



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

Tesis Doctoral
**Teorías efectivas de sistemas
fuertemente correlacionados en
bajas dimensiones.**

Carlos A. Lamas

Director: Dr. Daniel C. Cabra
Co-director: Dr. M. D. Grynberg
Agosto de 2010

Lamas, Carlos A.

Teorías efectivas de sistemas fuertemente correlacionados en bajas dimensiones. - 1a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata, 2010.

E-Book.

ISBN 978-950-34-0915-2

1. Física. 2. Tesis de Doctorado. I. Título
CDD 530.711

Fecha de catalogación: 12/11/2012

INTRODUCCIÓN GENERAL:

Los sistemas altamente correlacionados presentan una amplia variedad de fascinantes propiedades y se están estudiando de forma intensa desde hace ya varios años. Particularmente, desde el descubrimiento de los cupratos superconductores en 1986, se han escrito una gran cantidad de trabajos concernientes al mecanismo que genera la superconductividad de alta temperatura. La famosa teoría BCS en la cual el apareamiento de los electrones se obtiene como consecuencia de una atracción inducida por la interacción con los fonones es consistente con un gran número de experimentos en superconductores convencionales. Sin embargo, esta teoría no explica las altas temperaturas críticas que presentan algunos superconductores no convencionales.

Aunque a lo largo de los últimos años se ha trabajado intensamente para poder explicar la existencia de superconductividad no convencional, aun no se ha logrado consensuar con respecto a la teoría mas apropiada. Una de las teorías que parece tener los ingredientes necesarios para alcanzar este fin está basada esencialmente en el proceso de dopar un aislador de Mott y en que la superconductividad se genera directamente de la interacción repulsiva entre los electrones. Por este motivo entender el diagrama de fases en todo el régimen de dopajes se ha vuelto un problema de importancia en materia condensada. Desde el límite de grandes dopajes, donde los sistemas están descritos por la teoría de Landau, se debe entender el mecanismo por el cual esta descripción se vuelve inviable dando lugar a fases exóticas como los cristales líquidos o fases de tipo nemáticas. Por otro lado en el régimen de muy bajo dopaje el estado fundamental generalmente es un estado antiferromagnético. Al aumentar el dopaje este estado se vuelve inestable dando lugar a nuevas fases. En este límite el sistema suele estar descrito por un modelo de Heisenberg antiferromagnético como teoría efectiva de bajas energías.

En esta tesis se investigaron estos dos límites en el ámbito de los sistemas altamente correlacionados. Por un lado, se estudiaron las condiciones por las cuales se producen rupturas en la descripción del líquido de Fermi y las simetrías de las posibles fases más allá de esta inestabilidad. Desarrollamos para esto un método que puede aplicarse en forma sistemática a un amplio espectro de modelos de electrones sobre redes bidimensionales. Por otro lado se estudió el límite opuesto donde se desea entender cuales son los factores que desestabilizan el orden antiferromagnético del sistema. En este régimen, los modelos antiferromagnéticos en dos dimensiones han cobrado un interés a causa de su conexión con los superconductores de alta temperatura. En particular, es necesario comprender los factores que hacen que fases

ordenadas se desestabilicen dando lugar a fases exóticas como los llamados líquidos de espín.

Esta tesis se divide en tres partes: en la primera se presentan las motivaciones y algunos de los modelos y técnicas que se usarán a lo largo del resto de la tesis. La segunda parte esta centrada en el estudio de las posibles inestabilidades del líquido de Fermi en redes bidimensionales. Dando primero una introducción simple a la teoría de Landau del líquido de Fermi, luego desarrollamos un método que permite detectar inestabilidades del mismo en una gran cantidad de modelos. Aunque se describen aplicaciones del mismo a diferentes modelos en la red, la presentación del método se hace independientemente del modelo en cuestión de manera de que pueda ser utilizado de forma sistemática en otros contextos. En la tercera parte de la tesis se presenta el estudio realizado sobre un antiferromagneto frustrado en dos dimensiones sobre la red hexagonal en 2 dimensiones (o panal de abejas). Usando una teoría de campo medio basada en la representación de los operadores de espín en términos de bosones de Schwinger, se estudia la estabilidad del estado de Néel a medida que se incrementa la frustración del sistema.

Esta tesis consiste básicamente en un texto introductorio al tema de sistemas fuertemente correlacionados en dos dimensiones, un resumen de algunas motivaciones experimentales y los resultados originales presentados en las siguientes publicaciones.

1. **Fermi Liquid instabilities in two-dimensional lattice models.**
C. A. Lamas, D. C. Cabra, N. Grandi
Physical. Review. B **78**, 115104 (2008).
2. **Generalized Pomeranchuk instabilities in graphene.**
C. A. Lamas, D. C. Cabra, N. Grandi.
Physical. Review. B **80**, 075108 (2009).
3. **Pomeranchuk instabilities in multicomponent lattice systems at finite Temperature.**
C. A. Lamas, D. C. Cabra, N. Grandi.
Submitted to Physical. Review. B.
4. **Two-dimensional Hubbard Model in the presence of lattice distortions.**
C. A. Lamas
J. Phys. Soc. Jpn. **78** 014602 (2009).
5. **Quantum disordered phase on the frustrated honeycomb lattice**
D. C. Cabra, C. A. Lamas, H. D. Rosales.
Submitted to Eur. Phys. Lett.

