S = 1/2$ [29]. Por otro lado, a diferencia del caso bidimensional, el aspecto más característico en el caso unidimensional, como se ha destacado anteriormente, es que las fluctuaciones cuánticas impiden un ordenamiento completo y las correlaciones de espín decaen, esencialmente, como potencias la separación entre espines. Sin embargo, cálculos numéricos ([16]) han mostrado que la transición $1D$ a $2D$, ensamblando cadenas para formar escaleras de espín no es gradual en absoluto. Las cadenas con un número par de patas poseen un gap finito entre el estado fundamental y el primer estado excitado, lo cual genera decaimientos exponenciales en sus funciones de correlación (longitud de correlación ξ finita). Contrariamente, las escaleras con un número impar de patas, poseen propiedades cualitativamente similares a la cadena XXZ . Es decir son sistemas críticos descritos a bajas energías por líquidos de Luttinger (no poseen gap y sus correlaciones decaen con la distancia esencialmente como leyes de potencia). Esta diferencia fundamental predicha entre las escaleras con un número par e impar de patas ha sido observada en una variedad de sistemas. El compuesto $(VO)_2P_2O_7$ y algunos cupratos, como $SrCu_2O_3$ exhiben una estructura de escalera de dos patas de $S = 1/2$. Mediciones de la susceptibilidad de espín muestran un decaimiento exponencial a bajas temperaturas, lo cual se relaciona a la presencia del gap. Además, mediciones de dispersión de neutrones y resonancia nuclear magnética (NMR) confirman la presencia del gap en el espectro de excitación. Las escaleras de tres patas, como el $Sr_2Cu_3O_5$ por el contrario muestran correlaciones de mayor alcance.

1.3. Objetivos y organización de esta tesis

Los objetivos de esta tesis consisten en analizar en una primera etapa la estructura de plateaux en curvas de magnetización y diagramas de fase magnéticos en sistemas de magnetismo cuántico unidimensionales. Desde el punto de vista de teorías efectivas, esto consiste en analizar el efecto de ciertas perturbaciones, tales como cuasiperiodicidad (ver más adelante en esta Sección), desorden y anisotropías sobre modelos críticos, en particular líquidos de Luttinger. Para ello se han empleado técnicas provenientes de la teoría de campos, tales como bosonización (excepto para tratar el desorden), grupo de renormalización y algunos resultados de teorías de campos cuánticos conformes. También se utilizan técnicas numéricas sobre los modelos discretos las cuales dan soporte, complementan y verifican la validez de las predicciones de los modelos efectivos.

En la segunda parte de la tesis se ha estudiado el efecto de impurezas en escaleras de espín de dos patas utilizando herramientas estándar de materia

condensada tales como los métodos diagramáticos y métodos de funciones de Green, complementados con técnicas numéricas. La motivación para el uso de estas técnicas se basa en el hecho de que son adecuadas para ciertos regímenes perturbativos en los que nos hemos concentrado y permiten el modelado de situaciones más realistas donde se incorpora desorden a través del agregado de impurezas, que por otro lado son inevitables en cualquier sistema real.

Esta tesis está organizada de la siguiente manera. En el Capítulo 2 se desarrolla la teoría básica necesaria para tratar sistemas de electrones altamente correlacionados en una dimensión. El objetivo de este Capítulo se centra en la búsqueda de soluciones de modelos $1D$ de fermiones interactivos, a través del mapeo en modelos de bosones libres más interacciones que son analizadas desde el punto de vista de grupo de renormalización. Se comienza construyendo la identidad entre operadores fermiónicos y bosónicos en el espacio de Fock mediante la técnica de bosonización. A través del método de bosonización se resuelve en forma exacta el modelo de Tomonaga-Luttinger y se calculan las funciones de correlación en dicho modelo. El Capítulo concluye con la generalización al modelo de líquido de Luttinger y un análisis de las posibles interacciones en el mismo, para lo cual empleamos técnicas de grupo de renormalización. En el Capítulo 3 se estudia el modelo de Heisenberg de espín $S = 1/2$ y una generalización incluyendo una anisotropía Δ en el eje z , el modelo XXZ . Se obtiene una descripción efectiva de dicho modelo, en términos de fermiones sobre la cual se aplican las técnicas del Capítulo 2. Se concluye calculando funciones de correlación de espín y analizando el diagrama de fases magnético de la cadena XXZ en presencia de un campo magnético externo h .

Los tres Capítulos siguientes (4 a 6) contienen los aportes originales de esta tesis en relación a cadenas de espín unidimensionales. En el Capítulo 4 se estudia una cadena XXZ de espín $S = 1/2$ en presencia de un campo magnético externo, con **acoplamientos cuasiperiódicos** entre espines [30]. Esto significa que la intensidad de los acoplamientos está modulada por funciones oscilatorias de frecuencias irracionales. El estudio de esta clase de acoplamientos está motivado por el descubrimiento, en la década de los ochenta [31], de materiales reales que exhiben estructura cuasicristalina. Mediante las técnicas de teoría de campos de los Capítulos 2 y 3, analizando las perturbaciones relevantes, se obtienen condiciones para la aparición de una clase nueva de plateaux en las curvas de magnetización. El prototipo de cadena cuasiperiódica, llamada **cadena de Fibonacci** consta de un arreglo formado por dos tipos diferentes de acoplamientos. El espectro Fourier de dicha distribución está formado por frecuencias irracionales. En el régimen en que uno de los dos acoplamientos posee un valor muy pequeño respecto del otro (límite de acoplamiento fuerte), se aplica un procedimiento complementario denominado **decimación** (en espacio real) para obtener condiciones para la aparición de los plateaux. Previo a la discusión de los resultados numéricos se hace un breve comentario sobre las técnicas numéricas empleadas a lo largo de la tesis. Básicamente consisten en técnicas estándar de diagonalización de matrices tridiagonales y técnicas sofisticadas de diagonalización exacta como el método de Lanczos. La investigación numérica, empleando estas técnicas, complementa y verifica la validez de las predicciones del tratamiento mediante bosonización y decimación en una variedad de situaciones.

Como una manera de simular situaciones más realistas, se incluye desorden en los acoplamientos en la cadena unidimensional cuasiperiódica. Este es el tema

del Capítulo 5. En el mismo se estudia el efecto combinado de la cuasiperiodicidad y el desorden en cadenas de espín $S = 1/2$ en un campo externo [32]. Mediante el método de decimación (en espacio real), se obtienen condiciones para la aparición de plateaux en las curvas de magnetización considerando distribuciones de desorden discretas (tomando como ejemplo la distribución binaria). Se observa que el desorden desplaza las posiciones de los plateaux, sin destruir la estructura de los mismos. Las predicciones obtenidas se verifican mediante la diagonalización exacta de cadenas finitas. El caso de distribuciones continuas (considerando la distribución Gaussiana) no es tratable mediante decimación y se recurre al tratamiento numérico, el cual muestra que la estructura de plateaux en este caso desaparece al incrementar la desviación estándar de la distribución. También se estudia el comportamiento de la susceptibilidad magnética de estas cadenas ante un campo externo débil empleando un procedimiento basado en el camino aleatorio y técnicas numéricas.

El Capítulo 6 es el último dedicado a cadenas de espín unidimensionales. En el mismo se estudia el efecto simultáneo de diferentes perturbaciones en cadenas de espín $S = 1/2$ con anisotropía y dimerización en los acoplamientos en presencia de un campo magnético externo [33]. En el lenguaje de bosonización el sistema se mapea a un modelo doble seno Gordon. Mediante grupo de renormalización se estudia la competencia entre ambas perturbaciones capaces de llevar al sistema a una fase sin gap. Complementariamente el método de Lanczos de diagonalización exacta permite verificar la validez del diagrama de fases del sistema obtenido mediante el modelo efectivo.

El Capítulo 7 incluye el aporte original de esta tesis en referencia a escaleras de espín. En particular, se analiza el efecto de impurezas en escaleras de dos patas de espín $S = 1/2$ en el régimen de acoplamiento fuerte entre patas y en el sector de bajas energías (excitaciones de un triplete) [34]. Este régimen permite un tratamiento perturbativo, por lo que se utilizan métodos estándar en materia condensada que básicamente incluyen el cálculo de funciones de Green empleando técnicas de diagramas de Feynman, como así también métodos numéricos. El trabajo se orienta hacia el análisis del efecto de las impurezas sobre el espectro de bajas energías de la escalera, específicamente la aparición de modos de impureza resonantes y localizados (es decir dentro y fuera del espectro del sistema sin impurezas, respectivamente). Para bajas concentraciones de impurezas, la estructura de modos obtenida mediante el tratamiento numérico del problema en la región de excitaciones de un triplete es explicada analíticamente en términos de los aportes de pequeños arreglos de impurezas (clusters). Se utilizan técnicas diagramáticas como LCA (aproximación de bajas concentraciones) o CPA (aproximación del potencial coherente). Esta última permite extrapolar entre los límites de bajas y altas concentraciones de impurezas, sin tener en cuenta el detalle fino de la estructura de modos. Los límites de validez del tratamiento de bajas energías considerando sólo el subespacio de excitaciones de un triplete se obtienen resolviendo el problema de una impureza diagonalizando el espacio completo, a través del método de Lanczos. El análisis de modos llevado a cabo en este trabajo está motivado por el hecho de que estos juegan un papel relevante en la interacción de dichas cadenas con la radiación electromagnética y eventualmente los resultados podrían ser útiles en mediciones de espectroscopía Raman en algunos materiales magnéticos reales, que exhiben estructura cuasi-unidimensional.

La tesis finaliza con un Capítulo de Conclusiones generales y un Apéndice

sobre Teoría de campos conformes. Dicho tema es extenso y sofisticado. No hemos explotado todo el poder de las teorías de campos conformes en esta tesis por lo que se ha incluido en el apéndice sólo aquellos resultados relevantes para nuestro trabajo.

Capítulo 2

Bosonización y Modelos efectivos

2.1. Introducción

La idea básica de la bosonización¹ es que existen ciertas cantidades que pueden ser evaluadas tanto en una teoría fermiónica como en una bosónica obteniéndose en ambas la misma respuesta. La ventaja de esto es que algunas magnitudes pueden ser muy difíciles o imposibles de calcular en una teoría y prácticamente triviales en la otra [10, 35, 36, 37]. La bosonización es una técnica especialmente adecuada en una dimensión espacial aunque han habido intentos de generalizarla a mayores dimensiones.

Desde un punto de vista constructivo los operadores fermiónicos se expresan en términos de operadores bosónicos como una identidad entre operadores en un espacio de Fock. Para demostrar esta identidad no es necesario un hamiltoniano, el cual se introducirá oportunamente cuando se discutan modelos específicos con sus interacciones y funciones de correlación.

2.2. Derivación de la identidad de bosonización

Consideremos por simplicidad una sola especie de fermiones definidos sobre un círculo de longitud L con las siguientes condiciones de contorno sobre las funciones de onda de una partícula $\psi(x)$,

$$\tilde{\psi}(L) = e^{-i\pi\sigma} \tilde{\psi}(0), \quad (2.1)$$

donde $\sigma = 0$ y 1 corresponden a considerar condiciones de contorno periódicas y antiperiódicas, respectivamente, pero en principio es permitido cualquier valor en el rango $0 \leq \sigma < 2$. Las funciones de onda de una partícula libre, normalizadas, estarán dadas entonces por

$$\tilde{\psi}_{n_k} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx},$$

¹En este trabajo discutimos sólo la bosonización abeliana. Para un review de bosonización no abeliana ver [35]

$$k = \frac{2\pi}{L} \left(n_k - \frac{\sigma}{2} \right), \quad (2.2)$$

en la cual $n_k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Luego definamos un campo de Fermi en la representación de segunda cuantificación

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{ikx}, \quad (2.3)$$

donde

$$\{c_k, c_{k'}\} = 0 \quad \text{y} \quad \{c_k, c_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'}, \quad (2.4)$$

a partir de lo cual se obtiene

$$\{\psi(x), \psi(x')\} = 0, \quad \{\psi(x), \psi^\dagger(x')\} = \delta(x - x'); \quad 0 \leq x, x' \leq L. \quad (2.5)$$

El espacio de Fock se construye mediante la acción de los operadores de creación c_k^\dagger y destrucción c_k sobre el estado de vacío $|0\rangle$, el cual satisface

$$\begin{aligned} c_k |0\rangle &= 0 \quad \text{si} \quad k > 0, \\ c_k^\dagger |0\rangle &= 0 \quad \text{si} \quad k \leq 0, \end{aligned} \quad (2.6)$$

es decir todos los estados fermiónicos con k negativo están ocupados mientras que los estados con k positivo se encuentran desocupados.

Dado un operador A que puede escribirse como una cadena de c_k y c_k^\dagger denotamos su orden normal mediante el símbolo $:A:$. Este nuevo operador se obtiene a partir de A trasponiendo los pares necesarios para ubicar a la derecha todos los c_k con $k > 0$ y todos los c_k^\dagger con $k < 0$. Debe tenerse en cuenta que hay que multiplicar por un factor -1 con cada trasposición. Si A es cuadrático en los c_k y c_k^\dagger entonces $:A: = A - \langle 0|A|0\rangle$.

Luego definimos el operador número de fermiones (respecto del vacío) como

$$\hat{N} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} :c_k^\dagger c_k: = \sum_{k>0} c_k^\dagger c_k - \sum_{k\leq 0} c_k c_k^\dagger. \quad (2.7)$$

Claramente $\hat{N}|0\rangle = 0$. Consideremos además todos los estados $|\Psi\rangle$ que satisfacen $\hat{N}|\Psi\rangle = 0$. Cualquiera de estos estados difiere de $|0\rangle$ en un cierto número de excitaciones hueco - partícula, es decir aniquilación de fermiones con k negativo y creación de fermiones con k positivo, respectivamente. Podemos expresar $|\Psi\rangle$ genéricamente en la forma

$$|\Psi\rangle = c_{k_1}^\dagger c_{k_2} c_{k_3}^\dagger c_{k_4} \dots |0\rangle, \quad (2.8)$$

donde los k_i son todos diferentes entre sí y además $k_1, k_3, \dots > 0$ y $k_2, k_4, \dots \leq 0$. La idea central de la bosonización es que estos estados pueden reescribirse en términos de ciertos operadores de creación bosónicos actuando sobre el estado de vacío $|0\rangle$. Para ello definamos los siguientes operadores

$$\begin{aligned}
b^\dagger(q) &= \frac{1}{\sqrt{n_q}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_{k+q}^\dagger c_k, \\
b(q) &= \frac{1}{\sqrt{n_q}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_{k-q}^\dagger c_k,
\end{aligned} \tag{2.9}$$

con $q = 2\pi n_q/L$, donde $n_q = 1, 2, 3, \dots$. Debe notarse que se ha tomado el índice de momento q positivo. Utilizando las Ecs.(2.4) vemos que se cumplen las siguientes relaciones ².

$$\begin{aligned}
[\hat{N}, b_q] &= [\hat{N}, b_q^\dagger] = [b_q, b_{q'}] = 0, \\
[b_q, b_{q'}^\dagger] &= \delta_{qq'}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Es decir, los operadores $b(q)$ y $b^\dagger(q)$ poseen un carácter bosónico. La acción de estos operadores es simple de interpretar. Para cualquier $|\Psi\rangle$ dado por la Ec.(2.8) el estado $b_q^\dagger|\Psi\rangle$ (o $b_q|\Psi\rangle$) consiste en una combinación lineal de excitaciones hueco-partícula relativa a $|\Psi\rangle$ en la que cada término contiene q unidades de momento más (o menos) que $|\Psi\rangle$. También se verifica que $b_q|0\rangle = 0$ para todo q lo cual indica que $|0\rangle$ sirve también como vacío para las excitaciones bosónicas. Para un operador A dado que puede expresarse en términos de una cadena de operadores bosónicos b_q y b_q^\dagger se define su orden normal bosónico : A : ubicando todos los b_q a la derecha de los b_q^\dagger realizando las trasposiciones correspondientes a partir de A .

Cada estado $|\Psi\rangle$ en el espacio de Fock puede obtenerse actuando sobre el estado de vacío con alguna función de combinaciones bilineales de operadores fermiónicos (Ec.(2.8)) que escribiremos en forma compacta $|\Psi\rangle = \bar{f}\{c_k^\dagger c_k\}|0\rangle$. Remarcablemente y mucho menos obvio es que también existe una representación en términos de los b_q^\dagger

$$|\Psi\rangle = \bar{f}\{c_k^\dagger c_k\}|0\rangle = f\{b_q^\dagger\}|0\rangle. \tag{2.11}$$

Una demostración de esta aseveración puede encontrarse en [10]. La completitud de la representación bosónica permite, como veremos, derivar de una forma directa las reglas de bosonización.

Nuestro próximo paso es definir los siguientes operadores de campo bosónicos y observar que algunas funciones bilineales de los campos fermiónicos adquieren una forma simple en términos de los mismos

$$\begin{aligned}
\chi(x) &= \frac{i}{2\sqrt{\pi}} \sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{n_q}} b_q e^{iqx - \alpha q/2} \\
\chi^\dagger(x) &= -\frac{i}{2\sqrt{\pi}} \sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{n_q}} b_q^\dagger e^{-iqx - \alpha q/2} \\
\phi(x) &= \chi(x) + \chi^\dagger(x) - \frac{\sqrt{\pi} x}{L} \hat{N}.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

²La evaluación de la última de las identidades requiere más cuidado en el caso $q = q'$. Una forma de derivar la relación correctamente es multiplicar cada c_k^\dagger y c_k por un factor $\exp(-\alpha|k|/2)$ y tender $\alpha \rightarrow 0$ al final del cálculo.

Pueden verificarse las siguientes relaciones

$$\begin{aligned}
 [\chi(x), \chi(x')] &= 0, \\
 [\chi(x), \chi^\dagger(x')] &= -\frac{1}{4\pi} \ln \left[\frac{2\pi}{L} (\alpha + i(x - x')) \right], \\
 [\phi(x), \phi(x')] &= \frac{1}{4\pi} \ln \left[\frac{\alpha - i(x - x')}{\alpha + i(x - x')} \right].
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

La segunda de las Ecs.(2.13) es válida para $L \gg |x - x'|$ y en la última $L \rightarrow \infty$. Utilizando las Ecs.(2.12) puede expresarse el operador densidad de fermiones $\rho(x) \equiv : \psi^\dagger(x)\psi(x) :$ linealmente en el campo bosónico

$$\begin{aligned}
 \rho(x) &= : \psi^\dagger(x)\psi(x) : \\
 &= \frac{1}{L} \sum_{q>0} \sqrt{n_q} (b_q e^{iqx} + b_q^\dagger e^{-iqx}) + \frac{1}{L} \sum_k : c_k^\dagger c_k : \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\partial \phi}{\partial x}.
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

Para construir los operadores de campo fermiónicos en términos de los bosónicos debemos definir primero los factores de Klein η y η^\dagger tales que satisfacen

$$[\hat{N}, \eta^\dagger] = \eta^\dagger, \quad [\hat{N}, \eta] = -\eta, \quad [\eta, b_q] = [\eta, b_q^\dagger] = 0. \tag{2.15}$$

La acción de η^\dagger sobre un $|\Psi\rangle$ dado es incrementar todos los estados fermiónicos ocupados en una unidad de momento, mientras que la de η es disminuirlos en una unidad de momento. Los factores de Klein son necesarios para asegurar las relaciones de anticonmutación correctas entre los operadores fermiónicos que construiremos. Observemos que

$$[b_q, \psi(x)] = -\frac{e^{-iqx}}{\sqrt{n_q}} \psi(x), \quad [b_q^\dagger, \psi(x)] = -\frac{e^{iqx}}{\sqrt{n_q}} \psi(x). \tag{2.16}$$

Además como b_q aniquila el vacío tendremos

$$b_q \psi(x)|0\rangle = -\frac{e^{-iqx}}{\sqrt{n_q}} \psi(x)|0\rangle. \tag{2.17}$$

Entonces $\psi(x)|0\rangle$ es un autoestado de b_q para cada valor de q , es decir es un estado coherente y por lo tanto tendrá la forma

$$\begin{aligned}
 \psi(x)|0\rangle &= Q(x) \exp \left[-\sum_{q>0} \frac{e^{-iqx}}{\sqrt{n_q}} b_q^\dagger \right] |0\rangle, \\
 &= Q(x) \exp [-2i\sqrt{\pi} \chi^\dagger(x)] |0\rangle,
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

donde $Q(x)$ es un operador que conmuta con todos los b y los b^\dagger . Ya que $\psi(x)$ reduce en 1 el número de fermiones, Q debe ser $Q(x) = F(x)\eta$, donde $F(x)$ es determinado a partir de la condición

$$F(x) = \langle 0 | \eta^\dagger \eta F(x) | 0 \rangle = \frac{e^{-i\pi\sigma x/L}}{\sqrt{L}}. \quad (2.19)$$

Entonces se tiene

$$\begin{aligned} \psi(x) | 0 \rangle &= e^{-i\pi\sigma x/L} \frac{\eta}{\sqrt{L}} e^{-2i\sqrt{\pi}\chi^\dagger(x)} e^{-2i\sqrt{\pi}\chi(x)} | 0 \rangle \\ &= \frac{e^{-i\pi\sigma x/L}}{\sqrt{2\pi\alpha}} \eta e^{-2i\sqrt{\pi}\phi(x)} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Nótese que la primera de las Ecs.(2.20) está ordenada normalmente mientras que la segunda no. Como resultado aparece el factor divergente $1/\sqrt{2\pi\alpha}$ en esta última. Utilizaremos usualmente la segunda forma, recordando que la divergencia se elimina ordenando normalmente. El paso final consiste en demostrar la validez de la identidad anterior no sólo para la acción sobre el vacío sino sobre un estado $|\Psi\rangle$ arbitrario. Utilizando la completitud de la representación bosónica $|\Psi\rangle = f\{b_q^\dagger\}|0\rangle$ y las relaciones de conmutación dadas por las Ecs.(2.16) para evaluar $\psi(x)f\{b_q^\dagger\}$ es sencillo mostrar

$$\psi(x) |\Psi\rangle = \frac{e^{-i\pi\sigma x/L}}{\sqrt{2\pi\alpha}} \eta e^{-2i\sqrt{\pi}\phi(x)} |\Psi\rangle, \quad (2.21)$$

con lo cual arribamos al resultado buscado

$$\psi(x) = \frac{e^{-i\pi\sigma x/L}}{\sqrt{2\pi\alpha}} \eta e^{-2i\sqrt{\pi}\phi(x)}. \quad (2.22)$$

La Ec.(2.22) es una de las fórmulas más importantes de la bosonización y debe considerarse como una identidad entre operadores fermiónicos y bosónicos en el espacio de Fock.

2.3. Hamiltoniano de Tomonaga-Luttinger

En esta sección trataremos la bosonización de un modelo ideal de fermiones en una dimensión espacial $1D$ con las siguientes características

- La relación entre la energía ϵ_k y el momento k (dispersión) es lineal para todos los valores de k .
- $-\infty < k < \infty$.

Ninguna de estas propiedades son válidas en los sistemas de materia condensada que son típicamente no relativistas y tienen un número finito (aunque puede ser muy grande) de estados. Sin embargo, como veremos en la próxima sección, el modelo lineal es útil para estudiar las excitaciones de baja energía de los sistemas de fermiones interactivos unidimensionales y esa es la razón para estudiarlo en

detalle.

Comencemos con el caso más simple, que consiste en un sistema de fermiones no interactivos con una relación de dispersión

$$\epsilon_k = v_F k, \quad (2.23)$$

válida para todos los valores de k y en la cual v_F se denomina **velocidad de Fermi**. El hamiltoniano correspondiente puede escribirse

$$\begin{aligned} H_0 &= v_F \sum_{k=-\infty}^{\infty} k : c_k^\dagger c_k : + \frac{\pi v_F}{L} \hat{N}^2, \\ &= -v_F \int_0^L dx : \psi^\dagger i \partial_x \psi : + \frac{\pi v_F}{L} \hat{N}^2. \end{aligned} \quad (2.24)$$

En la Ec.(2.24) el último término desaparece en el límite termodinámico ($L \rightarrow \infty$) y la identidad entre la primera y la segunda línea se verifica utilizando la Ec.(2.2). Puede verse que $H_0|0\rangle = 0$ y aplicando las Ecs.(2.16) se obtiene

$$[H_0, b_q] = -v_F q b_q, \quad [H_0, b_q^\dagger] = v_F q b_q^\dagger. \quad (2.25)$$

Para cumplir con estas relaciones, en lenguaje bosónico corresponde

$$\begin{aligned} H_0 &= v_F \sum_{q>0} q b_q^\dagger b_q + \frac{\pi v_F}{L} \hat{N}^2, \\ &= v_F \int_0^L dx : (\partial_x \phi)^2 :. \end{aligned} \quad (2.26)$$

La identidad entre la primera y la segunda línea de la Ec.(2.26) se verifica utilizando las Ecs.(2.12).

Incorporemos en este modelo una interacción V que sea cuadrática en la densidad de fermiones $\rho(x) =: \psi^\dagger(x)\psi(x) :$

$$V = \frac{1}{2} \int_0^L dx g_4 \rho^2(x) = \frac{g_4}{2\pi} \sum_{q>0} q b_q^\dagger b_q \quad (2.27)$$

en la cual hemos utilizado la Ec.(2.14) y la nomenclatura g_4 es estándar. Físicamente, un término como la Ec.(2.27) podrá representar una repulsión Coulombiana o una atracción entre fermiones mediada por fonones, por lo tanto no haremos aseveraciones sobre el signo de g_4 . Si sumamos entonces la Ec.(2.27) a la Ec.(2.26) observamos que el único efecto de la perturbación es renormalizar la velocidad de Fermi $v_F \rightarrow v_F + (g_4/2\pi)$.

El próximo paso es considerar un modelo lineal que incorpore fermiones con dos componentes o ramas, derecha (R) e izquierda (L) como se muestra en la Fig. 2.1. La motivación de ello es que los modelos unidimensionales poseen dos direcciones de movimiento y ello se refleja en que el nivel de Fermi (el nivel ocupado de mayor energía en el estado fundamental) consiste de dos puntos en el espacio k . Si consideramos excitaciones de baja energía podemos aproximar la relación de dispersión como dos funciones lineales independientes (ramas) alrededor de ambos puntos. Para tratar el problema de dos ramas generalizaremos

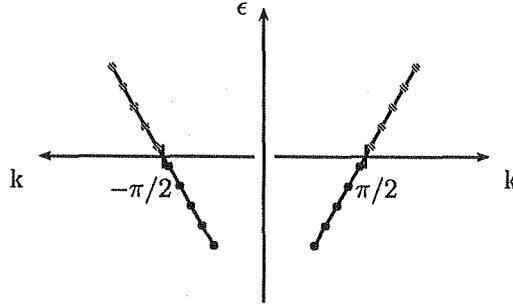


Figura 2.1: Estados de una partícula correspondientes a fermiones pertenecientes a la rama izquierda (L) y derecha (R). En el estado fundamental todos los niveles debajo del nivel de Fermi ($\epsilon_F = 0$) están ocupados (círculos llenos), mientras que por encima del mismo los estados están desocupados (círculos rayados). Nótese que el momento k se incrementa hacia la izquierda y la derecha, para las ramas L y R , respectivamente.

rápidamente las ecuaciones de bosonización obtenidas en la sección anterior, usaremos los valores $\nu = 1$ y $\nu = -1$ para denotar las ramas R y L respectivamente y tomaremos condiciones de contorno periódicas ($\sigma = 0$). Para la rama R consideramos k incrementándose hacia la derecha y para la rama L tomaremos k incrementándose hacia la izquierda de modo que el vacío tenga estados con k negativo ocupados y k positivo desocupados para ambas ramas. Las Ecs.(2.3-2.15) permanecen inalteradas salvo un índice ν extra en todos los campos y en el exponencial de la Ec.(2.3). Los campos $\chi_\nu(x)$ ahora se definen (comparar con Ec.(2.12))

$$\begin{aligned}\chi_\nu(x) &= \frac{i\nu}{2\sqrt{\pi}} \sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{n_q}} b_{\nu,q} e^{i\nu q x - \alpha q/2}, \\ \phi_\nu(x) &= \chi_\nu(x) + \chi_\nu^\dagger(x) - \frac{\sqrt{\pi} x}{L} \hat{N},\end{aligned}\quad (2.28)$$

que satisfacen las relaciones

$$\begin{aligned}[\chi_\nu(x), \chi_{\nu'}(x')] &= 0, \\ [\chi_\nu(x), \chi_{\nu'}^\dagger(x')] &= -\frac{1}{4\pi} \delta_{\nu\nu'} \ln \left[\frac{2\pi}{L} (\alpha - i\nu(x - x')) \right].\end{aligned}\quad (2.29)$$

Definimos dos campos **duales** entre sí

$$\phi(x) = \phi_R(x) + \phi_L(x), \quad \theta(x) = -\phi_R(x) + \phi_L(x),\quad (2.30)$$

tales que $[\phi(x), \phi(x')] = [\theta(x), \theta(x')] = 0$ y

$$[\phi(x), \theta(x')] = \frac{i}{2} \text{sign}(x - x').\quad (2.31)$$

Los operadores densidad fermiónicos $\rho_\nu(x) \equiv \psi_\nu^\dagger(x)\psi_\nu(x)$ están dados por $\rho_\nu(x) = \partial_x \phi_\nu / \sqrt{\pi}$, en lenguaje bosónico. Los operadores densidad y corriente totales se definen

$$\begin{aligned}\rho(x) &\equiv \rho_R(x) + \rho_L(x) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_x \phi(x), \\ j(x) &\equiv v_F(\rho_R(x) - \rho_L(x)) = \frac{v_F}{\sqrt{\pi}} \partial_x \theta(x).\end{aligned}\quad (2.32)$$

Finalmente podemos mostrar que la identidad de bosonización (Ec.(2.22)) se generaliza al caso de dos ramas como

$$\psi_R(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \eta_R e^{-2i\sqrt{\pi}\phi_R(x)}, \quad \psi_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \eta_L e^{2i\sqrt{\pi}\phi_L(x)}. \quad (2.33)$$

Como antes introducimos una relación de dispersión lineal para los fermiones (ahora para cada rama) $\epsilon_{\nu,k} = v_F k$. El hamiltoniano no interactivo en el lenguaje fermiónico es (comparar con Ec.(2.24))

$$\begin{aligned}H_0 &= v_F \sum_{k=-\infty}^{\infty} k [: c_{R,k}^\dagger c_{R,k} + c_{L,k}^\dagger c_{L,k} :] + \frac{\pi v_F}{L} (\hat{N}_R^2 + \hat{N}_L^2) \\ &= -v_F \int_0^L dx [: \psi_R^\dagger(x) i \partial_x \psi_R(x) - \psi_L^\dagger(x) i \partial_x \psi_L(x) :] \\ &\quad + \frac{\pi v_F}{L} (\hat{N}_R^2 + \hat{N}_L^2),\end{aligned}\quad (2.34)$$

mientras que en términos bosónicos

$$\begin{aligned}H_0 &= v_F \sum_{q>0} q (b_{R,q}^\dagger b_{R,q} + b_{L,q}^\dagger b_{L,q}) + \frac{\pi v_F}{L} (\hat{N}_R^2 + \hat{N}_L^2) \\ &= \frac{v_F}{2} \int_0^L dx [(\partial_x \phi)^2 + (\partial_x \theta)^2] \\ &= \frac{v_F}{2} \int_0^L dx [(\partial_x \phi)^2 + \Pi^2],\end{aligned}\quad (2.35)$$

en la cual definimos el campo canónico conjugado de ϕ dado por $\Pi = \partial_x \theta$ que satisface $[\phi(x), \Pi(x')] = i\delta(x - x')$.

Veremos que cuando se consideran las dos ramas las perturbaciones tienen efectos más interesantes que simplemente renormalizar la velocidad de Fermi. Estudiaremos el efecto de interacciones entre cuatro fermiones. Por ahora será más simple trabajar en la representación de Schrödinger en la que los campos no dependen del tiempo. Luego cuando calculemos funciones de correlación utilizaremos la representación de Heisenberg. Consideremos entonces una interacción de la forma

$$V = \frac{1}{2} \int_0^L dx [2g_2 \rho_R(x) \rho_L(x) + g_4 (\rho_R^2(x) + \rho_L^2(x))]. \quad (2.36)$$

Un modelo con esta clase de interacción es un ejemplo sencillo de Modelo de Tomonaga-Luttinger. Del mismo modo cuando las interacciones van más allá del régimen perturbativo, se tiene el caso simple de lo que Haldane [10] ha propuesto con el nombre de Líquido Luttinger. Como se ha mencionado en la Introducción, este modelo efectivo describe las propiedades críticas de baja energía (no perturbativas) de sistemas con grados de libertad muy diferentes. En la próxima Sección aparecerá en el contexto de electrones interactivos en $1D$ y en el Capítulo siguiente como una descripción efectiva de la cadena XXZ .

En el lenguaje fermiónico la interacción dada por la Ec.(2.36) se expresa

$$V = \frac{1}{2L} \sum_{k_1, k_2, k_3 = -\infty}^{\infty} [2g_2 c_{R, k_1+k_3}^\dagger c_{R, k_1} c_{L, k_2+k_3}^\dagger c_{L, k_2} + g_4 (c_{R, k_1+k_3}^\dagger c_{R, k_1} c_{R, k_2-k_3}^\dagger c_{R, k_2} + c_{L, k_1+k_3}^\dagger c_{L, k_1} c_{L, k_2-k_3}^\dagger c_{L, k_2})]. \quad (2.37)$$

El término en g_2 corresponde al scattering de dos fermiones involucrando ambas ramas, mientras que el término en g_4 describe el scattering entre dos fermiones involucrando la misma rama.

La interacción cuártica descrita en términos fermiónicos como se muestra en la Ec.(2.37) parece muy difícil de analizar. Sin embargo veremos que se resuelve fácilmente en términos bosónicos, de hecho ésta es una de las principales motivaciones detrás de la bosonización. La expresión bosónica para el hamiltoniano completo $H = H_0 + V$ está dada por

$$H = \sum_{q>0} q [v_F (b_{R,q}^\dagger b_{R,q} + b_{L,q}^\dagger b_{L,q}) + \frac{g_2}{2\pi} (b_{R,q}^\dagger b_{L,q}^\dagger + b_{R,q} b_{L,q}) + \frac{g_4}{2\pi} (b_{R,q}^\dagger b_{R,q} + b_{L,q}^\dagger b_{L,q})] + \frac{\pi v_F}{L} (\hat{N}_R^2 + \hat{N}_L^2) + \frac{g_2}{L} \hat{N}_R \hat{N}_L + \frac{g_4}{2L} (\hat{N}_R^2 + \hat{N}_L^2). \quad (2.38)$$

El término g_4 renormaliza la velocidad. El término g_2 puede ser diagonalizado mediante una transformación de Bogoliubov. Definamos primero dos parámetros

$$v = \left[(v_F + \frac{g_4}{2\pi} - \frac{g_2}{2\pi})(v_F + \frac{g_4}{2\pi} + \frac{g_2}{2\pi}) \right]^{1/2} \\ K = \left[(v_F + \frac{g_4}{2\pi} - \frac{g_2}{2\pi}) / (v_F + \frac{g_4}{2\pi} + \frac{g_2}{2\pi}) \right]^{1/2}. \quad (2.39)$$

Nótese que $K < 1$ si $g_2 > 0$ (interacción repulsiva) y $K > 1$ si $g_2 < 0$ (interacción atractiva). Consideraremos los casos en que g_2 es tal que $[v_F + g_4/(2\pi) - g_2/(2\pi)] > 0$ de modo que v y K sean reales. La transformación de Bogoliubov toma en este caso la forma

$$\tilde{b}_{R,q} = \frac{b_{R,q} + \gamma b_{L,q}^\dagger}{\sqrt{1-\gamma^2}}, \\ \tilde{b}_{L,q} = \frac{b_{L,q} + \gamma b_{R,q}^\dagger}{\sqrt{1-\gamma^2}}, \\ \gamma = \frac{1-K}{1+K}. \quad (2.40)$$

El hamiltoniano de Tomonaga-Luttinger H (que describe el Líquido de Luttinger) está dado, entonces por

$$\begin{aligned}
 H &= vq \sum_{q>0} (\tilde{b}_{R,q}^\dagger \tilde{b}_{R,q} + \tilde{b}_{L,q}^\dagger \tilde{b}_{L,q}) \\
 &\quad + \frac{\pi v}{2L} \left[\frac{1}{K} (\hat{N}_R + \hat{N}_L)^2 + K (\hat{N}_R - \hat{N}_L)^2 \right] \\
 &= \frac{1}{2} \int_0^L dx \left[vK (\partial_x \theta)^2 + \frac{v}{K} (\partial_x \phi)^2 \right], \tag{2.41}
 \end{aligned}$$

en la cual los campos originales se relacionan con los nuevos mediante

$$\begin{aligned}
 \phi_{R,L} &= \frac{(1+K)\tilde{\phi}_{R,L} - (1-K)\tilde{\phi}_{L,R}}{2\sqrt{K}} \\
 \phi &= \sqrt{K}\tilde{\phi}, \quad \theta = \frac{1}{\sqrt{K}}\tilde{\theta}. \tag{2.42}
 \end{aligned}$$

De la Ec.(2.41) resulta claro el nombre de duales a los campos ϕ y θ . Los pares $\phi(x), \Pi_\phi(y) = \partial_y \theta(y)$ son canónicos conjugados y dan representaciones ϕ o θ equivalentes. De la Ec.(2.41) vemos que la constante de acoplamiento es K en la representación θ y $1/K$ en ϕ . Entonces una teoría con un acoplamiento débil en una representación es "dual" (equivalente) a una teoría con un acoplamiento fuerte en la otra y viceversa. La dualidad anterior conecta entonces los casos repulsivo ($K < 1$) y atractivo ($K > 1$) y la teoría no interactiva ($K = 1$) es auto-dual.

Un punto importante a destacar es que el vacío cambia como consecuencia de la interacción. El nuevo vacío ($\tilde{0}$) es el estado aniquilado por los operadores $\tilde{b}_{\nu,q}$. Ya que las funciones de correlación deben calcularse en el nuevo vacío, dependerán de la interacción a través de los parámetros v y K , en particular veremos que las leyes de potencia de las funciones de correlación son gobernadas por K .

Finalizamos esta sección mostrando la forma de los lagrangianos correspondientes a la teoría libre e interactiva junto con la representación de Heisenberg de los campos. Para la teoría no interactiva ($g_2 = g_4 = 0$), la densidad de Lagrangiano \mathcal{L}_0 describe fermiones libres de Dirac sin masa

$$\mathcal{L}_0 = i\psi_R^\dagger (\partial_t + v_F \partial_x) \psi_R + i\psi_L^\dagger (\partial_t - v_F \partial_x) \psi_L, \tag{2.43}$$

y en el lenguaje bosónico un campo escalar de bosones libres de Klein-Gordon sin masa

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2v_F} (\partial_t \phi)^2 - \frac{v_F}{2} (\partial_x \phi)^2. \tag{2.44}$$

En el caso de la teoría interactiva se tiene

$$\frac{1}{2vK} (\partial_t \phi)^2 - \frac{v}{2K} (\partial_x \phi)^2 = \frac{1}{2v} (\partial_t \tilde{\phi})^2 - \frac{v}{2} (\partial_x \tilde{\phi})^2. \tag{2.45}$$

La representación de Heisenberg de los campos $\tilde{\phi}$ y $\tilde{\theta}$ está dada por

$$\begin{aligned}
\tilde{\phi}(x, t) &= \frac{i}{2\sqrt{\pi}} \sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{n_q}} [\tilde{b}_{R,q} e^{iq(x_R+i\alpha/2)} - \tilde{b}_{R,q}^\dagger e^{-iq(x_R-i\alpha/2)} \\
&\quad - \tilde{b}_{L,q} e^{-iq(x_L-i\alpha/2)} + \tilde{b}_{L,q}^\dagger e^{iq(x_L+i\alpha/2)}] \\
&\quad - \frac{\sqrt{\pi}}{L} \left[\frac{x}{\sqrt{K}} (\hat{N}_R + \hat{N}_L) - \sqrt{K}vt (\hat{N}_R - \hat{N}_L) \right], \\
\tilde{\theta}(x, t) &= \frac{i}{2\sqrt{\pi}} \sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{n_q}} [-\tilde{b}_{R,q} e^{iq(x_R+i\alpha/2)} + \tilde{b}_{R,q}^\dagger e^{-iq(x_R-i\alpha/2)} \\
&\quad - \tilde{b}_{L,q} e^{-iq(x_L-i\alpha/2)} + \tilde{b}_{L,q}^\dagger e^{iq(x_L+i\alpha/2)}] \\
&\quad + \frac{\sqrt{\pi}}{L} \left[\sqrt{K}x (\hat{N}_R - \hat{N}_L) - \frac{vt}{\sqrt{K}} (\hat{N}_R + \hat{N}_L) \right], \quad (2.46)
\end{aligned}$$

donde $x_R = x - vt$, $x_L = x + vt$ y el campo momento conjugado $\tilde{\Pi}$ satisface $\tilde{\Pi} = (1/v) \partial_t \tilde{\phi} = \partial_x \tilde{\theta}$.

2.4. Modelos efectivos de electrones 1D sin espín

En la sección anterior discutimos la bosonización de un modelo unidimensional de fermiones con una relación de dispersión lineal y con un número infinito de modos $L - R$ con momentos $-\infty < k < \infty$. Si bien estas propiedades no se cumplen en los sistemas de materia condensada, la bosonización puede proveer resultados útiles si estamos interesados en estudiar las propiedades a grandes distancias (respecto del espaciamiento en la red por ejemplo) o bajas energías (respecto del nivel de Fermi).

En un sistema real los fermiones son capaces de moverse sobre una red discreta, como en un cristal, o en un continuo tal como los electrones de conducción de un metal. En la aproximación de partícula independiente (ver cualquier referencia estándar, por ej. [1]) los fermiones no interactivos en un continuo tienen una relación de dispersión $\epsilon_k = k^2/2m^*$ siendo m^* la masa efectiva, mientras que los fermiones sobre una red con una amplitud de probabilidad t de pasar de un sitio a otro vecino (hopping) tienen una relación de dispersión de la forma $\epsilon_k = -t \cos(ka)$ donde a es el espaciamiento de la red. En el próximo Capítulo derivaremos una relación de dispersión similar al considerar nuestro tema de interés, las cadenas espines unidimensionales. En ambos casos el estado fundamental tendrá, para $T = 0$, todos sus estados de más baja energía ocupados. Hemos definido el nivel de Fermi como el nivel ocupado de mayor energía en el estado fundamental. La energía y momento correspondientes se designan con ϵ_F y k_F , respectivamente. En una dimensión las relaciones de dispersión anteriores determinan un nivel de Fermi doblemente degenerado en el espacio de los momentos dado por $k = \pm k_F$, además definimos $\epsilon_F = 0$ (ver Fig. 2.2).

A bajas energías los únicos modos que contribuyen son los más cercanos al nivel de Fermi $\pm k_F$ de modo que podemos aproximar la relación de dispersión por una función lineal con una velocidad de Fermi definida por $v_F = (d\epsilon_k/dk)_{k=k_F}$. Consideraremos los modos tipo R con momentos entre $k_F - \Lambda$ y $k_F + \Lambda$ y modos L con momentos entre $-k_F - \Lambda$ y $-k_F + \Lambda$, donde Λ es mucho menor que el rango completo de momentos (que es $2\pi/a$ sobre la red) y a la vez $v_F \Lambda$ es

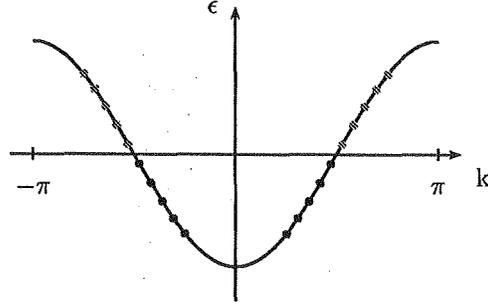


Figura 2.2: Relación de dispersión de fermiones libres en una red unidimensional. Los valores de momento k se encuentran en el intervalo $[-\pi, \pi]$ (en unidades de a). Se observa el nivel de Fermi, doblemente degenerado para $\pm k_F$. En el estado fundamental, todos los niveles debajo del nivel de Fermi $\epsilon_F = 0$ están ocupados (círculos llenos), mientras que por encima del nivel de Fermi los estados están desocupados (círculos rayados).

mucho mayor que las energías de interés. Si incluimos sólo estas regiones de momentos entonces el campo de Fermi en segunda cuantificación (Ec.(2.3)) puede escribirse de la siguiente forma

$$\psi(x, t) = \psi_R(x, t)e^{ik_F x} + \psi_L(x, t)e^{-ik_F x}, \quad (2.47)$$

donde los campos ψ_R y ψ_L varían lentamente sobre regiones espaciales grandes comparadas con la escala de distancia $1/\Lambda$. Los modos (componentes de momento) de estos campos están relacionados con los de ψ mediante

$$\psi_{R,k}(t) = \psi_{k+k_F}(t), \quad \psi_{L,k}(t) = \psi_{-k-k_F}(t), \quad (2.48)$$

en las cuales $-\Lambda \leq k \leq \Lambda$. Sobre estos campos de longitud de onda larga es aplicada la técnica de bosonización de la Sección anterior.

Las definiciones en las Ecs.(2.47-2.48) determinan las formas de los diferentes términos en un modelo definido en la red (microscópico) y cuáles de ellos sobreviven en el límite de longitudes de onda larga. Por ejemplo, la densidad fermiónica está dada por

$$\begin{aligned} \rho &= : \psi^\dagger \psi : = : \psi_R^\dagger \psi_R + \psi_L^\dagger \psi_L + e^{-2ik_F x} \psi_R^\dagger \psi_L + e^{2ik_F x} \psi_L^\dagger \psi_R : \\ &= -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{2\pi\alpha} [\eta_R^\dagger \eta_L e^{i(2\sqrt{\pi}\phi - 2k_F x)} + \eta_L^\dagger \eta_R e^{-i(2\sqrt{\pi}\phi - 2k_F x)}]. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Los términos que contienen $\exp(\pm 2ik_F x)$ generalmente no sobreviven en el modelo continuo. La razón es que como k_F toma un valor fijo en $(-\pi/(2a), \pi/(2a))$ siendo x/a entero, las oscilaciones son rápidas para $x \gg a$ y se promedian a cero al pasar al continuo.

Por otro lado hay situaciones donde aparecen términos de densidad de la forma $\rho \cos(2k_F x)$, por ejemplo en determinados sistemas donde hay acoplamiento entre fermiones y fonones de la red o como veremos en el próximo Capítulo en la cadena XXZ de espín $1/2$. En estos casos vemos que los exponentiales se cancelan para determinados valores de k_F generándose términos de variación lenta que por lo tanto sobreviven en la teoría continua. De hecho obtenemos

$$\rho \cos(2k_F x) =: \psi_R^\dagger \psi_L + \psi_L^\dagger \psi_R : \quad \text{si } e^{4ik_F x} = 1. \quad (2.50)$$

La condición en la Ec.(2.50) se denomina **commensurabilidad** y en este caso dicha condición implica $4k_F a = 2\pi$. Además para un sistema de N fermiones en una red de longitud L se satisface $k_F = N\pi/L$, entonces ambas condiciones implican $N/L = 1/2$. Esta condición se denomina de medio llenado (half-filling). Para el caso no interactivo ($K = 1$) la adición de un término como el lado derecho de la Ec.(2.50) en la densidad de lagrangiano libre Ec.(2.43) genera fermiones de Dirac masivos, esta es la razón por la cual llamamos operador de masa a dicho término. Como analizaremos más adelante la presencia de dicho término genera un gap de energía en el sistema y el mismo ya no se comportará como un líquido de Luttinger.

Antes de concluir esta sección debemos enfatizar una diferencia importante entre los modelos definidos en el continuo y aquellos definidos en la red. En el primer caso un término como $\psi_R^2(x) = \psi_L^2(x) = 0$ debido a las relaciones de anticonmutación. Entonces un término como $\psi_R^{\dagger 2}(x)\psi_L^2(x) = 0$ en el continuo. Sin embargo tal término no se anula necesariamente sobre una red si uno toma los dos factores de ψ_R^\dagger (o ψ_L) como provenientes de dos sitios vecinos separados por una distancia a . De hecho este término es permitido por la conservación del momento sobre una red si $4k_F a = 2\pi$.

2.5. Correlaciones en Líquidos de Luttinger

En esta sección utilizaremos las fórmulas de bosonización para calcular las funciones de correlación de algunos operadores fermiónicos en Líquidos de Luttinger. Comprobaremos las afirmaciones hechas en la Introducción sobre el comportamiento crítico de dicho sistema.

La función de correlación de dos puntos ordenada temporalmente de un operador A se define

$$\langle 0|T A(x, t) A(x', t')|0\rangle = \begin{cases} \sigma A(x, t) A(x', t') & \text{si } t > t', \\ \sigma A(x', t') A(x, t) & \text{si } t < t', \end{cases}$$

donde $|0\rangle$ es el vacío de la teoría donde está definido el operador y $\sigma = 1$ si A es bosónico y -1 si es fermiónico.

La forma asintótica ($L \gg |x - x'|$) de la función de correlación bosónica puede obtenerse a partir de las Ecs.(2.29) teniendo en cuenta que todos los ordenamientos normales se toman respecto del vacío interactivo $|\tilde{0}\rangle$ (simplificamos la notación $|\tilde{0}\rangle \rightarrow |0\rangle$)

$$\langle T \tilde{\phi}(x, t) \tilde{\phi}^\dagger(0, 0) \rangle = \frac{1}{4\pi} \ln \left[\left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 (x^2 - (vt - i\alpha \text{sign } t)^2) \right]. \quad (2.51)$$

Asumiremos $L \rightarrow \infty$ en las funciones de correlación de aquí en adelante. Utilizando las Ecs.(2.33-2.42-2.51) se obtiene la función de correlación de la componente de campo ψ_R (o función de Green $G_R(x, t)$)

$$G_R(x, t) \equiv \langle T \psi_R(x, t) \psi_R^\dagger(0, 0) \rangle \sim \frac{\alpha^{(1-K)^2/2K}}{2\pi(vt - x - i\alpha \text{sign } t)^{(1+K)^2/4K} (vt + x - i\alpha \text{sign } t)^{(1-K)^2/4K}} \quad (2.52)$$

El símbolo \sim en la Ec.(2.52) y en las funciones de correlación siguientes indica que hemos tomado el límite $L \rightarrow \infty$. Además estamos interesados en el cambio en la ley de potencia debido a la interacción por lo que el factor α en el numerador no es problemático y se elimina ordenando normalmente antes de tomar valor medio, como ya hemos indicado. A tiempos iguales, podemos sumar los exponentes en los denominadores y observamos que $G_R(x, t)$ decrece con la distancia x según una ley de potencia $(1 + K^2)/(2K)$.

Haciendo una transformación de Fourier en x y t de $G_R(x, t)$ obtenemos $G_R(k, \epsilon)$, la cual posee dos propiedades importantes (válidas para las funciones de Green de este tipo en general) [12]. Considerada en el plano complejo ϵ , $G_R(k, \epsilon)$ tiene polos simples en las autoenergías del sistema interactivo, correspondientes al momento k ($\epsilon = \epsilon_k$). La otra propiedad es que la densidad de estados de una partícula (DOS o $n(\epsilon)$) se expresa mediante

$$n(\epsilon) \equiv \delta(\epsilon - \epsilon_k) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int dk G_R(k, \epsilon) \quad (2.53)$$

Utilizando las Ecs.(2.52-2.53) puede mostrarse que para bajas energías ϵ se cumple

$$n(\epsilon) = |\epsilon|^{(1-K)^2/(2K)}. \quad (2.54)$$

Se obtiene el mismo resultado para la DOS de la rama L . Alternativamente, podemos integrar respecto de ϵ en la Ec.(2.53), agregando un factor adicional $\exp(ik_F x)$, ya que el momento se mide respecto del k_F . De este modo, se obtiene la función distribución de momentos (o función espectral) $A(k)$. Puede observarse, entonces, que la distribución de momentos es continua en $k = k_F$ con una ley de potencia de la forma

$$A(k) = A(k_F) + \text{cte} \cdot \text{sign}(k - k_F) |k - k_F|^{(1-K)^2/(2K)}. \quad (2.55)$$

Las Ecs.(2.54-2.55) representan los aspectos característicos de un líquido de Luttinger.

Calculemos ahora la función de correlación del operador de masa

$$M \equiv: \psi_R^\dagger \psi_L + \psi_L^\dagger \psi_R := \frac{1}{2\pi\alpha} \left[\eta_R^\dagger \eta_L e^{2i\sqrt{\pi}\phi} + \eta_L^\dagger \eta_R e^{-2i\sqrt{\pi}\phi} \right]. \quad (2.56)$$

Utilizando la técnica anterior obtenemos

$$\langle TM(x, t)M(0, 0) \rangle \sim \frac{\alpha^{2(K-1)}}{4\pi^2[(vt - i\alpha \text{sign } t)^2 - x^2]^K}. \quad (2.57)$$

Por comodidad omitiremos en lo que sigue los factores de Klein al escribir operadores fermiónicos en lenguaje bosónico ³.

Otro operador de importancia es el operador densidad ρ . De las Ecs. (2.49), (2.51) y (2.57) vemos que su función de correlación (a tiempos iguales) está dada por

$$\langle \rho(x, 0) \rho(0, 0) \rangle = -\frac{K}{2\pi^2 x^2} + \text{cte} \cdot \frac{\cos(4k_F x)}{x^{2K}}. \quad (2.58)$$

Finalmente consideremos un operador con la forma general

$$O_{m,n} = \exp(2i\sqrt{\pi}(m\phi + n\theta)). \quad (2.59)$$

Operadores de este tipo puede generarse en el producto de varios ψ y ψ^\dagger . Las Ecs.(2.33) implican que $m \pm n$ deben tomar valores enteros, obteniéndose el siguiente resultado general

$$\langle T O_{m,n}(x,t) O_{m',n'}^\dagger(0,0) \rangle \sim \delta_{m,m'} \delta_{n,n'} \times \quad (2.60)$$

$$\left[\frac{\alpha^{2(m^2 K + n^2/K)}}{(vt - x - i\alpha \text{sign } t)^{(m\sqrt{K} - n/\sqrt{K})^2} (vt + x - i\alpha \text{sign } t)^{(m\sqrt{K} + n/\sqrt{K})^2}} \right].$$

Un concepto central para lo que sigue es el de **dimensión de escala** $d[O]$ de un operador O , el cual se define

$$\langle O(x, 0) O(0, 0) \rangle = |x|^{-2d[O]}, \quad (2.61)$$

considerando su comportamiento asintótico a grandes distancias. De las funciones de correlación anteriores vemos que $d[\psi_R^\dagger] = d[\psi_R] = (1 + K^2)/(4K)$, $d[M] = K$ y en general

$$d[e^{i(\alpha\phi + \beta\theta)}] = \frac{\alpha^2 K}{4\pi} + \frac{\beta^2}{4\pi K}, \quad (2.62)$$

donde hemos reemplazado $m = \alpha/(2\sqrt{\pi})$ y $n = \beta/(2\sqrt{\pi})$ en la Ec.(2.59), ya que es una forma práctica para nuestro uso posterior.

Los aspectos a destacar son que los Líquidos de Luttinger son sistemas críticos a $T = 0$ ya que todas las funciones de correlación decrecen asintóticamente como leyes de potencia (la longitud de correlación es infinita). Todas las distancias son importantes y por lo tanto el sistema es invariante de escala. Esto abre la posibilidad de estudiar las propiedades a grandes distancias (o bajas energías) mediante el método de grupo de renormalización. Los exponentes de las funciones de correlación de los operadores dan las dimensiones de escala de los mismos. El significado de la dimensión de escala será discutido en la próxima Sección. Desde el punto de la clasificación provista por la teoría de campos cuánticos conformes, los líquidos de Luttinger pertenecen a la clase de universalidad con carga central $c = 1$ y el parámetro adicional que es necesario en esta clase está dado por el parámetro de Luttinger K el cual es no universal, en el sentido que depende de la teoría microscópica subyacente. Las funciones de correlaciones decaen como leyes de potencia que dependen de K .

³Para sistemas unidimensionales, los factores de Klein usualmente no causan problemas y pueden omitirse. El único cuidado que debe tenerse es el signo negativo que aparece cuando dos de ellos son intercambiados. En sistemas cuasi-unidimensionales, como en el caso de varias cadenas acopladas, donde existen al menos cuatro factores de Klein diferentes, se necesita más cuidado, aunque no analizaremos este caso en esta tesis.

2.6. Líquidos de Luttinger perturbados

En esta sección se analizará el efecto de las perturbaciones sobre las propiedades de baja energía de los líquidos de Luttinger, utilizando los métodos de grupo de renormalización (RG).

Consideremos una acción definida a una escala de longitud microscópica, que puede ser el espaciamiento en la red a , dicha acción contiene perturbaciones pequeñas, proporcionales a ciertos parámetros adimensionales λ_i tales que para $\lambda_i = 0$ el sistema no posee gap y todas las funciones de correlación decaen como leyes de potencia. El procedimiento de grupo de renormalización RG consiste en los siguientes pasos

(i) Asumiendo que los momentos k están definidos en el intervalo $[-\Lambda, \Lambda]$ (mientras que las energías en $(-\infty, \infty)$), integramos los k pertenecientes a los intervalos $[-\Lambda, -\Lambda/s]$ y $[\Lambda/s, \Lambda]$ y para todas las energías, siendo $s = e^{dl}$, donde dl es un número positivo pequeño.

(ii) Luego, las coordenadas (x, t) , los campos y los parámetros λ_i son re-escalados con potencias apropiadas de s de modo que la forma de la acción permanezca invariante. Por supuesto esto no es posible en general para cualquier acción. Un modelo cuya acción es invariante frente a un cambio de escala se dice que está en un punto fijo. El modelo de Luttinger exhibe esta propiedad. De hecho, posee además, como sabemos, invarianza relativista y nos referimos a ambas propiedades en conjunto como invarianza conforme. Tras el re-escalado, la nueva acción es efectiva a una longitud de escala mayor ae^{dl} y los cambios en los parámetros λ_i son proporcionales a dl (a primer orden). Como vamos a repetir el proceso de integración de los k grandes, introducimos longitudes de escala efectivas $a(l) = ae^l$ y $\lambda_i(l)$, donde $\lambda_i(0)$ es el λ_i en la acción original. Definimos, entonces las funciones β (llamadas funciones beta de grupo de renormalización)

$$\beta(\lambda_i) = \frac{d\lambda_i(l)}{dl}. \quad (2.63)$$

Éstas son funciones de todos los $\lambda_i(l)$ y en general obedecen un sistema de ecuaciones no lineales acopladas. Las mismas representan el cambio de los parámetros con la escala de longitud dada. En principio, las funciones β están dadas mediante una serie infinita de potencias en los λ_i , pero en la práctica podemos obtener sólo los primeros términos (dependiendo del orden perturbativo al que accedamos). El análisis de RG es por lo tanto usualmente limitado a valores de λ_i pequeños.

(iii) Finalmente integramos las ecuaciones de RG (Ecs.(2.63)). Por simplicidad consideremos el caso de una sola λ . A medida que l se incrementa desde 0 puede suceder: $\lambda(l)$ tiende a cero, en cuyo caso recuperamos la teoría no perturbada a grandes distancias; que λ no cambie con l o, por último, que $\lambda(l)$ crezca con l , en este caso, la ecuación de RG pierde validez más allá de la escala de longitud ae^l (para la cual $\lambda(l) \sim 1$), ya que las funciones β generalmente son sólo conocidas hasta órdenes bajos en λ . Más allá de esa escala de longitud se requiere un tipo de acción completamente diferente para describir el sistema. Examinemos con un poco más de detalle los diferentes tipos de ecuaciones

de RG que pueden aparecer a orden bajo. Supongamos que a primer orden la ecuación de RG para un solo término perturbativo está dada por

$$\frac{d\lambda}{dl} = b_1\lambda, \quad (2.64)$$

donde b_1 es constante. Si $b_1 < 0$ $\lambda \rightarrow 0$ a partir de $\lambda(0)$, es decir la perturbación lleva al sistema al punto crítico no perturbado. Dicha perturbación es llamada **irrelevante**. En cambio, si $b_1 > 0$ es llamada **relevante**. Una perturbación de este tipo actuando sobre un modelo sin gap generalmente abre un gap de energía y una longitud de correlación ξ finita (es decir las funciones de correlación tendrán un factor extra $\exp(-x/\xi)$): A pesar de que no sabemos la forma de la acción más allá de esta escala podemos estimar la longitud de correlación ξ de la nueva teoría de la siguiente manera. Consideremos la Ec.(2.64). Siendo $b_1 > 0$, λ crece de acuerdo a

$$\lambda = \lambda_0 e^{b_1 l}, \quad (2.65)$$

siendo λ_0 el valor del coeficiente de la perturbación para algún Λ^{-1} inicial (por ej. el espaciamiento de la red). Cuando $\lambda \sim 1$ esta ecuación deja de ser válida, ya que estamos considerando sólo el primer término de una expansión perturbativa. La distancia e^l a la cual esto ocurre introduce una escala de longitud característica que no puede ser otra que la longitud de correlación ξ de la nueva teoría. Del mismo modo se introduce una escala de energía característica $1/\xi$ (en unidades naturales) que necesariamente identificamos con la apertura de un gap. A partir de la Ec.(2.65) obtenemos directamente las estimaciones

$$\xi \sim \frac{1}{\lambda_0^{1/b_1}}, \quad \Delta\epsilon \sim \lambda_0^{1/b_1}. \quad (2.66)$$

Esta es una de las utilidades de las ecuaciones de RG y haremos uso de ella en los próximos Capítulos.

Finalmente si $b_1 = 0$ la perturbación es llamada **marginal** y debemos ir a segundo orden en λ : $d\lambda/dl = b_2\lambda^2$. Supongamos, por ejemplo, $b_2 > 0$. De la solución de la ecuación anterior puede verse fácilmente que si $\lambda(0) < 0$ entonces $\lambda(l) \rightarrow 0$ (marginalmente irrelevante); pero si $\lambda(0) > 0$ y pequeño $\lambda(l) \rightarrow 1$ (marginalmente relevante) a una escala de distancia que identificamos con una longitud de correlación $\xi \sim \exp[1/(b_2\lambda_0)]$ y un gap en energía $\Delta\epsilon \sim 1/\xi$ que es extremadamente pequeño para valores pequeños de λ_0 .

Existe una relación simple (e importante) entre la dimensión de escala $d[O]$ de un operador O (asumiendo que es hermitico por simplicidad) y el coeficiente b_1 en la ecuación de RG a primer orden (Ec.(2.64)). De la Ec.(2.61) mediante conteo de potencias, vemos que la dimensión de O (no de escala) es $a^{-d[O]}$. Incluyamos ahora una perturbación δH en el hamiltoniano de la forma

$$\delta H = \lambda a^{d[O]-2} v \int dx O, \quad (2.67)$$

en la cual los factores a y v (la velocidad del líquido de Luttinger no perturbado) han sido colocados para asegurar que el parámetro λ sea adimensional. Entonces,

se verifica simplemente que la ecuación de RG a primer orden tiene la forma de la Ec.(2.64), siendo

$$b_1 = 2 - d[O]. \quad (2.68)$$

El coeficiente b_2 en la ecuación de RG a segundo orden puede obtenerse a partir de la función de correlación de tres puntos [38].

Como aplicación de los conceptos de grupo de renormalización consideremos una perturbación de la forma

$$O = O_{m,0} + O_{m,0}^\dagger, \quad (2.69)$$

en la cual $O_{m,n}$ está definido en la Ec.(2.59). La dimensión de escala de O es $d[O] = m^2 K$. En el lenguaje bosónico la acción perturbada tiene la forma conocida como **seno-Gordon**

$$S[\tilde{\phi}] = \int dxdt \left[\frac{1}{2v} (\partial_t \tilde{\phi})^2 - \frac{v}{2} (\partial_x \tilde{\phi})^2 - \frac{v\lambda}{a^2} \cos(2m\sqrt{\pi K} \tilde{\phi}) \right]. \quad (2.70)$$

Introducimos las componentes de Fourier de $\tilde{\phi}$

$$\tilde{\phi}(x, t) = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} e^{i(kx - \epsilon t)} \tilde{\phi}(k, \epsilon) \quad (2.71)$$

y la función partición en la representación de integral funcional

$$Z = \int \mathcal{D}\tilde{\phi} e^{iS}. \quad (2.72)$$

Luego expandimos e^{iS} en serie de potencias de λ y expresamos $\tilde{\phi} = \tilde{\phi}_< + \tilde{\phi}_>$, donde $\tilde{\phi}_<$ contiene momentos k sólo en $[-\Lambda/s, \Lambda/s]$ mientras que $\tilde{\phi}_>$ sólo en los intervalos $[-\Lambda, -\Lambda/s]$ y $[\Lambda/s, \Lambda]$. Siguiendo los pasos del procedimiento de RG primero tenemos que integrar funcionalmente sobre $\tilde{\phi}_>$ y luego re-exponenciar la serie infinita para obtener la nueva acción en términos de $\tilde{\phi}_<$. A primer orden en λ se obtiene el siguiente resultado

$$S[\tilde{\phi}_<] = \int dxdt \left[\frac{1}{2v} (\partial_t \tilde{\phi}_<)^2 - \frac{v}{2} (\partial_x \tilde{\phi}_<)^2 - \frac{v\lambda s^{-m^2 K}}{a^2} \cos(2m\sqrt{\pi K} \tilde{\phi}_<) \right], \quad (2.73)$$

donde las integrales de momento k son entre $-\Lambda/s$ y Λ/s . Para restituir el rango de k a $[-\Lambda, \Lambda]$ y recobrar la forma de la acción de la Ec.(2.70) definimos

$$\begin{aligned} k' &= sk, \\ x' &= s^{-1}x, \\ \epsilon' &= s\epsilon, \\ t' &= s^{-1}t, \\ \tilde{\phi}'(k', \epsilon') &= \tilde{\phi}_<(k, \epsilon), \\ \lambda' &= s^{2-m^2 K} \lambda, \end{aligned} \quad (2.74)$$

y escribimos la acción en las variables primadas. Ya que $s = e^{dl}$ vemos que $d\lambda = \lambda' - \lambda$ satisface la Ec.(2.64) donde $b_1 = 2 - m^2 K$, lo cual ilustra la validez de la Ec.(2.68). Nótese que las funciones β de los parámetros v y K permanecen nulas a este orden. Sin embargo puede mostrarse que dan contribuciones a $O(\lambda^2)$ [39].

La perturbación del término de masa (Ec.(2.56)) corresponde al caso especial de la Ec.(2.69) con $m = 1$. Vemos, entonces, que es marginal para $K = 2$ y relevante para $K < 2$. En este último caso $\lambda(l)$ crece hasta alcanzar la escala de longitud $\xi = a/\lambda(0)^{1/(2-K)}$ donde la escala de longitud del coeficiente del término coseno es del orden de la unidad. Este es el punto adecuado para detener el flujo RG de λ . El gap estará dado por $\Delta\epsilon = v/\xi$. Entonces, el efecto de la renormalización es producir una teoría seno-Gordon con una densidad de lagrangiano

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2v}(\partial_t \tilde{\phi})^2 - \frac{v}{2}(\partial_x \tilde{\phi})^2 - \text{const} \cdot \frac{(\Delta\epsilon)^2}{v} \cos(2\sqrt{\pi K} \tilde{\phi}), \quad (2.75)$$

donde x y t denotan las coordenadas originales. Esta teoría tiene solución exacta y su espectro es conocido [40]. Posee excitaciones (tipo solitón) bosónicas y fermiónicas y un gap $\Delta\epsilon$ consistente con nuestra estimación perturbativa a partir de las ecuaciones RG (2.66).

Finalmente consideremos en forma breve otras perturbaciones relevantes y marginales que pueden aparecer en un sistema que a nivel microscópico involucra fermiones en una red. Si el modelo posee una invarianza de fase global $\psi_{R,L} \rightarrow \exp(i\zeta)\psi_{R,L}$, siendo ζ constante, entonces, los operadores $O_{m,n}$ (Ec.(2.59)) necesariamente tienen $n = 0$ y su dimensión de escala es $d[O] = m^2 K$. Ya que $m \geq 1$ sólo hay un número finito posible de operadores relevantes, dependiendo de K . Para $K > 2$ no hay operadores relevantes y para $1/2 < K < 2$ el único término relevante es el operador de masa.

En relación a los posibles operadores marginales observamos que el operador $O_{2,0} = \psi_R^{\dagger 2} \psi_L^2$ es marginal para $K = 1/2$. Este es un caso particularmente importante ya que un líquido de Luttinger con $K = 1/2$ tiene una simetría global $SU(2)$ por lo cual aparece en la descripción efectiva de un gran número de sistemas sin gap que involucran espín. De hecho, el valor b_2 de la ecuación de RG a segundo orden es conocido exactamente para el operador $O_{2,0}$ a partir de la teoría de campos conformes ([41]), siendo $b_2 = 4\pi/\sqrt{3}$. El coeficiente (λ) de $O_{2,0}$ en el hamiltoniano depende de los parámetros microscópicos del modelo y en general es diferente de cero. Se puede mostrar que, para un signo de λ , el sistema no exhibe gap pero posee correcciones logarítmicas en algunas magnitudes físicas (por ejemplo en la susceptibilidad magnética de un sistema de espines a baja temperatura aparece un término $1/\ln T$). Para el otro signo de λ el sistema se dimeriza espontáneamente produciendo una longitud de correlación finita y un gap de energía, esto da lugar a una susceptibilidad que decrece exponencialmente a bajas temperaturas.

Capítulo 3

Cadena de espín 1/2

3.1. Interacción entre espines

El ferromagnetismo se obtiene en los sólidos por el alineamiento colectivo de los momentos magnéticos de los electrones. El antiferromagnetismo y las ondas de espín describen ordenamientos oscilatorios de los momentos magnéticos. La interacción dipolar clásica entre los momentos de los electrones (que es del orden de $10^{-5} eV$) es extremadamente débil para explicar dichos ordenamientos. El mecanismo de acoplamiento que da lugar a estas interacciones magnéticas es de origen cuántico. Como motivación consideraremos brevemente el caso de dos electrones espacialmente localizados y veremos que la magnitud de la interacción y el carácter ferro/antiferromagnético depende de la naturaleza de los estados no interactivos. Estos son los mecanismos básicos que en los sistemas de electrones interactivos dan lugar a una variedad de estructuras magnéticas. Consideremos el caso de una molécula de H_2 (este es el caso más simple que puede exhibir antiferromagnetismo). En la misma suponemos los dos núcleos fijos y los dos electrones descritos por sus posiciones \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 y la componente z de sus espines S_{1z} y S_{2z} . Si $\psi_a(\mathbf{x})$ y $\psi_b(\mathbf{x})$ son la parte espacial de las autofunciones de energía de estados de un electrón, con energías ϵ_a y ϵ_b , entonces

$$\psi_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_a(\mathbf{x}_1) \psi_b(\mathbf{x}_2) \quad (3.1)$$

es autofunción del sistema sin interacción (entre los electrones) con energía $\epsilon_a + \epsilon_b$. Si agregamos un término de repulsión Coulombiano $V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)$ que es independiente del espín del electrón (puesto que estamos analizando la situación desde un punto de vista no relativista) entonces la parte espacial de las autofunciones de los estados de dos electrones será

$$\begin{aligned} \psi_{S(A)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{ab}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) + (-) \psi_{ba}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)] \\ \epsilon_{S(A)} &= \epsilon_a + \epsilon_b + I - (+)J, \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde los subíndices $S(A)$ indican simetría (antisimetría) respecto del intercambio de coordenadas e I y J se denominan **integrales de intercambio**

$$I = \int d^3\mathbf{x}_1 d^3\mathbf{x}_2 \psi_{ab}^* V \psi_{ab}, \quad J = - \int d^3\mathbf{x}_1 d^3\mathbf{x}_2 \psi_{ab}^* V \psi_{ba}. \quad (3.3)$$

Ahora debemos considerar el espín y el principio de exclusión de Pauli. Tenemos que multiplicar las funciones de onda espaciales (Ecs.(3.2)) por espinores χ que describen los posibles estados de espín de los electrones. Como sabemos, para dos partículas de espín $\frac{1}{2}$ los estados simétricos tienen espín total $\mathbf{S} = 1$ (estados triplete: $\chi^{(1)}$) y el antisimétrico $\mathbf{S} = 0$ (estado singlete: $\chi^{(0)}$). Entonces las funciones de onda totalmente antisimétricas tendrán la forma

$$\Psi_S = \psi_S \chi^{(0)}, \quad \Psi_A = \psi_A \chi^{(1)}. \quad (3.4)$$

Nótese que S (A) aquí también denota simetría (antisimetría) espacial. Como los autoestados de energía son autoestados del espín total \mathbf{S} , y teniendo en cuenta que los autovalores de $\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}$ son $s(s+1) = 0$ y 2 , podemos escribir la energía en términos del espín de la siguiente forma

$$\epsilon = \epsilon_S + (\epsilon_A - \epsilon_S) \frac{s(s+1)}{2}, \quad (3.5)$$

en la que se puede verificar $\epsilon = \epsilon_S$ para $s = 0$ y $\epsilon = \epsilon_A$ para $s = 1$. La Ec.(3.5) sugiere un hamiltoniano efectivo

$$\begin{aligned} H &= \epsilon_S + (\epsilon_A - \epsilon_S) \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}}{2} \\ &= \epsilon_a + \epsilon_b + I + \frac{1}{2}J + 2J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \end{aligned} \quad (3.6)$$

donde hemos usado las definiciones previas y

$$\begin{aligned} \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} &= (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) \\ &= \frac{3}{2} + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \end{aligned} \quad (3.7)$$

De la Ec.(3.6) observamos que el desdoblamiento de los niveles de energía es descrito por un término.

$$\Delta H = 2J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (3.8)$$

Nótese que el coeficiente J depende del solapamiento de las funciones de onda de partícula independiente (Ec.(3.3)) y por lo tanto puede ser positivo (antiferromagnético) o negativo (ferromagnético). La interacción descrita por la Ec.(3.8) es usualmente varios órdenes de magnitud más intensa que la interacción clásica entre dipolos magnéticos.

3.2. Modelo XXZ

Consideremos una red unidimensional con espines $\frac{1}{2}$ en cada sitio, acoplados a través de interacciones de intercambio como en la Ec.(3.8). Tal sistema se denomina **modelo de Heisenberg** y su hamiltoniano tiene la forma

$$H_{Heis} = J \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}, \quad (3.9)$$

donde $J > 0$ (caso antiferromagnético) y los espines \mathbf{S}_j satisfacen el álgebra de $SU(2)$ en cada sitio

$$[S_j^a, S_l^b] = i\delta_{jl}\epsilon^{abc}S_j^c, \quad \mathbf{S}_l^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{3}{4}. \quad (3.10)$$

Existen materiales que pueden modelarse mediante el hamiltoniano de Heisenberg, por ejemplo los compuestos inorgánicos $KCuF_3$ y Sr_2CuO_3 . Para un review actualizado sobre materiales que exhiben magnetismo cuántico en bajas dimensiones y técnicas experimentales consultar [42].

El modelo de Heisenberg puede generalizarse para describir una gran variedad de materiales que exhiben estructuras magnéticas. La primera generalización que consideraremos es el agregado de una anisotropía del acoplamiento efectivo en el eje z . Este sistema se denomina **Modelo XXZ** y tiene la forma

$$H_{XXZ} = \sum_j J \left[\frac{1}{2}(S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+) + \Delta S_j^z S_{j+1}^z \right] \quad (3.11)$$

en la cual hemos utilizado los operadores $S_j^\pm = S_j^x \pm iS_j^y$. El modelo XXZ tiene una invarianza $U(1)$ correspondiente a rotaciones alrededor del eje z para Δ genérico. Este modelo se ha utilizado para ajustar curvas de magnetización experimentales de diversos materiales, por ejemplo $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$ [16]. Otras generalizaciones involucran la dependencia del parámetro J con el sitio j e incluso alguna clase de desorden (ver Capítulo 1).

3.3. Transformación de Jordan-Wigner

Es posible expresar los operadores de espín $\frac{1}{2}$ en términos de fermiones sin espín ψ_n mediante la llamada transformación de Jordan-Wigner. Este es un punto crucial del desarrollo, ya que nos permitirá aplicar todas las técnicas del Capítulo anterior y nos evitará la dificultad de tratar directamente con las variables de espín. Definamos operadores fermiónicos ψ_j en cada sitio j ,

$$\begin{aligned} \{\psi_j, \psi_l\} &= \{\psi_j^\dagger, \psi_l^\dagger\} = 0, \\ \{\psi_j, \psi_l^\dagger\} &= \delta_{j,l}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Estos operadores, sin estructura interna, representan fermiones sin espín. Si consideramos un solo sitio, entonces podemos hacer el siguiente mapeo ($n_j \equiv \psi_j^\dagger \psi_j$)

$$\begin{aligned} S_j^z &= n_j - \frac{1}{2}, \\ S_j^+ &= \psi_j^\dagger, \\ S_j^- &= \psi_j. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Este mapeo reproduce las relaciones usuales de conmutación de los operadores de espín $\frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}
 [S_j^+, S_j^z] &= -S_j^+, \\
 [S_j^-, S_j^z] &= S_j^-, \\
 [S_j^+, S_j^-] &= 2S_j^z,
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

junto con la ecuación $\sum_a (S_j^a)^2 = \frac{3}{4}$. Sin embargo, no es posible aplicar directamente el mapeo dado por las Ecs.(3.13) a diferentes sitios porque mientras que los operadores de espín pertenecientes a diferentes sitios conmutan los operadores fermiónicos anticonmutan. Este problema puede solucionarse en forma ingeniosa agregando un operador de cadena no local que corrige la estadística de modo que en lugar de las Ecs.(3.13) escribimos

$$\begin{aligned}
 S_j^z &= n_j - \frac{1}{2}, \\
 S_j^+ &= \psi_j^\dagger e^{i\pi\phi_j}, \\
 S_j^- &= e^{-i\pi\phi_j} \psi_j,
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

donde

$$\phi_j \equiv \sum_{l=1}^{j-1} n_l. \tag{3.16}$$

Obviamente, para un mismo sitio el operador de cadena no modifica las Ecs.(3.13). Para diferentes sitios las mismas se generalizan a

$$\begin{aligned}
 [S_j^+, S_l^z] &= -\delta_{j,l} S_j^+, \\
 [S_j^-, S_l^z] &= \delta_{j,l} S_j^-, \\
 [S_j^+, S_l^-] &= \psi_j^\dagger e^{i\pi\phi_j} e^{-i\pi\phi_l} \psi_l - \psi_l e^{-i\pi\phi_l} e^{i\pi\phi_j} \psi_j^\dagger \\
 &= \pm \left(\psi_j^\dagger \psi_l + \psi_l \psi_j^\dagger \right) e^{i\pi\phi_j} e^{-i\pi\phi_l} = 0, \quad (j \neq l),
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

donde el signo $+$ ($-$) es válido para $l > j$ ($l < j$). Como se observa, los operadores de cadena introducen apropiadamente los cambios de signo necesarios que transforman los conmutadores en anticonmutadores, transmutando la estadística bosónica en fermiónica. De este modo los operadores ψ_l, ψ_j^\dagger exhiben carácter fermiónico, tanto localmente como en diferentes sitios.

Ahora utilizaremos la transformación de Jordan-Wigner (Ecs.(3.15)) para reescribir el hamiltoniano XXZ (Ec(3.11)) en términos de fermiones sin espín. Comenzamos por la parte XY

$$\begin{aligned}
 S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y &\equiv \frac{1}{2} (S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\psi_j^\dagger e^{i\pi\phi_j} e^{-i\pi\phi_{j+1}} \psi_{j+1} + \psi_j e^{-i\pi\phi_j} e^{i\pi\phi_{j+1}} \psi_{j+1}^\dagger \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\psi_j^\dagger e^{-i\pi n_j} \psi_{j+1} + \psi_j e^{i\pi n_j} \psi_{j+1}^\dagger \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\psi_j^\dagger \psi_{j+1} + \text{h.c.} \right),
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

donde hemos utilizado el hecho que sobre cualquier estado, por el principio de exclusión de Pauli $\psi_j e^{i\pi n_j} = -\psi_j$ y $\psi_j^\dagger e^{i\pi n_j} = \psi_j^\dagger$. Entonces, el hamiltoniano de la cadena XXZ tiene la forma

$$H_{XXZ} = \sum_j J \left[\frac{1}{2} (\psi_j^\dagger \psi_{j+1} + \text{h.c.}) + \Delta \left(\psi_j^\dagger \psi_j - \frac{1}{2} \right) \left(\psi_{j+1}^\dagger \psi_{j+1} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (3.19)$$

Existen varios puntos a destacar en cuanto a la interpretación física del modelo XXZ expresado en términos de fermiones sin espín (Ec.(3.19)). Primero la interpretación de los operadores ψ_j^\dagger . A partir de las Ecs.(3.15) obtenemos

$$\psi_j^\dagger = S_j^+ e^{-i\pi\phi_j}. \quad (3.20)$$

donde $\phi_j = \sum_{l < j} (S_l^z + 1/2)$. El operador de cadena $e^{-i\pi\phi_j}$ es unitario y su acción es rotar la configuración de espines un ángulo π , alrededor del eje z . Para visualizarlo consideremos su acción sobre $|\frac{1}{2} \dots \frac{1}{2}\rangle_x$, siendo el mismo un autoestado de S^x sobre todos los sitios

$$e^{-i\pi\phi_j} |\frac{1}{2} \dots \frac{1}{2}\rangle_x = (-i)^{j-1} |-\frac{1}{2} \dots -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \dots \frac{1}{2}\rangle_x, \quad (3.21)$$

donde el último espín invertido está en la posición $j - 1$. Este resultado se obtiene directamente trabajando en la base en que S_l^z es diagonal y utilizando la identidad

$$e^{\pm i\pi(\frac{1}{2} + S_l^z)} = -2S_l^z. \quad (3.22)$$

Por lo tanto las excitaciones generadas por ψ_j^\dagger no consisten de espines aislados. Además de la inversión local generada S_j^+ el operador de cadena no local $e^{i\pi\phi_j}$ genera paredes de dominio. En la terminología del magnetismo cuántico se dice que ψ_j^\dagger crea un kink (cuántico). De modo que en este lenguaje, no es el espín mismo, sino el kink cuántico (en este caso expresado mediante el fermión de Jordan-Wigner) la excitación elemental y las excitaciones de espín son expresadas en términos de los mismos.

En segundo lugar, analicemos la interpretación de los diferentes términos en el modelo XXZ . La parte XY (término de espín flip o de hopping) es un término cinético en el lenguaje fermiónico y da lugar al movimiento de fermiones. El término $S^z S^z$ genera interacciones entre cuatro fermiones en sitios adyacentes. Entonces, para $\Delta \neq 0$ los fermiones presentan auto-interacción y el modelo es no trivial. En este caso existe una competición entre el término cinético, y la energía potencial. Cualitativamente podríamos esperar que para Δ grande la energía potencial sea dominante y los fermiones estén localizados sobre sitios no adyacentes. En cambio, para Δ pequeño esperaríamos que el término cinético sea dominante y tener fermiones deslocalizados. En las próximas Secciones analizaremos el modelo XXZ desde un punto de vista más cuantitativo.