Índice general

I	Conceptos básicos y motivaciones.	1
1.	Introducción	3
2.	Modelos y métodos.	7
2.1.	Modelo de Hubbard	8
2.1.1.	De sistemas electrónicos a modelos de espín	11
2.2.	Modelo de Heisenberg.	13
2.3.	Líquidos de espín	15
2.3.1.	Materiales sin orden de largo alcance a $T = 0$	16
2.3.2.	Estados Valence Bond Resonantes	16
2.4.	Bosones de Schwinger	19
2.4.1.	Aproximación de campo medio.	20
2.4.2.	Diagonalización	25
2.4.3.	Ecuaciones de auto-consistencia.	26
2.5.	Ondas de espín	28
2.5.1.	Ferromagneto	28
2.5.2.	Antiferromagneto	31
3.	Sistemas altamente correlacionados	35
3.1.	Cristales líquidos	37
3.1.1.	Resultados experimentales	40
3.1.2.	Fases nemáticas en 2DEG	41
3.1.3.	Fase nemática en $Sr_3Ru_2O_7$	42
3.1.4.	Fases nemáticas y de tipo stripes en cupratos	43
II	Inestabilidades electrónicas	45
4.	Líquidos de Fermi.	47

4.1. Excitaciones elementales	48
4.1.1. El concepto de cuasipartícula	48
4.1.2. Energía de las cuasipartículas	53
4.2. Teoría de Landau	54
4.3. Inestabilidades	56
5. Inestabilidades en redes 2D	59
5.1. Pomeranchuk en redes 2 D	60
5.1.1. Desarrollo del método.	60
5.1.2. Una alternativa al cambio de variables.	67
5.2. Ejemplo: inestabilidades en la red cuadrada.	69
5.2.1. Inestabilidad del tipo onda s	71
5.2.2. Inestabilidad de Pomeranchuk del tipo onda d	72
5.3. Inestabilidades en Grafeno.	75
5.3.1. Grafeno: conceptos básicos	75
5.3.2. Hamiltoniano libre	78
5.3.3. Interacciones en grafeno	80
5.3.4. Parametrización de la superficie de Fermi.	82
5.3.5. Inestabilidades y diagrama de fases.	84
5.4. Generalización a varias bandas	86
5.5. Temperatura finita	90
5.5.1. Ejemplo: red cuadrada a temperatura finita.	94
5.6. Conclusiones	98
III Fases magnéticas	99
6. Introducción.	101
7. Antiferromagnetos en 2 D.	105
7.0.1. Modelo de Heisenberg en 2 dimensiones.	106
7.1. Modelo $J_1 - J_2$ sobre la red cuadrada.	107
7.1.1. Estado fundamental clásico y aproximación semiclásica.	108
7.1.2. Región no magnética $J_2 \simeq J_1/2$	109
7.2. Valence bond solids	110
7.2.1. Métodos analíticos y cálculos numéricos	111

8. Desorden cuántico en la red hexagonal.	113
8.1. Aspectos clásicos y semiclásicos	115
8.2. Resultados mediante bosones de Schwinger	120
8.3. Conclusiones	126
A. Apendice: Función delta	129

Parte I

Conceptos básicos y motivaciones.

Capítulo 1

Introducción

Desde el descubrimiento original de los superconductores de alta temperatura crítica, se continúan desarrollando nuevas técnicas experimentales y refinando las existentes, lo que ha resultado en grandes avances en los últimos 20 años. Una gran cantidad de experimentos han ofrecido importante información acerca del origen de la superconductividad en los cupratos, lo que promueve el desarrollo de varias ideas teóricas novedosas apuntadas a desarrollar una teoría global de la física de los cupratos superconductores. Los principales ingredientes que debe contener esta teoría global pueden resumirse en el diagrama de fases de la Figura 1.1.

La opción más simple es comenzar a examinar la estructura del diagrama de fases de la figura desde el régimen de mayor dopaje, donde se ha establecido amplia evidencia de que el estado fundamental está descrito por una teoría del líquido de Fermi convencional, con una superficie de Fermi simple que encierra el área impuesta por el teorema de Luttinger.

La región en el diagrama de fases con dopaje x menor que el dopaje correspondiente al máximo de T_c es la región de “bajo dopaje” (underdoped). En esta región, el estado metálico por encima de T_c es motivo de intensos estudios y presenta generalmente propiedades inusuales que no son encontradas en los metales normales. Esta región del diagrama de fases es conocida como fase de *pseudogap*. A temperaturas finitas el límite de esta fase no ha sido determinado y la línea mostrada en el diagrama de fases de la figura 1.1 debe tomarse como esquemático.

La región por arriba de la temperatura crítica óptima T_c también exhibe propiedades inusuales. La resistividad es lineal en T y el coeficiente Hall es dependiente de la temperatura. A medida que se aumenta el dopaje hacia la zona sobre dopada se

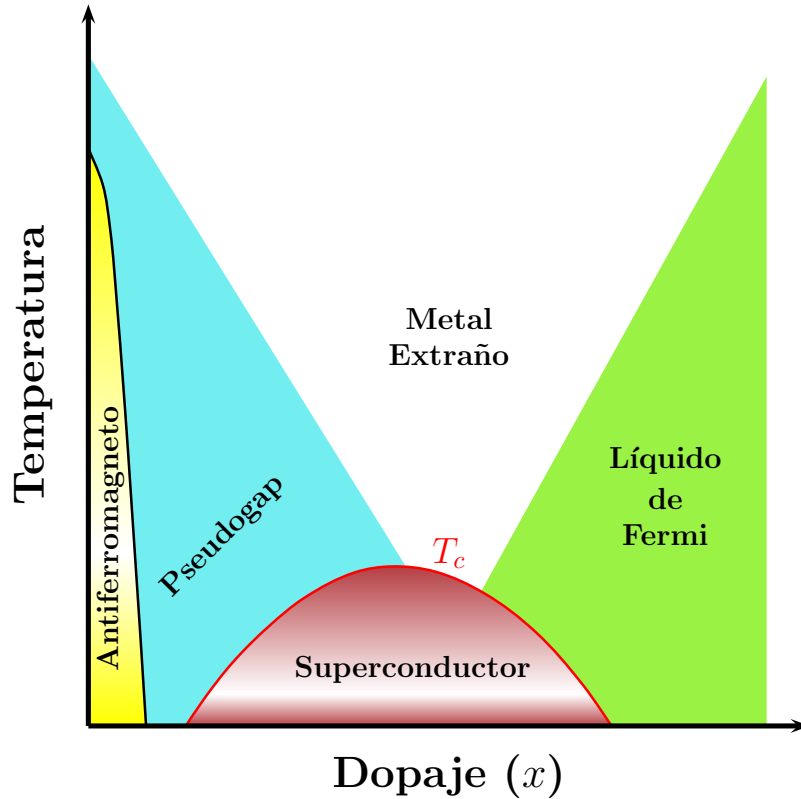


Figura 1.1: Diagrama de fases esquemático para los cupratos. Los ejes corresponden a la concentración de portadores (x) y temperatura (T).