Consideremos finalmente las condiciones de contorno. Supongamos una cadena finita de longitud $L = Na$ siendo N es el número total de sitios y a el

espaciado de la red (en lo sucesivo haremos $a = 1$, es decir L se mide en unidades de a). Si en esta cadena asumimos condiciones de contorno periódicas, es decir $S_{N+1} = S_1$, la parte XY del último término será

$$\frac{1}{2} (S_N^+ S_1^- + S_N^- S_1^+) = \frac{e^{i\pi(N+1)}}{2} (\psi_N^\dagger \psi_1 + \text{h.c.}), \quad (3.23)$$

Como vemos aparece una fase en la parte XY del último término, de modo que en términos de ψ_l^\dagger, ψ_l ya no se tiene una estructura cíclica simple. Dicho término, sin embargo puede descartarse en el caso de una cadena de longitud grande.

3.4. Modelo XY. Fermiones libres

Observando el hamiltoniano XXZ (Ec.(3.19)) resulta evidentemente más sencillo el caso $\Delta = 0$, denominado **modelo XY**. El mismo representa un sistema de fermiones sin espín no interactivos. Mediante la transformación de Fourier

$$\psi_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \psi_k e^{ikj}, \quad (3.24)$$

donde los valores de momento $k = (2m\pi)/(N)$ con m entero $\in (-N/2, N/2]$, el hamiltoniano XY toma su forma diagonal,

$$H_{XY} = -J \sum_k \cos(k) \psi_k^\dagger \psi_k. \quad (3.25)$$

La Ec.(3.25) representa una sola banda de fermiones no interactivos con una relación de dispersión $\epsilon_k = -J \cos(k)$. El estado fundamental se obtiene ocupando todos los estados con energía negativa $\epsilon_k \leq 0$, el nivel de Fermi es el mayor de todos ellos $\epsilon_{k_F} = 0$ de modo que $k_F = \frac{\pi}{2}$. Esta condición se denomina de medio llenado (half filling).

El valor M medio (normalizado) de la magnetización se define mediante

$$\langle M \rangle \equiv \left\langle \frac{2}{N} \sum_{j=1}^N S_j^z \right\rangle, \quad (3.26)$$

donde el valor medio se toma respecto del estado fundamental. Aplicando la transformación de Jordan-Wigner (Ecs.(3.15)), y la transformación de Fourier (Ec.(3.24)) la Ec.(3.26) puede expresarse como

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= \frac{2}{N} \sum_{j=1}^N \left(\langle \psi_j^\dagger \psi_j \rangle - \frac{1}{2} \right) \\ &= -1 + \frac{2}{N} \sum_{k=-\pi}^{\pi} \langle \psi_k^\dagger \psi_k \rangle \\ &= -1 + \frac{2}{N} \frac{2k_F}{\Delta k} = -1 + \frac{2k_F}{\pi} \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.27)$$

en lo cual, hemos utilizado el hecho que $\langle \psi_k^\dagger \psi_k \rangle$ mide el número de estados ocupados en el estado fundamental, que es $2k_F$ dividido el espaciamento entre modos $\Delta k = \frac{2\pi}{N}$ y en la última línea que $k_F = \frac{\pi}{2}$. De este modo obtenemos $\langle M \rangle = 0$. Como se observa de las mismas Ecs.(3.27), en este caso, el número de fermiones en el estado fundamental $\langle \psi_k^\dagger \psi_k \rangle = N/2$. Tal condición indica que el número de fermiones es la mitad de los espines originales (de ahí el nombre condición de medio llenado). Dicha condición no se cumplirá cuando se incluya un campo magnético externo h , en dicho caso la magnetización $\langle M \rangle$ ya no es cero y no es válida la condición de medio llenado. Más adelante analizaremos este caso.

3.5. Modelo de Luttinger de la cadena XXZ

Tras considerar el modelo de fermiones libres ($\Delta = 0$), en esta sección analizamos las propiedades de baja energía de la cadena XXZ . Estudiemos primero el caso $\Delta \ll 1$.

3.5.1. Caso perturbativo. $\Delta \ll 1$

De aquí en adelante fijaremos nuestra escala de energía tal que $J = 1$. De este modo Δ es el único parámetro microscópico (adimensional) en la teoría. El análisis del modelo XXZ en esta región ($\Delta \ll 1$) se lleva a cabo como en la Sección 2.4. Esto implica tener en cuenta sólo los modos alrededor de $\pm k_F$, restringiendo la suma en la Ec.(3.19) a $|k \pm k_F| \leq \Lambda$. Bajo estas condiciones, el campo fermiónico puede entonces expresarse del siguiente modo (Ec.(2.47)).

$$\psi(x, t) = \psi_R(x, t)e^{ik_F x} + \psi_L(x, t)e^{-ik_F x}, \quad (3.28)$$

Utilizando la Ec.(3.28) obtenemos el límite continuo de la parte XY , correspondiente a fermiones no interactivos, (ver Ec.(2.34))

$$H_{XY} = -v_F \int dx : \psi_R^\dagger(x) i \partial_x \psi_R(x) - \psi_L^\dagger(x) i \partial_x \psi_L(x) : . \quad (3.29)$$

El término de interacción en Δ en la (Ec.(3.11)) puede ser escrito, utilizando las Ecs.(3.15) y (3.28) como

$$V_\Delta = \Delta \int dx \left[4\rho_R \rho_L + (\rho_R^2 + \rho_L^2) - ((\psi_L^\dagger \psi_R)^2 + \text{h.c.}) \right]. \quad (3.30)$$

donde $\rho_{R,L}(x) \equiv \psi_{R,L}^\dagger(x) \psi_{R,L}(x) = \partial_x \phi_{R,L} / \sqrt{\pi}$. Los términos $(\psi_L^\dagger \psi_R)^2 + \text{h.c.}$ son irrelevantes para $\Delta < 1$ y posponemos su análisis para la Sección 3.6. Los tres primeros términos de la Ec.(3.30) se identifican con el V de interacción en el modelo de Luttinger (Ec.(2.36)), haciendo $g_2 = 4\Delta$ y $g_4 = 2\Delta$. Como sabemos del Capítulo anterior, en el lenguaje bosónico, V_Δ puede ser reabsorbido en la parte no interactiva XY obteniéndose (ver Ec.(2.41))

$$H_{XXZ} = \frac{1}{2} \int dx \left[vK (\partial_x \theta)^2 + \frac{v}{K} (\partial_x \phi)^2 \right], \quad (3.31)$$

en la cual, a partir de las Ecs.(2.39) se obtiene

$$K = 1 - \frac{2\Delta}{\pi}, \quad v = 1 + \frac{2\Delta}{\pi}; \quad \Delta \ll 1. \quad (3.32)$$

Recalcamos que este resultado, obtenido mediante técnica de bosonización, sólo es válido en el régimen perturbativo, es decir, considerando $\Delta \ll 1$, ya que allí es válida la aproximación lineal dada por la Ec.(3.28). En este caso nos referimos a la representación de la cadena XXZ como modelo de Tomonaga-Luttinger.

3.5.2. Caso $|\Delta| < 1$

El modelo microscópico XXZ (Ec.(3.11)) es uno de los pocos que posee una solución exacta, obtenida mediante el ansatz de Bethe, la cual es accesible para todo Δ , pero la solución es tan compleja que las variables dinámicas, tales como las funciones de correlación, no pueden ser calculadas explícitamente. Sin embargo, para $|\Delta| < 1$ se muestra que sus excitaciones de baja energía corresponden a una teoría crítica representada por un líquido de Luttinger donde los parámetros de la teoría bosónica (K, v) se mapean en términos de los parámetros de la teoría microscópica (Δ) a través de

$$K(\Delta) = \frac{\pi}{2(\pi - \theta)}, \quad v(\Delta) = \frac{\pi \sin \theta}{2\theta}, \quad (3.33)$$

donde $\cos \theta = \Delta$. Notar que las Ecs.(3.33) coinciden con las Ecs.(3.32) para ($\Delta \ll 1$). De las Ecs.(3.33) observamos que $K \rightarrow 1/2$ para $\Delta \rightarrow 1$.

El procedimiento para llevar a cabo este mapeo involucra técnicas de campos conformes y soluciones de cadenas finitas obtenidas mediante el Ansatz de Bethe. El método está descrito en [36] y en el apéndice haremos un comentario sobre el mismo. Debe recalarse que las fórmulas dadas por las Ecs.(3.33) no pueden obtenerse mediante el procedimiento de bosonización que empleamos para el caso $\Delta \ll 1$.

3.6. Gaps en el modelo XXZ

Como sabemos, las interacciones pueden cambiar las dimensiones de escala de los operadores y es posible que algunos términos perturbativos se transformen en relevantes para interacciones suficientemente intensas. Un ejemplo de ello son los términos del tipo $\delta H_{gap} \equiv \left((\psi_L^\dagger \psi_R)^2 + \text{h.c.} \right)$ en la Ec. (3.30), que allí han sido descartados porque son irrelevantes para $\Delta < 1$. Utilizando las identidades de bosonización (Ecs.(2.33)), se obtiene la versión bosonizada de estos términos

$$\begin{aligned} \delta H_{gap} &= \frac{\Delta}{4\pi^2} \int dx \left[e^{-4i\sqrt{\pi}\phi(x)} + \text{H.c.} \right] \\ &\sim \frac{\Delta}{2\pi^2} \int dx \cos [4\sqrt{\pi}\phi(x)]. \end{aligned} \quad (3.34)$$

La $d[\delta H_{gap}] = 4K$ (Ec.(2.62)) y se hace relevante ($d < 2$) para $K < 1/2$. De acuerdo a la Ec.(3.33) cuando Δ crece de $0 \rightarrow 1$, K decrece de $1 \rightarrow 1/2$. De modo que se hace relevante para $\Delta > 1$ y este término es el responsable de generar un gap de masa en el espectro, de modo que el sistema ya no se comporta como un líquido de Luttinger.

3.7. Cadena XXZ en un campo magnético externo

El hamiltoniano XXZ (Ec.(3.11)) en presencia de un campo magnético externo h ¹ está dado por

$$H_{XXZ}(\Delta, h) = \sum_j \left[\frac{1}{2}(S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+) + \Delta S_j^z S_{j+1}^z \right] - h \sum_j S_j^z. \quad (3.35)$$

Primero analicemos el caso especial $\Delta = 0$ (modelo XY) y correspondiente a fermiones no interactivos. Aplicando la transformación de Jordan-Wigner (Ecs.(3.15)) a la Ec.(3.35) y luego transformando Fourier (Ec.(3.24)) obtenemos

$$H_{XY}(h) = - \sum_k \cos(k) \psi_k^\dagger \psi_k - h \sum_k \psi_k^\dagger \psi_k. \quad (3.36)$$

Como puede observarse por comparación con la Ec.(3.25) el campo externo sólo agrega un potencial químico $-h$. El estado fundamental se obtiene ocupando todos los estados de partícula independiente que tienen energías $\epsilon_k \equiv -\cos(k) \leq h$ (de modo que en este caso $\epsilon_{k_F} = h$; $h \leq 1$). Siguiendo el mismo razonamiento que el dado por las Ecs.(3.27) obtenemos para la magnetización $\langle M \rangle$ la siguiente relación

$$k_F = \frac{\pi}{2}(1 + \langle M(h) \rangle), \quad \text{para } 0 \leq \langle M(h) \rangle \leq 1, \quad (3.37)$$

donde enfatizamos la dependencia $\langle M(h) \rangle$ es decir, ya no estamos en la condición de medio llenado.

Cuando $h > 1$ no existen más estados disponibles ya que esto implicaría $\cos(k) > 1$; de modo que el número de fermiones, y por lo tanto la magnetización se mantiene constante en su máximo valor $\langle M(h) \rangle = 1$ y $k_F = \pi$ a pesar del crecimiento del campo. La curva de magnetización ($\langle M \rangle$ en función de h) exhibe entonces plateaux en estas regiones y el sistema ya no se comporta como un líquido de Luttinger. Esta fase se denomina **ferromagnética**. Nótese que en este caso particular, al tener una solución exacta (fermiones libres), podemos obtener precisamente el punto de la transición ($\Delta = 1, h = 1$) de la fase sin gap (líquido de Luttinger) a la fase con gap (ferromagnética).

Ahora describiremos el caso XXZ ($\Delta \neq 0$). En presencia de un campo externo h , el modelo XXZ , aún es soluble mediante el ansatz de Bethe. La Fig. 3.1 muestra el diagrama de fases magnéticas para la cadena XXZ para los dos parámetros Δ y h del hamiltoniano microscópico (Ec.(3.35)). Existen dos fases con gap, la ferromagnética a campos suficientemente intensos (banda superior izquierda en la Figura) y otra fase llamada **antiferromagnética**, para $\Delta > 1$, a campos pequeños (inferior derecha). Entre ambas está la fase sin gap (líquido de Luttinger) descrita mediante la Ec.(3.31). Los parámetros $K(\Delta, h)$ y $v(\Delta, h)$ en dicha ecuación para Δ y h arbitrarios se obtienen numéricamente resolviendo un conjunto de ecuaciones integro-diferenciales desarrolladas en el marco del ansatz de Bethe. El procedimiento se describe en detalle en [66].

Para todo nuestro análisis posterior es útil contar con expresiones de las variables de espín directamente en términos bosónicos. Las mismas están dadas por

¹Consideramos $h \geq 0$ sin pérdida de generalidad.

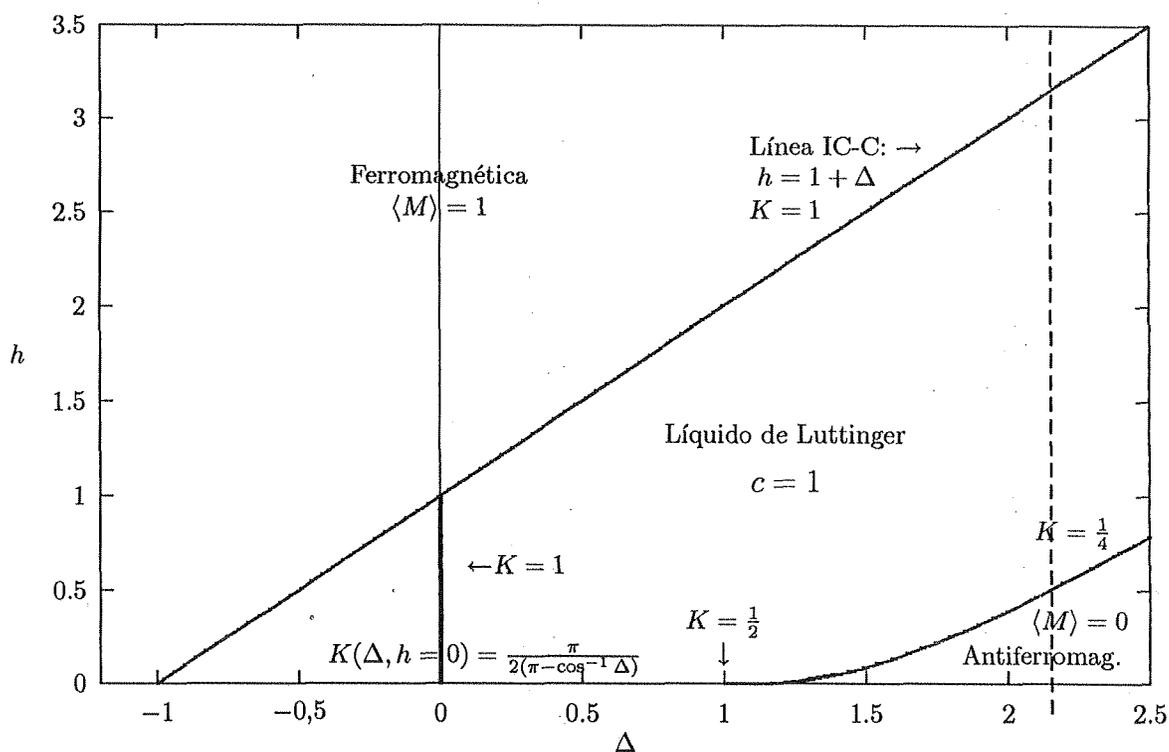


Figura 3.1: Diagrama de fases magnéticas de la cadena XXZ . Se observan dos fases con gap, la fase ferromagnética a campos suficientemente intensos (banda superior izquierda) y la fase antiferromagnética, para $\Delta > 1$, a campos pequeños (inferior derecha). Entre ambas está la fase sin gap (líquido de Luttinger) descrita mediante la Ec.(3.31).

$$\begin{aligned}
S_x^z &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \partial_x \phi + a : \cos(2k_F x + 2\sqrt{\pi} \phi) : + \frac{\langle M \rangle}{2}, \\
S_x^\pm &= (-1)^x : e^{\pm i\sqrt{\pi}\phi} [b \cos(2k_F x + 2\sqrt{\pi}\phi) + c] :, \quad (3.38)
\end{aligned}$$

en las que los símbolos $::$ denotan ordenamiento normal respecto del estado fundamental con magnetización $\langle M \rangle$. El momento de Fermi k_F está relacionado con la magnetización de la cadena mediante la Ec.(3.37).

En el caso particular $|\Delta| \ll 1$, $h = 0$ las Ecs.(3.38) ($k_F = \pi/2$, $\langle M \rangle = 0$) pueden derivarse utilizando la transformación de Jordan-Wigner (Ecs.(3.15)), las identidades de bosonización (Ecs.(2.33)), la linealización alrededor de $\pm k_F$ (Ec.(3.28)) y teniendo en cuenta las relaciones entre los ϕ y $\tilde{\phi}$ (Ecs.(2.42)). En este caso se tiene $K = 1 - \frac{2\Delta}{\pi}$. (Ec.(3.32)).

Para casos más generales de Δ y h (dentro de la fase sin gap) las Ecs.(3.38) no son derivables a partir de las identidades de bosonización (Ecs.(2.33)). Sin embargo la forma funcional de las Ecs.(3.38) debe ser la misma ya que describe un líquido de Luttinger. Las constantes no universales a , b y c se deben calcular numéricamente en general junto con el parámetro de Luttinger K para Δ y h dados [66]. Para $|\Delta| < 1$ y $h = 0$, K se obtiene analíticamente (Ec.(3.33)) (ver Apéndice). Para nuestros propósitos las constantes a , b y c no son importantes, ya que principalmente estudiaremos perturbaciones del líquido de Luttinger de la cadena XXZ desde el punto de vista de grupo de renormalización. Por lo tanto necesitamos conocer las dimensiones de los operadores, que no dependen de dichas constantes.

Analicemos ahora la transición de la fase gapless a la fase ferromagnética. Debido al origen del cambio de fase esta transición (en el caso general $\Delta \neq 0$) se dice que es del tipo **incommensurada-commensurada** (IC-C). Para el caso $\Delta = 0$ esta transición se obtiene para el campo crítico $h = 1$ como hemos analizado previamente a partir de la solución exacta (fermiones libres). En el caso $\Delta \neq 0$ el operador responsable de abrir un gap proviene del término del campo magnético (al menos para $\Delta > -1$). Utilizando las fórmulas de bosonización de los operadores de espín (Ecs.(3.38)) sobre el mismo obtenemos un término de la forma.

$$\delta H_{IC-C}(\Delta, h) \propto h \int dx \exp(2ik_F x + 2i\sqrt{\pi} \phi). \quad (3.39)$$

Este operador se hace commensurado (se elimina la parte oscilatoria en x) cuando $k_F = \pi$ es decir $\langle M \rangle = 1$. La dimensión de escala del operador es K y por lo tanto es relevante para $K < 2$. Por supuesto de este análisis no podemos predecir la línea crítica $h_{IC-C}(\Delta)$, salvo el punto ($\Delta = 0$, $h_{IC-C} = 1$). Se demuestra [43, 44] que dicha transición ocurre sobre la línea $h_{IC-C} = 1 + \Delta$. Además que para $\langle M \rangle \rightarrow 1$ la magnetización se comporta como $\langle M \rangle \sim h^2 - h_{IC-C}^2$ y sobre dicha línea de transición el parámetro de Luttinger toma el valor universal $K = 1$.

La otra línea de transición comienza en $\Delta = 1$ y $h = 0$, es decir en el punto con simetría $SU(2)$. El parámetro de Luttinger toma el valor $K = 1/2$ en este punto y entonces debe incluirse en el análisis de la dinámica de bajas energías el último término de la Ec.(3.30), $\delta H_{gap} \equiv \left((\psi_L^\dagger \psi_R)^2 + \text{h.c.} \right)$ que analizamos

en la Sección 3.6. Como allí hemos visto, en lenguaje bosónico este término es de la forma $\cos(4\sqrt{\pi}\phi)$, cuya dimensión es $4K$. Este operador es marginal en este punto y se hace relevante para $K < 1/2$ ($\Delta > 1$) y es responsable del gap en esta región. Nótese que en esta fase $\langle M \rangle = 0$, es decir $k_F = \pi/2$ (de ahí el nombre fase antiferromagnética). Esto puede entenderse por el hecho de que esta perturbación proviene del término en Δ que al ser tipo $S^z S^z$ tendrá un factor oscilatorio $\exp(4ik_F x)$ (Ecs.(3.38)), y por lo tanto es conmensurado para $k_F = \pi/2$. También recalquemos que el término del campo es inconmensurado en esta región.

3.8. Curva de magnetización de la cadena XXZ

En presencia de un campo h el valor medio de vacío de la magnetización $\langle M \rangle$ se define como

$$\langle M \rangle = \frac{\partial \langle E \rangle_{GS}}{\partial h} \quad (3.40)$$

siendo $\langle E \rangle_{GS}$ el valor medio de la energía en el estado fundamental. En las regiones de gap $\langle E \rangle_{GS}$ no cambia con h y esto se manifiesta con un plateau (meseta) en la curva de magnetización ($\langle M \rangle$ en función de h). Siguiendo una línea vertical en el diagrama de fases 3.1 (h creciente) para algún $\Delta > 1$, por ejemplo la línea a rayas, resulta clara la relación entre los gaps y los plateaux en la curva de magnetización. En la Fig. 3.2 se observa una curva de magnetización representativa de dicha región. En la misma se exhiben dos plateaux a $\langle M \rangle = 0$

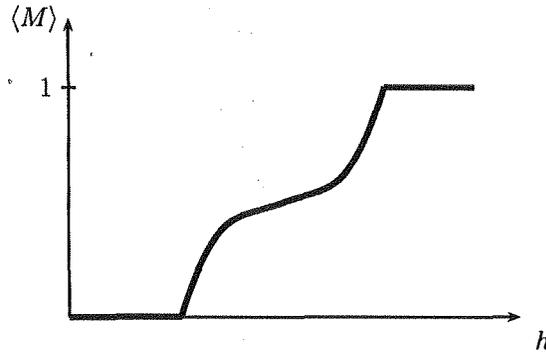


Figura 3.2: Plateaux a magnetización nula, correspondiente al gap antiferromagnético, y a magnetización de saturación, correspondiente al gap ferromagnético del diagrama de fases de la Fig. 3.1.

y 1 debido a las fases con gap antiferro y ferromagnética, respectivamente. En el medio la curva exhibe un crecimiento continuo con el campo, que refleja la ausencia de gap de la fase de líquido de Luttinger. El análisis de la estructura de plateaux en este tipo de curvas debido a distintas perturbaciones sobre el modelo de líquido de Luttinger de la cadena XXZ forma gran parte de los aportes originales de esta tesis, como veremos en los próximos Capítulos.

bosonización es útil en este caso es porque esta fase no local que aparecería en términos de fermiones de Jordan-Wigner en $G^{+-}(x, t)$ se transforma en un término muy sencillo. Aplicando directamente las identidades de bosonización de los operadores de espín (Ecs.(3.38)) en este caso particular obtenemos

$$G^{+-}(x, t) = (-1)^x \frac{1}{2\pi\alpha} [e^{-ik_F x} e^{2i\sqrt{\pi}\phi_R(x,t)} + e^{ik_F x} e^{-2i\sqrt{\pi}\phi_L(x,t)}] \times \\ \left[e^{ik_F x - i\sqrt{\pi}(\phi(x) - \phi(0))} + e^{-ik_F x + i\sqrt{\pi}(\phi(x) - \phi(0))} \right] \times \\ [e^{-2i\sqrt{\pi}\phi_R(0,0)} + e^{2i\sqrt{\pi}\phi_L(0,0)}], \quad (3.47)$$

donde $\phi = \phi_R + \phi_L$. Luego, utilizando la identidad $e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2}$ para escribir cada uno de los 8 términos de la Ec. (3.47) como productos de factores exponenciales, y aplicando entonces las Ecs.(2.59) y (2.60) (haciendo $K = 1$) para calcular funciones de correlación genéricas obtenemos que 4 de dichos términos se anulan, mientras que la suma de los restantes da

$$G^{+-}(x, t) \sim \frac{1}{(x_R x_L)^{1/4}} \left[(-1)^x + d \left(\frac{1}{x_R^2} + \frac{1}{x_L^2} \right) \right], \quad (3.48)$$

donde el factor d no puede ser calculado por ambigüedades en el ordenamiento normal. Sólo se pueden obtener los exponentes.

Entonces, incluso para la teoría no interactiva (o modelo XY) la bosonización es de gran utilidad para calcular funciones de correlación. Las dos funciones de correlación evaluadas son las únicas no nulas en el modelo. Las otras correlaciones, tales como G^{z+} o G^{++} son cero debido a la simetría $U(1)$ en el modelo de espines o por conservación de la carga en el modelo fermiónico.

Finalmente para calcular las funciones de correlación para el caso general de la cadena XXZ para Δ y h arbitrarios (en la fase sin gap) utilizaremos las Ecs.(3.38). El procedimiento es equivalente al caso anterior, aunque algebraicamente más tedioso. Se obtiene el resultado (a tiempos iguales)

$$G^{zz}(x_1, x_2) \approx \frac{(M)^2}{2} + \frac{K}{4\pi^2} \frac{1}{|\Delta x|^2} + \frac{a^2}{2} \frac{\cos(2k_F(\Delta x))}{|\Delta x|^{2K}} \\ G^{+-}(x_1, x_2) \approx -\frac{b^2}{2} \frac{\cos((2k_F - \pi)(\Delta x))}{|\Delta x|^{2K + \frac{1}{2K}}} + (-1)^{(\Delta x)} \frac{c^2}{|\Delta x|^{\frac{1}{2K}}}, \quad (3.49)$$

donde $\Delta x = x_1 - x_2$. Observamos que se obtienen dos contribuciones, una no oscilatoria y otra oscilatoria. Para $\Delta > 0$ (la región antiferromagnética), $K < 1$ y entonces vemos que en la correlación $G^{zz}(x_1, x_2)$ la contribución oscilatoria es dominante, señalando la tendencia esperada, hacia un ordenamiento antiferromagnético. Para $\Delta < 0$ (la región ferromagnética) $K > 1$ y es el término no oscilatorio, en cambio, el que domina a largas distancias, como es de prever en esta región. Sin embargo, en una dimensión no hay un verdadero ordenamiento, el sistema es crítico ya que las correlaciones decaen lentamente con una ley de potencia en función del parámetro de Luttinger K que es no-universal y depende de los detalles microscópicos, es decir de la anisotropía Δ , y del campo magnético h . Esta dependencia se calcula numéricamente, como hemos mencionado.

Finalmente en las fases masivas aparecen longitudes de correlación ξ finitas. Por ejemplo, cuando se alcanza el punto isotrópico ($\Delta = 1$) Puede mostrarse [45, 46] que las correlaciones entre espines decaen exponencialmente a grandes distancias.

Capítulo 4

Cadenas de espín cuasiperiódicas

4.1. Introducción

Los cuasicristales son materiales que poseen una estructura que no es periódica ni tampoco aleatoria, sino que exhiben modulaciones espaciales con uno o más períodos irracionales. Los primeros materiales con estructura cuasiperiódica fueron descubiertos en 1984 [47], provocando una revolución en el campo de la cristalografía. Estos materiales poseen muchas propiedades interesantes. Un ejemplo de esto es su inusual incremento de la conductividad con el aumento de la temperatura o el desorden. Debido a su particular estructura, se han utilizado para modelar cadenas de ADN.

En este trabajo nos concentraremos en el estudio de las propiedades de materiales magnéticos que exhiben una estructura cuasiperiódica unidimensional, sin concentrarnos en ningún material en particular, ni en los mecanismos que dan lugar a la cuasiperiodicidad. Para esto, remitimos al lector a la bibliografía [48]. Una variedad de métodos teóricos, que van desde análisis de grupo de renormalización (RG) [49] hasta soluciones exactas de cadenas cuasiperiódicas de espines clásicos (Ising) y XY [50][51] han revelado una compleja estructura de ordenamientos magnéticos asociados con la cuasiperiodicidad de estos sistemas. El mecanismo de intercambio de espín no metálico implícito en estos estudios ha sido evidenciado en los cuasicristales de tierras raras (RE) ZnMg-RE recientemente sintetizados (ver por ejemplo [52]) cuyos elementos RE poseen momentos magnéticos $4f$ bien localizados.

4.2. Hamiltoniano cuasiperiódico efectivo

Motivados por estas investigaciones, en este Capítulo consideraremos cadenas XXZ de espín $1/2$ cuasiperiódicas en un campo magnético en las que analizaremos las condiciones para la aparición de plateaux en las curvas de magnetización [30]. Este tema ha recibido una atención sistemática en estos últimos años tanto desde un punto de vista teórico como experimental (ver por ej. [53]).

En este trabajo estamos específicamente interesados en el estudio del sistema antiferromagnético descrito por el siguiente hamiltoniano

$$H_{qp} = J \sum_n (1 + \epsilon_n) (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + \Delta S_n^z S_{n+1}^z) - h \sum_n S_n^z, \quad (4.1)$$

donde S^x, S^y, S^z denotan los operadores de espín $1/2$ que aparecen en el hamiltoniano XXZ estándar ($\epsilon_n = 0$) en un campo magnético externo h aplicado en la dirección de la anisotropía ($|\Delta| < 1$). La modulación en los acoplamientos es introducida a través de los parámetros ϵ_n definidos como

$$\epsilon_n = \sum_\nu \delta_\nu \cos(2\pi\omega_\nu n), \quad (4.2)$$

en la cual la cuasiperiodicidad proviene de tomar un conjunto de frecuencias irracionales ω_ν con amplitudes δ_ν .

El interés de las Ecs.(4.1) y (4.2) proviene de las aplicaciones de los hamiltonianos $1D$ en la descripción de heteroestructuras cuasiperiódicas creadas artificialmente [54], cristales de puntos cuánticos (quantum dots) [55] y multicapas magnéticas [56]. Recientemente se han investigado estructuras cuasiperiódicas involucrando tanto los acoplamientos [57] como el campo magnético [58][59][60]. En las mismas se ha utilizado bosonización abeliana junto con grupo de renormalización (RG) y técnicas numéricas. En este trabajo nos concentraremos en el efecto combinado de una modulación de intercambio cuasiperiódico bajo la acción de un campo magnético externo uniforme h .

De particular importancia son las frecuencias racionales de la Ec.(4.2), no sólo como una forma de aproximación al límite cuasiperiódico, sino porque también permiten la verificación numérica de situaciones novedosas (para un trabajo relacionado ver Refs.[61][62]). Como veremos, a pesar de que los plateaux de valores racionales predichos en el caso presente se incluyen dentro de la clasificación provista por teorema generalizado de Lieb-Schultz-Mattis [63], el tratamiento mediante bosonización del hamiltoniano dado por la Ec.(4.1) da un escenario alternativo, no provisto por estudios previos [64][65][66]. Esto se ve reflejado en la aparición de plateaux de magnetización asociados con cada una de las frecuencias presentes en la Ec.(4.1). Para acentuar el interés potencial de nuestros resultados, mostramos cómo un modelo simple de dos frecuencias exhibe una curva de magnetización con dos plateaux amplios a $1/4$ y $3/4$ del valor de saturación, una situación que es altamente reminiscente de los plateaux observados en las curvas experimentales de magnetización del compuesto NH_4CuCl_3 [68] [69].

Siguiendo el procedimiento estándar de bosonización (ver Capítulos anteriores), el límite continuo del hamiltoniano XXZ en presencia de un campo magnético externo h está dado por el hamiltoniano de Tomonaga-Luttinger (Ec.(2.41))

$$H = \frac{1}{2} \int dx \left(vK(\partial_x \theta)^2 + \frac{v}{K}(\partial_x \phi)^2 \right), \quad (4.3)$$

donde $\partial_x \theta = \Pi$. Los campos ϕ y su dual θ están dados por la suma y la diferencia de los campos ϕ_L y ϕ_R , respectivamente (Ec.(2.30)). La constante $K = K(\Delta, \langle M \rangle)$ se obtiene a partir de la solución mediante bosonización en

el caso $K(\Delta \ll 1, 0)$. Para casos más generales dentro de la fase de líquido de Luttinger se utiliza el ansatz de Bethe aplicado a la cadena XXZ combinado con resultados de campos conformes sobre sistemas de tamaño finito como se ha mencionado en el Capítulo anterior y se muestra en el Apéndice. En particular para el caso con simetría $SU(2)$, $K(1, 0) = 1/2$ y para el caso XX , $K(0, 0) = 1$. En términos de los campos ϕ y su dual θ , los operadores de espín están dados por las Ecs.(3.38), que reproducimos aquí por comodidad

$$\begin{aligned} S_x^z &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \partial_x \phi + a : \cos(2k_F x + 2\sqrt{\pi}\phi) : + \frac{\langle M \rangle}{2}, \\ S_x^\pm &= (-1)^x : e^{\pm i\sqrt{\pi}\theta} [b \cos(2k_F x + 2\sqrt{\pi}\phi) + c] : . \end{aligned} \quad (4.4)$$

En las mismas, recordemos que los símbolos $::$ denotan ordenamiento normal respecto del estado fundamental con magnetización $\langle M \rangle$. Además, el momento de Fermi k_F está relacionado con la magnetización de la cadena mediante $k_F = (1 + \langle M \rangle) \frac{\pi}{2}$ (Ec.(3.37)). Tanto la anisotropía XXZ como el campo magnético externo modifican las dimensiones de escala de los campos físicos a través de K y las propiedades de conmensurabilidad de los operadores de espín como puede verse de las Ecs.(4.4). Las constantes no universales a , b y c pueden ser evaluadas numéricamente. Todo esto ha sido analizado en detalle en el Capítulo anterior.

4.3. Caso de una frecuencia racional

Por simplicidad, primero consideremos el efecto de una sola frecuencia, es decir, la Ec.(4.2) posee un solo término de la forma $\epsilon_n = \delta \cos(2\pi\omega n)$. Utilizando las Ecs.(4.4) y seleccionando sólo los términos relevantes de la parte de interacción en $H_r = H^0 + H_r^{int}$ (Ec.(4.1)) se obtiene

$$\begin{aligned} H_r^{int} &= \sum_x \cos(2\pi\omega x) [\lambda_1 (\partial_x \theta)^2 + \lambda_2 (\partial_x \phi)^2 + \lambda_3 \cos(2k_F x + 2\sqrt{\pi}\phi) \\ &\quad + \lambda_4 \sin(2k_F x + 2\sqrt{\pi}\phi)], \end{aligned} \quad (4.5)$$

donde $\lambda_i \propto \delta$, $i = 1, \dots, 4$.

Como en análisis previos [63] [65] [66] puede obtenerse una condición necesaria para la aparición de un plateau analizando la conmensurabilidad de los operadores relevantes. En este caso necesitamos considerar solamente los operadores $\exp \pm (2i\sqrt{\pi}\phi)$ de dimensión de escala $d = K$ (ver Ec.(2.62)). De este modo, las perturbaciones $\lambda_{3,4}$ en la Ec.(4.5) no son eliminadas como oscilaciones rápidas cuando las oscilaciones provenientes del término en ω y en el k_F se anulan entre sí (conmensuran), es decir

$$2k_F \pm 2\omega\pi = 2n\pi, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (4.6)$$

Como $k_F = \pi/2(1 + \langle M \rangle)$ (Ec.(3.37)) obtenemos que se debe satisfacer

$$\langle M \rangle = \pm(2\omega - 1), \quad \omega \leq 1, \quad (4.7)$$

para que esté presente un plateau. Cuando se cumple esta condición se abre un gap de espín en el espectro de excitaciones ya que el operador en cuestión es

relevante al menos para $0 < \Delta < 1$. En la región $-1 < \Delta < 0$ aparece una curva crítica que puede ser determinada mediante el ansatz de Bethe [65] [66]. Adicionalmente, aplicando la Ec.(2.66) vemos que la amplitud del plateau Δh_{pl} escala como

$$\Delta h_{pl} = \delta^{1/(2-K)}. \quad (4.8)$$

Nótese que las perturbaciones $\lambda_{1,2}$ no juegan ningún rol aquí ya que son inconmensuradas cuando se satisface la Ec.(4.7).

4.3.1. Verificación Numérica

Antes de presentar nuestros resultados comentaremos brevemente las técnicas numéricas empleadas en este Capítulo y los subsiguientes. La diagonalización numérica en el caso XX , ($\Delta = 0$) se lleva a cabo reescribiendo el hamiltoniano dado por la Ec.(4.1) en términos de fermiones sin espín a través de la transformación de Jordan-Wigner (Ecs.(3.15) y (3.16))

$$\begin{aligned} H_r(\Delta = 0) &= J \sum_n (1 + \epsilon_n)(\psi_n^\dagger \psi_{n+1} + \psi_{n+1}^\dagger \psi_n) \\ &\quad - h \sum_n \left(\psi_n^\dagger \psi_n - \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Es decir, $H_r(\Delta = 0)$ es una forma cuadrática que en la base $\{\psi_n, \psi_n^\dagger\}$ está representada por una matriz tridiagonal de dimensión N (número de sitios)¹. La misma puede llevarse a una base $\{\psi_k, \psi_k^\dagger\}$ en la que sea diagonal. De modo que

$$\begin{aligned} \langle M(\Delta = 0) \rangle &= \frac{2}{N} \sum_n \langle S_n^z \rangle \\ &= \frac{2}{N} \sum_n \left\langle \psi_n^\dagger \psi_n - \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{2}{N} \sum_k \left\langle \psi_k^\dagger \psi_k - \frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.10)$$

La curva de magnetización se construye de la siguiente manera. Para una magnetización dada $\langle M \rangle$, es decir ocupando los primeros $(N + \langle M \rangle)/2$ niveles de energía, se busca el campo h que lleva el sistema de $\langle M \rangle$ a $\langle M \rangle + 2$, esto es $h = (E_{M+2} - E_M)/2$. Después se grafica $\langle M(h) \rangle$ en vez de $h(\langle M \rangle)$.

Existen algoritmos estándar [67] que permiten diagonalizar este tipo de matrices. En el caso XX las matrices son hermíticas de $N \times N$ y prácticamente tridiagonales (salvo los elementos $(1, N)$ y $(N, 1)$ para condiciones periódicas).

Los algoritmos utilizados para diagonalizar una matriz hermítica H de $N \times N$ combinan el **Método de potencias** y el **Método de Jacobi**.

La idea básica del primero es la siguiente. Se parte de un vector arbitrario $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^N$ el cual puede expandirse en la base (ortogonal) $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N\}$ de H . Se muestra fácilmente que para $l \rightarrow \infty$ el vector $H^l \mathbf{v}$ es colineal con el autovector \mathbf{u}_M de autovalor más alto λ_M (suponiendo que el coeficiente c_M de la expansión de \mathbf{v} en la base $\{\mathbf{u}_i\}$ es no nulo).

¹Si se consideran condiciones de contorno periódicas, además son distintos de cero los elementos de matriz $(1, N)$ y $(N, 1)$

El método de Jacobi se aplica sólo a matrices simétricas y consiste en realizar una serie de rotaciones elementales sobre H de tal forma de ir haciendo nulos sucesivamente los elementos fuera de la diagonal. Puede elegirse una matriz de rotación tal que en cada rotación se anulan sólo un par de elementos $(i, j); (j, i)$ $i \neq j$. Por supuesto al anular este par los mismos pueden volver a ser no nulos cuando se anulan otros pares, pero se demuestra que conforme se van haciendo las rotaciones los elementos no diagonales van siendo cada vez menores. En la práctica el método de Jacobi no es útil para N grande debido a su lenta velocidad de convergencia.

En la Fig. 4.1 se muestra el diagrama de fases magnéticas a través de un

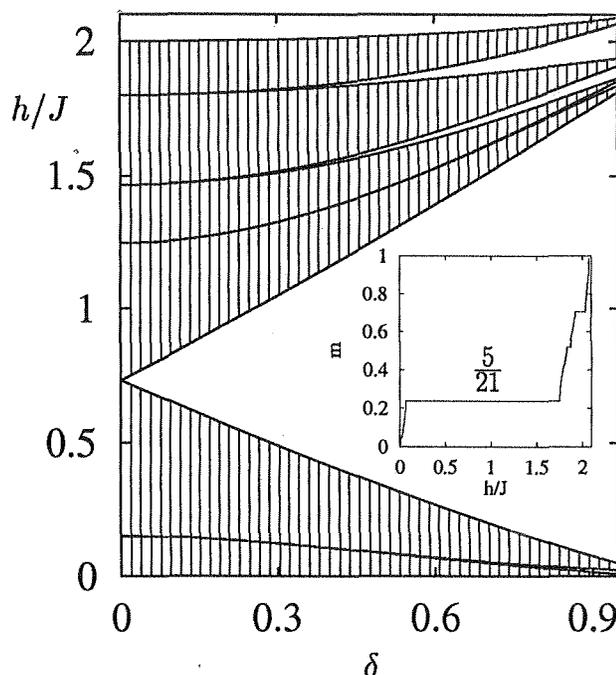


Figura 4.1: Campos críticos (líneas en negrita) de la cadena XX con $\omega = 13/21$ y 10^5 espines. Para $\delta = 0,9$ estos campos conforman la curva de magnetización estándar que se muestra en la Figura insertada. Las regiones con rayas verticales denotan zonas de excitaciones de espín no masivas donde la magnetización se incrementa continuamente con h (fase de líquido de Luttinger). Las regiones sin rayas verticales en orden ascendente representan plateaux que aparecen a $\langle M \rangle = 1/21, 5/21$ (región central predicha por la Ec.(4.7)), $9/21, 11/21$ y $15/21$ antes de saturación (zona superior de la Figura).

amplio rango de acoplamientos, obtenido mediante la diagonalización exacta de cadenas XX usando los métodos anteriores. El tamaño de la cadena es de $(N = 10^5)$ espines y se ha fijado $\omega = 13/21$ ². Puede observarse que la condición dada por la Ec.(4.7) es aplicable en un rango más amplio que el régimen de

²Este valor no es arbitrario; lo hemos considerado como anticipo de nuestro estudio de

acoplamiento débil. Además, es de resaltar que para frecuencias ω racionales y $\delta \rightarrow \delta_c$, para algún valor apropiado de δ_c que depende de ω , la cadena se divide en una colección periódica de segmentos finitos, que dan naturalmente plateaux adicionales a valores racionales.