recuperan las características de un líquido de Fermi convencional. La región anómala sobre el dopaje óptimo es conocida habitualmente como “metal extraño”.

Finalmente para dopajes muy pequeños el sistema se vuelve un aislador de Mott. Esta fase aisladora es de fundamental importancia para intentar entender el mecanismo que generaría la superconductividad no convencional. Hay un marcado consenso acerca de que la física de los superconductores de alta temperatura corresponde a dopar un aislador de Mott y que las altas correlaciones son las responsables del rico diagrama de fases de los cupratos.

El modelo más simple que captura la física de altas correlaciones es el modelo de Hubbard y su límite de acoplamiento fuerte, el modelo $t - J$. Es razonable tratar de entender estos modelos antes de explorar modelos mas elaborados.

Este punto de vista basado en las altas correlaciones del sistema fue motivado por las ideas de Anderson (1987), en base a posibles estados del tipo líquidos de espín o

valence bond resonantes (RVB). Estos estados no poseen orden antiferromagnético de largo alcance y tienen excitaciones de espín $1/2$ llamadas espinones. La idea general es que al dopar con huecos el estado RVB se obtiene un estado de singletes con portadores de carga coherentes que posee las mismas simetrías que un estado superconductor del tipo BCS. El proceso de dopar con huecos fue estudiado por Kivelson en 1987, quien argumentó que la combinación de huecos con los espinones forman excitaciones bosónicas. Estas excitaciones llamadas holones llevan carga pero no espín, mientras que los espinones son portadores de espín $1/2$ pero no de carga. En estos argumentos se ve claramente la noción de separación de espín y carga.

En la primera parte de la tesis introducimos los conceptos básicos y algunas de las motivaciones experimentales. En los siguientes capítulos estudiaremos los casos límites del diagrama de fases de la figura 1.1. Por un lado en la segunda parte de esta tesis estudiaremos algunas de las posibles causas de la ruptura del líquido de Fermi en diferentes geometrías. Por otro lado partiendo de el régimen de dopaje pequeño encontramos que el estado fundamental del diagrama 1.1 esta dado por un aislador de Mott. Cuando describimos a los sistemas mediante el límite de acoplamiento fuerte del modelo de Hubbard a medio llenado es decir, el modelo de Heisenberg debemos entender de que manera puede obtenerse un estado fundamental desordenado como el que fue propuesto por Anderson a partir de un estado antiferromagnético de tipo Néel (orden clásico del sistema).

Estas cuestiones están lejos de ser entendidas desde el punto de vista de una teoría global y es motivo de intensos estudios en el marco de la teoría de materia condensada. En esta tesis se han estudiado algunos de estos puntos claves, que deben entenderse antes de poder pensar en formular una teoría mas general.

Capítulo 2

Modelos y métodos.

Índice

2.1. Modelo de Hubbard	8
2.1.1. De sistemas electrónicos a modelos de espín	11
2.2. Modelo de Heisenberg.	13
2.3. Líquidos de espín	15
2.3.1. Materiales sin orden de largo alcance a $T = 0$	16
2.3.2. Estados Valence Bond Resonantes	16
2.4. Bosones de Schwinger	19
2.4.1. Aproximación de campo medio.	20
2.4.2. Diagonalización	25
2.4.3. Ecuaciones de auto-consistencia.	26
2.5. Ondas de espín	28
2.5.1. Ferromagneto	28
2.5.2. Antiferromagneto	31

Durante mucho tiempo, se ha buscado construir modelos simples que caractericen el estado fundamental de los sistemas en materia condensada, rescatando los grados de libertad relevantes en el régimen de interés. A

lo largo de los años, algunos de estos modelos simplificados han cobrado mayor importancia que otros, mostrando ser apropiados para describir las propiedades físicas que caracterizan el estado fundamental. Algunos de los modelos más famosos y más estudiados hasta la fecha son por ejemplo: el modelo de Ising, el modelo de Hubbard, el modelo de Heisenberg, la teoría del líquido de Fermi, el modelo de Sommerfeld de los metales, etc. Discutiremos brevemente en este capítulo algunos de estos modelos, que nos serán útiles en el resto de la tesis.

El modelo de Hubbard es un modelo altamente simplificado para los electrones en un sólido, los cuales interactúan entre sí a través de una interacción coulombiana de muy corto alcance. A pesar de su aparente simplicidad, se cree que este modelo puede describir bien diversos fenómenos como la transición metal-aislante, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo, ferromagnetismo y superconductividad. Se cree que es posible también describir varias clases de universalidad para diferentes sistemas fuertemente interactuantes mediante el estudio del modelo de Hubbard. Se espera que los fenómenos no triviales y los mecanismos que los generan encontrados en el modelo de Hubbard puedan observarse también en otros sistemas de la misma clase de universalidad. La situación es muy similar a lo que ocurre con el modelo de Ising para un sistema de espines clásicos. El modelo de Ising es demasiado simple para ser un modelo realista que describa los materiales magnéticos, pero este modelo se ha vuelto extremadamente valioso y útil en el proceso de desarrollar varias nociones y técnicas en mecánica estadística. Muchas clases de universalidad de gran importancia (tanto en sistemas de espín como en teoría de campos) fueron descubiertas estudiando el modelo de Ising.