En el caso particular que estamos analizando ($\omega = 13/21$) la celda unidad está compuesta de 21 espines y a primera vista podría esperarse que los plateaux aparecieran para valores de $M = (2n + 1)/21$, $n = 0, \dots, 10$. Como puede observarse en la misma Fig. 4.1, éste no es el caso. Esto es debido a la estructura no trivial de la celda unidad, lo cual hace que sólo algunos de estos valores sean, de hecho, observados. Remarcablemente, el plateau predicho por la Ec.(4.7) permanece siendo el más prominente.

Estas observaciones fueron corroboradas también en la cadena XXZ . Sin embargo, para $\Delta \neq 0$, como se sabe, se tienen interacciones entre cuatro fermiones de Jordan-Wigner y la matriz ya no tiene una estructura básicamente tridiagonal. El problema debe tratarse en la base de espines original $\{|S_1^z\rangle \otimes |S_2^z\rangle \otimes \dots \otimes |S_N^z\rangle\}$, cuya dimensión es 2^N . Por lo tanto es imposible en la práctica utilizar los algoritmos anteriores. Existe, sin embargo un algoritmo estándar para calcular el estado fundamental, denominado **Método de Lanczos**. No analizaremos aquí en detalle dicho método, el cual puede encontrarse en la literatura ([13]). Sólo esbozaremos la idea general.

Sea \mathbf{v}_1 un vector unitario con proyección no nula sobre cualquiera de los espacios propios de la matriz a diagonalizar H (simétrica o hermítica). Es posible obtener recursivamente a partir de \mathbf{v}_1 un conjunto ortogonal de vectores $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{2N}\}$ mediante operaciones matriciales que involucran productos $H\mathbf{v}_m$. Posteriormente se arma una matriz ortogonal V_{2N} cuyas columnas son los vectores \mathbf{v}_i . El algoritmo que genera los vectores ortogonales \mathbf{v}_i es tal que la transformación de similitud $V_{2N}^{-1}HV_{2N} = T_{2N}$ hace T_{2N} tridiagonal.

El éxito del método de Lanczos se debe al siguiente hecho semiempírico conocido como **fenómeno Lanczos**. Supongamos que se aplica el algoritmo de ortogonalización para obtener $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m\}$; $m \leq 2^N$ y con ésta la matriz tridiagonal T_m . El fenómeno de Lanczos expresa que si m es "suficientemente grande", cada autovalor distinto de H con un autovector que tiene proyección no despreciable sobre el vector de partida \mathbf{v}_1 , es un autovalor de T_m . Obviamente m "suficientemente grande" puede implicar $m = 2^N$ y en dicho caso no se gana nada. Pero ocurre que en muchos ejemplos de interés práctico, el fenómeno de Lanczos se observa con $m \ll 2^N$ y en estos casos es donde el método resulta muy adecuado.

En particular en nuestro caso, dado el tamaño de las matrices involucradas, el cálculo efectivo puede llevarse a cabo hasta cadenas de unas pocas decenas sitios. Se consideraron cadenas de N hasta 24 sitios (el espacio es de dimensión 2^{24}). Los contornos de magnetización obtenidos son mostrados en la Fig. 4.2, tomando $\omega = 13/21$ para $N = 8, 16$ y 24. Como es de esperar las excitaciones no masivas XXZ alrededor de $\langle M \rangle = 1/4$ presentan efectos de tamaño finito, que son más notorios en las regiones de acoplamiento débil. A medida que δ decrece dichos efectos son más notables, dando estos resultados un soporte mayor al esquema de bosonización.

Debe advertirse sobre la importancia de las condiciones de contorno periódicas en el testeo de la aproximación analítica a través de la diagonalización exacta

la cadena de Fibonacci, que es el prototipo de cadena cuasiperiódica que analizaremos en la Sección 4.5. Allí veremos que el valor $\omega = 13/21$ es una aproximación racional a una de las frecuencias principales (irracionales) de la cadena de Fibonacci.

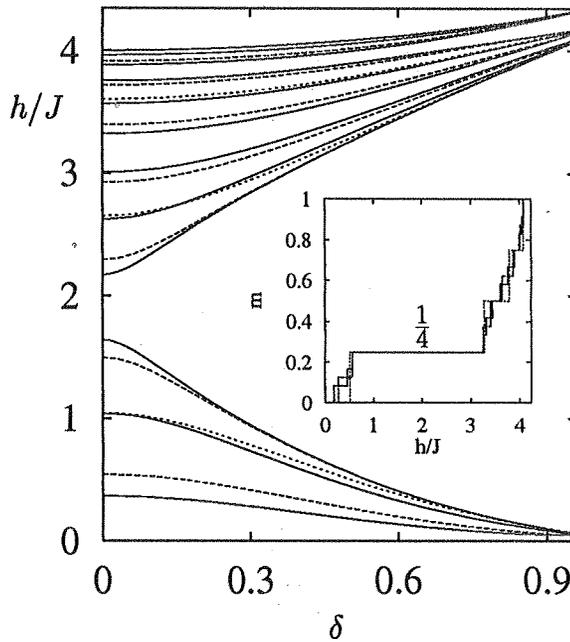


Figura 4.2: Contornos de magnetización de la cadena XXZ isotrópica ($\Delta = 1$) para $\omega = 5/8$. Las líneas sólida, de rayas, y de puntos denotan los campos críticos para $N = 24$, 16 y 8, respectivamente. La región en blanco central corresponde al plateau con $\langle M \rangle = 1/4$ predicho por la Ec.(4.7). La Figura insertada muestra una curva de magnetización típica en el caso particular $\delta = 0,5$.

de cadenas finitas. Ya al nivel de una simple cadena dimerizada ($\omega = 1/2$), las condiciones de contorno periódicas son cruciales. De hecho, el análisis numérico de esta situación utilizando condiciones de contorno abiertas muestra que el plateau $\langle M \rangle = 0$ esperado en el límite de N grande realmente emerge a $\langle M \rangle = 2/N$. La Fig. 4.3 ilustra esta observación para $N = 24, 20$ y 16 y debería

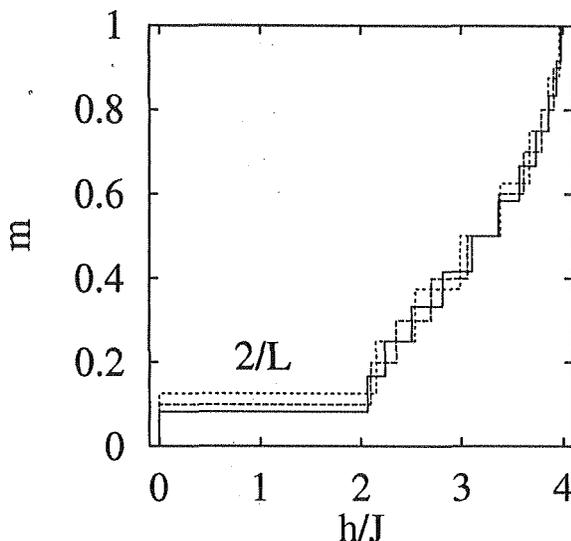


Figura 4.3: Curvas de magnetización de una cadena de Heisenberg dimerizada ($\omega = 1/2$) y $\delta = 0,4$. Utilizando condiciones de contorno abiertas, se obtiene el plateau mostrado en $\langle M \rangle = 2/N$. Las líneas sólidas, de rayas y de puntos denotan los resultados conseguidos para $N = 24, 20$ y 16 , respectivamente.

enfatar el rol esencial de las condiciones de contorno periódicas en todos los chequeos numéricos subsiguientes.

4.4. Caso de varias frecuencias racionales

Por construcción, el método de bosonización puede ser extendido directamente al caso en que hay más de una frecuencia en ϵ_n . De este modo, cada vez que es satisfecha la condición dada por la Ec.(4.7) para cada frecuencia, aparece un plateau. Esta extensión es simple de entender, ya que cada operador (correspondiente a una dada frecuencia) es conmensurado separadamente y por lo tanto las diferentes perturbaciones pueden ser tratadas en forma independiente. Por supuesto la situación es diferente en el caso de un espectro multifrecuencia autosimilar (tal como en el caso de la secuencia de Fibonacci que discutiremos más adelante) en el cual debe hacerse un análisis más cuidadoso [57].

Para chequear estas predicciones se han analizado las cadenas XX y XXZ utilizando acoplamientos con doble frecuencia. En la Fig.4.4 se muestran las

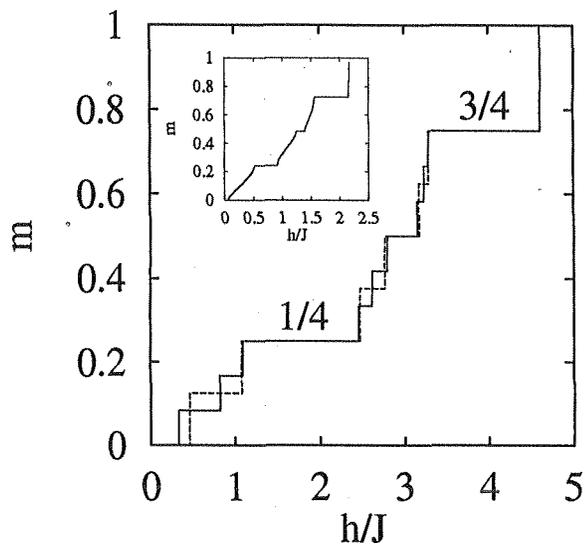


Figura 4.4: Curva de magnetización de la cadena XXZ isotrópica ($\Delta = 1$) con dos frecuencias $\omega_1 = 5/8$ y $\omega_2 = 7/8$ de amplitudes respectivas $\delta_1 = 0,2$ y $\delta_2 = 0,3$. Las líneas sólida y de rayas denotan las curvas de magnetización para $L = 24$ y 16 , respectivamente. La Figura insertada muestra la curva de magnetización de cadena XX correspondiente con 10^5 espines.

curvas de magnetización obtenidas para $\omega_1 = 5/8$ y $\omega_2 = 7/8$ con amplitudes $\delta_1 = 0,2$ y $\delta_2 = 0,3$, respectivamente. La aparición de dos amplios plateaux para valores de $\langle M \rangle = 1/4$ y $3/4$ no sólo confirman la validez de nuestra predicción de la bosonización extendida al caso multifrecuencia, sino también da un indicio de una explicación alternativa de los plateaux observados a estos dos valores de magnetización en el NH_4CuCl_3 , un compuesto cuasiunidimensional de espín $S = 1/2$ que es atractivo desde el punto teórico y experimental ya que su comportamiento magnético permanece aún inexplicado [69] [70] [71]. Por supuesto, una descripción más realista de este material debe comenzar por un análisis de la estructura microscópica observada mediante espectroscopía de rayos X, la cual se ajusta más a una estructura de escalera en zigzag de dos patas. En este sentido, un estudio completo debería incluir el acoplamiento de los espines con la red (fonones), lo cual podría dar lugar a modulaciones en los acoplamientos con frecuencias como las estudiadas aquí.

4.5. Cadena de Fibonacci

En el estudio de frecuencias irracionales u otras modulaciones cuasiperiódicas es interesante chequear el análisis anterior con la denominada cadena de Fibonacci. Analizaremos el caso general de una cadena de Fibonacci XXZ (un modelo relacionado ha sido estudiado en la Ref. [72]) y compararemos nuestros resultados con la curva de magnetización de la cadena de Fibonacci XX , la cual es bien conocida [51], [73]. Previamente definiremos la cadena de Fibonacci, y analizaremos algunas de sus propiedades.

4.5.1. Definición y Propiedades de la Cadena de Fibonacci

Recordemos primero la Sucesión de Fibonacci $F(l)$. La misma se define implícitamente a través de

$$\begin{aligned} F(0) &= 0; \\ F(1) &= 1; \\ F(l) &= F(l-1) + F(l-2); \quad l \geq 2 \end{aligned} \quad (4.11)$$

utilizando esta definición es trivial mostrar que

$$\gamma \equiv \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{F(l)}{F(l-1)} = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{F(l-1)}{F(l-2)} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}. \quad (4.12)$$

El valor de γ (conocido como Número de Oro) aparece a menudo en las expresiones que involucran a la Cadena y la Sucesión de Fibonacci.

La Cadena de Fibonacci puede construirse de la siguiente manera. Escribamos en filas los términos de la Sucesión de Fibonacci sin llevar a cabo las sumas en el orden $F(l) = F(l-1) + F(l-2)$ fijando la atención en la secuencia de 0's y 1's

$$\begin{aligned}
 &0 \\
 &1 \\
 &1+0 \\
 &1+0+1 \\
 &1+0+1+1+0 \\
 &1+0+1+1+0+1+0+1 \\
 &1+0+1+1+0+1+0+1+1+0+1+1+0,
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

donde hemos mostrado los **aproximantes** de la cadena de Fibonacci hasta $l = 6$. La longitud del aproximante l es $F(l)$. La Cadena de Fibonacci se obtiene en el límite $l \rightarrow \infty$. En este arreglo los 0's y 1's determinan los acoplamientos entre espines (estos últimos denotados con el +). Indicaremos el aproximante l de la cadena de Fibonacci con la notación $W(j)_l$, siendo j el índice de sitio. Por ejemplo el segundo elemento en el último aproximante en la Figura anterior es un 0, en esta notación es $W(j = 2)_{l=6} = 0$. La cadena de Fibonacci que denotamos como $W(j)$ posee entonces dos tipos de acoplamientos, los del tipo 1 y los del tipo 0. Los 1's vienen sólo o de a pares y los 0's siempre sólo.

Otra forma de generar la cadena de Fibonacci es observando que en el arreglo anterior (4.13) a cada 0 en el aproximante $F(l)$ (es decir la fila l) le corresponde un 1 en $F(l+1)$ (la fila debajo de l) y a cada 1 en $F(l)$ le corresponde un 1+0 en $F(l+1)$. De aquí puede verse fácilmente que

$$\begin{aligned}
 N1_l &= F(l-1), \\
 N0_l &= F(l-2),
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

siendo $N1_l$ y $N0_l$ el número de 1's y de 0's, respectivamente en el aproximante l . Todo esto puede verificarse observando la construcción anterior. A partir de las relaciones dadas por las Ecs(4.14) se obtienen directamente los cocientes (omitimos el subíndice l para la cadena infinita)

$$\begin{aligned}
 \frac{N1}{N0} &= \gamma; & \frac{N1}{N_T} &= \frac{1}{\gamma}; \\
 \frac{N11}{N_T} &= \frac{1}{\gamma^3}; & \frac{N0}{N_T} &= \frac{1}{\gamma^2},
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

donde $N_T = N1 + N0$ (el número total) y $N11$ es el número de pares 1+1.

Pueden obtenerse distintas fórmulas explícitas para la cadena de Fibonacci $W(j)$ una de las cuales está dada por

$$W(j) = [(j+2)\gamma] - [(j+1)\gamma] - 1; \quad j \geq 0 \tag{4.16}$$

donde $[x]$ denota la parte entera de x .

Analicemos ahora el espectro de la cadena de Fibonacci a través de sus aproximantes. La transformada de Fourier $\hat{W}(q)_l$ del aproximante $W(j)_l$ está dada por la forma usual

$$\hat{W}(q = \frac{2m\pi}{N})_l = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N-1} W(j)_l e^{iqj}, \tag{4.17}$$

siendo $N = F(l)$ y m entero $\in [1, F(l) - 1]$. Además para $W(j)_l$ empleamos la Ec.(4.16), válida para todo l . Aunque existe una expresión cerrada para esta suma [57], la misma no posee un límite continuo para $l \rightarrow \infty$. En la Fig. 4.5, panel superior se muestra el aproximante $\hat{W}(q)_{l=15}$ (610) sitios, mientras que en el panel inferior se muestra un detalle de la parte central del panel superior. Como puede observarse, el aspecto más notable es la estructura autosimilar del espectro. Además para diferentes aproximantes se manifiesta una gran estabilidad de las dos frecuencias principales. Evaluando estos dos modos principales para distintos aproximantes observamos que se trata de aproximaciones racionales de

$$\omega_1 = \frac{1}{\gamma}, \quad \omega_2 = 1 - \frac{1}{\gamma}, \quad (4.18)$$

teniendo por supuesto ambas la misma amplitud. La robustez de estos modos al incrementar el número de sitios es lo que permitirá describir adecuadamente la cadena de Fibonacci con sólo este par de frecuencias irracionales, como veremos más adelante.

4.5.2. Régimen de acoplamiento fuerte - Decimación

Antes de tratar la cadena de Fibonacci mediante bosonización en el régimen perturbativo analizaremos el régimen de acoplamiento fuerte de este sistema en el contexto de un procedimiento de decimación (ver por ej. Ref. [27] [74] [75] [76]).

La idea básica es la siguiente. Consideremos un régimen de acoplamientos en el que la cadena se pueda desacoplar en pequeños agrupamientos aislados (clusters). Entonces perturbativamente, a orden cero en los acoplamientos entre clusters, la curva de magnetización está determinada por el comportamiento de los clusters en el campo magnético. Por supuesto en el caso de tener clusters de pocos espines esto resulta muy sencillo de analizar. Obviamente se puede mejorar la aproximación yendo a órdenes superiores.

Sin embargo, para la cadena de Fibonacci (en el régimen de acoplamiento fuerte que definiremos a continuación) veremos que para reproducir la estructura principal de plateaux sólo es necesario considerar un par de espines acoplados (dímeros) o a lo sumo clusters de tres espines (trímeros) a orden cero.

Consideraremos una forma más general de los dos tipos de acoplamientos en la cadena de Fibonacci reemplazando

$$1 \rightarrow J_A \equiv (1 + \delta), \quad 0 \rightarrow J_B \equiv (1 - \delta). \quad (4.19)$$

Para evaluar la magnetización de los plateaux más amplios, hay dos casos diferentes a analizar, de acuerdo a que $\delta \simeq -1$ es decir, $J_B \gg J_A$, y la situación opuesta para $\delta \simeq 1$. Nos referiremos a ambos casos como régimen de acoplamiento fuerte.

Comenzando desde saturación, en el primer caso el campo magnético es disminuido hasta que alcanza el valor $h_c \simeq J_B$ en el cual los acoplamientos tipo- B experimentan una transición desde el estado de máxima polarización hacia el estado singlete (de acuerdo al comportamiento trivial de un par de espines en un campo magnético). La magnetización en este plateau es obtenida, entonces, decimando (eliminando) los acoplamientos B . Con esto se obtiene

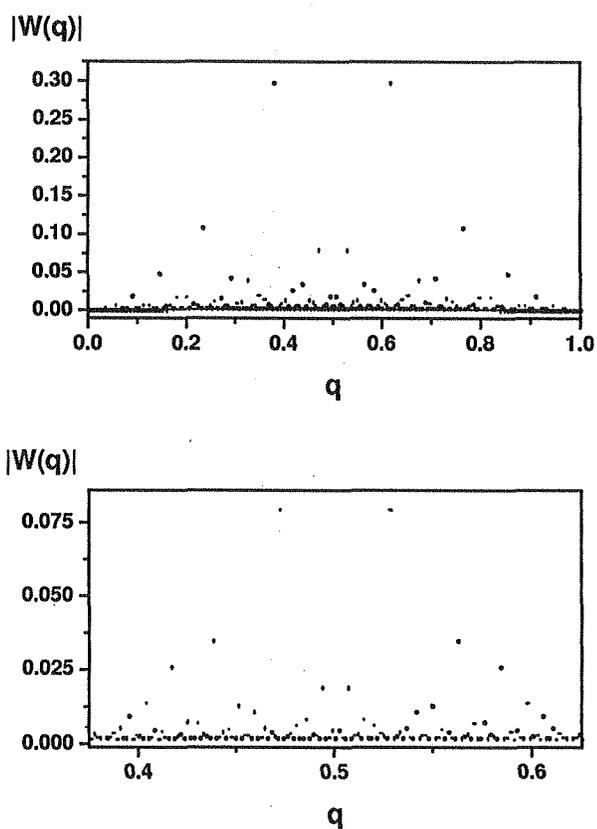


Figura 4.5: Espectro de la cadena de Fibonacci. En el panel superior se muestra el aproximante $\hat{W}(q)_{l=15}$ (610) sitios. En el panel inferior se muestra un detalle de la parte central del panel superior. Obsérvese la estructura autosimilar del espectro

$$\begin{aligned}
\langle M_1 \rangle &= 1 - \frac{2N_B}{N_B + N_A} \\
&= 1 - \frac{2}{\gamma^2} \\
&\simeq 0,236068,
\end{aligned} \tag{4.20}$$

donde $N_{A,B}$ denota el número de acoplamientos de tipo A y B , respectivamente y hemos utilizado las Ecs.(4.15).

En el segundo caso, $J_A \gg J_B$ hay que distinguir dos celdas unidad (clusters) diferentes, ya que los acoplamientos tipo- A pueden aparecer tanto de a pares (formando trímeros) como aislados (formando dímeros), como puede verse en el esquema (4.13). Puede mostrarse fácilmente que al descender el campo magnético desde saturación los primeros espines en ser decimados corresponden a los que forman trímeros (en el diagrama de energía de un trímero $J_A - J_A$ en un campo magnético la transición desde saturación se produce para $h_{c-AA} = (3/2)J_A$). De este modo, obtenemos dos plateaux, el más cercano a saturación

$$\begin{aligned}
\langle M_2 \rangle &= 1 - \frac{2}{\gamma^3} \\
&\simeq 0,527864,
\end{aligned} \tag{4.21}$$

tras decimar los trímeros y otro, como en el caso $\delta \simeq 1$ en $\langle M_1 \rangle$ (Ec. (4.20)), tras decimar los dímeros remanentes. Ya que el procedimiento de decimación es aplicable a cadenas XXZ genéricas [27] [74] [75] [76], concluimos que la aparición de estos plateaux en el régimen de acoplamiento fuerte es un rasgo genérico, al menos para el caso de un parámetro de anisotropía antiferromagnético $0 < \Delta < 1$.

4.5.3. Análisis de la cadena de Fibonacci - Bosonización

En el régimen intermedio $0 < \delta < 1$ la curva de magnetización tiene una estructura mucho más rica. La misma puede ser comprendida mediante nuestro análisis de bosonización en el caso multifrecuencia. La estructura autosimilar de frecuencias resultante de la transformación de Fourier de la cadena de Fibonacci [57] junto con la condición de cuantización obtenida (Ec.(4.7)), permiten reconstruir la estructura completa de gaps de espín de la cadena de Fibonacci, al menos para $|\delta| \ll 1$ y siempre que el operador responsable del plateau sea relevante.

Resulta que pueden obtenerse los aspectos más prominentes de la estructura de plateaux de la cadena de Fibonacci, tomando sólo las frecuencias principales del espectro, incluso más allá del régimen de acoplamiento débil. Al aplicar la condición dada por la Ec.(4.7) a las dos frecuencias principales del espectro de Fibonacci, las cuales hemos visto que son $\omega_1 = 1/\gamma$ y $\omega_2 = 1 - 1/\gamma$ se obtienen precisamente los plateaux $\langle M_1 \rangle$ y $\langle M_2 \rangle$ (Ecs.(4.20) y (4.21), respectivamente) obtenidos por decimación en el régimen de acoplamiento fuerte. Estos resultados se muestran en la Fig.4.6 donde se exhiben tanto las aproximaciones de la frecuencia principal ω_1 como de las dos frecuencias principales ω_1 y ω_2 . Más aún, las amplitudes de los gaps de Fibonacci exhiben un acuerdo remarkable

con el exponente de escaleo $1/(2 - K)$ referido anteriormente (Ec.(4.8)). Esto puede observarse en el gráfico insertado en la Fig.4.6 sobre más de tres órdenes de magnitud en δ . A su vez, esto sustenta la observación que todas las amplitudes de los gaps de la cadena XX Fibonacci escalan simultáneamente con δ , ya que para $\Delta = 0$ los valores de parámetro de Luttinger K incluidos en los exponentes son independientes de la magnetización ($K \equiv 1$).

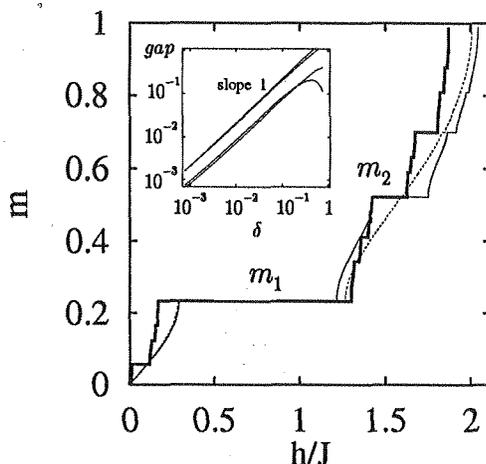


Figura 4.6: Curva de magnetización de la cadena de Fibonacci para $\delta = 0,5$ y $F(25) = 75025$ XX espines (línea en negrita). $F(25)$ es el número de Fibonacci 25 (ver texto). Las líneas de puntos y sólidas denotan, respectivamente, las aproximaciones de una y de dos frecuencias a los plateaux $\langle M_1 \rangle$ y $\langle M_2 \rangle$ referidos en el texto. Las pendientes comparadas en la Figura insertada muestran la amplitud de $\langle M_2 \rangle$ y $\langle M_1 \rangle$, en orden creciente. Las líneas en negrita representan los gaps en la cadena de Fibonacci mientras que las líneas sólidas denotan las amplitudes de las aproximaciones de doble frecuencia.

Finalmente, señalamos que en el caso de la cadena de Fibonacci (cuyo espectro está formado por frecuencias irracionales), resolviendo las ecuaciones de R-G a un loop [57] [58][59][60] ha sido mostrado que para $0 < \Delta < 1$ y magnetización arbitraria, los operadores responsables de abrir el gap a cada una de las frecuencias de Fibonacci son relevantes. Por lo tanto la curva de magnetización en el caso XXZ con anisotropía antiferromagnética es de la misma forma que la del caso XX (ver Fig.4.6), aunque con diferentes amplitudes en los plateaux.

4.6. Conclusiones

Se ha estudiado el efecto combinado de acoplamientos cuasiperiódicos y campos magnéticos uniformes en cadenas de espín antiferromagnéticas usando tanto la técnica de bosonización como métodos numéricos y decimación. La bosonización fue testeada y complementada por estos métodos numéricos en una varie-

dad de situaciones no perturbativas. Nuestros cálculos sugieren la posibilidad de observar plateaux de magnetización suficientemente estables (Ec.(4.7)) sobre arreglos de puntos cuánticos (quantum dots) desarrollados artificialmente [55] de acuerdo a una distribución espacial (controlada) de sus integrales de intercambio. Es de esperar que este trabajo genere una motivación para subsiguientes desarrollos experimentales en estas tecnologías de materiales.

Capítulo 5

Cadenas de espín cuasiperiódicas desordenadas

5.1. Introducción

El estudio de las propiedades de sistemas cuasiperiódicos unidimensionales ha recibido atención en los últimos años. Se han elucidado muchas propiedades interesantes que caracterizan a los sistemas cuasiperiódicos en contraste con los sistemas periódicos y desordenados. En particular, en las Refs. [57],[77] se ha estudiado un sistema de fermiones sin espín en un potencial cuasiperiódico utilizando teoría de perturbaciones. En los mismos se muestra que el comportamiento es diferente tanto del caso periódico como desordenado. Mientras que en el caso de un potencial periódico solo puede producirse una transición metal-aislador si el potencial es conmensurado, en el caso desordenado el potencial es relevante independientemente de la posición del nivel de Fermi. En el caso cuasiperiódico, se producen dos situaciones distintas dependiendo de que el nivel de Fermi coincida o no con una de las frecuencias principales del espectro de Fourier del potencial cuasiperiódico. En el primer caso, la situación resulta ser similar a la del caso periódico, mientras que en la segunda, a nivel perturbativo, el punto de transición metal-aislador es fuertemente modificado. Estas predicciones también han sido verificadas numéricamente en las Refs. [58], [59].

Motivados por estos resultados y como una continuación del estudio de las cadenas de espín cuasiperiódicas llevado a cabo en el capítulo anterior, aquí analizaremos el efecto combinado de la cuasiperiodicidad y desorden en los acoplamientos de una cadena de espín XXZ en presencia de un campo magnético externo [32].

Si bien las técnicas de bosonización no se adaptan a este problema, presentaremos resultados obtenidos con técnicas complementarias. Utilizando el procedimiento de decimación se predice la aparición de plateaux en la curva de magnetización para valores de $\langle M \rangle$ que dependen tanto de la cuasiperiodicidad como de parámetros del desorden. Para un conjunto de acoplamientos bien separados en intensidad, la presencia de desorden binario genera un corrimiento

de las posiciones de los plateaux en función de su intensidad. A diferencia de esto, en el caso de desorden Gaussiano la estructura de plateaux desaparece al incrementar el mismo. Estos resultados se verifican estudiando numéricamente cadenas XX de longitud grande. Además, extendiendo los argumentos dados en las Refs. [74],[75] y [76] se predice un comportamiento logarítmico de la susceptibilidad a campos magnéticos externos bajos, lo cual también es verificado numéricamente.

5.2. Modelo XXZ cuasiperiódico con desorden

Consideramos el sistema antiferromagnético

$$H_{qp-d} = \sum_n J_n (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + \Delta S_n^z S_{n+1}^z) - h \sum_n S_n^z, \quad (5.1)$$

en la cual S^x, S^y, S^z son los operadores de espín 1/2 que aparecen en el hamiltoniano XXZ estándar ($\epsilon_n = 0$) en un campo magnético externo h aplicado en la dirección de la anisotropía ($|\Delta| < 1$). En el caso de la cadena cuasiperiódica pura (Ec.(4.1)), la modulación en los acoplamientos es introducida a través de $J_n = (1 + \epsilon_n)$ donde los parámetros $\epsilon_n = \sum_\nu \delta_\nu \cos(2\pi\omega_\nu n)$ (Ec. (4.2)). La cuasiperiodicidad proviene de considerar un conjunto de frecuencias irracionales ω_ν con amplitudes δ_ν .

Además los acoplamientos están aleatoriamente distribuidos. Específicamente tenemos en cuenta dos tipos distribuciones, una discreta y la otra continua. Dentro de la primera consideramos la distribución binaria de intensidad p . En la misma, $p = 0$ corresponde al caso cuasiperiódico puro, mientras que $p = 1$ corresponde a una cadena con un acoplamiento uniforme U , es decir

$$P(J_n) = p \delta(J_n - U) + (1 - p) \delta[J_n - J(1 + \epsilon_n)], \quad (5.2)$$

donde ϵ_n está definido arriba (o en la Ec. (4.2)).

Dentro de las distribuciones continuas consideramos la distribución Gaussiana, dada por

$$P(J_n) \propto \exp \left[-\frac{(J_n - \langle J_n \rangle)^2}{2\sigma_n^2} \right]. \quad (5.3)$$

Esta distribución es tomada con alguna media $\langle J_n \rangle$ y desviación estándar σ_n , alrededor de los acoplamientos cuasiperiódicos. Por ejemplo en el caso de la cadena de Fibonacci con acoplamientos $J_{A,B}$ este desorden consiste en el reemplazo de los mismos por dos distribuciones Gaussianas con medias $\langle J_{A,B} \rangle$ y desviación estándar $\sigma_{A,B}$, respectivamente. En lo que sigue asumiremos que U está bien separado de los otros acoplamientos. Esta consideración es importante para que nuestro procedimiento de decimación sea válido. Regímenes de U más generales requieren un tratamiento que está fuera de los objetivos de este trabajo.

Para obtener los valores de magnetización de los plateaux principales, seguiremos el mismo método de decimación del Capítulo anterior (ver también Refs. [74],[75] y [76]).

En el estudio de frecuencias irracionales u otras modulaciones cuasiperiódicas utilizaremos, como en el Capítulo anterior, el caso de la cadena de Fibonacci, parametrizada en la forma $J_A = J(1 + \delta)$, $J_B = J(1 - \delta)$ (ver Ec.(4.19)) con la distribución binaria

$$P(J_n) = p \delta(J_n - U) + (1 - p) \delta[J_n - J_{A,B}]. \quad (5.4)$$

5.3. Procedimiento de decimación

Evaluemos, mediante decimación, la magnetización de los plateaux más grandes en el límite de acoplamientos fuertes ($\delta \rightarrow \pm 1$). Como en el Capítulo anterior, hay dos casos diferentes a considerar, de acuerdo a que $\delta \simeq -1$, es decir $J_B \gg J_A$ y la situación opuesta para $\delta \simeq 1$.

Comenzando desde saturación, en el primer caso el campo magnético es disminuido hasta que alcanza el valor $h_c \simeq J_B$ en el cual los acoplamientos tipo- B experimentan una transición desde el estado de máxima polarización hacia el estado singlete. La magnetización en este plateau es entonces obtenida decimando los acoplamientos J_B con lo que se obtiene

$$\langle M \rangle = 1 - 2 \frac{N_B}{N_T} = 1 - 2 \frac{N_{A,B}}{N_T} \frac{N_B}{N_{A,B}} = 1 - 2(1 - p) \frac{1}{\gamma^2}, \quad (5.5)$$

donde $N_T = N_U + N_{A,B}$ denota el número total de acoplamientos, siendo $N_{A,B} = N_A + N_B$ y $\gamma^2 = (N_A + N_B)/N_B$, ($\gamma = (1 + \sqrt{5})/2$ para $N_{A,B} \rightarrow \infty$). En el límite $p = 0$ recuperamos el resultado dado por la Ec.(4.20) y el efecto de p no nulo resulta en un corrimiento de la posición del plateau.

En el segundo caso $J_A \gg J_B$ tenemos que distinguir dos celdas unidad (clusters) diferentes, las que están formadas por pares de acoplamientos tipo- A (trímeros) y los acoplamientos tipo- A aislados (dímeros). Cuando se desciende el campo magnético los primeros en ser decimados son los trímeros. Separando nuevamente en factores para seleccionar la fracción eliminada por la decimación se tiene entonces un plateau (el más cercano a la saturación) con magnetización

$$\langle M_2 \rangle = 1 - 2 \frac{N_{AA}}{N_T} = 1 - 2(1 - p)^2 \frac{1}{\gamma^3}, \quad (5.6)$$

donde N_{AA} se refiere a los pares tipo- A . El próximo plateau es obtenido tras decimar los acoplamientos A aislados. Para ello debemos considerar todas las secuencias de J_A entre los otros tipos de acoplamientos. Esto da para el siguiente plateau

$$\langle M_1 \rangle = \langle M_2 \rangle - 2 \left[(1 - p)^3 \frac{1}{\gamma^4} + 2p(1 - p)^2 \frac{1}{\gamma^2} + p^2(1 - p) \frac{1}{\gamma} \right]. \quad (5.7)$$

Nuevamente recobramos los resultados dados por la Ec.(4.21) y la Ec.(4.20) como límites $p \rightarrow 0$ de las Ec.(5.6) y la Ec.(5.7), respectivamente.

Recalamos que con este sencillo procedimiento de decimación se puede predecir la presencia y posición de los plateaux, siempre que haya una diferencia finita entre los valores de los acoplamientos en sitios diferentes.

Ya que la decimación es aplicable a cadenas genéricas XXZ [27],[74],[75], [76] la emergencia de estos plateaux en el régimen de acoplamiento fuerte es un aspecto general, al menos con un parámetro de anisotropía antiferromagnético $0 < \Delta < 1$ y dentro del rango de acoplamientos discutidos más arriba.

5.4. Diagonalización exacta en la cadena XX

Como una verificación de las afirmaciones de la sección anterior, llevamos a cabo una diagonalización numérica del hamiltoniano dado por la Ec.(5.1) considerando sólo el caso particular $\Delta = 0$. Esto permite explorar cadenas de longitud mayor y llevar a cabo una mejor estadística. En la Fig.5.1 se muestran, respectivamente, las curvas de magnetización obtenidas para intensidades de desorden crecientes $p = 0, 0,2, 0,4, 0,6, 0,8$ y 1 , promediando sobre 5×10^4 muestras de $L = f(18) = 2584$ sitios, bajo un desorden binario (Ec.(5.4)) y condiciones abiertas o de bordes libres (OBC), siendo $\delta = 0,95$ (es decir $J_A \gg J_B$) y $U = 0,2$. Puede constatarse que para cada $p < 1$ emerge un par de robustos plateaux precisamente a las magnetizaciones críticas predichas por la Ec.(5.6) para el más cercano a saturación y por la Ec.(5.7) para el que se encuentra debajo. Es importante enfatizar que la derivación de nuestros resultados para

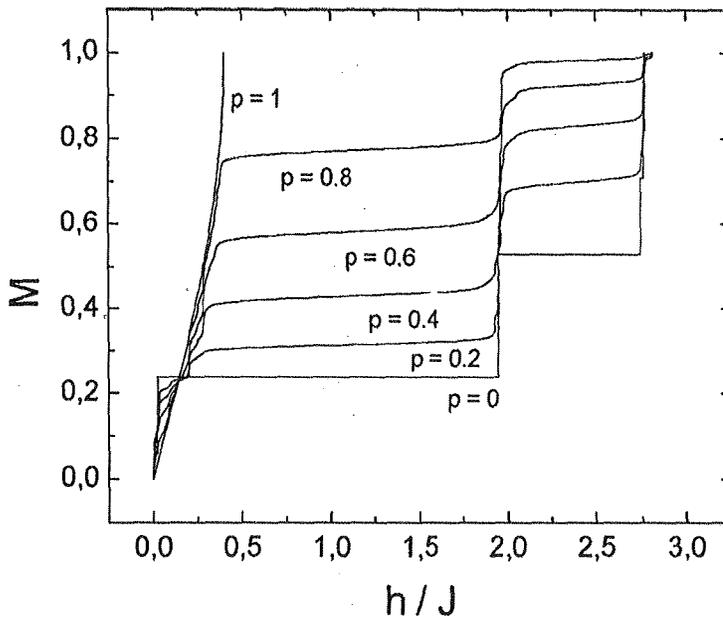


Figura 5.1: Curvas de magnetización de la cadena de Fibonacci XX con desorden binario de intensidad p , tras promediar sobre 5×10^4 muestras de $f(18) = 2584$ sitios cada una. $\delta = 0,95$, $U = 0,2$ y $p = 0, 0,2, 0,4, 0,6, 0,8$ y 1 en orden ascendente en la Figura. Las curvas del extremo izquierdo y derecho denotan los casos de la cadena pura uniforme y pura de Fibonacci, respectivamente.

las condiciones de cuantización (Ecs.(5.5)-(5.7)) son válidas en el caso de distribuciones discretas de desorden y no serían aplicables a una distribución de acoplamientos continua arbitraria. De acuerdo a esta observación para un desorden Gaussiano suficientemente intenso no existe una estructura de plateaux

observable. Esto es corroborado en la Fig. 5.2, donde cada acoplamiento $J_{A,B}$ en la cadena de Fibonacci se reemplaza por una distribución Gaussiana con valor medio $\langle J_{A,B} \rangle$ y desviación estándar $\sigma_{A,B}$ respectivamente. En dicha Figura se advierte que la configuración de plateaux tiende a desaparecer a medida que la desviación estándar es incrementada (tomamos el mismo valor para ambos acoplamientos). Aquí hemos promediado sobre 4×10^4 muestras cada una con $L = f(18) = 2584$ sitios. Sin embargo la diagonalización numérica de cadenas más largas no produce diferencias sustanciales. Nuestros datos nos indican que habría un valor límite de $\sigma_{A,B} > 0$ debajo del cual la estructura de plateaux de la cadena de Fibonacci permanece básicamente inalterada. Esto es particularmente notable (ver Fig. 5.2) en el límite $\delta \rightarrow 1$ es decir dentro del régimen en el cual el procedimiento de decimación es más confiable. Un análisis de este aspecto requiere un examen más cuidadoso que queda fuera de los objetivos del trabajo.

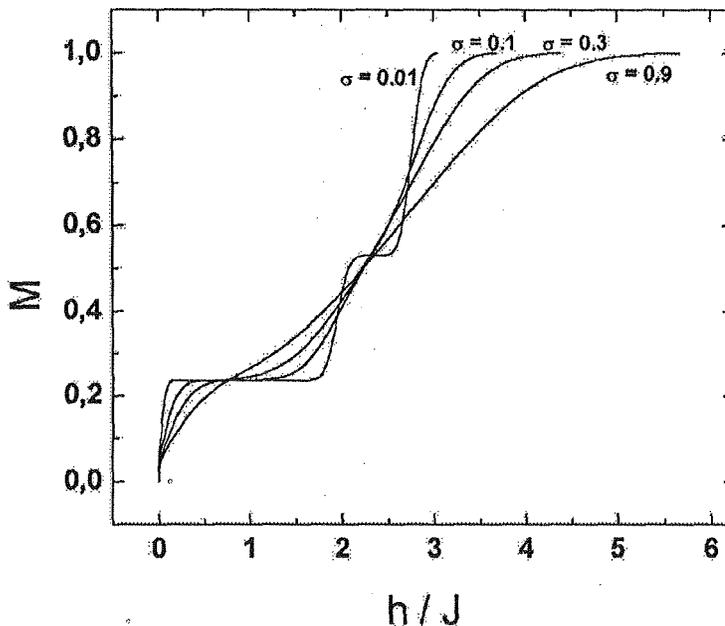


Figura 5.2: Curvas de magnetización de la cadena de Fibonacci XX con desorden Gaussiano alrededor de J_A y J_B y la misma desviación estándar para ambos acoplamientos $\sigma_{A,B} \equiv \sigma$. Se ha promediado sobre 4×10^4 muestras de $f(18) = 2584$ sitios cada una. $\delta = 0,95$ y σ creciente de izquierda a derecha en la parte superior de la Figura. (Nótese que la curva del extremo izquierdo representa prácticamente la cadena de Fibonacci pura).