2.1. Modelo de Hubbard

El modelo de Hubbard es uno de los modelos más simples que presentan tanto correlaciones antiferromagnéticas como transporte electrónico. Aunque es un modelo altamente simplificado, se conocen soluciones analíticas solo para los casos límites de una e infinitas dimensiones. El hamiltoniano está dado por

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} [\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + H.c.] + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}, \quad (2.1)$$

donde la suma $\langle i, j \rangle$ se realiza sobre pares de primeros vecinos, t es la amplitud de hopping, U es la constante de interacción, H. c. representa el hermítico conjugado y el operador \hat{c}_i^\dagger crea un electrón en el sitio i con espín σ y satisface

$$\{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger\} = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad (2.2)$$

$$\{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}\} = 0 \quad (2.3)$$

$$\{\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger\} = 0 \quad (2.4)$$

Hemos introducido además el operador $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$. A partir del principio de Pauli tenemos que $n_{i,\sigma} = 0, 1$ o $n_{i,\sigma}^2 = n_{i,\sigma}$ en cada sitio.

El espacio de Hilbert de este hamiltoniano es el producto tensorial de cuatro estados por cada sitio, que representaremos como $|0\rangle$ al estado sin ningún electrón, $|\uparrow\rangle$ al estado con un electrón con espín up, $|\downarrow\rangle$ al estado con un electrón con espín down y $|\uparrow\downarrow\rangle$ al estado de dos electrones con espines up y down respectivamente. Los estados $|0\rangle$ y $|\uparrow\downarrow\rangle$ son singletes de espín.

Es conveniente también definir los operadores de espín y número de partículas. El operador de espín \hat{S}_i puede escribirse como

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \sum_{\alpha,\beta} \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha,\beta} \hat{c}_{i,\beta} \quad (2.5)$$

donde $\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

El operador de espín total se define como

$$\hat{S}_{tot}^\alpha = \sum_i \hat{S}_i^\alpha \quad (2.7)$$

El operador \hat{S}_{tot}^α conmuta tanto con la parte de hopping como con el término de interacción. En otras palabras, este hamiltoniano es invariante ante rotaciones globales en el espacio de espines.

El operador número de partículas en el sitio i es

$$\hat{n}_i = \sum_\sigma \hat{n}_{i\sigma} = \sum_\sigma \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \quad (2.8)$$

y el correspondiente número total de partículas puede definirse como

$$\hat{N}_t = \sum_i \hat{n}_i \quad (2.9)$$

Este operador conmuta con el hamiltoniano \hat{H} . Aunque hay otras cantidades conservadas además de N_t , en general es conveniente clasificar los estados estacionarios del sistema en sectores donde los autovalores de \hat{N}_t tienen un valor constante.

Podemos analizar fácilmente los casos límites en los cuales solo uno de los términos del hamiltoniano está presente. Por ejemplo suponiendo que $U = 0$ recobramos el hamiltoniano de hopping

$$\hat{H}_{hop} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} [\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + H.c.] \quad (2.10)$$

que es cuadrático en los operadores fermiónicos y puede ser diagonalizado de forma simple mediante una transformación al espacio de momentos

$$\hat{c}_{\mathbf{x}_i, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (2.11)$$

donde \mathbf{x}_i es la posición del sitio i en la red. De esta manera el hamiltoniano libre queda en la forma

$$\hat{H}_{hop} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (2.12)$$

El estado fundamental del sistema con N_t electrones se construye llenando los estados de una partícula de menor energía. Cada estado de una partícula puede ser ocupado por un electrón con espín up y otro con espín down, por lo que el estado fundamental tendrá espín total cero y no tendrá orden de largo alcance. En este caso los autoestados de una partícula son simplemente ondas planas y el estado fundamental es un estado paramagnético. El hecho de que el hamiltoniano se pueda diagonalizar de esta manera implica que los electrones se comportan como ondas en el sistema no interactuante.

Por otro lado podemos tomar el límite opuesto y suponer $U \neq 0$ y $t = 0$, en este caso tenemos que

$$H = H_U = U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} \quad (2.13)$$

El hamiltoniano representa una interacción no lineal que aumenta la energía del sistema en una cantidad U cuando dos electrones ocupan el mismo orbital en el sitio i . El hamiltoniano H_U ya está dado en forma diagonal y podemos escribir un autoestado general de la siguiente manera

$$|\psi\rangle_{X,Y} = \left(\prod_{x \in X} \hat{c}_{\mathbf{x}, \uparrow}^\dagger \right) \left(\prod_{y \in Y} \hat{c}_{\mathbf{y}, \downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (2.14)$$

donde X e Y son subconjuntos arbitrarios de la red total y representan los sitios de la red que están ocupados con electrones con espín up y down respectivamente. El número total de electrones sera entonces $N_t = |X| + |Y|$, y la energía del sistema estará dada por

$$E_{X,Y} = \sum_{x \in X \cap Y} U \quad (2.15)$$

Luego podemos construir el estado fundamental correspondiente a un dado valor de N_t seleccionando los subconjuntos X e Y que minimizan la energía $E_{X,Y}$. En los casos que el número de electrones N_t es menor que el número de sitios N , podemos siempre elegir X e Y de forma que $X \cap Y = \emptyset$, con lo que el estado fundamental tiene energía cero. Este estado fundamental no tiene orden magnético de largo alcance. Nuevamente el sistema es paramagnético pero en este caso los electrones se comportan como partículas

Al investigar rápidamente las propiedades de los dos límites del modelo de Hubbard encontramos que ninguno de ellos favorece el orden magnético. También observamos que los electrones se comportan como ondas en el caso libre mientras que se comportan como partículas en el límite interactuante sin término de hopping. El comportamiento del hamiltoniano total es un problema fascinante que resulta ser no trivial. Aún cuando cada uno de los hamiltonianos H_{hop} y H_U puede diagonalizarse, es realmente muy difícil encontrar la solución para su suma. Una característica interesante del modelo es que, aunque los hamiltonianos H_{hop} y H_U no favorecen ningún tipo de orden no trivial, su suma $H = H_{hop} + H_U$ puede generar varios ordenes no triviales, incluyendo antiferromagnetismo y superconductividad.