En el Capítulo anterior observamos que la curva de magnetización de la cadena de Fibonacci podía ser reproducida adecuadamente considerando un pequeño subconjunto de las frecuencias principales de su espectro de Fourier. En el caso de dos frecuencias racionales $\omega_1 = 5/8$ y $\omega_2 = 7/8$ en presencia de

desorden binario, se observa que la estructura de plateaux desaparece incluso para intensidades de desorden p pequeñas (ver Fig. 5.3). Es interesante advertir el contraste con la situación de desorden binario en la cadena de Fibonacci (Fig. 5.1) en la que la estructura de plateaux es estable y sólo se produce un corrimiento con la intensidad del desorden. Hemos chequeado que un modelo con un subconjunto finito de las frecuencias principales del espectro de Fourier de la cadena de Fibonacci (que ahora son irracionales) es también inestable al desorden. Esto es sorprendente, ya que en ausencia de desorden la aproximación mediante las frecuencias principales del espectro Fourier reproduce muy bien la estructura de plateaux de la cadena de Fibonacci real (ver Fig. 4.6). Desde el punto de vista de la bosonización no deberían esperarse diferencias importantes entre la cadena de Fibonacci real y su aproximación mediante las frecuencias principales, por lo tanto este aspecto requiere de un mayor análisis que no llevaremos adelante en este trabajo.

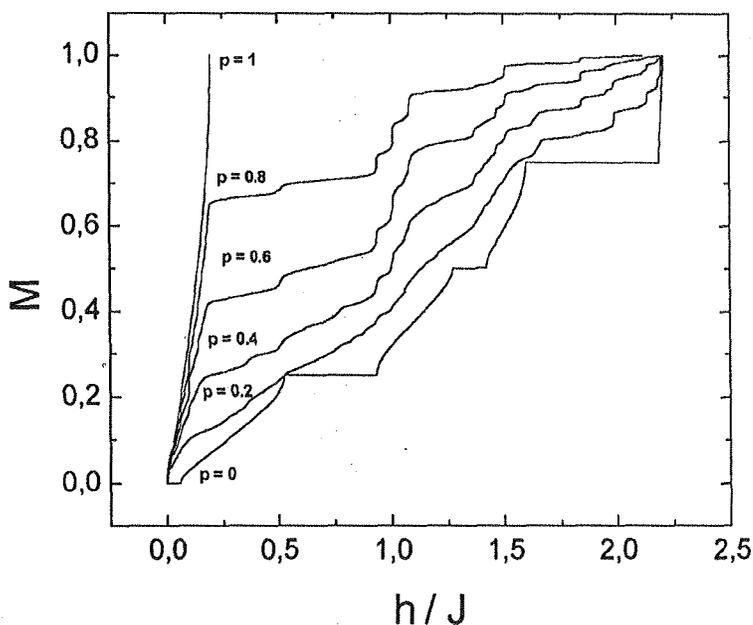


Figura 5.3: Curvas de magnetización de la cadena XX moduladas con dos frecuencias racionales $\omega_1 = 5/8$ y $\omega_2 = 7/8$ con amplitudes respectivas $\delta_1 = 0,2$ y $\delta_2 = 0,3$. $U = 0,1$ y se han tomado 10^4 sitios sobre 100 muestras. El sistema posee un desorden binario con intensidades $p = 0, 0,2, 0,4, 0,6, 0,8$ y 1 en orden ascendente en la Figura.

5.5. Susceptibilidad a campos bajos

En el caso de cadenas homogéneamente desordenadas, puede utilizarse el procedimiento de decimación descrito en las Refs. [74],[75] y [76] junto con la universalidad del punto fijo, para mostrar que tanto para distribuciones discretas o continuas la susceptibilidad $\chi \equiv \partial \langle M \rangle / \partial h$ a campos magnéticos externos h pequeños se comporta de acuerdo a

$$\chi_z \propto \frac{1}{h[\ln(h^2)]^3}. \quad (5.8)$$

5.5.1. Tratamiento exacto de la cadena Fibonacci XX desordenada

Mostraremos que el comportamiento dado por la (Ec.(5.8)) puede ser extendido al caso de cadenas de Fibonacci XX ($\Delta = 0$) con desorden. Nuestro resultado es obtenido siguiendo un argumento basado en el camino aleatorio desarrollado Eggarter y Riedinger ([78]), el cual por claridad, detallamos a continuación. Posteriormente lo adaptaremos a nuestro caso de interés

Considérese un modelo de fermiones $1D$ con un desorden no diagonal dado por

$$H_d = \sum_n [J_n(\psi_n^\dagger \psi_{n+1} + \text{h.c.})] \quad (5.9)$$

donde los acoplamientos J_n obedecen una distribución de probabilidad arbitraria y los autoestados $|\psi\rangle$ ($H_d|\psi\rangle = E|\psi\rangle$) son de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \quad (5.10)$$

siendo $|\psi_n\rangle = \psi_n^\dagger |0\rangle$. Reemplazando la Ec.(5.10) en la Ec.(5.9) se obtiene para las amplitudes c_n

$$c_{n-1}J_{n-1} + c_{n+1}J_n = E c_n. \quad (5.11)$$

Introduciendo el cambio de variable

$$\Delta_n \equiv \frac{c_{n-1}J_{n-1}}{c_n}, \quad (5.12)$$

la Ec.(5.11) toma la forma

$$\Delta_{n+1} = \frac{J_n^2}{E - \Delta_n}. \quad (5.13)$$

Puede mostrarse [79] que la densidad integrada de estados por sitio

$$N(E) = \int_{-\infty}^E \rho(E') dE', \quad (5.14)$$

es igual a la fracción de términos positivos en la secuencia $\{\Delta_n\}$ definida por la Ec.(5.13). Nótese que para el caso particular $E = 0$, los signos de $\{\Delta_n\}$ siguen

la secuencia $+ - + - + - \dots$, y entonces $N(E = 0) = 1/2$. Considerando la subsecuencia de los Δ_n positivos y asumiendo que ésta corresponde a los n pares ($\Delta_{2n} > 0$; $\Delta_{2n+1} < 0$), tras iterar la Ec.(5.13) se obtiene,

$$\Delta_{2n} = \left(\frac{J_{2n-1}}{J_{2n-2}} \right)^2 \Delta_{2n-2} \quad (5.15)$$

o

$$u_{2n} \equiv \ln \Delta_{2n} = \ln \left(\frac{J_{2n-1}}{J_{2n-2}} \right)^2 + u_{2n-2}. \quad (5.16)$$

La Ec.(5.16) muestra que u_{2n} ejecuta un **camino aleatorio**. El desplazamiento promedio en cada paso es

$$\langle u_{2n} - u_{2n-2} \rangle = \left\langle \ln \left(\frac{J_{2n-1}}{J_{2n-2}} \right)^2 \right\rangle = 0, \quad (5.17)$$

y el desplazamiento cuadrático medio

$$\langle (u_{2n} - u_{2n-2})^2 \rangle = \left\langle \left[\ln \left(\frac{J_{2n-1}}{J_{2n-2}} \right)^2 \right]^2 \right\rangle \equiv 2\sigma^2, \quad (5.18)$$

en la cual se ha introducido la desviación estándar σ de $\ln J^2$

$$\sigma^2 = \langle (\ln J^2)^2 \rangle - \langle \ln J^2 \rangle^2. \quad (5.19)$$

El problema del camino aleatorio puede ser estudiado como un proceso de difusión [78]. Sea $\phi(l, u)$ la densidad de probabilidad para u_l , entonces haciendo la aproximación usual de tratar a l como una variable continua $\phi(l, u)$ satisface la ecuación de difusión

$$2 \frac{\partial \phi(l, u)}{\partial l} = \sigma^2 \frac{\partial^2 \phi(l, u)}{\partial u^2}. \quad (5.20)$$

En el caso presente debe tenerse en cuenta que la solución es relevante sólo para $l = 2n$. Todo esto es estrictamente válido para $E = 0$. La Ec.(5.20) no tiene un buen comportamiento en estado estacionario y eventualmente $u_{2n} \rightarrow \pm\infty$.

Considérese el caso en que E es pequeño aunque no nulo. Ya que la densidad de estados es una función par de E , sin pérdida de generalidad puede suponerse que $E > 0$. A partir de la Ec.(5.13) se obtiene

$$\Delta_{2n} = \left(\frac{J_{2n-1}}{J_{2n-2}} \right)^2 \Delta_{2n-2} \frac{1 - E/\Delta_{2n-2}}{1 + (E\Delta_{2n-2} - E^2)/J_{2n-2}^2}. \quad (5.21)$$

Es claro que en el rango $E \ll \Delta_{2n-2} \ll J_{2n-2}^2/E$ los términos adicionales debido a $E \neq 0$ son despreciables y se tiende nuevamente a la Ec.(5.15). Entonces, asumiendo como antes $\Delta_0 > 0$, $u_{2n} \equiv \ln \Delta_{2n}$ ejecuta un camino aleatorio siempre que permanezca en el intervalo

$$\ln E \ll u \ll \ln(\tilde{J}^2/E) \quad (5.22)$$

siendo \tilde{J} algún J típico cuyo valor exacto no será importante en esta discusión. El próximo paso es analizar que sucede en los extremos de la Ec.(5.22). Para

$\Delta_{2n-2} \simeq \tilde{J}^2/E$, el efecto del denominador en la Ec.(5.21) es reducir Δ_{2n} . Esta situación puede describirse considerando un camino aleatorio con una barrera reflectora en $u_{max} = \ln(\tilde{J}^2/E)$.

En el otro extremo, para $\Delta \simeq E$, el término $1 - E/\Delta_{2n-2}$ favorece un decrecimiento continuo en la secuencia y cuando Δ_{2n} alcanza un valor levemente menor que E sucede lo siguiente: (i) $\Delta_{2n+1} = J_{2n}^2/(E - \Delta_{2n}) > 0$. Hay una ruptura en la secuencia natural de signos ya que aparecen dos signos más sucesivos $\dots + - + - + - + - \dots$; (ii) desde el punto $++$ en adelante el rol de las subredes par e impar se intercambia, ahora los $\Delta_{2n+1} > 0$; (iii) el proceso de difusión comienza nuevamente con los Δ del orden de \tilde{J}^2/E (siendo positivos sobre los sitios impares).

Por lo tanto, la evolución de los Δ derivada de la Ec.(5.13) puede considerarse como repeticiones del siguiente ciclo. Los Δ positivos comienzan con un valor del orden \tilde{J}^2/E y decrecen (difunden) hacia E donde son absorbidos, tras lo cual comienza un nuevo ciclo. Cada vez que un ciclo es completado un par $++$ destruye la secuencia alternada de $+ - + - + - \dots$. Se verifica que toma dos de estos ciclos cambiar un $-$ de la secuencia alternada en un $+$. Entonces, llamando \bar{n} al número medio de sitios requerido para completar un ciclo, se obtiene la siguiente relación para el número total de estados $N(E)$ con energía menor que E

$$N(E) - N(0) = N(E) - \frac{1}{2} = \frac{1}{2\bar{n}}. \quad (5.23)$$

Para determinar \bar{n} se utiliza la ecuación de difusión (Ec.(5.20)) con las condiciones de contorno $(\partial\phi/\partial u)|_{u=u_{max}} = 0$; $\phi|_{u=u_{min}} = 0$, correspondiente a una barrera reflectora en $u_{max} = \ln(\tilde{J}^2/E)$ y una barrera absorbente en $u_{min} = \ln E$. Considerando un ciclo que comienza en $n = 0$, corresponde una condición inicial $\phi(0, u) = \delta(u - u_{max} - 0^+)$.

Sea además

$$P(n) = \int_{u_{min}}^{u_{max}} \phi(n, u) du \quad (5.24)$$

la probabilidad que $u_{min} \leq u \leq u_{max}$ (es decir no ser absorbido) tras n pasos, entonces

$$\bar{n} = \int_0^\infty n \left(-\frac{dP}{dn} \right) dn = \int_0^\infty P(n) dn. \quad (5.25)$$

Por lo cual el cálculo de \bar{n} se reduce a resolver la Ec.(5.20) con las condiciones de contorno e iniciales anteriores. Esto puede llevarse a cabo por métodos estándar [17]. El resultado es

$$\bar{n} = \frac{[\ln(\tilde{J}^2/E^2)]^2}{\sigma^2}. \quad (5.26)$$

Finalmente utilizando las Ecs.(5.23) y (5.26) se obtiene la densidad integrada de estados

$$N(E) \simeq \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sigma^2}{[\ln(\tilde{J}^2/E^2)]^2} \right) \quad (5.27)$$

diferenciando obtenemos la densidad de estados

$$\rho(E) \equiv \frac{dN}{dE} \simeq \frac{2\sigma^2}{E} \frac{1}{[\ln(\tilde{J}/E)]^3} \simeq \frac{2\sigma^2}{E|\ln E^2|^3}. \quad (5.28)$$

El valor \tilde{J} simplemente agrega un factor finito constante al denominador divergente y entonces es irrelevante como se había anticipado.

Debe notarse que la existencia de una singularidad en la densidad de estados (Ec.(5.28)) no es intuitiva en absoluto. Por supuesto que si todos los acoplamientos fueran iguales ($J_n = J_0$), $\rho(E = 0)$ sería finita. Si sobre esta cadena se modifica una cierta fracción c de los acoplamientos tomando otro valor J_1 (es decir una distribución binaria), desde un punto de vista perturbativo sería de esperar que los estados fueran desplazados del origen ($E = 0$) en función de la diferencia $J_1 - J_0$. Esto disminuiría $\rho(E = 0)$ pero nunca daría lugar a una singularidad. El resultado dado por la Ec.(5.28) indica que tales argumentos no son válidos cerca de $E = 0$ y reafirman el carácter no perturbativo del mismo.

Ahora aplicaremos el resultado dado por la Ec.(5.28) a la cadena XX de Fibonacci desordenada (Ec.(5.1), con $\Delta = 0$). Mediante la transformación de Jordan-Wigner (Ecs.(3.15)) se obtiene

$$H_{XX-d} = \sum_{n=1}^N \left[J_n(\psi_n^\dagger \psi_{n+1} + \text{h.c.}) - h(\psi_n^\dagger \psi_n - \frac{1}{2}) \right] \quad (5.29)$$

en la cual hemos absorbido un factor $1/2$ en J_n y aparece el término adicional en h en relación con la Ec.(5.9). Reemplazando la (Ec.(5.10)) en la Ec.(5.29) obtenemos la Ec.(5.11) donde en lugar de E se tiene $E' \equiv E + h$. Considerando el caso $E = 0$ (la escala de energía es el campo) y utilizando $\langle M \rangle = \frac{2}{N} \sum_{n=1}^L (\langle \psi_n^\dagger \psi_n \rangle - \frac{1}{2})$, podemos identificar (ver Ec.(5.14))

$$\begin{aligned} N(E) &\rightarrow \langle M(h) \rangle, \\ \rho(E) &\equiv \frac{dN(E)}{dE} \rightarrow \chi(h) \equiv \frac{d\langle M(h) \rangle}{dh} \end{aligned} \quad (5.30)$$

Por lo tanto

$$\chi_{XX}(h) = \frac{2\sigma^2}{h|\ln h^2|^3}, \quad (5.31)$$

La desviación estándar σ (Ec.(5.19)) para la cadena de Fibonacci XX con desorden Gaussiano y binario puede calcularse por métodos elementales. Los resultados se muestran en las líneas continuas en los gráficos insertados en las Figs. 5.4 y 5.5. Los puntos indican los resultados numéricos. En las mismas se observa claramente que la validez de estos argumentos parecen ser aplicables por más de dos órdenes de magnitud. Sin embargo debe tenerse cuidado al analizar escalas de campo más pequeñas. Nótese que los campos críticos más pequeños accesibles están dados por los espaciamientos de los niveles del hamiltoniano, que a su vez dependen de la longitud de la cadena. Por lo tanto, en muestras finitas, pueden ocurrir desviaciones respecto del exponente esperado. De hecho, esto es reflejado en el apartamiento leve, aunque progresivo, observado debajo de $h/J \sim 10^{-5}$. Es de destacar el rol crucial que desempeña el desorden, ya que éste cambia el comportamiento de ley de potencia de la cadena de Fibonacci pura (obtenida en la Ref. [73]) a un comportamiento logarítmico.

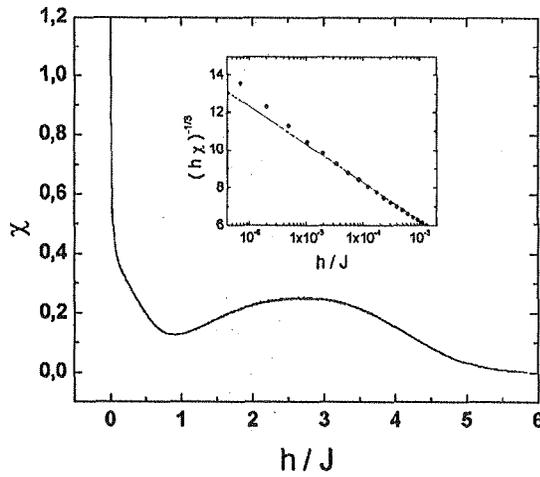


Figura 5.4: Susceptibilidad magnética de la cadena XX de Fibonacci con desorden Gaussiano alrededor de J_A y J_B e igual desviación estándar para ambos casos, $\sigma_{A,B} = 1$. Se ha promediado sobre 4×10^4 muestras de $f(18) = 2584$ sitios cada una, siendo $\delta = 0,95$. La Figura insertada muestra el comportamiento de la susceptibilidad a campos magnéticos externos pequeños, el cual se ajusta al régimen logarítmico predicho en el texto. La línea continua corresponde a la predicción teórica.

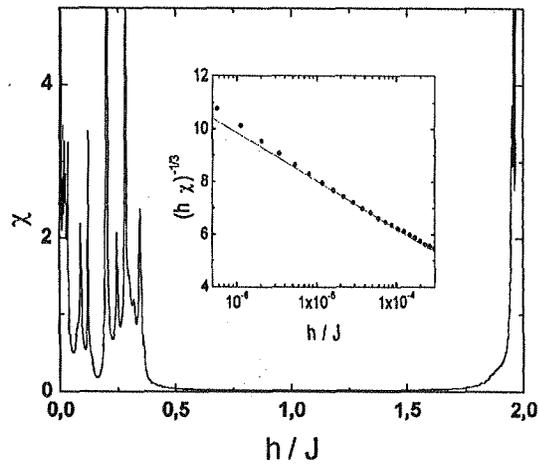


Figura 5.5: Susceptibilidad magnética de la cadena XX de Fibonacci, con desorden binario de intensidad $p = 0,6$ y $U = 0,2$, promediado sobre 5×10^4 muestras de $f_s(18) = 2584$ sitios cada una, siendo $\delta = 0,95$. La Figura insertada muestra el comportamiento de la susceptibilidad a campos magnéticos externos pequeños, que similarmente al caso de desorden Gaussiano exhibe un comportamiento logarítmico. La línea continua corresponde a la predicción teórica.

5.6. Conclusiones

Se ha estudiado el efecto del desorden sobre la estructura de plateaux en cadenas XXZ cuasiperiódicas en presencia de un campo magnético externo. Por medio de un simple procedimiento de decimación en espacio real hemos encontrado los valores de la magnetización para los cuales emergen los plateaux principales, Ecs.(5.5)-(5.7). Estas predicciones fueron verificadas mediante diagonalización numérica de cadenas XX largas, encontrándose un remarcable acuerdo en una variedad de situaciones. Ya que el esquema de decimación es aplicable a cadenas XXZ genéricas [27], concluimos que la aparición de estos plateaux es una característica general, al menos con un parámetro de anisotropía anti-ferromagnético $0 < \Delta < 1$. Este último aspecto todavía aguarda confirmación numérica en cadenas suficientemente largas utilizando metodologías tales como DMRG (density matrix renormalization group) [80]. Finalmente se ha estudiado la susceptibilidad a campos magnéticos externos pequeños, la cual exhibe un claro comportamiento logarítmico, Ec.(5.8). Es de esperar que este trabajo sea una motivación para estudios posteriores tanto desde un punto de vista numérico como experimental.

Capítulo 6

Interacciones competitivas en el modelo XYZ

6.1. Introducción

La competencia entre diferentes perturbaciones relevantes que un sistema crítico puede presentar en un cierto dominio del espacio de acoplamientos ha sido estudiada por muchos autores ([81],[82], [83],[84], [85], [86], [87], [88], [89] y [90]). Dentro de la descripción de bajas energías de muchos sistemas unidimensionales es usual encontrar el modelo seno-Gordon de doble frecuencia (H_{DSG}) [84]. El mismo es un campo escalar $U(1)$ con dos perturbaciones diferentes de la forma $\exp(i\alpha\phi)$ y $\exp(i\beta\theta)$. En el caso en que ambas perturbaciones son relevantes y para un cierto cociente de frecuencias α/β , se ha conjeturado la aparición de un comportamiento tipo Ising crítico ([84]). En el lenguaje de la teoría de campos conformes esta clase de universalidad está caracterizada por una carga central $c = 1/2$ (ver Apéndice y los exponentes críticos del modelo de Ising unidimensional). Tal situación ha sido encontrada en el estudio de diferentes sistemas definidos en una red (ver Ref.[88] y las referencias en la misma, por ejemplo). Recientemente ha sido estudiado el llamado modelo seno-Gordon auto-dual Ref.[88].

Un ejemplo simple de esta situación se encuentra en la cadena XY dimerizada, la cual es exactamente soluble (Refs. [90], [91]). En la misma Ref. [91] ha sido presentado un análisis cualitativo de casos más generales en presencia de un campo magnético aplicado. El efecto de una anisotropía XY ha sido también investigado en la cadena de Fibonacci XY en un campo magnético. En este caso se observa la desaparición gradual de la estructura escalonada de la curva de magnetización al incrementar la anisotropía de las interacciones de intercambio de espín (Ref. [92]).

En este trabajo se presenta una imagen unificada de los efectos mencionados más arriba y se describe, utilizando tanto bosonización como técnicas numéricas, situaciones genéricas en las cuales compite un mecanismo de generación de gap de espín a través de la dimerización (Ref. [53]) con una anisotropía XY para dar lugar a un comportamiento crítico llamado Ising crítico [33]. Este tema ha sido estudiado en las Refs. [89] y [90]. En esta última Ref., se ha investigado el efecto simultáneo de una perturbación responsable de abrir un gap y una

anisotropía XY , proponiéndose un diagrama de fases cualitativo.

Nosotros utilizaremos un hamiltoniano anisotrópico que captura los aspectos esenciales a los que nos hemos referido en los párrafos precedentes y proveerá resultados cuantitativos que justifican las afirmaciones hechas en la Ref. [90]. El mismo está dado por

$$\begin{aligned}
 H_{XYZ} = & \sum_{n=1}^N [(1 + \gamma)S_n^x S_{n+1}^x + (1 - \gamma)S_n^y S_{n+1}^y] \\
 & + \sum_{n=1}^N [\delta(-1)^n (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y) + \Delta S_n^z S_{n+1}^z - h S_n^z]. \quad (6.1)
 \end{aligned}$$

En las conclusiones se discute brevemente un modelo más general, dado por la cadena de Fibonacci XYZ en un campo magnético externo.

6.2. Caso XY . Fermiones libres

Como caso preliminar para el estudio de situaciones más generales, primero analizaremos el caso XY ($\Delta = 0$) el cual ofrece algunos aspectos genéricos de interés. Este modelo es exactamente soluble ya que se reduce a una forma bilineal de operadores fermiónicos que puede ser diagonalizada. Aplicando la transformación de Jordan-Wigner (Ecs.(3.15) y (3.16)) el hamiltoniano dado por la Ec.(6.1) es expresado como

$$\begin{aligned}
 H_{XY} = & \sum_{n=1}^N \left[\left(\frac{1 + (-1)^n \delta}{2} \right) (\psi_n^\dagger \psi_{n+1} + \text{h.c.}) + \frac{\gamma}{2} (\psi_n^\dagger \psi_{n+1}^\dagger + \text{h.c.}) \right] \\
 & - h \sum_{n=1}^N \left(\psi_n^\dagger \psi_n - \frac{1}{2} \right). \quad (6.2)
 \end{aligned}$$

Para tratar la dimerización en δ en la Ec.(6.2) es conveniente implementar la transformación de Fourier distinguiendo entre sitios pares e impares de la siguiente forma

$$\psi_{k,j} = \sum_{n=1}^{N/2} e^{i2kn} \psi_{2n+j}, \quad j = 0, 1, \quad (6.3)$$

donde $k \in [-\pi, \dots \pi)$. Aplicando la inversa de la Ec.(6.3) a la Ec.(6.2) se obtiene

$$\begin{aligned}
 H_{XY} = & \frac{2}{N} \sum_{k=-\pi}^{\pi} \begin{pmatrix} \psi_{-k,0}^\dagger & \psi_{-k,1}^\dagger & \psi_{k,0} & \psi_{k,1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ -B & -A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{-k,0} \\ \psi_{-k,1} \\ \psi_{k,0}^\dagger \\ \psi_{k,1}^\dagger \end{pmatrix} \\
 & \quad (6.4)
 \end{aligned}$$

siendo

$$\begin{aligned}
 A &= \begin{pmatrix} -h & \frac{1}{2}[(1+\delta) + (1-\delta)e^{-2ik}] \\ \frac{1}{2}[(1+\delta) + (1-\delta)e^{2ik}] & -h \end{pmatrix}, \\
 B &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\gamma(1 - e^{-2ik}) \\ -\frac{1}{2}\gamma(1 - e^{2ik}) & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{6.5}$$

La forma cuadrática dada por la (Ec.(6.4)) se diagonaliza en forma directa, obteniéndose.

$$H_{XY} = \frac{2}{N} \sum_{k=-\pi}^{\pi} \left[E_{k,0}(\delta, \gamma, h)(\psi_{k,0}^\dagger \psi_{k,0} + 1) + E_{k,1}(\delta, \gamma, h)(\psi_{k,1}^\dagger \psi_{k,1} + 1) \right], \tag{6.6}$$

donde los $\psi_{k,(0,1)}$ están dados por la Ec.(6.3) y las relaciones de dispersión de las dos bandas de fermiones son

$$\begin{aligned}
 E_{k,0} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \{1 + \cos(2k) + (\delta^2 + \gamma^2)[1 - \cos(2k)] + 2h^2 + f(\delta, \gamma, k, h)\}^{1/2} \\
 E_{k,1} &= \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \{1 + \cos(2k) + (\delta^2 + \gamma^2)[1 - \cos(2k)] + 2h^2 - f(\delta, \gamma, k, h)\}^{1/2}
 \end{aligned} \tag{6.7}$$

siendo

$$\begin{aligned}
 f(\delta, \gamma, k, h) &= 2\{\delta^2 \gamma^2 [1 - \cos(2k)]^2 \\
 &\quad + 2h^2 [1 + \cos(2k) + \delta^2 [1 - \cos(2k)]]\}^{1/2}.
 \end{aligned} \tag{6.8}$$

Debemos aclarar que se obtiene el mismo resultado si se lleva a cabo una transformación de Bogoliubov directamente sobre el hamiltoniano en la representación de coordenadas (Ec.(6.2)). En la ref.([91]) se diagonaliza la Ec.(6.4) en el caso $h = 0$ mediante este procedimiento.

Nótese que para ambas bandas el campo magnético externo no actúa como un potencial químico. Respecto del nivel Fermi ($E_F = 0$), los signos en ambas Ecs. (6.7) deben tomarse (-) para $k \in [-\pi/2, \pi/2)$ y (+) en el complemento.

En general, para valores arbitrarios de δ , γ y h los modos $E_{k,(0,1)}$ presentarán un gap (un salto finito de energía en el nivel de Fermi). A partir de las Ecs.(6.7) y (6.8), imponiendo entonces la condición para que dicho gap se cierre

$$E_{k,(0,1)} = 0, \tag{6.9}$$

se obtiene

$$h_c = \pm \sqrt{\delta^2 - \gamma^2}; \quad k = \frac{\pi}{2}. \tag{6.10}$$

Esta transición es denominada Ising debido a que pertenece a la misma clase de universalidad ($c = 1/2$) que el modelo de Ising (Ref. [90]). El cierre del

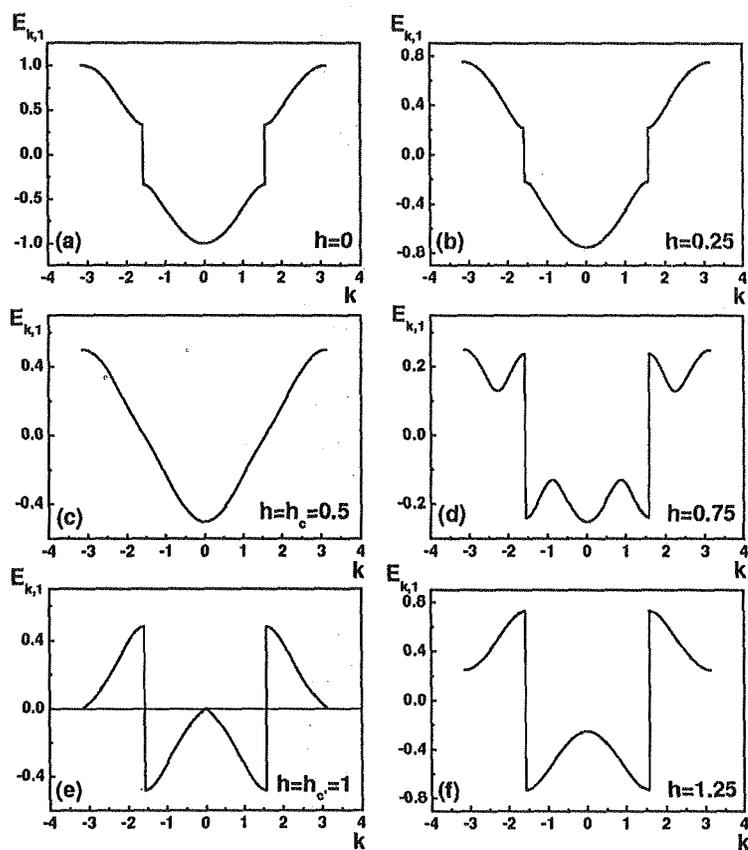


Figura 6.1: Cadena XY. Relación de dispersión del modo 1 ($E_{k,1}$ (Ec.(6.7)), para $\gamma = 0,2$, $\delta \simeq 0,538$ fijos y valores crecientes del campo h desde $h = 0$ (a) hasta $h = 1,25$ (f). Para estos valores de γ y δ la (Ec.(6.10)) predice que el gap se cierra para $h_c \simeq 0,5$ (panel (c)). Obsérvese además la otra transición Ising en $h_c = 1$.

gap siempre se produce para uno de los modos. La Ec.(6.10) muestra que la transición Ising puede ocurrir sólo para $\delta > \gamma$. Además existe una segunda transición Ising para $E_{k=\pi,(0,1)} = 0$, para ($h_c = 1$) la cual no depende de los valores de δ y γ .

En la Fig. 6.1 se muestra la relación de dispersión del modo 1 ($E_{k,1}$ en función de k), para $\gamma = 0,2$ y $\delta \simeq 0,538$. Estos valores predicen (Ec.(6.10)) un $h_c \simeq 0,5$. Obsérvese además la otra transición Ising en $h_c = 1$.

El cierre del gap se manifestará asimismo en la curva de magnetización del sistema (la cual podemos obtener en forma exacta). Por definición, el valor medio de la magnetización (en el límite $N \rightarrow \infty$) está dado por

$$\langle M \rangle \equiv \frac{\partial \langle H \rangle_{GS}}{\partial h} = \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{\partial E_{k,0}}{\partial h}(\delta, \gamma, h) + \frac{\partial E_{k,1}}{\partial h}(\delta, \gamma, h) \right], \quad (6.11)$$

en la cual GS denota el estado fundamental, que es el vacío del espacio de Fock de los fermiones creados por $\psi_{k,(0,1)}^\dagger$.

La curva de magnetización exacta mostrada en la Fig.6.2 exhibe todos los aspectos que queremos discutir (nos concentramos en la región $h > 0$). Primero, nótese que no hay un plateau real a campos magnéticos pequeños, ya que el campo comienza a crecer ni bien el mismo empieza a ser no nulo. Esto es debido a la ruptura de simetría $U(1)$ para $\gamma \neq 0$ y en este caso la magnetización no puede ser asociada a ninguna cantidad conservada. Para campos h donde $h < h_c$ (nos referimos al primer h_c dependiente de δ y de γ dado por la Ec.(6.10)), nos encontramos en la zona que denominamos región de "pseudoplateau". En la misma, se encuentra una pendiente muy suave. En el campo crítico $h = h_c$, se produce la transición Ising, en la cual se muestra que la magnetización se comporta de acuerdo a (Ref. [90])

$$\langle M \rangle - \langle M_c \rangle \propto (h - h_c) (\ln |h - h_c| - 1). \quad (6.12)$$

y por lo tanto la susceptibilidad χ

$$\chi(h) \equiv \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} \propto \ln |h - h_c|. \quad (6.13)$$

El comportamiento dado por las Ecs.(6.12) y (6.13) puede ser interpretado a partir de la analogía con el modelo de Ising (Refs. [89] y [90]) del modo siguiente. Ya que la transición es controlada por el campo magnético, éste juega el rol de la temperatura en el modelo de Ising y, entonces, la magnetización es el análogo del calor específico. Para $h > h_c$, el sistema se encuentra en la fase XY , donde la magnetización crece más rápidamente con el campo aplicado. De acuerdo a la Ec.(6.10) vemos entonces que el efecto de la dimerización δ es favorecer la fase de "pseudoplateau", mientras que la anisotropía γ tiende a llevar al sistema la fase XY . El diagrama de fases está ilustrado esquemáticamente en la Fig. 6.3.

6.3. Bosonización de la cadena XYZ.

Mapeo en fermiones de Majorana.

Discutiremos los resultados obtenidos en la sección precedente dentro del marco de la bosonización. Además proponemos la validez del diagrama de fases

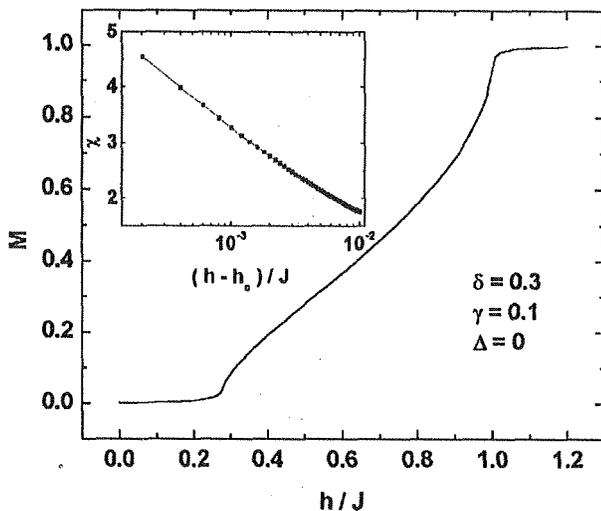


Figura 6.2: Curva exacta de magnetización para el caso XY. La Figura insertada exhibe la singularidad logarítmica que domina el comportamiento de la susceptibilidad para $h_c = \sqrt{\delta^2 - \gamma^2}$.

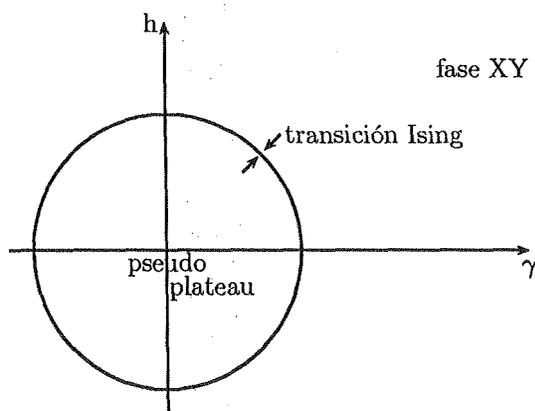


Figura 6.3: Diagrama esquemático del estado fundamental para $\Delta = 0$ y $\delta \leq \gamma$. Al aproximarse a la línea de transición no masiva (Ec.(6.10)), la susceptibilidad magnética diverge como $\chi(h) \propto \ln|h - h_c|$.

anterior para Δ arbitrario, suponiendo que δ y γ son renormalizados adecuadamente. Para δ y γ pequeños, pueden estudiarse los efectos de tales perturbaciones utilizando bosonización. Como sabemos, esta técnica permite incluir los efectos de Δ y h exactamente, mediante la solución del ansatz de Bethe para el parámetro de Luttinger $K = K(\Delta, h)$.

Como hemos analizado detalladamente en el Capítulo 3, el límite continuo del hamiltoniano XXZ en presencia de un campo magnético externo h está dado por el hamiltoniano de Tomonaga-Luttinger (Ec.(2.41)) cuya expresión reproducimos aquí por comodidad

$$H_0 = \frac{1}{2} \int dx \left(vK(\partial_x \theta)^2 + \frac{v}{K}(\partial_x \phi)^2 \right). \quad (6.14)$$

Del mismo modo, hemos visto que en términos de estos campos, los operadores de espín están dados por (ver Ecs. (3.38))

$$\begin{aligned} S_x^z &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \partial_x \phi + a : \cos(2k_F x + 2\sqrt{\pi}\phi) : + \frac{\langle M \rangle}{2}, \\ S_x^\pm &= (-1)^x : e^{\pm i\sqrt{\pi}\theta} [b \cos(2k_F x + 2\sqrt{\pi}\phi) + c] : . \end{aligned}$$

Utilizando estas ecuaciones, la forma bosonizada del hamiltoniano XYZ (Ec.(6.1)) incluyendo los términos relevantes en δ y γ como perturbaciones está dada por

$$H_{XYZ-bos} = H_0 + \lambda_1 \int dx \cos(2\sqrt{\pi}\phi) + \lambda_2 \int dx \cos(2\sqrt{\pi}\theta), \quad (6.15)$$

donde $\lambda_1 \propto \delta$ y $\lambda_2 \propto \gamma$. La forma de estas perturbaciones se obtiene fácilmente a partir del modelo (Ec.(6.1)). El término en λ_1 proviene del hecho de que en la (Ec.(6.1)) el término en δ es proporcional a $(S_n^+ S_{n+1}^- + \text{h.c.})$ lo cual genera una perturbación $\propto \delta (\exp(i2\sqrt{\pi}\phi) + \text{h.c.})$ de acuerdo a las ecuaciones de bosonización para los operadores de espín anteriores (Ecs.(3.38)). Del mismo modo el término en γ es de la forma $(S_n^+ S_{n+1}^+ + \text{h.c.})$ lo cual a través de las mismas ecuaciones de bosonización, genera una perturbación $\propto \gamma (\exp(i2\sqrt{\pi}\theta) + \text{h.c.})$.

Las dimensiones de escala de las perturbaciones en la Ec.(6.15) son K y $1/K$, respectivamente (ver Ec. 2.62).

Notar que en el caso XY ($K(0,0)=1$) ambas dimensiones son iguales a la unidad. En este caso autodual podemos entender, dentro de la aproximación perturbativa, la aparición de la transición Ising (Ref. [88]) del siguiente modo.

Linealizado alrededor del $k_F \equiv \pi/2$ (Ec.(3.28))

$$\psi(x, t) = \psi_R(x, t)e^{ik_F x} + \psi_L(x, t)e^{-ik_F x}, \quad (6.16)$$

obtenemos el límite continuo del hamiltoniano XY (Ec.(6.2)) para $h = 0$ y γ y δ pequeños

$$\begin{aligned} H_{XY} &= \int dx \left[i\psi_R^\dagger \partial_x \psi_R - i\psi_L^\dagger \partial_x \psi_L \right. \\ &\quad \left. + i\gamma (\psi_R^\dagger \psi_L^\dagger - \psi_L^\dagger \psi_R^\dagger) - i\delta (\psi_R^\dagger \psi_L - \psi_L^\dagger \psi_R) \right]. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Definiendo dos campos reales de fermiones de Majorana $\xi_{R,L}^\alpha$ ($\alpha = 1, 2$) dados por

$$\psi_{R(L)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi_{R(L)}^1 + \xi_{R(L)}^2 \right). \quad (6.18)$$

reemplazando en la Ec.(6.17) se obtiene

$$\begin{aligned} H_{XY-M} = & \int dx \left[\frac{i}{2} \sum_{\alpha=1}^2 [\xi_R^\alpha \partial_x \xi_R^\alpha - \xi_L^\alpha \partial_x \xi_L^\alpha] \right. \\ & \left. + i(\gamma - \delta) \xi_R^1 \xi_L^1 - i(\gamma + \delta) \xi_R^2 \xi_L^2 \right], \end{aligned} \quad (6.19)$$

La Ec.(6.19) es la forma estándar del hamiltoniano de dos campos de Majorana diferentes con masas $m_1 = -\gamma + \delta$ y $m_2 = \gamma + \delta$. El punto crítico Ising es alcanzado cuando $\gamma = \pm\delta$ (por supuesto de acuerdo a nuestro resultado de diagonalización exacta de la Sección anterior). Cuando se cumple esta condición una de las masas se anula. En este punto, el comportamiento de baja energía del sistema es dominado por el fermión de Majorana no masivo. Ni bien el campo externo se hace distinto de cero, las masas de los fermiones de Majorana cambian y se necesita un valor mayor de λ_1 (es decir de δ) para alcanzar la transición Ref. [90] (ver Ec.(6.10)).