2.1.1. De sistemas electrónicos a modelos de espín

Aunque en dos dimensiones el estado fundamental del hamiltoniano de Hubbard no puede encontrarse en forma exacta, existen varias aproximaciones que nos permiten comprender las principales características del mismo. En el caso especial de medio llenado, es decir cuando el número de electrones en el sistema es igual al número total de sitios en la red, puede usarse un hamiltoniano efectivo válido en el régimen de U grande que describe los grados de libertad magnéticos. Este hamiltoniano efectivo puede ser derivado en forma perturbativa y resulta en el conocido modelo de Heisenberg.

En lo que sigue nos enfocaremos principalmente en aisladores magnéticos, es decir materiales en donde la ausencia de transporte electrónico se debe a las correlaciones electrónicas. Como ya discutimos, estos sistemas son conocidos generalmente como

aisladores de Mott. El objetivo de explicar el magnetismo en este tipo de aisladores no es una tarea fácil, no pudiéndose usar una teoría de bandas ya que ésta se basa en las propiedades de los electrones independientes, mientras que el magnetismo es un fenómeno colectivo generado por las correlaciones electrónicas.

Supondremos además que la principal fuente de las interacciones magnéticas es la interacción electrón-electrón y no las interacciones de tipo dipolo-dipolo o interacciones espín-orbita. Es decir supondremos que las interacciones magnéticas están básicamente generadas por las interacciones Coulombianas junto con el principio de exclusión de Pauli.

Primero observemos el modelo en el llamado límite atómico, esto es $\frac{U}{t} \rightarrow \infty$, es decir el límite de grandes valores de la repulsión electrón-electrón. En este límite, a medio llenado el estado fundamental es altamente degenerado, ya que cualquier estado con un electrón por sitio es un estado fundamental del sistema con energía cero, sin importar la orientación del espín de cada electrón. Para describir como esta degeneración desaparece para valores pequeños pero finitos de $\frac{t}{U}$, debemos efectuar un desarrollo a segundo orden en teoría de perturbaciones. De esta manera puede obtenerse un hamiltoniano efectivo que actúa en el subespacio de espín y toma la forma del conocido hamiltoniano de Heisenberg de espín $\frac{1}{2}$

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (2.16)$$

donde $J_{i,j} = \frac{t_{i,j}^2}{U}$ depende de la amplitud de hopping entre sitios y mide la magnitud de la interacción antiferromagnética entre los espines.

Aunque el hamiltoniano anterior representa un problema muy complicado con solo unos pocos casos especiales en los que se puede obtener una solución exacta, es posible estudiar las propiedades de su estado fundamental usando diversas aproximaciones. En particular, el estado fundamental puede ser un estado ordenado de forma antiferromagnética o estado *tipo Néel*. Estos estados pueden ser obtenidos por técnicas semiclásicas como las ondas de espín que veremos en las secciones siguientes. El ejemplo más simple se puede encontrar al estudiar el modelo de Heisenberg con acoplamientos antiferromagnéticos sólo a primeros vecinos en una red bipartita, como por ejemplo es el caso de la red cuadrada, la cúbica o la hexagonal (de la cual hablaremos extensamente en la última parte de esta tesis). En estos casos encontramos que, en promedio, todos los espines de una subred apuntan en la dirección $+S$ (lo que implica ruptura de la simetría $SU(2)$) mientras que los de la otra subred apuntan hacia $-S$. La diferencia con una configuración clásica de espines radica en que la magnetización de una dada subred se ve reducida por las fluctuaciones cuánticas de punto cero de los espines, aún a temperatura cero.

2.2. Modelo de Heisenberg.

Como mencionamos anteriormente, el hamiltoniano efectivo que usaremos para modelar los grados de libertad magnéticos es el modelo de Heisenberg (2.16), el cual está escrito en términos de el operador de intercambio

$$\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (2.17)$$

donde los $\hat{\mathbf{S}}_i$ son los operadores de espín localizados en el sitio i de la red. Este operador describe correctamente la interacción entre un par de espines. No es trivial extender este hamiltoniano a un sistema de N cuerpos y no lo discutiremos en detalle en esta tesis, nos bastará decir que la extensión que se obtiene sumando sobre pares de espines es la correcta. Entonces a partir de aquí discutiremos algunas de sus propiedades del hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{i,j} J_{i,j} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (2.18)$$

Este es un hamiltoniano cuántico con $\hat{\mathbf{S}}_i$, ($i = 1, 2, \dots, N$), un operador con elementos $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z)$ que cumplen con el álgebra de $SU(2)$. Sin embargo, a partir de este modelo cuántico podemos obtener lo que llamaremos su límite clásico para grandes valores de la magnitud del espín. Podemos ver las razones por las cuales llamamos a este límite “clásico” escribiendo $\hat{\mathbf{S}}_i$ en términos de operadores normalizados $\hat{\Omega}_i$, tal que $\hat{\mathbf{S}}_i = S\hat{\Omega}_i$. En función de estos operadores las relaciones de conmutación quedan

$$[\hat{\Omega}_i^x, \hat{\Omega}_j^y] = \frac{i}{S} \hat{\Omega}_i^z \delta_{i,j} \quad (2.19)$$

Tomando el límite para grandes valores de S vemos que los operadores normalizados conmutan, y por lo tanto se comportan como vectores clásicos. Estudiar las propiedades del modelo en este límite es extremadamente útil desde el punto de vista teórico, por un lado puede usarse para chequear que las aproximaciones realizadas en los cálculos sean válidas al menos para grandes valores de S . Por otro lado se pueden realizar expansiones semiclásicas partiendo del orden clásico. Trataremos algunas de estas en las siguientes secciones.