Este razonamiento puede ser extendido al caso $\Delta > 0$ ya que su único efecto es modificar la dimensión de escala de las perturbaciones a través de $K(\Delta, h)$. Consideremos para simplificar el caso $h = 0$. Es interesante notar, que para $\Delta > 0$, el coseno del campo dual (θ) es decir el término en λ_2 es menos relevante, transformándose en marginal para $\Delta = 1$ y $h = 0$ (recordar que $K(\Delta, 0)$ va de $1 \rightarrow 1/2$ para Δ yendo $0 \rightarrow 1$). Esto abre la cuestión de si todavía debería esperarse que ocurra la transición Ising. Puede argumentarse que éste es el caso analizando las ecuaciones de grupo de renormalización RG

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda_1(l)}{dl} &= (2 - K) \lambda_1(l), \\ \frac{d\lambda_2(l)}{dl} &= \left(2 - \frac{1}{K} \right) \lambda_2(l), \\ \frac{dK(l)}{dl} &= -K^2 \lambda_1^2(l) + \lambda_2^2(l). \end{aligned} \quad (6.20)$$

Estas Ecuaciones se obtienen, empleando el formalismo de expansión de producto de operadores (OPE) en espacio real sobre los operadores $\lambda_1 \cos(2\sqrt{\pi}\phi)$ y $\lambda_2 \cos(2\sqrt{\pi}\theta)$. Dicho procedimiento se detalla en [9] y se lleva a cabo para el modelo DSG en [94].¹

Los valores $\lambda_{1,2}$ para los cuales las derivadas $d\lambda_{1,2}/dl = 0$ en las Ecs.(6.20) determinan los puntos fijos (críticos). El punto fijo trivial de líquido de Luttinger $c = 1$ (Gaussiano) en $\lambda_{1,2} = 0$ es inestable respecto de estos parámetros y numéricamente puede mostrarse que el sistema fluye hacia otro punto crítico no trivial, el de Ising $c = 1/2$. De hecho esto puede analizarse cualitativamente

¹Alternativamente las dos primeras Ecs.(6.20) se pueden obtener utilizando el mismo procedimiento del Capítulo 2 (Sección 2.6).

proponiendo para la línea crítica (con $h = 0$) el ansatz $\lambda_1 = \lambda_2^\nu$ o en términos de δ y γ

$$\delta \propto \gamma^\nu. \quad (6.21)$$

Reemplazando la Ec.(6.21) en las dos primeras Ecs.(6.20) encontramos que ν depende de k de la siguiente forma

$$\nu = \frac{2 - \frac{1}{K}}{2 - K}. \quad (6.22)$$

El comportamiento a gran escala de K que llamaremos K_{ef} debe obtenerse a partir de la solución numérica del conjunto de Ecs.(6.20), sujeto a dicho ansatz. En la Sección siguiente proporcionamos evidencia numérica sobre la validez de la Ec.(6.21) con $\nu = 1$ para $\Delta = 1$ y $h = 0$.

6.4. Resultados numéricos

Examinaremos la conjetura dada por la Ec.(6.21) con $\nu \simeq 1$ estudiando en forma numérica el caso extremo $SU(2)$ ($\Delta = 1$). Esto permite una verificación independiente del contexto de la bosonización dentro del régimen no perturbativo.

6.4.1. Espectro del gap a $\langle M \rangle = 0$

Hemos analizado numéricamente el gap del hamiltoniano dado por la Ec.(6.1) a $\langle M \rangle = 0$ ($h = 0$) por medio del método de diagonalización Lanczos (Ref. [13]). Este cálculo se ha llevado a cabo sobre cadenas finitas de longitud $L = N$ (donde N es el número de sitios) con condiciones de contorno periódicas. Si $L/4$ es un entero se muestra que el estado fundamental $|GS\rangle$ es par, es decir $\langle GS | \exp(i\pi \sum_n \sigma_n^+ \sigma_n^-) | GS \rangle = 1$, ($S_n^\pm \equiv \sigma_n^\pm/2$), de otro modo el espectro tiene que ser computado dentro del subespacio impar de H . Este aspecto es también encontrado en el caso de fermiones libres (ver Ref. [95]).

En la Fig.6.4 se muestran los resultados obtenidos para $14 \leq L \leq 22$ sitios. Las longitudes alcanzadas en nuestro tratamiento computacional están, en parte, limitadas por la ruptura de simetría $U(1)$ para el caso $\gamma \neq 0$. Como es de esperar los efectos de tamaño finito se hacen notables al aproximarse al régimen crítico, particularmente en cuanto a lo pronunciado del mínimo del gap. Esto es debido a que la convergencia hacia el límite termodinámico es típicamente logarítmica (Refs. [96] y [97]). Notablemente, la localización de estos mínimos resulta, sin embargo, suficientemente independiente del tamaño del sistema. Esto último facilita la estimación de la línea crítica. Para $L \leq 12$, sin embargo, el gap del espectro se incrementa monótonamente con $|\gamma|$. Entonces, para evitar resultados espureos, no hemos considerado los datos de longitudes menores que este límite. A su vez esto impide el uso de la mayoría de los algoritmos de extrapolación encontrados en la literatura (Refs. [96] y [97]). Estos algoritmos son eficientes sólo si pueden ser iterados varias veces sobre una larga secuencia de tamaños. Por lo tanto nos limitamos a una extrapolación del gap estándar (logarítmica) de la forma

$$g \simeq \text{gap}(L) + \frac{A}{LB}. \quad (6.23)$$

Los resultados mostrados en el gráfico insertado en la Fig.6.4 indican, sin embargo, un gap cercano al mínimo obtenido con las muestras de tamaño finito.

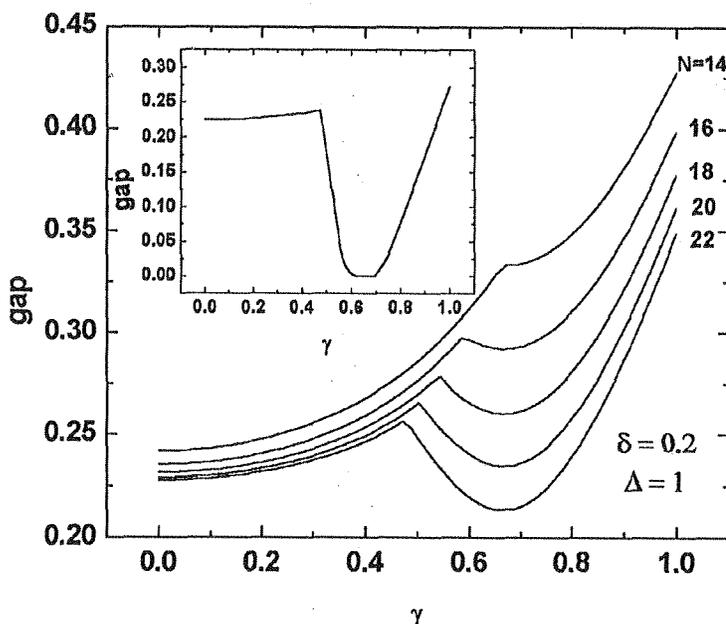


Figura 6.4: Espectro del gap para diferentes tamaños del hamiltoniano dado por la Ec.(6.1) con $\Delta = 1$. La Figura insertada muestra la extrapolación al límite termodinámico.

Al estudiar numéricamente el régimen no masivo, obtenido a partir de dicho mínimo, debe tenerse presente que las correcciones de tamaño finito al gap de la cadena de Heisenberg homogénea ($\gamma = \delta = 0$) varían lentamente, como $\ln(\ln L)/\ln^2 L$, afectando entonces los resultados sobre un rango amplio de tamaños (Ref. [98]). Por consiguiente estamos limitados a considerar regímenes donde tanto $|\gamma|$ como $|\delta|$ no sean demasiado pequeños. La Fig. 6.5 exhibe nuestra estimación de la línea crítica para $\delta \geq 0,15$. En esta región se observa un extenso régimen lineal, en concordancia con la predicción de la bosonización. En efecto, nuestra estimación numérica es consistente con el valor de ν obtenido mediante bosonización $\nu \simeq 1$. También se han obtenido resultados similares para el régimen intermedio $0 < \Delta < 1$.

6.4.2. Curva de magnetización del modelo XYZ

Comencemos por analizar la curva de magnetización del estado fundamental (GS) del hamiltoniano dado por la Ec.(6.1). Dicha curva ha sido calculada numéricamente utilizando

$$\langle M_{XYZ} \rangle = \frac{1}{L} \sum_j \langle GS | \sigma_j^z | GS \rangle, \quad (6.24)$$

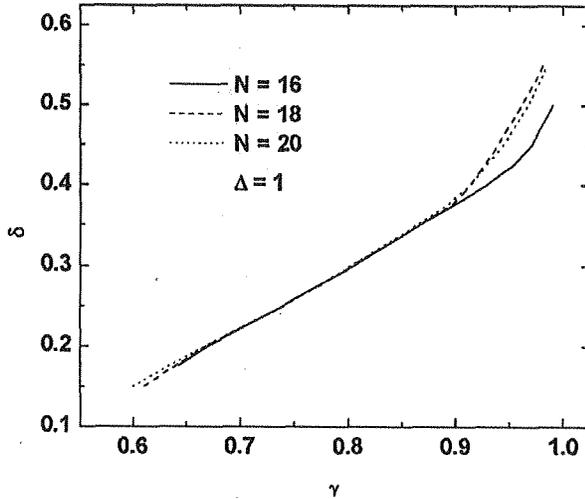


Figura 6.5: Línea sin gap del hamiltoniano dado por la Ec.(6.1) en el espacio de los parámetros (γ, δ) obtenida a partir de las posiciones del mínimo de los gaps de muestras finitas con $\Delta = 1$ y $h = 0$, $\langle M \rangle = 0$.

donde en general la paridad $\exp(i\pi \sum_n \sigma_n^+ \sigma_n^-)$ del $|GS\rangle$ es dependiente tanto del campo magnético como del tamaño. A pesar de la existencia de todo un régimen masivo alejado de la línea crítica, la magnetización, en lugar de exhibir un plateau a $\langle M \rangle = 0$, crece linealmente para campos h aplicados pequeños (un aspecto que también se mantiene para $\Delta = 0$). Esto se observa en el gráfico insertado en la Fig. 6.6. El origen de este crecimiento de la magnetización con el campo es la ruptura de simetría $U(1)$ que se produce para $\gamma \neq 0$. Esto hace que $\langle M \rangle$ no se acople a ninguna magnitud conservada y siempre crezca con h , a pesar de la tendencia del término de dimerización δ a generar fases masivas. Ya que este régimen de pseudoplateau está dominado por una amplitud de gap finita (esto es correlaciones de corto alcance), los efectos de tamaño finito aquí se hacen despreciables. Esto hace que nuestros resultados para campos bajos sean los más confiables. Dicha situación se mantiene hasta que se produce el primer cambio de paridad en el $|GS\rangle$ (indicado por un incremento abrupto en la magnetización). Esto último asociado, probablemente, a la emergencia de modos sin gap, tales como los del caso de fermiones libres.

Al seleccionar los parámetros del hamiltoniano (Ec.(6.1)) en un punto no masivo con $(h = 0)$ se produce un efecto interesante cuyo análisis hemos relegado para investigación posterior. En la Fig. 6.7 hemos seleccionado el punto no masivo $\gamma = 0,668$, $\delta = 0,2$ ($\Delta = 1$). Como puede observarse, esta elección de parámetros remueve todos los pseudoplateaux observados en la Fig. 6.6 con un punto masivo $\gamma - \delta$. También nótese que cerca del límite de saturación en ambos casos la susceptibilidad tiende a diverger, a diferencia del caso XY.

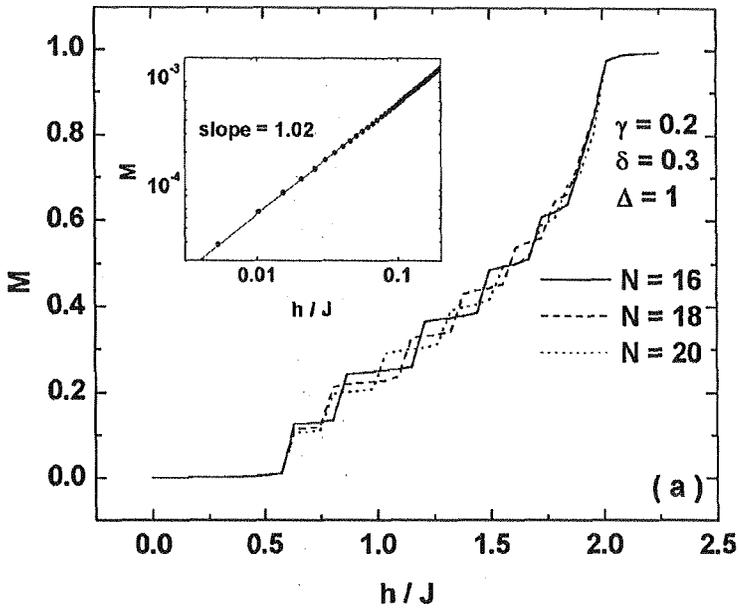


Figura 6.6: Curvas de magnetización para el caso $\Delta = 1$. El comportamiento escalonado está relacionado con los cambios de paridad en el estado fundamental. La Figura insertada exhibe la respuesta a campos externos bajos.

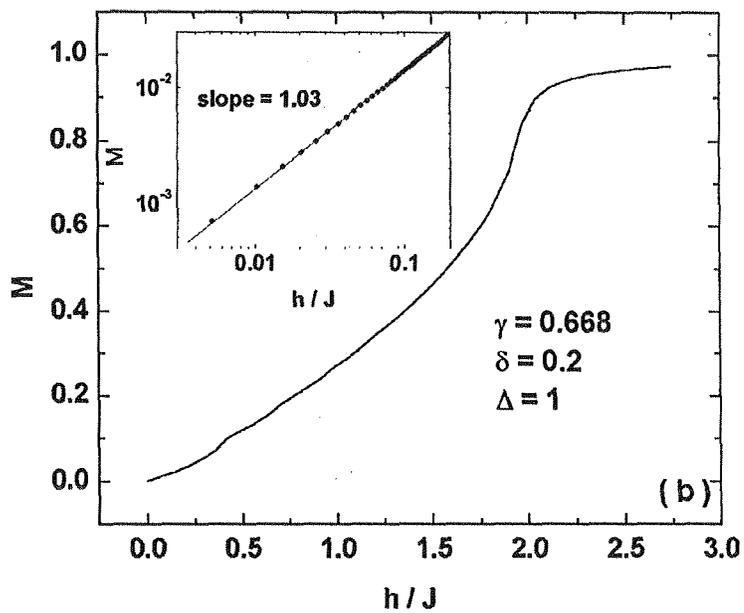


Figura 6.7: Curva de magnetización para el caso $\Delta = 1$ para un punto (γ, δ) no masivo. La Figura insertada exhibe la respuesta a campos externos bajos.

Finalmente analicemos la estructura de las curvas de magnetización cerca de los campos críticos h_c , que de acuerdo a los resultados obtenidos mediante bosonización debería corresponder a un comportamiento Ising crítico. Tras estimar dichos campos mediante los $h_c(L)$ responsables del primer salto de paridad en el $|GS\rangle$ en cadenas finitas, obtenemos un comportamiento logarítmico sobre más de dos órdenes de magnitud respecto de $(h - h_c)(\ln|h - h_c| - 1)$. Esto es mostrado en la Fig. 6.8. El valor de la pendiente de la línea superior resulta casi independiente del tamaño del sistema y es indicativo del régimen logarítmico determinado por ambas aproximaciones, la de fermiones libres y la de bosonización.

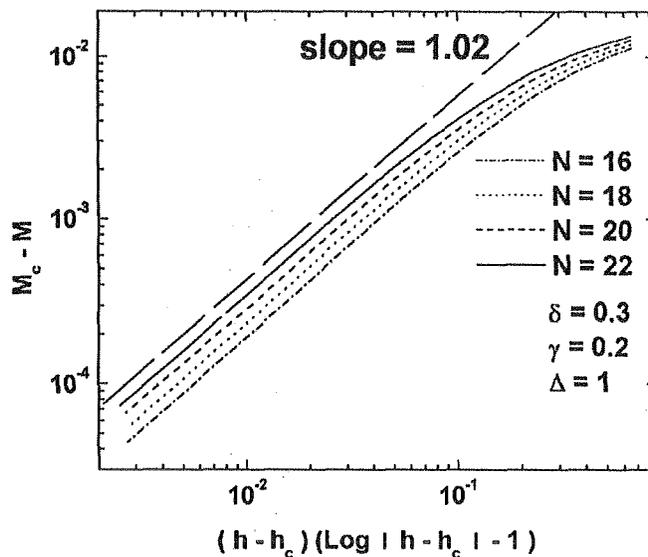


Figura 6.8: Comportamiento de la magnetización para $\Delta = 1$ cerca de los campos críticos referidos en el texto. El valor de la pendiente sugiere la emergencia de un régimen logarítmico como el observado en la Fig.(6.2)

6.5. Conclusiones

Se ha estudiado la competición entre la tendencia hacia la formación de excitaciones de espín masivas (a través de intercambios δ dimerizados) y hacia el ordenamiento XY (vía el apareamiento de las interacciones γ). Desde el punto de vista de la bosonización, estas tendencias se manifiestan en la existencia de dos interacciones relevantes (competitivas) y son responsables de la transición de tipo Ising. Debido a la ruptura de simetría $U(1)$, el campo externo h no se acopla a ninguna cantidad conservada y, entonces, el proceso de magnetización es esencialmente modificado con respecto al caso $\gamma = 0$. Es decir, la magnetización siempre crece a pesar de la presencia de regímenes masivos. Por lo tanto, los regímenes masivos corresponden en este caso a la aparición de "pseudoplateaux"

y lo que se observa en la transición es un cambio abrupto de la pendiente.

Tanto la bosonización como el análisis numérico apoyan la idea de que el mecanismo físico que da lugar a la transición Ising es suficientemente general, y válido en ambos límites, de acoplamiento fuerte y débil. Siguiendo las ideas dadas en la Ref. [30], puede conjeturarse que se mantiene una imagen similar para cada plateau en la cadena de Fibonacci XYZ . El mecanismo en ese caso es el mismo, donde el operador relevante proveniente de la dimerización es reemplazado para cada plateau por el operador conmensurado a la frecuencia correspondiente del espectro de Fourier de la cadena de Fibonacci. A partir de esto se concluye que una imagen similar a la encontrada en el caso XY (Ref. [92]) es válida también para cadenas de Fibonacci XYZ genéricas.

El análisis numérico ha otorgado un apoyo adicional a nuestros resultados teóricos en varias situaciones no perturbativas. Hemos encontrado evidencia de la existencia de una línea no masiva junto con el esperado comportamiento tipo Ising cerca de los campos críticos. A su vez, esto sugiere que la mayoría de los aspectos básicos del sistema completamente interactivo pueden ser capturados por la imagen de fermiones libres discutida más arriba. Sin embargo, permanece bajo análisis la cuestión acerca de si todos cambios de paridad del GS inducidos por el campo (Fig. 6.6) corresponden o no a transiciones Ising en el límite termodinámico. En esta última observación, será interesante elucidar si hay una relación intrínseca entre la desaparición de estos cuasiplateaux (Fig.6.7) con el cierre del gap para $h = 0$.

Capítulo 7

Impurezas en escaleras de espín 1/2

7.1. Introducción

Las escaleras de espín son sistemas relacionados con las cadenas de espín estudiadas en los Capítulos anteriores. Las mismas están constituidas por un número finito de cadenas lineales acopladas. Desde que se produjo la síntesis de materiales con estructura de escaleras de espín, como el SrCu_2O_3 (Refs. [99], [100]) o $(\text{Sr,Ca,La})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ (Ref. [101]) y el descubrimiento posterior de la superconductividad en condiciones de alta presión en el compuesto $\text{Sr}_{0,4}\text{Ca}_{13,6}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41,84}$ (Ref. [102]), las escaleras formadas por dos cadenas lineales (dos patas) de espín 1/2 han sido el centro de las investigaciones teóricas sobre el tema (ver una reseña en las Refs. [16] y [103]). Este modelo es de particular interés, ya que el estado fundamental es no magnético (hay un gap de espín que se propaga), siendo el mismo un ejemplo de un líquido de espín donde las correlaciones muestran un decaimiento exponencial con la distancia. Actualmente son bien comprendidas muchas de las propiedades del sistema puro, tales como la relación de dispersión de las excitaciones elementales (Refs. [104], [105], [106], [107]) y la termodinámica (Ref. [108]). Las excitaciones elementales son modos tripletes con una relación de dispersión masiva.

Una extensión importante del modelo de espín puro comprende la inclusión de impurezas, que son inevitables en la mayoría de los compuestos reales. Si bien muchos resultados sobre escaleras de espín se han obtenido mediante técnicas de bosonización [109] la presencia de impurezas distribuidas en forma aleatoria no permite una adaptación sencilla de las mismas.

En este trabajo se discuten los efectos de las impurezas sobre la relación de dispersión de las excitaciones triplete elementales focalizando la atención sobre la aparición de estados ligados en el gap de espín, utilizando técnicas analíticas y numéricas [34]. Tales estados podrían ser visibles en experimentos de resonancia. Pueden distinguirse dos tipos de impurezas. Primero, iones magnéticos, tales como el Cu^{+2} en el SrCu_2O_3 pueden ser reemplazados por iones no magnéticos como los de Zn, efectivamente removiendo un espín 1/2 o por otros iones con el mismo o diferente momento efectivo (ver Ref. [110] y las subsiguientes indicadas allí). El reemplazo de un ion portando espín será referido como una

impureza en un sitio. Nótese que también es concebible que una impureza en un sitio de lugar a modificaciones de los acoplamientos de intercambio con los sitios vecinos. Segundo, y esto es lo que tenemos en mente en este trabajo, las interacciones de intercambio mismas pueden ser modificadas dopando los iones-X en, por ejemplo, en el enlace Cu-X-Cu, generando lo que llamaremos de aquí en adelante una impureza de acoplamiento (o simplemente impureza). Tal situación es descripta en la Refs. [111] y [112] para la cadena de espines alternados $(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{Cu}(\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x})_3$ donde los iones de Cl y Br son sustituidos uno por el otro. Además existe un material con estructura de escalera de espín, el $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$ (Refs. [113], [114]) donde pueden considerarse experimentos de dopaje análogos. Se ha sugerido que este material puede ser descripto por una escalera de espín de dos patas en el límite de acoplamiento fuerte, es decir el acoplamiento a lo largo de las patas J_L es mucho menor que el de los escalones J_R ; ver Refs. [113], [114]. Más aún, existe un número de compuestos orgánicos que son candidatos a ser descriptos mediante una estructura de escalera de espín en el límite de acoplamiento fuerte (ver, por ej. Ref. [115]). Como un ejemplo de un sistema inorgánico mencionamos el CaV_2O_5 para el cual se ha estimado un cociente $J_L/J_R \simeq 0,1$ (Refs. [116], [117]).

En la literatura, se han estudiado acoplamientos aleatorios en sistemas de escaleras de espín tanto en el régimen de acoplamiento fuerte como débil (opuesto al anterior) utilizando métodos de grupo de renormalización en espacio real (Refs. [118], [119]), bosonización (Ref. [120]) y mapeo sobre fermiones de Dirac de masa aleatoria (Ref. [121]). La mayoría de estas investigaciones se ha centrado en el análisis del efecto del desorden sobre la estabilidad del estado fundamental y del gap. En dichos estudios, se ha encontrado que las escaleras de espín desordenadas exhiben propiedades termodinámicas no universales (ver por ej. Ref. [119]) similares a las halladas en las cadenas desordenadas de espín 1/2 dimerizadas (Ref. [122]).

Primero definiremos el modelo y llevaremos a cabo una proyección sobre el espacio de un triplete. Esta aproximación provee resultados que son correctos a primer orden en J_L/J_R y son cuantitativamente relevantes para materiales que poseen una estructura de escalera de espín en el régimen de acoplamiento fuerte. En segundo lugar se resolverá analíticamente el problema de una sola impureza en el límite de acoplamiento fuerte y de pequeños arreglos de impurezas sobre sitios vecinos y se compararán con las soluciones de la diagonalización mediante el método de Lanczos del modelo completo de la escalera de espín.

Finalmente se considerarán concentraciones finitas de impurezas en el límite de acoplamiento fuerte tanto numéricamente como por medio de técnicas diagramáticas.

7.2. Modelo de escalera de dos patas de espín 1/2

El hamiltoniano de la escalera de dos patas de espín 1/2 puro (sin impurezas) está dado por

$$H_0 = \sum_{l=1}^N [J_R \vec{S}_{l,1} \cdot \vec{S}_{l,2} + J_L (\vec{S}_{l,1} \cdot \vec{S}_{l+1,1} + \vec{S}_{l,2} \cdot \vec{S}_{l+1,2})]. \quad (7.1)$$

$\vec{S}_{l,1(2)}$ son los operadores de espín 1/2 actuando sobre el sitio l de la pata 1(2) y N es el número de escalones. En la Fig. 7.1 se muestra esquemáticamente la estructura de la escalera. De aquí en adelante haremos $J_R = 1$ en todas las computaciones explícitas, pero mantendremos J_R en las ecuaciones por claridad. Se analizarán las siguientes casos

$$H = H_0 + H'; \quad H' = \sum_{n=1}^{N_{\text{imp}}} h_n \quad (7.2)$$

donde N_{imp} es el número de acoplamientos modificados y h_n es la perturbación local en el sitio l_n . La misma da lugar a la modificación de la interacción en el escalón $J'_R = J_R + \delta J_R$ o modificando la interacción entre l_n y l_{n+1} en una de las patas en la forma $J'_L = J_L + \delta J_L$. Explícitamente, h_n está dado por

$$\begin{aligned} h_n &= \delta J_R \vec{S}_{l_n,1} \cdot \vec{S}_{l_n,2} \\ h_n &= \delta J_L \vec{S}_{l_n,j} \cdot \vec{S}_{l_{n+1},j}; \quad j = 1, 2. \end{aligned} \quad (7.3)$$

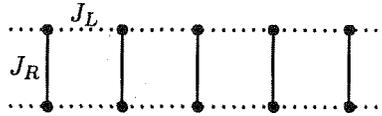


Figura 7.1: Diagrama esquemático de la escalera homogénea de dos patas de espín 1/2. Los círculos llenos indican las posiciones de los espines. Las líneas continuas y de puntos muestran los acoplamientos J_R y J_L , respectivamente, enfatizando nuestro régimen de interés $J_R \gg J_L$.

7.2.1. Proyección sobre el subespacio de un triplete

Estudiaremos el efecto de las interacciones modificadas (Ecs.(7.3)) sobre la relación de dispersión de un triplete en el límite de acoplamiento fuerte $J_L \ll J_R$ proyectando sobre el subespacio de excitaciones de un triplete. De este modo, todos los términos contenidos en H_0 (Ec.(7.1)) que crean o destruyen excitaciones de dos tripletes son despreciados.

Para la descripción de las excitaciones de baja energía de la escalera es útil mapear los operadores de espín sobre los denominados **operadores de enlace bosónicos** (bond boson operators) Refs. [123], [124], [125]. Los mismos se construyen de la siguiente manera. Consideremos dos operadores de espín 1/2 $S_{l,1}$ y $S_{l,2}$ sobre el escalón l y el índice 1(2) identificando cada pata. Los autoestados de este sistema de dos espines son el estado singlete $|s_l\rangle$ y tres estados triplete $|t_{\alpha,l}\rangle$ siendo $\alpha = x, y, z$. En la descripción de operadores de enlace bosónicos

estos son creados a partir de un estado de vacío $|0\rangle$ aplicando los operadores $s_l^\dagger, t_{\alpha,l}^\dagger$

$$\begin{aligned} s_l^\dagger|0\rangle &= |s_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)_l \\ t_{x,l}^\dagger|0\rangle &= |t_{x,l}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle)_l \\ t_{y,l}^\dagger|0\rangle &= |t_{y,l}\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)_l \\ t_{z,l}^\dagger|0\rangle &= |t_{z,l}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)_l. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Considerando los diferentes elementos de matriz $\langle s_l | S_{l,1(2)} | t_{\alpha,l} \rangle, \dots$, se obtiene la siguiente representación (Ref. [125])

$$S_{l,j}^\alpha = \frac{1}{2} \{ \pm s_l^\dagger t_{\alpha,l} \pm t_{\alpha,l}^\dagger s_l - i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} t_{\beta,l}^\dagger t_{\gamma,l} \}. \quad (7.5)$$

El signo más (menos) corresponde a $j = 1$ (2) lo cual identifica a cada pata. Para evitar la doble ocupación (no física) se debe imponer la siguiente restricción local (se considera suma sobre índices repetidos)

$$s_l^\dagger s_l + t_{\alpha,l}^\dagger t_{\alpha,l} = 1. \quad (7.6)$$

Imponiendo relaciones de conmutación bosónicas a los operadores $s_l, s_l^{(\dagger)}, t_{\alpha,l}, t_{\beta,l}^{(\dagger)}$ los operadores $S_{l,1(2)}^\alpha; \alpha = x, y, z$ satisfagan el álgebra de $SU(2)$. De este modo arribamos a una descripción de bosones sin masa pero por un procedimiento distinto del empleado en los Capítulos anteriores.

La proyección sobre el subespacio de excitaciones de un triplete se obtiene tras implementar la restricción (Ec.(7.6)) eliminando el operador singlete $|s_l\rangle$ a través de una transformación tipo Holstein-Primakoff (Refs. [123], [124], [126])

$$s_l = s_l^\dagger = \sqrt{1 - t_{\alpha,l}^\dagger t_{\alpha,l}}. \quad (7.7)$$

Empleando la Ec.(7.5) en la Ec.(7.1) e insertando la Ec.(7.7), reteniendo términos hasta segundo orden en los operadores triplete (esto equivale a hacer directamente $s_l = s_l^\dagger \equiv 1$) se obtiene el hamiltoniano efectivo

$$H_{0,ef} = J_R \sum_l t_{\alpha,l}^\dagger t_{\alpha,l} + \frac{J_L}{2} \sum_l (t_{\alpha,l+1}^\dagger t_{\alpha,l} + \text{h.c.}) \quad (7.8)$$

donde no hemos incluido constantes aditivas irrelevantes. $H_{0,ef}$ es diagonalizado mediante una transformación de Fourier

$$t_{\alpha,k}^\dagger = (1/\sqrt{N}) \sum_l e^{ikl} t_{\alpha,l}^\dagger, \quad (7.9)$$

obteniéndose

$$H_{0,ef} = \sum_k \epsilon_k t_{\alpha,k}^\dagger t_{\alpha,k} \quad (7.10)$$

en la cual la relación de dispersión de las excitaciones de un triplete es (Ref. [104])

$$\epsilon_k = J_R + J_L \cos(k). \quad (7.11)$$

Las perturbaciones h_n causadas por las modificaciones de los acoplamientos de intercambio son expresadas en términos de los operadores de enlace bosónicos como sigue

$$h_n = \frac{1}{N} \sum_{k, k_1} v_{R(L)}(k, k_1) t_{\alpha, k}^\dagger t_{\alpha, k_1} \quad (7.12)$$

donde los potenciales $v_{R(L)}(k, k_1)$ están dados por

$$\begin{aligned} v_R(k, k_1) &= \delta J_R e^{i l_n \Delta k} \\ v_L(k, k_1) &= \frac{\delta J_L}{4} (e^{i l_n \Delta k} e^{i k_1} + e^{-i l_n \Delta k} e^{-i k}) \end{aligned} \quad (7.13)$$

en las cuales $\Delta k = k_1 - k$ es el momento transferido en un proceso de dispersión. Juntando todo lo anterior, el hamiltoniano efectivo toma la forma

$$H_{\text{ef}} = H_{0, \text{ef}} + H'_{\text{ef}}; \quad H'_{\text{ef}} = \sum_{n=1}^{N_{\text{imp}}} h_n. \quad (7.14)$$

7.3. Impureza aislada y pequeños agrupamientos de impurezas (clusters)

La solución del problema de una impureza aislada para el potencial efectivo Ec.(7.14), es decir sólo un acoplamiento modificado, es obtenida a partir de la Ecuación de Schrödinger en espacio real. También se consideran casos de arreglos con un número pequeño de impurezas y el problema de una impureza en el hamiltoniano en el espacio completo original (Ec.(7.2)).

7.3.1. Problema de una impureza. Tratamiento en espacio real

La Ecuación de Schrödinger correspondiente a la Ec.(7.14) con una impureza puede ser escrita en la siguiente forma

$$[I - G^0(E) H'_{\text{ef}}] |\psi\rangle = 0, \quad (7.15)$$

donde

$$G^0(E) = \frac{1}{E - H_{0, \text{ef}}} \quad (7.16)$$

es el **operador Función de Green** libre asociado al hamiltoniano efectivo $H_{0, \text{ef}}$ definido en la Ec.(7.8) e I es el operador identidad. $|\psi\rangle$ es un autoestado del hamiltoniano H_{ef} . Se obtiene una representación conveniente al trabajar en

el espacio de coordenadas de la base de un triplete $\{|t_{\alpha,l}\}$. La expansión de la (Ec.(7.15)) en dicha base está dada por

$$\langle t_{\alpha,l}|I - G^0(E)|t_{\beta,l'}\rangle \langle t_{\beta,l'}|H'_{\text{ef}}|t_{\gamma,l''}\rangle \langle t_{\gamma,l''}|\psi\rangle = 0, \quad (7.17)$$

donde hemos utilizado dos veces la completitud de $\{|t_{\alpha,l}\}$ y por lo tanto se suma sobre índices repetidos. Como la impureza es localizada, sólo son no nulos los elementos de matriz en el entorno de la misma. Esta es la ventaja de trabajar en la representación de coordenadas para el caso de una impureza o pequeños agrupamientos de impurezas. Los elementos de matriz $\langle t_{\alpha,l}|G^0(E)|t_{\beta,l'}\rangle$ son diagonales en α, β y dependen sólo de la distancia $\Delta l \equiv |l - l'|$. Para evaluarlos, debemos utilizar la Ec.(7.9) ya que $G^0(E)$ es diagonal en la representación de momentos $\{|t_{\alpha,k}\}$. En el límite continuo $N \rightarrow \infty$ la sumas implicadas se transforman en integrales y para dichos elementos de matriz se obtiene

$$\langle t_{\alpha,l}|G^0(E)|t_{\beta,l'}\rangle \equiv [G^0(E)]_{\Delta l}^{\alpha,\beta} = \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos(k \Delta l)}{E - J_R - J_L \cos k} dk, \quad (7.18)$$

siendo $\alpha, \beta = x, y, z$. A pesar que E tiene que ser prolongada analíticamente al plano complejo para obtener la función de Green retardada, haciendo el reemplazo $E \rightarrow E + i0^+$, nótese que para E real, $|E - J_R| > J_L$, los elementos de matriz en la Ec.(7.18) son reales. Por simplicidad colocamos el acoplamiento del escalón modificado en el sitio $l = 0$ y los acoplamientos modificados de las patas entre los sitios $l = 0$ y $l = 1$. Las autoenergías correspondientes a los estados (anti-) ligados son obtenidas mediante la condición para soluciones no triviales para el sistema homogéneo dado por la Ec.(7.15), es decir

$$\text{Det} [I - G^0(E) H'_{\text{ef}}] = 0, \quad (7.19)$$

evaluado en la representación de coordenadas. Como hemos mencionado, debido a la localización de las impurezas sólo es necesario considerar la submatriz de 2×2 superior izquierda (de hecho para la impureza en el escalón sólo el primer elemento). Nótese, sin embargo, que los autovalores son triplemente degenerados, ya que $\alpha = x, y, z$. Para el caso $\delta J_R \neq 0, \delta J_L = 0$ las energías asociadas a los estados (anti-)ligados están dadas por

$$E_{1,R} = J_R \pm \sqrt{J_L^2 + (\delta J_R)^2}. \quad (7.20)$$

El signo más (menos) en la Ec.(7.20) corresponde a $\delta J_R > 0$ ($\delta J_R < 0$). Entonces aparece un estado ligado en el gap de espín, es decir debajo de la banda de un triplete, si $\delta J_R < 0$ mientras que para $\delta J_R > 0$, se genera, inversamente, un estado anti-ligado por encima de la banda de un triplete.

Análogamente, se encuentran las energías de los estados (anti-) ligados en el caso de una sola impureza en la pata $\delta J_R = 0, \delta J_L \neq 0$. Para $\delta J_L > 0$ existen siempre tanto un estado ligado como uno no ligado, siendo sus energías

$$E_{1,L} = J_R \pm \frac{J_L + \frac{\delta J_L}{2} \left(1 + \frac{\delta J_L}{4J_L}\right)}{1 + \frac{\delta J_L}{2J_L}}; \quad \delta J_L > 0. \quad (7.21)$$

Por otro lado, debe notarse que no hay estados fuera de la banda de un triplete para $-4J_L < \delta J_L < 0$, en cambio, se espera la aparición de modos resonantes

dentro de la banda (ver Sección 7.4.2). Finalmente para acoplamientos ferromagnéticos fuertes $\delta J_L < -4J_L$, la Ec.(7.21) posee nuevamente dos soluciones. Sin embargo, restringiremos nuestra discusión al caso de acoplamientos anti-ferromagnéticos.

La función de onda para los estados (anti-) ligados $\psi_\alpha(l)$ también puede ser derivada analíticamente. Para $\delta J_R \neq 0$, $\delta J_L = 0$ se tiene

$$\psi_\alpha(l) \propto [G^0(E_{1,R})]_l^{\alpha\alpha} \quad (l > 0), \quad (7.22)$$

y para $\delta J_L \neq 0$, $\delta J_R = 0$

$$\psi_\alpha(l) \propto [G^0(E_{1,L})]_l^{\alpha\alpha} + [G^0(E_{1,L})]_{l-1}^{\alpha\alpha} \quad (l > 1). \quad (7.23)$$

La extensión de $\psi_\alpha(l)$ en espacio real sólo depende del cociente $\delta J_R/J_L$ (o $\delta J_L/J_L$, respectivamente). $|\psi_\alpha(l)|^2$ es más angosta (especialmente más localizada alrededor de la posición de la impureza) cuanto mayor es dicho cociente. Por ejemplo, $|\psi_\alpha(l=4)|^2/|\psi_\alpha(l=1)|^2 < 0,01$ para $\delta J_R/J_L = 1$, $\delta J_L = 0$, mientras que $|\psi_\alpha(l=4)|^2/|\psi_\alpha(l=1)|^2 \simeq 0,15$ para $\delta J_R/J_L = 1/3$.

7.3.2. Agrupamientos pequeños de impurezas (clusters)

El efecto de un número reducido de impurezas en un arreglo predeterminado (clusters de impurezas) puede estudiarse mediante la correspondiente solución de la Ec.(7.15) en espacio real. Consideremos la presencia de impurezas del mismo tipo localizadas sobre algunos de los primeros N_c sitios de la escalera. Las autoenergías de los estados (anti-) ligados dependen en principio tanto del número de acoplamientos modificados como de las distancias entre ellos como así también de las perturbaciones $\delta J_{R(L)}$ mismas. Es natural esperar que los autoestados de una impureza interfieran entre sí cuando las impurezas se encuentran suficientemente próximas. Como en el caso de una sola impureza, las autoenergías de un arreglo dado de impurezas son calculadas resolviendo la Ec.(7.19). En este caso, sólo necesita ser considerada la submatriz superior izquierda de dimensiones $N_c \times N_c$. Como un ejemplo, mostramos la expresión analítica para el caso de la modificación de los acoplamientos de dos escalones vecinos ($N_c = 2$). Para un δJ_R dado la solución de la Ec.(7.19) es

$$E_{2,R} = \frac{J_L J_R \pm J_L^2 + 2J_L \delta J_R \pm 2\delta J_R (J_R + \delta J_R)}{J_L \pm 2\delta J_R}. \quad (7.24)$$

El signo mas (menos) corresponde a $\delta J_R > 0$ (< 0). Hemos calculado expresiones equivalentes para arreglos de hasta $N_c = 5$. En la Sección 7.4.3 mostraremos cómo la influencia de tales disposiciones de impurezas puede explicar los detalles de la estructura de picos que se presenta en la densidad de estados, obtenida mediante diagonalización numérica de sistemas con una concentración finita de impurezas.

7.3.3. Comparación con la diagonalización exacta

Los resultados de esta Sección fueron llevados a cabo por integrantes del grupo del Dr. W. Brenig (Braunschweig University, Alemania), como parte de una colaboración académica con nuestro grupo [34].

Para testear la región de validez de los resultados anteriores a primer orden en J_L/J_R , se llevó a cabo una comparación con las soluciones numéricas obtenidas resolviendo el hamiltoniano completo (Ec.(7.2)), es decir sin proyectar sobre el subespacio de un triplete, con una impureza en el escalón o en las patas.

Para la solución de este problema se ha explotado la conservación de la componente S^z ; la simetría de inversión de espín, la simetría de reflexión en la posición de la impureza y, en el caso de una impureza en el escalón, la simetría de intercambio de ambas patas. Se han aplicado condiciones de contorno periódicas en las patas para eliminar efectos de superficie aún cuando, en contraste con el caso puro, esto no da aquí lugar a simetrías espaciales adicionales. Se encuentra que los efectos de tamaño finito son minimizados para un número par de escalones. Se ha trabajado en sistemas con $N = 4, 6, 8, 10, 12$ y 14 escalones. La mayor dimensión de la matriz Hamiltoniana tratable computacionalmente es de alrededor de 10 millones y ocurre para $N = 14$ escalones (28 espines) y una impureza en las patas (donde no hay simetría de intercambio de patas).

Se ha computado el autovalor más bajo en cada uno de los subespacios relevantes usando el método de Lanczos. Los resultados para la menor energía E de excitación para N finito han sido extrapolados al límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ utilizando el algoritmo de Vanden-Broeck-Schwartz (Refs. [128], [129]) con $\alpha = -1$. Para la escalera pura esto permite estimar el gap de espín, el cual es representado por los círculos abiertos en la Fig. 7.2. Usando $N \leq 14$, se obtiene un valor $(0,5025 \pm 0,0008)J_R$ para $J_L = J_R$, en excelente acuerdo con los valores aceptados para este caso (Ref. [108]). Como una comparación adicional, la línea llena en la Fig. 7.2 muestra un aproximante de Padé [7, 6] a la serie de orden 13 para el gap de espín de la escalera pura de la Ref. [107].