Es fácil ver que el estado fundamental clásico correspondiente a $J_{ij} < 0$ es ferromagnético. Cualquier vector que apunte en una dirección distinta a la del resto aumenta la energía del sistema. El caso $J_{ij} > 0$ es mas complicado, incluso en el modelo clásico, y puede generar una extensa variedad de estados fundamentales. Para simplificar, por ahora asumamos que solo hay interacciones entre primeros vecinos, es decir $J_{ij} = J_1$ si i y j son vecinos próximos y cero en otro caso. En este caso

el estado fundamental es antiferromagnético, que en el caso clásico y para una red bipartita corresponde a todos los vectores que son primeros vecinos apuntando en direcciones opuestas. Sin embargo, para el caso cuántico el estado fundamental es otro. Podemos ver esto introduciendo los operadores $\hat{S}^\pm = \hat{S}^x \pm i\hat{S}^y$ y escribiendo

$$2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = 2\hat{S}_1^z \hat{S}_2^z + \hat{S}_1^+ \hat{S}_2^- + \hat{S}_1^- \hat{S}_2^+ \quad (2.20)$$

podemos ver que

$$2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 | \uparrow \downarrow \rangle = \frac{1}{2} | \uparrow \downarrow \rangle + | \downarrow \uparrow \rangle \quad (2.21)$$

Por lo que vemos que el estado antiferromagnético clásico no es un autoestado del hamiltoniano. El estado clásico $| \uparrow \downarrow \uparrow \dots \rangle$ es conocido como estado de Néel

El análogo cuántico al estado clásico antiferromagnético se define como un autoestado de espín del hamiltoniano de Heisenberg con una magnetización por subred diferente de cero. La magnetización por subred se define entonces como

$$m_s = \frac{1}{N} \sum_i \langle \epsilon_i \hat{S}_i^z \rangle \quad (2.22)$$

donde ϵ_i es igual a 1 en una subred y -1 en la otra. De manera que para el estado clásico la magnetización $m_s = \frac{1}{2}$. Este parámetro de orden está bien definido sólo en el límite clásico. Cuando tomamos valores cada vez más bajos del espín las fluctuaciones cuánticas se vuelven cada vez más importantes. Esto se debe a que la magnetización m_s no conmuta con el hamiltoniano de Heisenberg.

$$\frac{d\hat{m}_s}{dt} \propto [\hat{m}_s, \hat{H}] \neq 0 \quad (2.23)$$

por lo que no es una cantidad conservada sino que fluctúa. Solo en el caso en que tomemos el límite $S \rightarrow 0$ los operadores de espín conmutan entre sí, lo que hace que el operador \hat{m}_s conmute con el hamiltoniano y la magnetización m_s se conserve. Para cualquier valor finito del espín tendremos un parámetro de orden que no conmuta con el hamiltoniano y por lo tanto fluctuante. De esta manera vemos que la importancia de las fluctuaciones cuánticas es regulada de alguna manera por la magnitud del espín. El límite cuántico extremo, donde las fluctuaciones cuánticas son más importantes es el caso $S = \frac{1}{2}$. Es justamente este límite el que estudiaremos con más detalle a lo largo de la tesis.

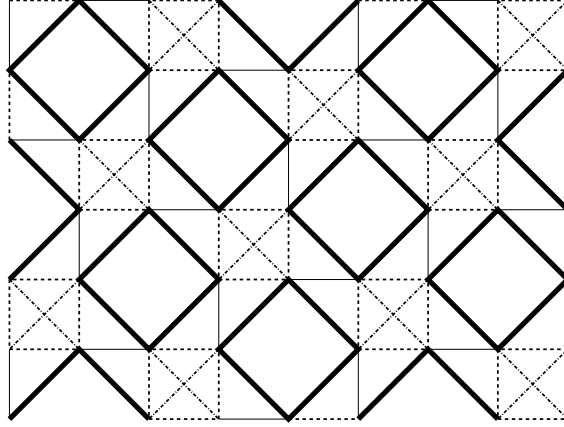


Figura 2.1: Modelo sobre la red cuadrada de las propiedades magnéticas del compuesto CaV_4O_9 . Las energías de diferentes intercambio se esquematizan mediante los distintos tipos de línea. El acoplamiento más fuerte J corresponde a las líneas de gruesas que forman las plaquetas cuadradas.

2.3. Líquidos de espín

Dependiendo de el contexto, el nombre líquido de espín es usualmente utilizado con diferentes significados. Comenzaremos aquí dando una definición simple del mismo: diremos que el estado fundamental de un modelo de espines en la red es un líquido de espín cuántico (LSC) si no rompe espontáneamente ninguna simetría. De acuerdo a esta simple definición un LSC es obtenido si los espines no muestran ningún tipo de orden de largo alcance a $T = 0$. Un estado sin ningún tipo de orden no es necesariamente interesante desde el punto de vista teórico, por ejemplo un sistema de espines a muy alta temperatura esta completamente desordenado y no tiene ninguna estructura.

Como discutimos anteriormente el modelo de Heisenberg a primeros vecinos en redes bipartitas presenta como estado fundamental un estado ordenado antiferromagnético que acordamos en llamar de tipo Néel. Este estado rompe la simetría de rotación por lo que evidentemente no puede ser considerado un líquido de espín. Una de las preguntas que aún debemos entender en materia condensada es cuál es el mecanismo que hace que el orden de Néel se vuelva inestable dando lugar a estados aisladores exóticos como los líquidos de espín.

2.3.1. Materiales sin orden de largo alcance a $T = 0$

El compuesto CaV_4O_9 es un ejemplo de un sistema que se puede modelar con un hamiltoniano de Heisenberg en $D > 1$, donde, en 1995, se observó experimentalmente que las excitaciones magnéticas poseen gap [33]. En particular, este compuesto se modela con un modelo de Heisenberg de espín $\frac{1}{2}$ sobre una red cuadrada a la que se le sustrae un sitio de cada cinco (Fig.2.1). Los sitios restantes corresponden a las ubicaciones de los iones de vanadio, que llevan los electrones magnéticamente activos. Las interacciones magnéticas $J_{i,j}$ resultan ser significativas, no sólo entre los vecinos más cercanos, sino también entre los segundos vecinos. A través de mediciones de susceptibilidad magnética, se observó que el estado fundamental es un singlete de espín rotacionalmente invariante, lo que excluye cualquier estado de tipo Néel.

Este comportamiento tipo líquido de espín puede entenderse en el límite en el que sólo los acoplamientos más fuertes $J_{i,j}$ se mantienen, y los otros se ponen a cero. Resulta ser que estos acoplamientos actúan entre segundos vecinos, y forman un conjunto de plaquetas desacopladas de cuatro sitios. Dado que el estado fundamental de dicho sistema de Heisenberg de cuatro sitios es un único estado con $S = 0$, separado por un gap de otros estados, el modelo es trivialmente gapeado y sin ruptura de simetría en este límite. Pero este no es el tipo de líquido de espín en el que queremos centrarnos aquí, ya que puede ser transformado adiabáticamente en un aislador de bandas. Apagando la interacción electrón-electrón podemos hacer que el sistema sea metálico. Pero se puede proceder de una manera diferente, a partir de valores realistas de $J_{i,j}$, podemos apagar gradualmente los acoplamientos entre plaquetas. De esta manera, se puede verificar (numéricamente, por ejemplo) que el gap de espín no se cierra y no hay ninguna transición de fase cuántica. Entonces, en este sistema de plaquetas de cuatro espines desacopladas, la repulsión U se puede llevar a cero, sin causar ningún cambio de fase. El estado final es un aislador de bandas y esta suavemente conectado con el modelo inicial de Heisenberg.

2.3.2. Estados Valence Bond Resonantes

Anteriormente mencionamos que, al estudiar el modelo de Heisenberg, una estrategia razonable puede ser partir del orden clásico del modelo y realizar un desarrollo semiclásico en potencias de $1/S$. En dicho desarrollo asumimos que los espines experimentan pequeñas fluctuaciones alrededor de una dirección bien definida y que la función de correlación espín-espín es de largo alcance. Esto es, por supuesto, incompatible con la posibilidad de tener un estado invariante rotacional de tipo líquido de espín. Para obtener alguna intuición de la forma que podría tener un estado de tipo líquido de espín es interesante analizar el límite opuesto al estado de Néel: es

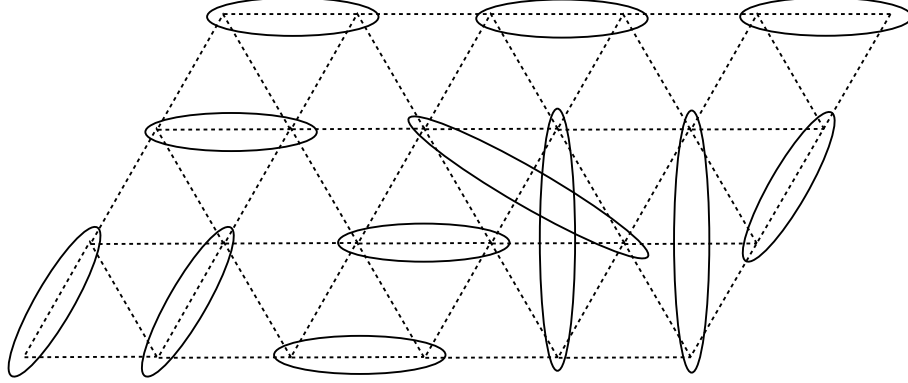


Figura 2.2: Esquema de un estado de tipo Valence Bond de corto alcance en la red triangular. Los singletes entre pares de espines son representados por medio de las elipses.

decir un estado de singletes con correlaciones extremadamente cortas. Llamaremos a este tipo de estados Valence Bond de corto alcance. Este estado puede escribirse como producto directo de estados de $S = 0$, $|i, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle)$ entre pares de sitios

$$|VB\rangle = |i_0, i_1\rangle \otimes |i_2, i_3\rangle \otimes |i_4, i_5\rangle \cdots \otimes |i_{N-1}, i_N\rangle \quad (2.24)$$

donde cada sitio de la red aparece exactamente una vez. Este tipo de estados es de corto alcance si todos los pares de sitios que forman un singlete, están a una distancia menor o igual que una longitud fija r_{max} . El caso mas simple es tomar $r_{max} = 1$, donde cada espín forma un singlete con alguno de sus vecinos próximos (ver Fig. 2.2). En un estado VB las correlaciones espín-espín son de corto alcance: $\langle VB | \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j | VB \rangle = 0$ si $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > r_{max}$. Para un modelo de Heisenberg con acoplamientos a primeros vecinos en una red bipartita podemos comparar el valor de expectación de la energía de un estado VB a primeros vecinos con el del estado tipo Néel. La energía de un VB es $E_{VB} = -\frac{3}{8}J$ por sitio mientras que en el estado de Néel obtenemos $E_{Neel} = -\frac{z}{8}J$, donde z es el número de coordinación. Si la red no es bipartita pero admite un estado de mínima energía clásica en tres subredes (con los espines formando un ángulo de 120 grados entre si), la energía del estado de Néel es $E_N = -\frac{z}{16}J$. De esto podemos ver por ejemplo que en la red hexagonal el valor de expectación de la energía en el estado VB es igual que E_N .