Un número finito de impurezas (densidad tendiendo a cero) no afecta la banda de un triplete en el límite termodinámico. Entonces, el resultado para el gap de espín en el caso puro corresponde al límite inferior de la banda de un triplete si también hay impurezas presentes.

También se ha considerado el caso de una impureza, se ha focalizado sobre aquellas situaciones en donde se espera que la excitación de menor energía sea un estado ligado sobre la impureza, es decir $\delta J_R < 0$ o $\delta J_L > 0$, respectivamente. Para comprender el comportamiento a tamaño finito de sistemas con una impureza, es importante tener en cuenta que en este caso existen dos escalas de longitud competitivas involucradas. Por un lado, hay una longitud de correlación del sistema puro, y por el otro necesita ser considerada la extensión espacial de la función de onda de una impureza (ver Ecs.(7.22) y (7.23)). De hecho, esta última, que a su vez depende de los parámetros, puede ser mucho (mayor) que la longitud de correlación. Esto da lugar a una escala de entrecruzamiento a partir de la cual cambia el comportamiento de tamaño finito del sistema. Para J_L pequeño, la energía del nivel de impureza crece con el tamaño del sistema, en contraste con el comportamiento del sistema puro, donde la energía decrece con las dimensiones de escalera. Ya que este comportamiento de tamaño finito es preservado a J_L grande, los efectos de tamaño finito son no-monótonos en la región intermedia. Se produce un cambio en el comportamiento de tamaño finito a una dimensión característica del sistema, la cual se incrementa a medida que el nivel de impureza se aproxima a la banda de un triplete. Aquí se debe ser más cuidadosos con la extrapolación. Sólo pueden utilizarse aquellos sistemas cuyo tamaño se encuentra en el régimen asintótico para N grande. De acuerdo a esto, la Fig. 7.2 muestra los datos extrapolados para el nivel de impureza, sólo

para una región restringida de J_L . Cuando el nivel de impureza se aproxima a la banda de un triplete, las barras de error se hacen más grandes y es difícil decidir si este nivel toca la banda o se aproxima a ella asintóticamente. De cualquier manera, los datos numéricos demuestran la presencia de un estado ligado de impureza en una amplia región del espacio de parámetros.

En el límite $J_L \ll J_R$, se puede comparar con las Ecs.(7.20) y (7.21), respectivamente. De hecho se observa un acuerdo cuantitativo para J_L suficientemente pequeño, ver Fig. 7.2 (a) y el gráfico insertado en la Fig. 7.2(b). Nótese que debido a la normalización de la Fig. 7.2 es decir, $\delta J_L \sim J_L$, la Ec.(7.21) resulta en líneas rectas que comienzan a $E = 1$ para $J_L = 0$. Para J_L mayores se observan desviaciones en la Fig. 7.2, aunque todavía puede verse un nivel de impureza. De acuerdo a esto, puede esperarse que la aproximación de primer orden sea cualitativamente correcta incluso en la región de parámetro donde ya no es cuantitativamente precisa. Entonces, se puede utilizar la aproximación a primer orden para estudiar el caso de varias impurezas e incluso concentraciones finitas, lo cual ya no es sistemáticamente posible mediante el método de diagonalización de Lanczos del hamiltoniano completo.

7.4. Concentración finita de impurezas

En esta sección discutiremos el efecto de una concentración finita de acoplamientos J_R o J_L modificados, sobre la dispersión de un triplete, en el límite de acoplamiento fuerte $J_L \ll J_R$. Para resolver este problema, aplicaremos técnicas diagramáticas tales como aproximación a bajas concentraciones (LCA) y la aproximación del potencial coherente (CPA). También emplearemos técnicas de diagonalización numéricas para sistemas de tamaño grande. Asimismo, utilizaremos nuestros resultados analíticos para las autoenergías de pequeños arreglos de impurezas para explicar los detalles obtenidos en las soluciones numéricas de la densidad de estados, tanto para modos (anti-) ligados como resonantes.

Antes de considerar los métodos analíticos y compararlos con los resultados provenientes del promediado numérico de impurezas (NAV), analicemos ciertos casos límite. De aquí en adelante c denotará la concentración de impurezas. Nótese que en el caso de impurezas sobre las patas, $c = 1$ implica que todos los $2N$ acoplamientos son modificados. Los casos límite son:

- (i) El sistema puro ($c = 0$).
- (ii) El caso de una sola impureza (ver Sección 7.3.1).
- (iii) El caso $c = 1$ donde todos los acoplamientos son iguales a $J_R + \delta J_R$ o $J_L + \delta J_L$, respectivamente.

En este último caso, y para $\delta J_R \neq 0$, $\delta J_L = 0$, se esperará una banda de un triplete con dispersión

$$E_k(J_R + \delta J_R, J_L) = (J_R + \delta J_R) + J_L \cos k, \quad (7.25)$$

es decir su centro está desplazado en una cantidad δJ_R con respecto al centro de la banda original para $c = 0$. Entonces, el estado de una impureza (anti-)

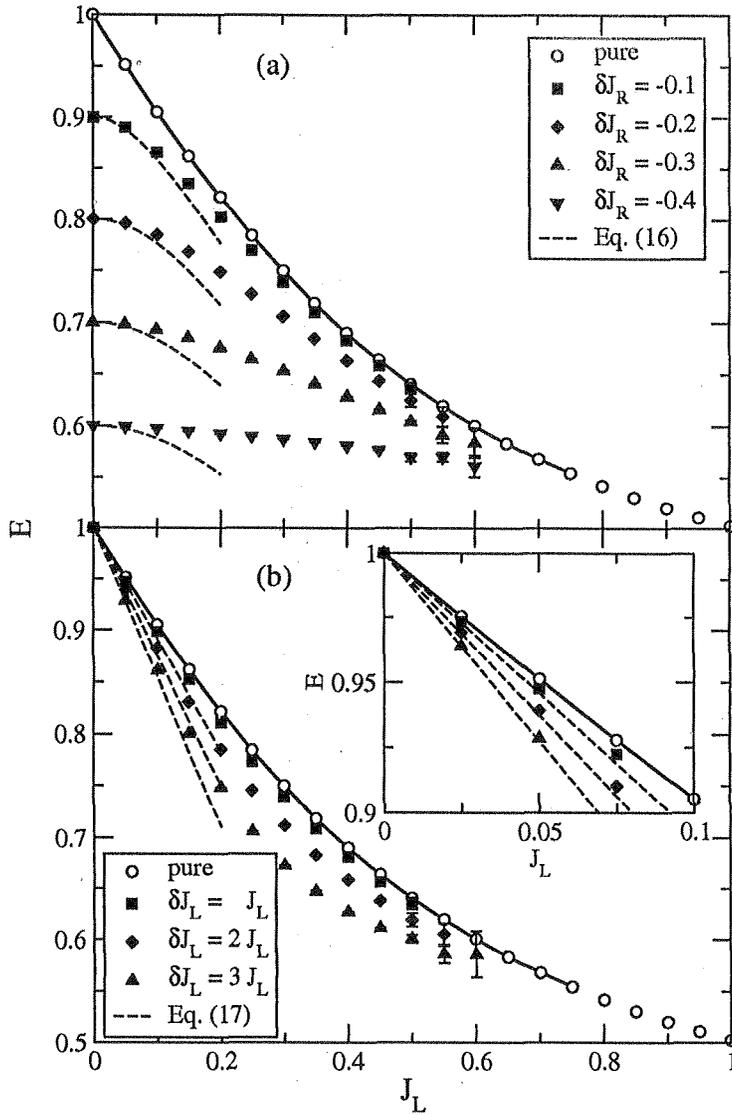


Figura 7.2: Energía E del menor estado excitado del hamiltoniano completo de la escalera de espín (Ec.(7.2)). Panel (a): una impureza aislada en un escalón $J'_R = J_R + \delta J_R$. Panel (b): impureza aislada en una pata (entre dos escalones) $J'_L = J_L + \delta J_L$. En todos los casos, se ha tomado la condición de normalización $J_R = 1$. Los símbolos indican los resultados de la extrapolación de la diagonalización de sistemas finitos mediante el método de Lanczos. Los círculos abiertos representan el sistema puro ($\delta J_R = 0$, $\delta J_L = 0$) y corresponden al gap de espín. La línea sólida es un aproximante de Padé [7, 6] a la serie de acoplamiento fuerte de orden 13 (Ref.([107])) para el gap de espín de la cadena pura. Las líneas de rayas muestran los resultados analíticos para la posición del estado ligado en el hamiltoniano efectivo (Ec.(7.14)), dados por la Ec.(7.20) para el panel (a) y Ec.(7.21) para el panel (b).

ligado debería derivar en una banda dispersiva a medida que la concentración se incrementa, estando su centro $\epsilon(c)$ entre

$$J_R - \sqrt{J_L^2 + (\delta J_R)^2} < \epsilon(c) < J_R + \delta J_R; \quad \delta J_R < 0. \quad (7.26)$$

Para $\delta J_R = 0$, $\delta J_L > 0$, la dispersión triplete en el límite $c = 1$, es decir, todos los J_L modificados será

$$E_k(J_R, J_L + \delta J_L) = J_R + (J_L + \delta J_L) \cos k. \quad (7.27)$$

De este modo, los estados anti-ligado y ligado aparecen simétricamente con respecto al centro de la banda original. Al incrementar la concentración, aparecerán niveles adicionales de impurezas y eventualmente se fundirán con la banda original, la cual finalmente ($c = 1$) poseerá un ancho $(J_L + \delta J_L)$.

7.4.1. Aproximaciones Diagramáticas

Comenzamos comentando brevemente algunos conceptos básicos.

El operador función de Green $G(E)$, siendo en general $E \in \mathbb{Z}$, asociado a un hamiltoniano $H = H_0 + V$ (H_0 representa en general un sistema puro, mientras que V las impurezas) se define como

$$G(E) = (E - H)^{-1}. \quad (7.28)$$

La utilidad de $G(E)$ es que el operador densidad de estados (DOS) del sistema $n(E)$ se obtiene a partir del mismo mediante

$$n(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr } G(E). \quad (7.29)$$

La Ec.(7.28) puede escribirse en términos de $G_0(E) \equiv (E - H_0)^{-1}$ (en nuestro caso Ec.(7.16)) en la forma

$$G = (1 - G_0 V)^{-1} G_0 = G_0 + G_0 T G_0, \quad (7.30)$$

donde la **matriz de scattering** o matriz-T se define como

$$T \equiv V(1 - G_0 V)^{-1}. \quad (7.31)$$

La Ec.(7.30) también puede escribirse como una **ecuación de Dyson**

$$G = G_0 + G_0 V G, \quad (7.32)$$

cuya iteración da una expansión perturbativa de G

$$G = G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + \dots \quad (7.33)$$

Este operador representa la propagación de una excitación en un sistema perfecto (representado por H_0), con scattering en las impurezas, dadas por V . Los diferentes términos en la Ec.(7.33) dan lugar a procesos de scattering múltiple por lo que comunmente no es posible calcular G en forma exacta. Los diferentes esquemas de aproximación consisten en evaluar G (en valor medio) resumiendo seleccionados términos (clases de diagramas) en esta expansión. Generalmente

se utilizan aproximaciones a la **autoenergía** exacta $\Sigma(E)$ que es definida de modo tal que la función de Green (en valor medio) está dada por

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G = (G_0^{-1} - \Sigma)^{-1}. \quad (7.34)$$

En lo referente a nuestro problema, dentro de los métodos basados en la expansión diagramática de las Funciones de Green de un triplete en presencia de impurezas, primero comentaremos brevemente la aproximación de bajas concentraciones (LCA) y luego discutiremos la aproximación del potencial coherente (CPA).

Como en la Sección 7.3 nos concentraremos en el subespacio de un triplete. Entonces, la restricción dada por la Ec.(7.6) es automáticamente satisfecha en nuestra aproximación, es decir, teoría de perturbaciones a primer orden en J_L/J_R .

Aproximación de baja concentración (LCA)

Utilizando técnicas estándar de promediado de impurezas (ver por ej. Ref. [130]), la auto-energía $\Sigma(E)$ de la función de Green de un triplete puede ser obtenida a primer orden en la concentración c de impurezas. Como el procedimiento de promediado restablece la invarianza traslacional, la función de Green de un triplete $G_k(E)$ ($G(E)$ en la representación de momentos) puede ser escrita en términos de una ecuación de Dyson

$$G_k(E) = \frac{1}{E - E_k - c\Sigma(k, E)}. \quad (7.35)$$

Considerar sólo términos lineales en c implica que la auto-energía $\Sigma(E)$ es igual a la matriz-T del problema de una impureza. La expansión diagramática de la auto-energía es representada en la Fig. 7.3.

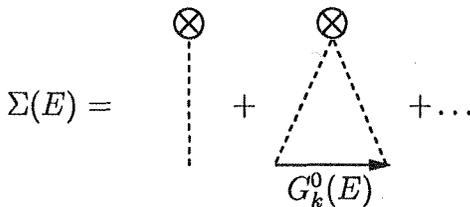


Figura 7.3: Representación esquemática de la expansión diagramática de la autoenergía $\Sigma(E)$ en el límite de bajas concentraciones. $G_k^0(E) = 1/(E - \epsilon_k)$ es la Función de Green de un triplete libre. Los círculos representan los centros de scattering.

Adviértase que todas las cantidades en la Ec.(7.35) se transforman en matrices de 2×2 si los acoplamientos modificados conectan dos sitios, como es el caso de una impureza en la pata. En la Ref. [131], por ejemplo, puede encontrarse una discusión más detallada sobre este tema.

La función espectral $A_k(E)$

$$A_k(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_k(E), \quad (7.36)$$

$(n(E) = \int A_k(E) dk)$ es graficada en la Fig. 7.4, para (a) $J_L = 0,1, \delta J_R = -0,1, c = 0,01$ y (b) para $J_L = 0,1, \delta J_L = 0,5, c = 0,01$. En concordancia con nuestros resultados previos encontramos un estado ligado en el caso (a) y un par ligado-antiligado en el caso (b). La Fig. 7.4 revela además que, primero, el nivel de impureza ha desarrollado una pequeña dispersión y segundo, que el peso espectral está concentrado alrededor de $k = \pi$ para el caso de los estados ligados, mientras que se reduce en el centro de la zona, y viceversa para los estados antiligados.

Aproximación del potencial coherente (CPA)

La aproximación del potencial coherente permite interpolar entre los dos límites de concentración $c = 0$ y $c = 1$. Aquí aplicaremos este método para el caso $\delta J_R \neq 0, \delta J_L = 0$. La auto-energía $\Sigma(E)$ es obtenida a partir de la solución autoconsistente de la siguiente ecuación (Ref. [132])

$$\Sigma(E) = \frac{c \delta J_R}{1 - G(E)[\delta J_R - \Sigma(E)]}. \quad (7.37)$$

En lugar de derivar esta ecuación (ver detalles en la Ref. [132]), mencionaremos algunos aspectos de este método:

- (i) La auto-energía es simétrica ante el cambio c por $1 - c$ y el reemplazo respectivo de las constantes de acoplamiento.
- (ii) La técnica CPA da resultados cualitativamente correctos para la densidad de estados en el caso de concentraciones intermedias.

Nótese que en contraste con la aproximación de bajas concentraciones (ver, por ejemplo Fig. 7.5 (a)), CPA no da un pico pronunciado en la densidad de estados para la posición del nivel de impureza incluso para bajas concentraciones. Esto puede observarse por ejemplo en la Fig. 7.5 (b) para $c = 0,1$. Sin embargo, hemos verificado que en ambas aproximaciones diagramáticas, el peso total en los niveles de impureza es el mismo y que este crece linealmente con la concentración de impurezas, como es de esperar.

7.4.2. Resultados numéricos y comparación

En esta Subsección, compararemos los resultados analíticos obtenidos con los alcanzados mediante la diagonalización numérica del hamiltoniano efectivo H_{ef} en sistemas de tamaño grande y muestreando sobre varias escaleras a concentración fija. El hamiltoniano efectivo (Ec.(7.14)) ha sido diagonalizado sobre sistemas finitos con $N = 10^3$ escalones para diferentes concentraciones c de ambos tipos de impurezas. La densidad de estados $n(E)$ (DOS), es decir el número de estados por unidad de energía, es obtenida numéricamente contabilizando los autoestados en un dado intervalo de energía ΔE . La elección de un $\Delta E \sim 10^{-2} J_R$ determina la resolución en las Figs. 7.5 a 7.8. En la 7.5 se muestran los resultados para $J_L = 0,1, \delta J_R = -0,1$ (Panel (a): $c = 0,01$; (b): $c = 0,1$; (c): $c = 0,3$). Obsérvese que, de acuerdo a la Ec.(7.20), la posición del nivel de una sola impureza es $E_{1,R} = 0,8586 J_R$. Se observan los siguientes aspectos

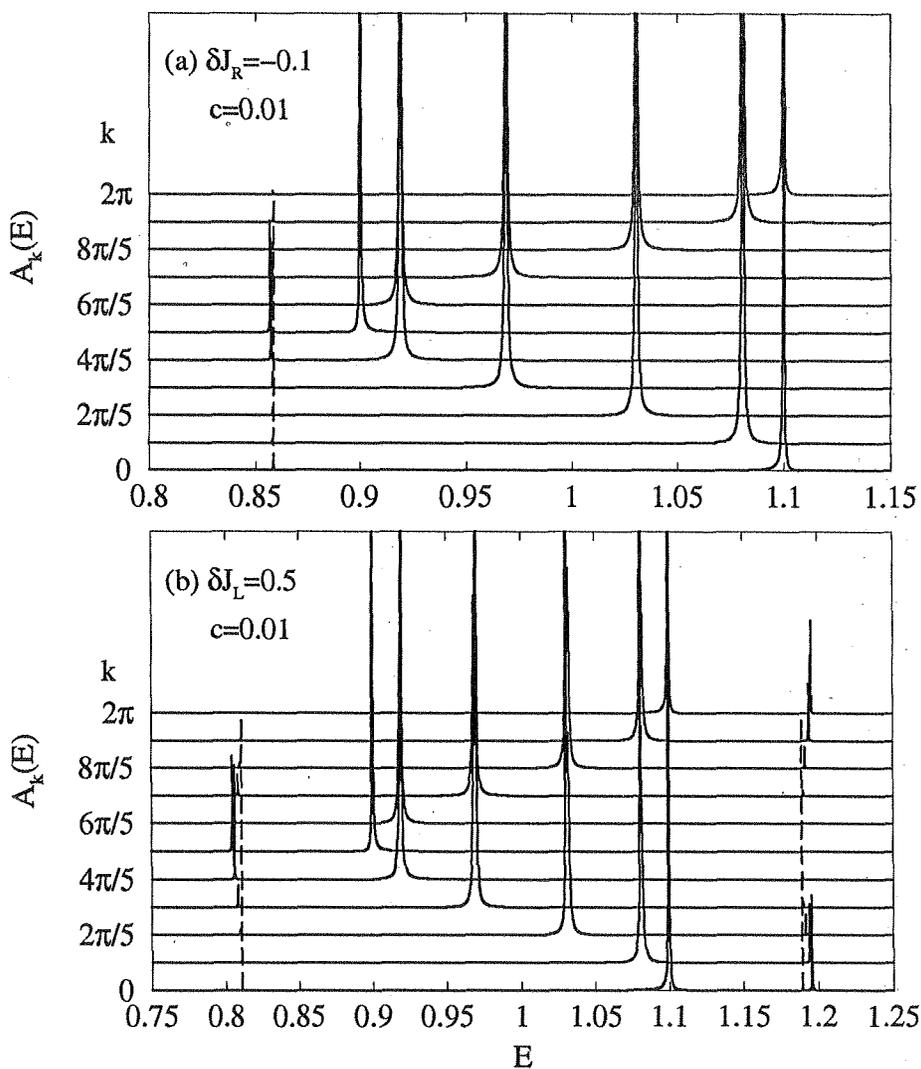


Figura 7.4: Función Espectral $A_k(E)$ en la aproximación de bajas concentraciones (LCA) para (a) perturbación en los acoplamientos de los escalones con $\delta J_R = -0,1, c = 0,01$; (b) perturbación en los acoplamientos de las patas $\delta J_L = 0,5, c = 0,01$. Las líneas de rayas indican las posiciones de los estados (anti-) ligados, de acuerdo a las Ecs.(7.20) y (7.21). $J_R = 1$ y $J_L = 0,1$ en ambos casos.

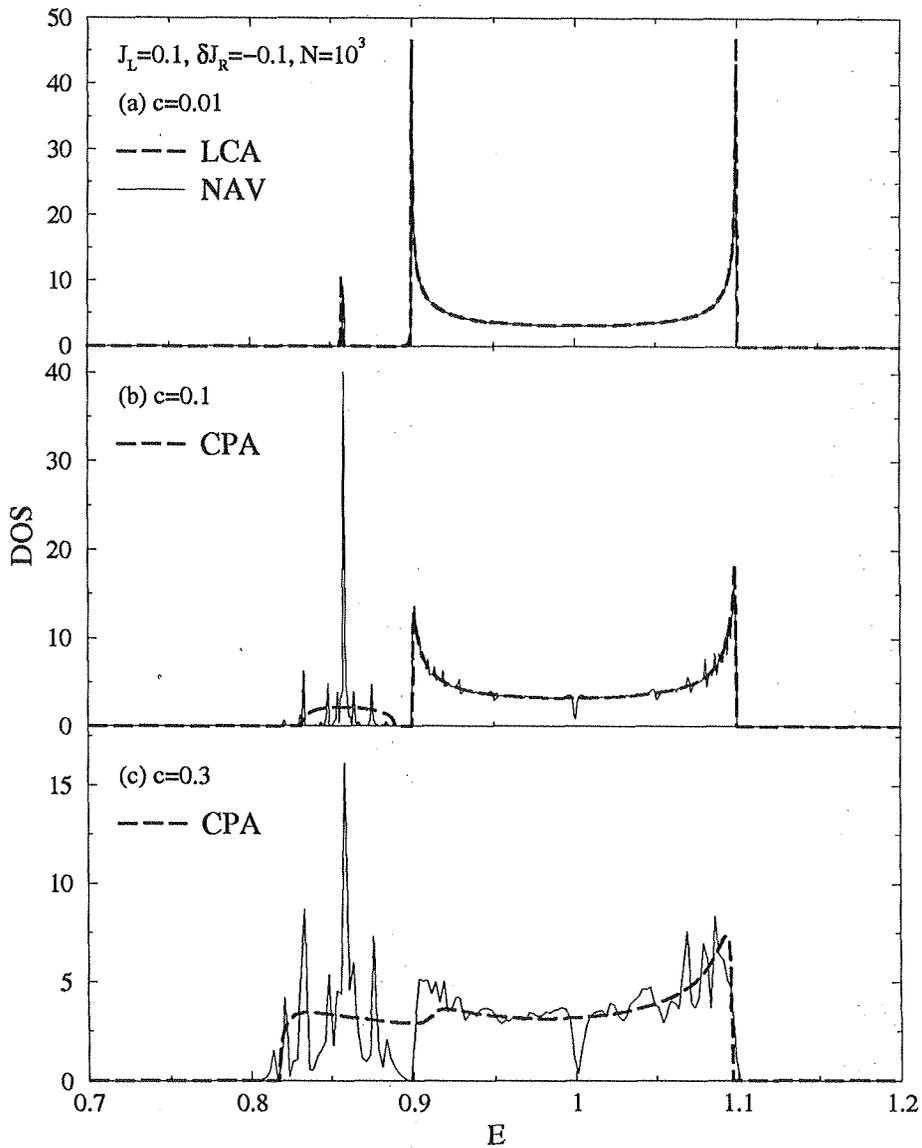


Figura 7.5: Densidad de estados (DOS) para una concentración finita de acoplamientos de escalón modificados J'_R : datos numéricos (NAV, línea sólida) para escaleras de espín con $N = 10^3$ escalones y $J_R = 1$, $J_L = 0,1$, $\delta J_R = -0,1$ (concentración: panel (a) $c = 0,01$; panel (b) $c = 0,1$; panel (c) $c = 0,3$). Línea de rayas en el panel (a): aproximación de bajas concentraciones (LCA); en paneles (b) y (c) CPA.

- (i) Al incrementar la concentración c aparecen picos adicionales alrededor del nivel de una impureza. Los mismos provienen de pequeños arreglos de impurezas (clusters). Esto será discutido en detalle en la Subsección 7.4.3.
- (ii) El nivel correspondiente al estado ligado degenera en una banda centrada alrededor de $J_R + \delta J_R = 0,9$ como función de la concentración c . Notar que los sistemas con concentraciones $c > 0,5$ son convenientemente construidos mediante los reemplazos $c \rightarrow 1 - c$, $J_R \rightarrow J_R + \delta J_R$ y $\delta J_R \rightarrow -\delta J_R$.
- (iii) Dentro de la banda original, la curva no es suave, sino que se observan pequeñas oscilaciones. Estas características no son debidas a efectos de tamaño finito, ni tampoco a una baja estadística (la densidad de estados ha sido obtenida promediando sobre varias muestras aleatorias a concentración fija). Como veremos en la Sección siguiente, su origen está relacionado al efecto de los clusters de impurezas.

Comparemos ahora los resultados numéricos con los analíticos. En la Fig. 7.5 (a) se comparan los resultados obtenidos mediante LCA con el promediado numérico de impurezas (NAV) para el caso $J_L = 0,1$, $\delta J_R = -0,1$ y $c = 0,01$. Ambas aproximaciones están en buen acuerdo en relación a la posición del nivel principal de impureza (impureza aislada). La comparación con los resultados provenientes de CPA para $c = 0,1$ (Fig. 7.5 (b)) y $c = 0,3$ (Fig. 7.5 (c)), muestra que esta aproximación da resultados cualitativamente aceptables, incluso a concentraciones algo elevadas. Para $c = 0,3$, los niveles de impureza y la banda comienzan a fusionarse.

Para una concentración finita de impurezas en las patas, los resultados numéricos confirman nuestras predicciones cualitativas. Los datos son mostrados en la Fig. 7.6 para $J_L = 0,1$, $\delta J_L = 0,5$ (panel (a): $c = 0,01$; (b): $c = 0,1$; (c): $c = 0,9$). Es importante aclarar que las posibles configuraciones de impurezas en las patas son:

- (i) Un acoplamiento modificado sobre una pata, conectando, por ejemplo el escalón l con el $l + 1$.
- (ii) Ambos acoplamientos entre los escalones l y $l + 1$ modificados.

Ambos casos son tenidos en cuenta en la implementación numérica. Los niveles de impureza de las patas se producen simétricamente con respecto al centro de la banda. Al incrementar la concentración c la banda original se ensancha y eventualmente incluye todos los niveles de impureza (ver Fig. 7.6 (c) para $c = 0,9$). La influencia de las impurezas es ahora visible como modos resonantes dentro de la banda. Nótese que este último caso es equivalente a $J_L = 0,6$, $\delta J_L = -0,5$ y $c = 0,1$.

En resumen, las aproximaciones analíticas dan resultados aceptables para la estructura completa de la densidad de estados, incluso a altas concentraciones, como está ejemplificado en el caso $\delta J_R \neq 0$, $\delta J_L = 0$. Los efectos de los clusters de impurezas no son tenidos en cuenta en la descripción diagramática.

7.4.3. Resultados analíticos para arreglos pequeños de impurezas

Estudiaremos la estructura de picos de los niveles de impurezas provenientes de una variedad de pequeños arreglos (clusters) en el caso de impurezas en los

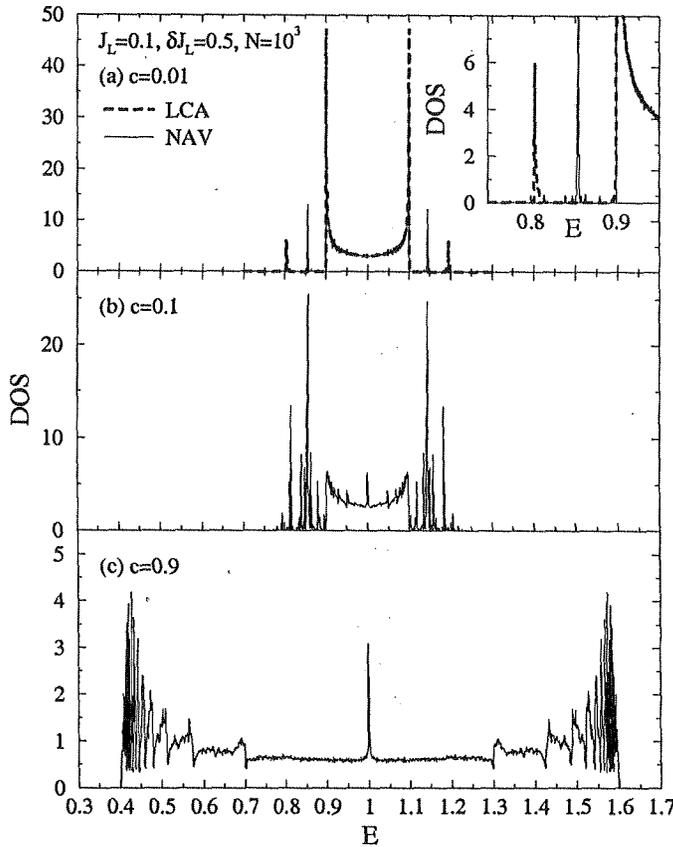


Figura 7.6: Densidad de estados (DOS) para una concentración finita de acoplamientos de las patas modificados J'_L : datos numéricos (NAV, línea sólida) para escaleras de espín con $N = 10^3$ escalones y $J_R = 1$, $J_L = 0,1$, $\delta J_L = 0,5$ (concentración: panel (a) $c = 0,01$; panel (b) $c = 0,1$; panel (c) $c = 0,9$). Línea de rayas en el panel (a): aproximación de bajas concentraciones (LCA). Inserción en el panel (a): estructura de la DOS en el entorno del estado ligado. Panel (c): se observan los modos de resonancia dentro de la banda para $c = 0,9$; el caso mostrado aquí es equivalente a $J_L = 0,6$, $\delta J_L = -0,5 < 0$, y $c = 0,1$.

escalones. Los arreglos analizados incluyen los siguientes patrones (11), (101), (111), (1001), (1101), (1111), (10001), (11011), (11111) donde, en esta notación, 1 indica un acoplamiento de escalón modificado en la secuencia del arreglo y 0 indica un escalón puro (no modificado). Por ejemplo, (11) denota dos impurezas en dos escalones vecinos en una escalera con el resto de los escalones sin impurezas.

Hemos encontrado que los autovalores de energía correspondientes a los picos principales fuera de la banda de un triplete observados en los resultados numéricos de la densidad de estados (ver Sección previa) pueden ser asociados con la contribución de ciertos clusters de impurezas. En particular, en la Fig. 7.7, se observa la identificación entre la estructura de estados ligados obtenida numéricamente y las autoenergías correspondientes a pequeños clusters de impurezas colocados sobre la escalera pura, calculadas analíticamente. En dicha Figura los parámetros son $J_L = 0,1$, $\delta J_R = -0,1$ y $c = 0,1$ (en la Fig. 7.5 (b) se muestra la densidad de estados completa para estos mismos parámetros).

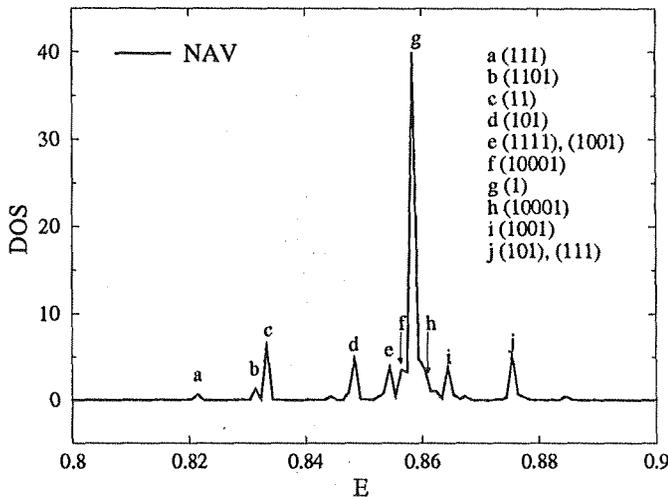


Figura 7.7: Comparación de las auto-energías de los estados ligados inducidos por arreglos pequeños de impurezas (clusters) en los escalones sobre un sistema puro, derivadas analíticamente, con la diagonalización numérica del H_{ef} sobre grandes sistemas con una concentración finita acoplamientos modificados en los escalones. Se muestra la densidad de estados (DOS) en el entorno del nivel de una impureza. Los patrones entre paréntesis denotan diferentes tipos de clusters de impurezas: con 1, indicamos la posiciones relativas de las impurezas de los escalones en la secuencia del cluster. Los datos numéricos (NAV, línea sólida) corresponden a $J_R = 1$, $J_L = 0,1$, $\delta J_R = -0,1$ y $c = 0,1$. Las letras 'a' a 'j' relacionan los picos en la densidad de estados a ciertos clusters de impurezas, los cuales son listados en la leyenda.

Para analizar la estructura dentro de la banda (modos resonantes) es útil re

escribir la densidad de estados en la siguiente forma

$$n(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr } G(E) = n_0(E) + n_{imp}(E), \quad (7.38)$$

donde la densidad pura de estados $n_0(E)$ está dada por (Ref. [132])

$$n_0(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr } G^0(E) \quad (7.39)$$

y la contribución de las impurezas puede escribirse como

$$n_{imp}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } \frac{d}{dE} \ln [\text{Det}(I - G^0(E) H'_{ef})]. \quad (7.40)$$

Hemos utilizado la Ec.(7.40) para calcular las contribuciones de un arreglo particular de impurezas a la DOS dentro de la banda de un triplete. Más aún, a partir de las amplitudes de los diferentes picos fuera de la banda de un triplete, uno puede estimar, al menos cualitativamente, la distribución de probabilidades para la presencia de los diferentes clusters en una muestra aleatoria de impurezas con una dada concentración. Esta información es utilizada para ponderar la influencia de cada cluster en la estructura de picos dentro de la banda de un triplete. En la Fig. 7.8, se muestra un ejemplo donde los picos principales han sido asociados con las contribuciones de los clusters. En este caso particular hemos identificado el pico central, que está levemente corrido hacia la derecha respecto del centro de la banda, con los patrones (101) y (1101). Por otro lado los otros dos picos que son casi simétricos respecto del centro de la banda han sido identificados con la contribución del cluster (1001).

Este análisis explica por un lado la aparición de los distintos modos localizados y por el otro da evidencia de que los picos dentro de la banda de un triplete se originan por la existencia de clusters de impurezas.

7.5. Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado la aparición de estados ligados en el gap de espín (es decir debajo de la banda de un triplete) en escaleras dos patas de espín 1/2, debido a la presencia de impurezas en los acoplamientos. Han sido considerados tanto modificaciones en los acoplamientos en los escalones, como así también en las patas. Se han derivado resultados analíticos para la posición de los estados ligados en el límite de acoplamiento fuerte, equivalente a teoría de perturbaciones a primer orden en J_L/J_R . La existencia de estados ligados inducidos por las impurezas ha sido verificada por medio de un estudio de Lanczos de escaleras de espín finitas con una impureza y $0 < J_L \leq J_R$. Encontramos que nuestros resultados analíticos son cuantitativamente correctos para $J_L \leq J_R/10$ y que el acuerdo cualitativo se mantiene para valores de J_L todavía mayores. Recientemente se han descubierto materiales con estructura de escalera de espín, como por ej. $(C_5H_{12}N)_2CuBr_4$ (Ref. [113], [114]) o CaV_2O_5 (Ref. [116], [117]) que caen dentro de este rango de parámetros.

Posteriormente, hemos analizado la densidad de estados en presencia de una concentración finita de impurezas en el límite de $J_L \ll J_R$ tanto desde el punto de vista numérico como analítico. La comparación de las diferentes aproximaciones muestra que los métodos diagramáticos dan resultados cuantitativamente

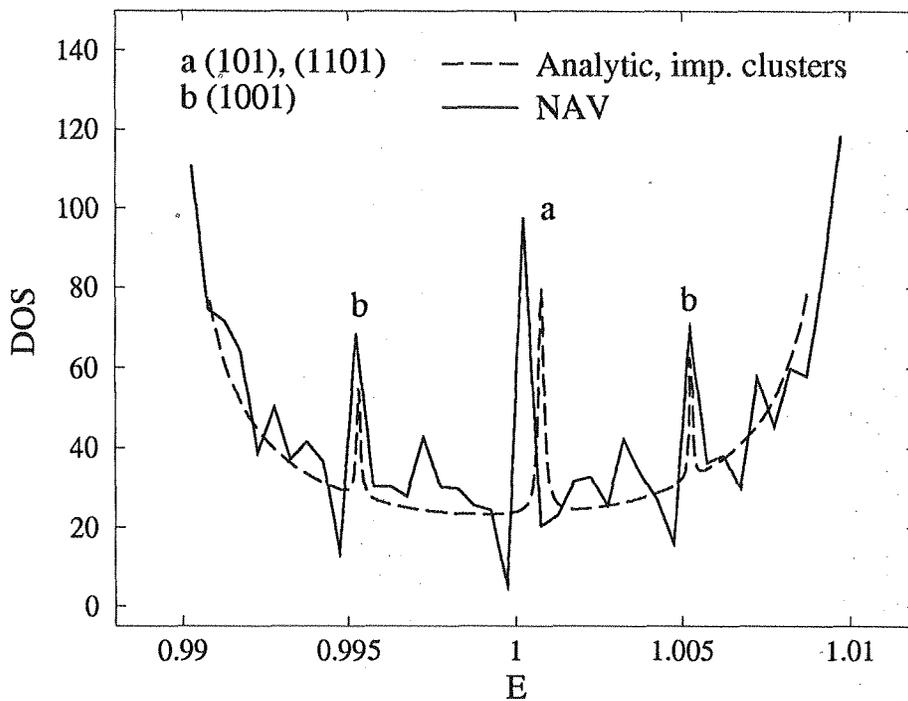


Figura 7.8: Identificación entre la estructura de picos dentro de la banda de un triplete obtenida numéricamente a una concentración finita de impurezas en los escalones (NAV, línea sólida) y analíticamente para sistemas con diferentes tipos de clusters de impurezas (línea de rayas), para $J_R = 1$, $J_L = 0,01$, $\delta J_R = -0,05$, y $c = 0,1$.

correctos para concentraciones pequeñas de impurezas. Además, se obtiene una imagen cualitativamente correcta para concentraciones grandes de impurezas. Debido a que las técnicas diagramáticas no tienen en cuenta la interferencia entre impurezas y el efecto de arreglos (clusters) de impurezas, hemos presentado un análisis cuidadoso de sistemas de clusters con un número reducido de impurezas. El mismo nos ha permitido comprender detalles visibles en la densidad de estados. Extensiones naturales de este trabajo, como ser el cálculo de observables y la discusión de sistemas con cocientes arbitrarios J_L/J_R , son relegadas para investigaciones posteriores. Sin embargo, nuestros resultados implican aspectos adicionales en el gap de espín que podrían ser observados, por ej., mediante experimentos ópticos sobre materiales con estructura de escaleras de espín con acoplamientos desordenados.

Capítulo 8

Conclusiones

El objetivo principal de esta tesis ha sido el de extender el estudio de sistemas magnéticos en $1D$ en situaciones que pueden encontrarse en materiales reales, tales como inhomogeneidades en los acoplamientos y la presencia de desorden, inevitable en cualquier experimento real.

En particular se ha estudiado, en una primera etapa, la estructura de plateaux en curvas de magnetización y diagramas de fase magnéticos en sistemas de magnetismo cuántico unidimensionales. Específicamente se ha analizado el efecto de perturbaciones, tales como cuasiperiodicidad, desorden y anisotropías sobre modelos críticos, en particular líquidos de Luttinger. Para ello se han empleado métodos de teoría de campos, como bosonización, grupo de renormalización y resultados de teorías de campos cuánticos conformes. Adicionalmente se han utilizado técnicas numéricas para dar soporte, complementar y verificar la validez de los métodos analíticos.

En el Capítulo 4 se ha estudiado una cadena XXZ de espín $S = 1/2$ en presencia de un campo magnético externo, con acoplamientos cuasiperiódicos entre espines. Mediante las técnicas de teoría de campos mencionadas, analizando la conmensurabilidad de las perturbaciones relevantes, se han obtenido condiciones para la aparición de una clase nueva de plateaux en las curvas de magnetización (Ec.(4.7)). Complementariamente, para la cadena de Fibonacci, en el régimen de acoplamiento fuerte, se ha aplicado el procedimiento decimación (en espacio real). A través del mismo se han obtenido condiciones para la aparición de los plateaux (Ecs(4.20), (4.21)). La investigación numérica mediante diagonalización sobre cadenas de tamaño finito ha verificado la validez de las predicciones del tratamiento mediante bosonización y decimación. Los resultados obtenidos, sugieren la posibilidad de observar plateaux de magnetización estables (Ec.(4.7)) sobre arreglos de puntos cuánticos (quantum dots), por lo que es de esperar que esto genere una motivación para futuros desarrollos experimentales.

En el Capítulo 5 se ha investigado el efecto del desorden sobre la estructura de plateaux en cadenas XXZ cuasiperiódicas en presencia de un campo magnético externo. Para el caso de distribuciones de desorden discretas, con los valores de acoplamientos espaciados, se ha aplicado el procedimiento de decimación en espacio real. A través del mismo, se han obtenido los valores de la magnetización para los cuales emergen los plateaux principales, Ecs.(5.5)-(5.7). Estas predicciones han sido verificadas mediante diagonalización numérica de cadenas

XX largas, encontrándose un remarcable acuerdo en una variedad de situaciones. Como el esquema de decimación es aplicable a cadenas XXZ genéricas, se concluye que la aparición de estos plateaux es una característica general, al menos para $0 < \Delta < 1$. También se ha analizado la susceptibilidad para campos magnéticos externos pequeños. Utilizando un argumento basado en el camino aleatorio hemos mostrado que la misma exhibe un comportamiento logarítmico, Ec.(5.8), el cual hemos verificado numéricamente.

En el Capítulo 6 se ha analizado la competición entre la tendencia hacia la formación de excitaciones de espín masivas a través de una dimerización δ en los acoplamientos y hacia el ordenamiento XY a través de un término de anisotropía γ . Empleando la técnica de bosonización, estas tendencias se manifiestan como dos interacciones competitivas relevantes que son responsables de la transición Ising. El campo externo h no se acopla a ninguna cantidad conservada (debido a la ruptura de la simetría $U(1)$). De este modo, a pesar de la presencia de regímenes masivos, la magnetización siempre crece con el campo externo aplicado. La bosonización y el análisis numérico sustentan la idea de que el mecanismo físico que da lugar a la transición Ising es suficientemente general, y válido en ambos límites, de acoplamiento fuerte y débil. Numéricamente se ha encontrado evidencia de la existencia de una línea no masiva con el comportamiento tipo Ising esperado alrededor de los campos críticos. Asimismo esto sugiere que los aspectos principales del sistema interactivo XYZ , pueden ser captados por el modelo de fermiones libres XY , discutido en la primera parte del Capítulo 6.

En la segunda parte de la tesis se ha estudiado el efecto de impurezas en escaleras de espín utilizando herramientas estándar de materia condensada, es decir métodos diagramáticos y de funciones de Green, complementados con técnicas numéricas.

En el Capítulo 7 se ha investigado la aparición de modos localizados en el gap de espín de escaleras dos patas de espín $1/2$, debido a la presencia de impurezas que dan lugar a modificaciones en los acoplamientos. Se han considerado modificaciones en los acoplamientos en los escalones, como así también en las patas. Se han obtenido analíticamente, a primer orden en J_L/J_R , las energías de los modos ligados (Ecs.(7.20), (7.21)), para una impureza en el escalón y en la pata, respectivamente. La existencia de estados ligados inducidos por las impurezas ha sido verificada diagonalizando el espacio completo a través del método de Lanczos, en escaleras de espín de tamaño finito con una impureza en el rango $0 < J_L \leq J_R$. Se ha encontrado que los resultados analíticos son cuantitativamente correctos para $J_L \leq J_R/10$ y el acuerdo cualitativo se mantiene para valores de J_L aún mayores.

Luego se ha estudiado numérica y analíticamente el comportamiento de la densidad de estados para una concentración finita de impurezas en el límite de $J_L \ll J_R$. Comparando las distintas aproximaciones se observa que los métodos diagramáticos dan resultados cuantitativamente correctos para concentraciones pequeñas de impurezas. Además, se obtiene una imagen cualitativamente correcta para concentraciones grandes de impurezas.

Como las técnicas diagramáticas no tienen en cuenta la interferencia entre impurezas y el efecto de arreglos (clusters) de las mismas, se ha llevado a cabo un análisis de sistemas de clusters con un número pequeño de impurezas. El mismo ha permitido comprender la estructura detallada de la densidad de estados. Estos resultados podrían ser observados mediante experimentos ópticos sobre

materiales con estructura de escaleras de espín con acoplamientos desordenados. El cálculo de observables y el análisis de sistemas con cocientes arbitrarios J_L/J_R , son extensiones de este trabajo, relegadas para investigaciones futuras. Los resultados obtenidos podrían ser útiles en la interpretación de los resultados experimentales sobre estos materiales y en la comprensión de los mecanismos físicos subyacentes.

Apéndice A

Teoría de Campos Conformes

A.1. Criticalidad del líquido de Luttinger

En el lenguaje de la teoría de las transiciones de fase, los líquidos de Luttinger son críticos a $T_c = 0$. Un sistema arbitrario, cercano a una transición de fase de segundo orden, exhibe intensas fluctuaciones precursoras de la fase ordenada, cuyo tamaño típico es medido por la longitud de correlación $\xi \sim |(T - T_c)/T_c|^{-\nu}$, que diverge para $T \rightarrow T_c$. Las magnitudes termodinámicas exhiben divergencias similares cuyo único origen es la divergencia de ξ . De este modo, sus exponentes críticos poseen relaciones de escala que vinculan a ν y la dimensión del espacio. La forma de estas relaciones de escala sólo depende de la simetría de la teoría (universalidad). En el punto crítico, las funciones de correlación decaen como leyes de potencia ($\xi \rightarrow \infty$) con la distancia y el tiempo con exponentes críticos que generalmente pueden ser calculados a partir del modelo considerado [133]. Las correlaciones tipo ley de potencia que hemos encontrado en el Capítulo 2 para el líquido de Luttinger muestran explícitamente que dicho sistema se encuentra en un punto crítico cuántico con $T_c = 0$.

A.2. Invarianza conforme en el punto crítico

La teoría de campos conformes es una herramienta poderosa para caracterizar las clases de universalidad de los sistemas críticos en mecánica estadística en $2D$ o teorías de campos cuánticos en $1D$ teniendo el tiempo el rol de segunda dimensión (estas teorías de hecho son en $(1+1)D$). En esta clasificación está involucrado un número adimensional, la **carga central** c del álgebra de Virasoro [41]. Los exponentes críticos son las dimensiones de escala de los diferentes operadores en una teoría invariante conforme y están totalmente determinados por c cuando $c < 1$. En las teorías con carga central $c = 1$ tales como el líquido de Luttinger, los exponentes (dimensiones de escala) dependen además de una constante de acoplamiento efectiva del modelo (K en el líquido de Luttinger). Tanto la carga central como las dimensiones de escala pueden ser calculados a partir de las propiedades de escaleo de tamaño finito (finite size-scaling) del

estado fundamental y de los primeros estados excitados [29, 71]. Esto es muy importante, ya que dichas cantidades pueden ser evaluadas precisamente por el *ansatz* de Bethe (para modelos solubles por esta técnica) o en cualquier caso por diagonalización numérica.

Las simetrías de un modelo en el punto crítico son la invarianza traslacional y rotacional. Las teorías de campos cuánticos, además son invariantes de Lorentz, pero en $(1+1)D$, la invarianza de Lorentz se reduce a rotaciones en el plano (x, t) . Como todas las escalas son importantes sabemos además que el sistema es caracterizado por una invarianza de escala $x \rightarrow \lambda x$.

Se encuentra que el efecto combinado de la invarianza rotacional y de escala implica que el sistema es invariante bajo un grupo más amplio de simetría, el grupo global conforme. A nivel clásico, las transformaciones conformes son transformaciones generales de coordenadas que dejan invariante el ángulo entre dos vectores. En $d > 2$, el grupo global conforme es de dimensión finita, y por ende lo es el álgebra de Lie asociada de sus generadores. En este caso hay un número finito de condiciones que permiten la evaluación de las funciones de correlación de dos o tres puntos, pero no las de ordenes superiores.

La situación es diferente en $2D$ donde las funciones de correlación, en principio, pueden ser determinadas. Consideremos una transformación general de coordenadas

$$x \rightarrow x' = x + \zeta(x). \quad (\text{A.1})$$

Para que esta transformación sea conforme, $\zeta(x)$ debe satisfacer ciertas condiciones que pueden ser expresadas en una ecuación diferencial (ecuación de Killing-Cartan). En una dimensión arbitraria D , ésta restringe $\zeta(x)$ a ser un polinomio de segundo grado en x (con coeficientes tensoriales). En $2D$, sin embargo, al considerar variables complejas $z, \bar{z} = x_1 \pm ix_2$, la ecuación de Killing-Cartan se reduce a las ecuaciones de Cauchy-Riemann, y por lo tanto todas las funciones analíticas generan transformaciones conformes. Este grupo de transformaciones, se denomina **grupo local conforme**. En términos de las variables complejas z, \bar{z} se tiene

$$z \rightarrow z + \zeta^z(z) = f(z), \quad \bar{z} \rightarrow \bar{z} + \bar{\zeta}^{\bar{z}}(\bar{z}) = \bar{f}(\bar{z}). \quad (\text{A.2})$$

Para determinar el álgebra correspondiente al grupo conforme local, se necesitan las relaciones de conmutación de los generadores de las transformaciones. Ya que $\zeta^z(z)$ y $f(z)$ son analíticas, pueden expandirse en serie de Laurent

$$\zeta^z(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \zeta_n z^{n+1} \quad (\text{A.3})$$

(y una ecuación similar para $\bar{\zeta}(\bar{z})$). De este modo obtenemos los generadores de las transformaciones conformes locales

$$\ell_n(z) = -z^{n+1} \partial_z, \quad \bar{\ell}_n(\bar{z}) = -\bar{z}^{n+1} \partial_{\bar{z}} \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.4})$$

Estos generadores satisfacen el álgebra conforme local

$$[\ell_m, \ell_n] = (m-n)\ell_{m+n}, \quad [\bar{\ell}_m, \bar{\ell}_n] = (m-n)\bar{\ell}_{m+n}, \quad [\ell_m, \bar{\ell}_n] = 0. \quad (\text{A.5})$$

Este álgebra de dimensión infinita es llamada el **álgebra clásica de Virasoro** (el álgebra conforme global es generada por $\ell_{-1}, \ell_0, \ell_1$). Ya que los dos álgebras son independientes, pueden tomarse z y \bar{z} como independientes. Para la teoría física se cumple $\bar{z} = z^*$.

A.3. Transformación de las funciones de correlación

Consideremos la transformación de los campos y las funciones de correlación de una teoría cuántica de campos bajo una transformación conforme. En general, una transformación de simetría infinitesimal de un campo ϕ es generada por $\delta_\zeta \phi = \zeta[Q, \phi]$, donde Q es la carga conservada asociada con la simetría. Las transformaciones de coordenadas locales son generadas por las cargas construidas a partir del tensor de energía-impulso T_{ij} . La invarianza rotacional restringe a T_{ij} a ser simétrico, y la invarianza de escala requiere que su traza sea nula. En coordenadas complejas z, \bar{z} puede mostrarse que sólo las componentes diagonales $T(z) \equiv T_{zz}(z)$ y $\bar{T}(\bar{z}) \equiv \bar{T}_{\bar{z}\bar{z}}(\bar{z})$ son no nulas. La carga conservada está dada por

$$Q = \frac{1}{2\pi i} \oint [dz T(z) \zeta(z) + d\bar{z} \bar{T}(\bar{z}) \bar{\zeta}(\bar{z})], \quad (\text{A.6})$$

la cual genera una variación

$$\begin{aligned} \delta_{\zeta, \bar{\zeta}} \phi(w, \bar{w}) &= \frac{1}{2\pi i} \int dz [T(z) \zeta(z), \phi(w, \bar{w})] + \\ &\frac{1}{2\pi i} \int d\bar{z} [\bar{T}(\bar{z}) \bar{\zeta}(\bar{z}), \phi(w, \bar{w})]. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

En general, es difícil en este punto continuar sin expresiones explícitas. Sin embargo existe una clase distintiva de campos, llamados **campos primarios** para los cuales se cumple

$$\delta_{\zeta, \bar{\zeta}} \phi(w, \bar{w}) = [h \partial_z \zeta^z(z) + \zeta^z(z) \partial_z + \bar{h} \partial_{\bar{z}} \bar{\zeta}^{\bar{z}}(\bar{z}) + \bar{\zeta}^{\bar{z}}(\bar{z}) \partial_{\bar{z}}] \phi(w, \bar{w}), \quad (\text{A.8})$$

que puede identificarse como la versión infinitesimal de

$$\phi(w, \bar{w}) \rightarrow \left(\frac{\partial f}{\partial w} \right)^h \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{w}} \right)^{\bar{h}} \phi(f(w), \bar{f}(\bar{w})). \quad (\text{A.9})$$

Todos los otros campos son llamados **campos secundarios**. h y \bar{h} son dos números reales denominados **pesos conformes** del campo ϕ . Las combinaciones $\Delta_+ = h + \bar{h}$ y $\Delta_- = h - \bar{h}$ son las **dimensión de escala** y de **espín** del campo ϕ , respectivamente.

A partir de la transformación dada por la Ec.(A.8) pueden derivarse algunas funciones de correlación. La función de dos puntos $G^{(2)} = \langle \phi_1(z_1, \bar{z}_1) \phi_1(z_2, \bar{z}_2) \rangle$ debe ser invariante bajo la transformación dada por la Ec.(A.2). Utilizando la Ec.(A.8), se deriva una ecuación diferencial para $G^{(2)}$ cuya solución es

$$G^{(2)}(z_{12}, \bar{z}_{12}) = \frac{C_{12}}{z_{12}^{2h} \bar{z}_{12}^{2\bar{h}}}, \quad (\text{A.10})$$

donde $z_{12} = z_1 - z_2$ (lo mismo para \bar{z}) y C_{12} es una constante. La función de correlación de tres puntos $G^{(3)}$ puede ser determinada en forma similar, sin embargo la función de cuatro puntos $G^{(4)}$ sólo puede determinarse que es una función del cociente $(z_{12} z_{34}) / (z_{13} z_{24})$.

La propiedad de transformación de los campos primarios (Ec.(A.8)) implica que la expansión del producto de operadores (OPE) del tensor energía-impulso con ϕ , para cortas distancias debe comportarse como

$$T(z)\phi(w, \bar{w}) = \frac{h}{(z-w)^2}\phi(w, \bar{w}) + \frac{1}{z-w}\partial_w\phi(w, \bar{w}) + \dots \quad (\text{A.11})$$

habiendo una ecuación equivalente para la parte anti-holomórfica del tensor energía-impulso. Un campo secundario, en cambio, tiene singularidades de orden mayor que un polo doble en su OPE con $T(z)$. El ejemplo más representativo es el de $T(z)$ consigo mismo:

$$T(z)T(w) = \frac{c/2}{(z-w)^4} + \frac{2}{(z-w)^2}T(w) + \frac{1}{z-w}\partial T(w). \quad (\text{A.12})$$

El coeficiente $c (= \bar{c} \geq 0)$ es llamado carga central. El mismo no puede ser determinado por el requerimiento de invarianza conforme solamente, y dependerá de la teoría estudiada. Diferentes valores de c implican distintas clases de universalidad. Como ejemplos, para el bosón libre $\phi(z)$, $T(z) =: [\partial_z\phi(z)]^2$: y $c = 1$; los fermiones libres, reales (Majorana) $\psi_M(z)$, relevantes para el modelo $2D$ de Ising, tienen $T(z) =: \psi_M(z)\partial_z\psi_M(z)$: y $c = 1/2$; finalmente, fermiones libres, complejos (Dirac) $\psi(z)$, relevantes para el modelo de Luttinger, poseen $T(z) = i : [\partial_z\psi^\dagger(z)]\psi(z) - \psi^\dagger(z)\partial_z\psi(z) :$: y $c = 1$ como en el caso de los bosones.

Como hicimos para el caso clásico, podemos derivar el álgebra de los generadores de las transformaciones locales conformes a nivel cuántico. Expandiendo en serie de Laurent el tensor $T(z)$

$$T(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} L_n z^{-n-2}. \quad (\text{A.13})$$

Utilizando la Ec.(A.12), obtenemos el álgebra de Virasoro con la extensión central c

$$\begin{aligned} [L_n, L_m] &= (n-m)L_{n+m} + \frac{c}{12}(n^3-n)\delta_{n+m,0}, \\ [\bar{L}_n, \bar{L}_m] &= (n-m)\bar{L}_{n+m} + \frac{\bar{c}}{12}(n^3-n)\delta_{n+m,0}, \\ [L_n, \bar{L}_m] &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

El álgebra clásica de Virasoro (Ecs.(A.5)) se obtiene como caso particular para $c = 0$. Cada teoría de campos cuánticos conformes define una representación de las Ecs.(A.14) con alguna carga central c, \bar{c} . Los L_n son los generadores de las transformaciones de los campos cuánticos asociados con el monomio de grado $n+1$ en z . Para $\zeta^z(z) = -\zeta_n z^{n+1}$, se tiene

$$\delta\phi(z, \bar{z}) = -\zeta_n [L_n, \phi(z, \bar{z})]. \quad (\text{A.15})$$

La unitariedad restringe los generadores a satisfacer $L_m^\dagger = L_{-m}$ y la regularidad del tensor energía-impulso implica

$$\begin{aligned} L_m|0\rangle &= 0, \quad m \geq -1 \\ L_m^\dagger|0\rangle &= 0, \quad m \leq -1, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

al actuar sobre el vacío $|0\rangle$.

Una propiedad adicional importante del tensor energía-impulso es que bajo una transformación conforme local $z \rightarrow z' = f(z)$ el mismo se transforma

$$T(z) \rightarrow T'(z) = \left(\frac{dz'}{dz}\right)^2 T(z') + \frac{c}{12}\{z', z\}, \quad (\text{A.17})$$

siendo

$$\{z', z\} = \frac{\partial_z^3 z'}{\partial_z z'} - \frac{3(\partial_z^2 z')^2}{2(\partial_z z')^2}. \quad (\text{A.18})$$

El primer término en la Ec.(A.17) indica que $T(z)$ es un campo de peso conforme $(2, 0)$ de acuerdo a la Ec.(A.12), mientras que el segundo término, que contiene c es conocido como derivada de Schwarz.

A.4. Representaciones del álgebra de Virasoro. Estados del espacio de Hilbert

En general, las representaciones de los grupos de simetría son construidos a partir de los vectores (estados) de mayor peso $|h\rangle$. Un estado de este tipo es creado por la acción de un campo primario ϕ sobre el vacío en el origen

$$|h\rangle = \phi(0)|0\rangle, \quad L_0|h\rangle = h|h\rangle, \quad L_n|h\rangle = 0, \quad n > 0. \quad (\text{A.19})$$

$|h\rangle$ es entonces autoestado de L_0 . Los L_n , $n > 0$ son los operadores de aniquilación de $|h\rangle$. Los operadores de creación correspondientes son los L_{-n} , $n > 0$, que actuando sobre $|h\rangle$, generan los estados descendientes.

$$L_{-n_1} \dots L_{-n_k}|0\rangle \neq 0, \quad 1 \leq n_1 \leq \dots \leq n_k. \quad (\text{A.20})$$

Estos estados forman una base para la representación del espacio vectorial. El autovalor de L_0 sobre el estado dado por la Ec.(A.20) es $h + n_1 + \dots + n_k$. El estado de mayor peso $|h\rangle$ posee el menor autovalor entre todos los estados (descendientes) que pueden ser creados a partir de él, actuando con los operadores L_{-n} . El mismo es el estado fundamental en un sector dado de la teoría. Los estados descendientes son los estados excitados.

Todos los estados (y campos) en una teoría de campos conformes pueden ser agrupados en familias conformes o **torres conformes**. Las mismas consisten de el estado de mayor peso $|h\rangle$ y todos los estados descendientes generados por la aplicación de los operadores L_{-n} ($n > 0$). Los diferentes estados de mayor peso son obtenidos a partir de la acción de los distintos campos primarios $\phi(z, \bar{z})$ sobre el vacío de acuerdo a la Ec.(A.19).

Las torres conformes ofrecen una forma muy conveniente de clasificar las excitaciones en el sistema y el espectro de las dimensiones de escala. Las funciones

de correlación que involucran campos secundarios pueden ser calculadas a partir de aquellas que contienen campos primarios solamente, actuando sobre estos con un operador diferencial obtenido a partir de la propiedad de transformación dada por la Ec.(A.15).

Las representaciones unitarias del álgebra de Virasoro sólo existen para ciertos valores de c y h

$$c \geq 1, \quad h \geq 0, \quad (\text{A.21})$$

o

$$c = 1 - \frac{6}{m(m+1)}, \quad h_{p,q}(m) = \frac{[(m+1)p - mq]^2 - 1}{4m(m+1)}, \quad (\text{A.22})$$

donde $m = 3, 4, \dots; 1 \leq p \leq m-1$ y $1 \leq q \leq p$. Entre los modelos que pertenecen a la clasificación dada por las Ecs.(A.22) se encuentra el modelo 2D de Ising con $c = 1/2$.

A.5. Invarianza conforme en sistemas finitos

Hasta ahora hemos implícitamente asumido que los campos están definidos en el plano z infinito. Consideremos ahora el caso de sistemas de tamaño finito. A partir de la Ec.(A.16) se deduce que

$$\langle T(z) \rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\langle 0 \left| \frac{L_m}{z^{m+2}} \right| 0 \right\rangle = 0, \quad (\text{A.23})$$

en el plano complejo z . Ahora utilicemos la transformación exponencial

$$z = \exp\left(\frac{2\pi i}{L}u\right), \quad u = \frac{L}{2\pi i} \log z, \quad (\text{A.24})$$

para mapear el plano z infinito sobre una franja semi-infinita (u) de ancho L , con condiciones de contorno periódicas. Bajo esta transformación la expansión de $T(z)$ (Ec.(A.13)) se convierte simplemente en una transformación de Fourier, y los generadores de Virasoro L_n en los coeficientes de Fourier del tensor energía-impulso. Se obtiene

$$T_{\text{franja}}(u) = \left(T_{\text{plano}}(z) - \frac{c}{12} \{u, z\} \right) \left(\frac{dz}{du} \right)^2, \quad (\text{A.25})$$

y aplicando la Ec.(A.23)

$$\langle T_{\text{franja}}(u) \rangle = \frac{c}{24} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2. \quad (\text{A.26})$$

El tensor energía-impulso mide el costo en energía (cambio en la acción $\delta S = (-1/2\pi) \int T_{ij} \partial_i \zeta_j d^2r$) debido a un cambio en la métrica. Podemos ahora calcular el cambio en energía asociado con otra transformación (no conforme), una

dilatación horizontal de la franja $-u$ ($u'_1 = (1 + \varepsilon)u_1$, $u'_2 = u_2$) que cambia la longitud del sistema, con lo que se obtiene

$$E_0(L) = E_0(\infty) + \frac{c\pi}{6L} \quad (\text{A.27})$$

donde $E(L)$ es la energía por unidad de longitud [134]. Esta fórmula es extremadamente importante porque permite determinar el valor de la carga central a partir de cálculos en sistemas de tamaño finito.

La transformación exponencial (Ec.(A.24)) es también importante para obtener las dimensiones de escala de los campos primarios a partir de sistemas finitos [9]. La función de correlación de dos puntos de un operador primario $\phi(z, \bar{z})$ con pesos conformes h, \bar{h} se convierte, bajo la transformación conforme (Ec.(A.24)) en

$$\langle \phi(u, \bar{u}) \phi(u', \bar{u}') \rangle = \frac{(\pi L)^{2\Delta_+}}{(\sinh[\pi(u - u')/L])^{2h} (\sinh[\pi(\bar{u} - \bar{u}')/L])^{2\bar{h}}} \quad (\text{A.28})$$

A partir de la Ec.(A.28) puede obtenerse [9] que la energía escala como

$$E_n(L) - E_0(\infty) = \frac{2\pi v(\Delta_+)}{L}, \quad (\text{A.29})$$

donde $E_n(L)$ son las autoenergías de los estados excitados evaluados en el sistema finito, v es la velocidad de las excitaciones y $\Delta_+ = h + \bar{h}$ la dimensión de escala. Las Ecs.(A.27) y (A.29) son los resultados más importantes de la teoría de campos conformes en relación a nuestra aplicación al modelo de Luttinger.

A.6. Determinación del parámetro de Luttinger en el modelo XXZ

Como aplicación de las Ecs.(A.27) y (A.29) indicaremos la forma de obtener el parámetro de Luttinger en la región no masiva del diagrama de fases de la cadena XXZ . En el caso $h = 0$ el único parámetro microscópico de la teoría es Δ , siendo $|\Delta| < 1$. Los exponentes críticos que aparecen en las funciones de correlación pueden ser expresados en términos de las dimensiones conformes Δ_+ de los campos primarios. En general, un operador físico se descompone en todos los operadores que no están prohibidos por leyes de conservación. El decaimiento asintótico es determinado por el operador primario que tiene el exponente crítico más bajo. Para la fase de líquido de Luttinger del modelo XXZ conocemos algunos valores de K . $K(\Delta = 0) = 1$, el valor de $K(\Delta \ll 1)$ está dado por la (Ec.(3.32)) y $K(\Delta = 1) = 1/2$ (este punto con simetría $SU(2)$ se estudia mediante bosonización no abeliana [35]). Al menos en estas regiones el operador $\exp(i\sqrt{\pi}\theta)$ posee la menor dimensión de escala ($1/(4K)$). Con esto se tiene evaluado el lado derecho de la Ec.(A.29).

Por otro lado, mediante el ansatz de Bethe se obtiene una expresión para el espectro de energía para un sistema finito de longitud L en función de Δ [135]. Para el primer estado excitado dicha expresión coincide con la Ec.(A.29) si se

identifica $c = 1$ y $\Delta_+ = \frac{1}{2\pi}(\pi - \cos^{-1} \Delta)$ lo cual, junto con nuestro resultado anterior $\Delta_+ = 1/(4K)$ permite obtener la relación

$$K(\Delta) = \frac{\pi}{2(\pi - \theta)}, \quad |\Delta| < 1. \quad (\text{A.30})$$

de esta forma se arriba a la Ec.(3.33). Para obtener el resultado general $K(\Delta, h)$ el procedimiento es esencialmente el mismo, pero las ecuaciones que se obtiene a partir del ansatz de Bethe deben resolverse numéricamente. El método se desarrolla en [66].

Bibliografía

- [1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt, Rinehart, Winston, 1976).
- [2] C. Kittel, *Quantum theory of solids* (John Wiley and Sons, 1987).
- [3] J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State* (Academic Press, 1992).
- [4] W. Jones, N. H. March, *Theoretical Solid State Physics* (Dover, 1973).
- [5] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics. A Set of Lectures* (Addison Wesley, 1990).
- [6] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum, 1990).
- [7] J. M. Luttinger, *J. Math. Phys.* **4**, 1154 (1963).
- [8] S. Tomonaga, *Prog. Theor. Phys.* **5**, 544 (1950).
- [9] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge University Press, 1996).
- [10] F. D. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1358 (1980).
- [11] A. L. Fetter, W. D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particle Physics* (McGraw-Hill, 1971).
- [12] S. Doniach, E. H. Sondheimer, *Green's Functions for Solid State Physicists* (Imperial College, 1998).
- [13] G. H. Golub, C. F. Van Loan, in *Matrix Computations*, (Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1996).
- [14] V. J. Emery, S. A. Kivelson, J. M. Tranquada, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **96**, 8814 (1999).
- [15] T. Hotta, Y. Takada, H. Koizumi, E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2477 (2000).
- [16] E. Dagotto, T. M. Rice, *Science* **271**, 618 (1996).
- [17] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [18] K. Okamoto, *Solid State Commun.* **98**, 245 (1996).
- [19] M. Oshikawa, M. Yamanaka, I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997).

- [20] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag, 1994).
- [21] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [22] D. C. Cabra, P. Pujol, C. von Reinchenbach, *Phys. Rev. B* **58**, 65 (1998).
- [23] Buyers, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 371 (1986).
- [24] D. C. Cabra, M. D. Grynberg, *Phys. Rev. B* **59**, 119 (1999).
- [25] A. Honecker, *Phys. Rev. B* **59**, 6790 (1999).
- [26] R. Wießner, A. Fledderjohann, K. H. Mütter, M. Karbach, *Eur. Phys. J. B* **15**, 475 (2000).
- [27] D. C. Cabra, A. De Martino, M. D. Grynberg, S. Peysson, P. Pujol, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4791 (2000).
- [28] J. G. Bednorz, K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 188 (1986).
- [29] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1 (1991).
- [30] M. Arlego, D. C. Cabra, M. D. Grynberg, *Phys. Rev. B* **64**, 134419 (2001).
- [31] D. Schechtman, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [32] M. Arlego, *Phys. Rev. B* **66**, 052419 (2002).
- [33] M. Arlego, D. C. Cabra, J. E. Drut, M. D. Grynberg, *Phys. Rev. B* **67**, 144426 (2003).
- [34] M. Arlego, W. Brenig, D. C. Cabra, F. Heidrich-Meisner, A. Honecker, G. Rossini, *Phys. Rev. B* (en prensa)
- [35] D. Sénéchal, *cond. mat.* **9908262**.
- [36] I. Affleck, in *Fields, Strings and Critical Phenomena*, edited by J. Zinn-Justin E. Brezin (North-Holland, 1989).
- [37] S. Rao, D. Sen, *cond. mat.* **0003492**.
- [38] I. Affleck, D. Gepner, H. Schulz, T. Ziman, *J. Phys.* **22**, 511 (1989).
- [39] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, A. M. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated Systems* (Cambridge University Press, 1998).
- [40] R. Rajaraman, *Solitons and Instantons* (North-Holland, 1982).
- [41] P. Di Francesco, P. Mathieu, D. Sénéchal, *Conformal Field Theory* (Springer-Verlag, New York, 1997).
- [42] Lemmens, *Phys. Reports* **376**, 1 (2003).
- [43] G. I. Dzhaparidze, A. A. Nersesyan, *JETP Lett.* **27**, 334 (1978).
- [44] V. L. Pokrovsky, A. L. Talapov, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 65 (1979).
- [45] J. Voit, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21**, 1141 (1988).

- [46] T. Giamarchi, H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **39**, 4620 (1989).
- [47] D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [48] J. B. Suck, M. Schreiber, P. Häussler, in *Quasicrystals. An Introduction to Structure, Physical Properties and Applications.*, edited by J. B. Suck, M. Schreiber, P. Häussler (Springer-Verlag, Berlin, 2002).
- [49] C. Godrèche, J. M. Luck, H. Orland, *J. Stat. Phys.* **45**, 777 (1986).
- [50] Y. Achiam, T. C. Lubensky, E. W. Marshall, *Phys. Rev. B* **33**, 6460 (1986).
- [51] M. Kohmoto, B. Sutherland, C. Tang, *Phys. Rev. B* **35**, 1020 (1987).
- [52] T. J. Sato, H. Takakura, A. P. Tsai, K. Shibata, K. Ohoyama, K. H. Andersen, *Phys. Rev. B* **61**, 476 (2000).
- [53] D. C. Cabra, M. D. Grynberg, A. Honecker, P. Pujol, in *Condensed Matter Theories 16*, edited by S. Hernández, J. W. Clark (Nova Science, New York, 2001).
- [54] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.-Y. Juang, P. K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985).
- [55] L. P. Kouwenhoven, F. W. J. Hekking, B. J. van Wees, C. J. P. M. Harmans, C. E. Timmering, C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 361 (1990).
- [56] C. G. Bezerra, J. M. de Araujo, C. Chesman, E. L. Albuquerque, *cond. mat.* **0101099**.
- [57] J. Vidal, D. Mouhanna, T. Giamarchi, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3908 (1999).
- [58] K. Hida, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1331 (2001).
- [59] K. Hida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3177 (1999).
- [60] K. Hida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 311 (2000).
- [61] W. Chen, K. Hida, H. Nakano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 625 (1999).
- [62] O. Derzhko, J. Richter, O. Zaburanyi, *J. Magn. Magn. Matter.* **222**, 207 (2000).
- [63] M. Oshikawa, M. Yamanaka, I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997).
- [64] K. Totsuka, *Phys. Lett. A* **228**, 103 (1997).
- [65] D. C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5126 (1997).
- [66] D. C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, *Phys. Rev. B* **58**, 6241 (1998).
- [67] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery *Numerical Recipes in C++* (Springer-Verlag, New York, 1997).
- [68] H. Tanaka, K. Takatsu, W. Shiramura, T. Kambe, H. Nojiri, T. Yamada, S. Okubo, H. Ohta, M. Motokawa, *Physica B* **246**, 230 (1998).

- [69] W. Shiramura, K. Takatsu, B. Kurniawan, H. Tanaka, H. Uekusa, Y. Ohashi, K. Takizawa, H. Mitamura, T. Goto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 548 (1998).
- [70] A. K. Kolezhuk, *Phys. Rev. B* **59**, 4181 (1999).
- [71] D. C. Cabra, M. D. Grynberg, *Phys. Rev. B* **62**, 337 (2000).
- [72] T. Tokihiro, *Phys. Rev. B* **41**, 7334 (1990).
- [73] J. M. Luck, Th. M. Nieuwenhuizen, *Europhys. Lett.* **2**, 257 (1986).
- [74] D. S. Fischer, *Phys. Rev. B* **50**, 3799 (1994).
- [75] S. K. Ma, C. Dasgupta, C. K. Hu, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1434 (1979).
- [76] C. Dasgupta, S. K. Ma, *Phys. Rev. B* **22**, 1305 (1979).
- [77] J. Vidal, D. Mouhanna, T. Giamarchi, *Phys. Rev. B* **65**, 014201 (2002).
- [78] T. P. Eggarter, R. Riedinger, *Phys. Rev. B* **18**, 569 (1978).
- [79] H. Schmidt, *Phys. Rev.* **105**, 425 (1957).
- [80] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, K. Hallberg, in *Density-Matrix Renormalization, Lecture Notes in Physics Vol 528*, edited by I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, K. Hallberg (Springer-Verlag, Berlin, 1999).
- [81] M. A. Martin-Delgado, R. Shankar, G. Sierra, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3443 (1996).
- [82] M. A. Martin-Delgado, R. Shankar, G. Sierra, *Phys. Lett. A* **250**, 430 (1998).
- [83] D. C. Cabra, M. D. Grynberg, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1768 (1999).
- [84] G. Delfino, G. Mussardo, *Nucl. Phys. B* **516**, 675 (1998).
- [85] M. Fabrizio, A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, *Nucl. Phys. B* **580**, 647 (2000).
- [86] M. Fabrizio, A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2014 (1999).
- [87] Y. J. Wang, A. A. Nersesyan, *Nucl. Phys. B* **583**, 671 (2000).
- [88] P. Lecheminant, A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, *Nucl. Phys. B* **639**, 502 (2002).
- [89] I. Affleck, *Phys. Rev. B* **43**, 3215 (1991).
- [90] K. Totsuka, *Eur. Phys. J. B* **5**, 705 (1998).
- [91] F. Ye, G. Ding, B. Xu, *cond. mat.* **0105584**.
- [92] P. Tong, M. Zhong, *Phys. Rev. B* **65**, 064421 (2002).
- [93] B. M. McCoy, *Phys. Rev.* **173**, 531 (1968).
- [94] F. Ye, G. Ding, B. Xu, *cond. mat.* **0104321 v1**.

- [69] W. Shiramura, K. Takatsu, B. Kurniawan, H. Tanaka, H. Uekusa, Y. Ohashi, K. Takizawa, H. Mitamura, T. Goto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 548 (1998).
- [70] A. K. Kolezhuk, *Phys. Rev. B* **59**, 4181 (1999).
- [71] D. C. Cabra, M. D. Grynberg, *Phys. Rev. B* **62**, 337 (2000).
- [72] T. Tokihiro, *Phys. Rev. B* **41**, 7334 (1990).
- [73] J. M. Luck, Th. M. Nieuwenhuizen, *Europhys. Lett.* **2**, 257 (1986).
- [74] D. S. Fischer, *Phys. Rev. B* **50**, 3799 (1994).
- [75] S. K. Ma, C. Dasgupta, C. K. Hu, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1434 (1979).
- [76] C. Dasgupta, S. K. Ma, *Phys. Rev. B* **22**, 1305 (1979).
- [77] J. Vidal, D. Mouhanna, T. Giamarchi, *Phys. Rev. B* **65**, 014201 (2002).
- [78] T. P. Eggarter, R. Riedinger, *Phys. Rev. B* **18**, 569 (1978).
- [79] H. Schmidt, *Phys. Rev.* **105**, 425 (1957).
- [80] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, K. Hallberg, in *Density-Matrix Renormalization, Lecture Notes in Physics Vol 528*, edited by I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, K. Hallberg (Springer-Verlag, Berlin, 1999).
- [81] M. A. Martin-Delgado, R. Shankar, G. Sierra, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3443 (1996).
- [82] M. A. Martin-Delgado, R. Shankar, G. Sierra, *Phys. Lett. A* **250**, 430 (1998).
- [83] D. C. Cabra, M. D. Grynberg, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1768 (1999).
- [84] G. Delfino, G. Mussardo, *Nucl. Phys. B* **516**, 675 (1998).
- [85] M. Fabrizio, A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, *Nucl. Phys. B* **580**, 647 (2000).
- [86] M. Fabrizio, A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2014 (1999).
- [87] Y. J. Wang, A. A. Nersesyan, *Nucl. Phys. B* **583**, 671 (2000).
- [88] P. Lecheminant, A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, *Nucl. Phys. B* **639**, 502 (2002).
- [89] I. Affleck, *Phys. Rev. B* **43**, 3215 (1991).
- [90] K. Totsuka, *Eur. Phys. J. B* **5**, 705 (1998).
- [91] F. Ye, G. Ding, B. Xu, *cond. mat.* **0105584**.
- [92] P. Tong, M. Zhong, *Phys. Rev. B* **65**, 064421 (2002).
- [93] B. M. McCoy, *Phys. Rev.* **173**, 531 (1968).
- [94] F. Ye, G. Ding, B. Xu, *cond. mat.* **0104321 v1**.

- [95] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, *Ann. Phys. (N. Y.)* **16**, 407 (1961).
- [96] A. J. Guttmann, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb, J. Lebowitz (Academic Press, New York, 1990).
- [97] C. J. Hamer, M. N. Barber, *J. Phys. A* **14**, 2009 (1981).
- [98] R. B. Griffiths, *Phys. Rev.* **133**, (1964).
- [99] Z. Hiroi, M. Azuma, M. Takano, Y. Bando, *J. Solid State Chem* **95**, 230 (1991).
- [100] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, Y. Kitaoka, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3463 (1994).
- [101] E. M. Carron, M. A. Subramanian, J. C. Calabrese, R. L. Harlow, *Matter. Res. Bul.* **23**, 1355 (1988).
- [102] M. Uehara, T. Nagata, J. Akimitsu, H. Takahashi, N. Mori, K. Kinoshita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 2764 (1994).
- [103] E. Dagotto, *Rep. Prog. Phys.* **62**, 1525 (1999).
- [104] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera, E. S. Swanson, *Phys. Rev. B* **47**, 3196 (1993).
- [105] M. Reigrotzki, H. Tsunetsugu, T. M. Rice, *J. Phys. : Condens. Matter* **6**, 9235 (1994).
- [106] M. Greven, R. J. Birgeneau, U. J. Wiese, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1865 (1996).
- [107] Zheng Weihong, V. Kotov, J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **57**, 11439 (1998).
- [108] D. C. Johnston, M. Troyer, S. Miyahara, D. Lidsky, K. Ueda, M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, M. Isobe, Y. Ueda, M. A. Korotin, V. I. Anisimov, A. V. Mahajan, L. L. Miller, *cond. mat.* **0001147**.
- [109] D. C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, *Phys. Rev. B* **58**, 6241 (1998).
- [110] M. Sigrist, A. Furusaki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 2385 (1996).
- [111] H. Manaka, I. Yamada, H. Aruga Katori, *Phys. Rev. B* **63**, 104408 (2001).
- [112] H. Manaka, I. Yamada, H. Mitamura, T. Goto, *Phys. Rev. B* **66**, 064402 (2002).
- [113] B. R. Patyal, B. L. Scott, R. D. Willett, *Phys. Rev. B* **41**, 1657 (1990).
- [114] B. C. Watson, V. N. Kotov, M. W. Meisel, D. W. Hall, G. E. Granroth, W. T. Montfrooij, S. E. Nagler, D. A. Jensen, R. Backov, M. A. Petruska, G. E. Fanucci, D. R. Talham, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5168 (2001).
- [115] C. P. Landee, M. M. Turnbull, C. Galeriu, J. Giantsidis, F. M. Woodward, *Phys. Rev. B* **63**, 100402 .
- [116] M. J. Konstantinović, Z. V. Popović, M. Isobe, Y. Ueda, *Phys. Rev. B* **61**, 15185 (2000).

- [117] T. Ohama, M. Isobe, Y. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 1801 (2001).
- [118] R. Mélin, Y. C. Lin, P. Lajko, H. Rieger, F. Iglói, Phys. Rev. **B 65**, 104415 (2002).
- [119] E. Yusuf, K. Yang, Phys. Rev. **B 65**, 224428 (2002).
- [120] E. Orignac, T. Giamarchi, Phys. Rev. **B 57**, 5812 (1998).
- [121] M. Steiner, M. Fabrizio, A. O. Gogolin, Phys. Rev. **B 57**, 8290 (1998).
- [122] R. A. Hyman, K. Yang, R. N. Bhatt, S. M. Girvin, Phys. Rev. Lett. **76**, 839 (1996).
- [123] A. V. Chubukov, JETP Lett. **49**, 129 (1989).
- [124] A. V. Chubukov, Th. Jolicoeur, Phys. Rev. **B 44**, 12050 (1991).
- [125] S. Sachdev, R. Bhatt, Phys. Rev. **B 41**, 9323 (1990).
- [126] O. A. Starykh, M. E. Zhitomirsky, D. I. Khomskii, R. R. P. Singh, K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **77**, 2558 (1996).
- [127] R. M. White, in *Quantum Theory of Magnetism*, edited by McGraw-Hill (McGraw-Hill, New York, 1970).
- [128] J. M. vanden Broeck, L. W. Schwartz, Siam. J. Math. Anal. **10**, 658 (1979).
- [129] M. Henkel, G. Schülz, J. Phys. **A 21**, 2617 (1988).
- [130] S. Doniach, E. H. Sondheimer, in *Green's Functions for Solid State Physicists*, edited by Imperial College (Imperial College, London, 1998).
- [131] W. Brenig, A. P. Kampf, Phys. Rev. **B 43**, 12914 (1991).
- [132] R. J. Elliott, J. A. Krumhansl, P. L. Leath, Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974).
- [133] S. K. Ma, in *Modern Theory of Critical Phenomena*, (Benjamin, 1976).
- [134] I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **56**, 746 (1986).
- [135] F. Woynarovich, H-P. Eckerle, J. Phys. **A 20**, L97 (1987).