Esta simple comparación variacional nos sugiere que las redes con número de coordinación mas bajo e interacciones frustradas (lo que incrementa el número de

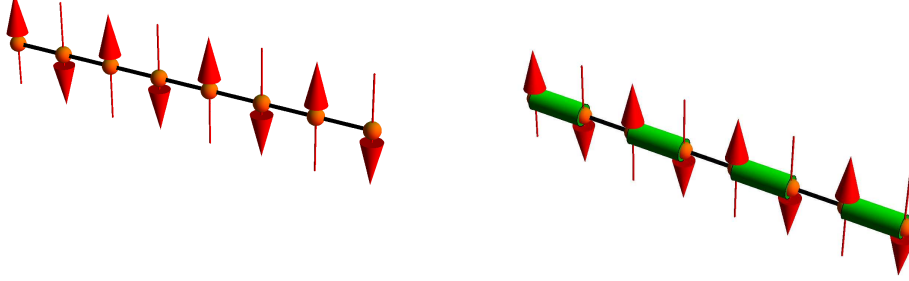


Figura 2.3: Uno de los estados fundamentales del modelo de Majumdar-Gosh representado esquemáticamente.

subredes en el estado fundamental clásico) tienden a favorecer los estados de tipo VB, y entonces podrían dar lugar a estados más complejos de tipo líquido de espín.

De hecho hay algunos modelos en donde los estados de tipo VB son los estados fundamentales exactos del sistema. El ejemplo más famoso es el modelo de Majumdar-Gosh. Consideremos una cadena de espines con acoplamientos a primeros y segundos vecinos y situémonos en el punto especial del espacio de acoplamientos donde se cumple que $J_1 = 2J_2$. En este caso podemos escribir entonces:

$$H_{MG} = J_1 \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1} + J_2 \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+2} \quad (2.25)$$

$$H_{MG} = J_2 \left(2 \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1} + \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+2} \right) \quad (2.26)$$

$$(2.27)$$

y por simplicidad tomaremos $J_2 = 1$, esta elección no cambia la física del problema ya que solo define la escala de energías. Tenemos por lo tanto

$$H_{MG} = 2 \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1} + \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+2} \quad (2.28)$$

y el estado fundamental (doblemente degenerado) está dado por

$$|a\rangle = \cdots |0, 1\rangle \otimes |2, 3\rangle \otimes |4, 5\rangle \otimes |6, 7\rangle \otimes \cdots \quad (2.29)$$

$$|b\rangle = \cdots |1, 2\rangle \otimes |3, 4\rangle \otimes |5, 6\rangle \otimes |7, 8\rangle \otimes \cdots \quad (2.30)$$

$$(2.31)$$

Podemos ver fácilmente que estos son los estados fundamentales posibles de la siguiente manera: Primero definimos un hamiltoniano de Heisenberg para una terna

de espines vecinos de la siguiente manera

$$\hat{h}_{ijk} = \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_k + \hat{\mathbf{S}}_k \cdot \hat{\mathbf{S}}_i \quad (2.32)$$

que podemos escribir como

$$\hat{h}_{ijk} = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_j + \hat{\mathbf{S}}_k \right)^2 - \frac{9}{8} \quad (2.33)$$

de esta manera podemos ver claramente que los autovalores de \hat{h}_{ijk} son $\frac{1}{2}S(S+1) - \frac{9}{8}$, con $S = \frac{1}{2}$ o $S = \frac{3}{2}$. De manera que si los sitios ijk están en un estado de espín $\frac{1}{2}$ minimizan exactamente la energía.

Por otro lado es fácil ver que el hamiltoniano de Majumdar-Gosh puede escribirse como

$$\hat{H}_{MG} = \sum_i \hat{h}_{i-1,i,i+1} \quad (2.34)$$

De esta manera, como los autoestados $|a\rangle$ y $|b\rangle$ tienen siempre un singlete en cualquier terna de sitios $i-1, i, i+1$ y entonces se encuentran en un estado de espín $\frac{1}{2}$ y minimizan cada uno de los términos de la ecuación anterior para \hat{H}_{MG} . Por lo tanto constituyen estados fundamentales exactos del sistema.

A excepción del modelo particular de MG visto anteriormente y algunos pocos casos especiales más, los estados VB generalmente no son autoestados del hamiltoniano. Partiendo de un estado de tipo VB el hamiltoniano inducirá alguna dinámica sobre él. Sin embargo el estado fundamental puede ser pensado como una combinación lineal de muchos estados de este tipo. Anderson sugirió que, con la geometría de la red apropiada e interacciones frustradas, el estado fundamental podría estar deslocalizado cubriendo una gran parte del subespacio generado por los estados VB y formando una combinación lineal de muchos de estos estados (en esta combinación toman parte estados con singletes a segundos, terceros vecinos, etc). En este caso el sistema puede restaurar todas las simetrías de la red (que se rompen en cada estado VB particular) y formar un líquido de espín.

2.4. Bosones de Schwinger

En esta sección describimos detalladamente la técnica de bosones de Schwinger a orden campo medio en redes con motivo, utilizando el método canónico. Es decir, consideramos los bosones de Schwinger como operadores y aplicamos la técnica estándar de campo medio para tratar los términos cuárticos de interacción entre

bosones. Resultados similares se obtienen en una formulación por integral funcional de la función de partición. El lector que no este interesado en los detalles técnicos del método puede obviar la lectura de esta sección o consultarla luego de la lectura de la tesis.

2.4.1. Aproximación de campo medio.

Comenzamos como antes con un hamiltoniano de Heisenberg sobre una red general

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}\mathbf{y}\alpha\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}_\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{y}+\mathbf{r}_\beta} \quad (2.35)$$

donde \mathbf{x} e \mathbf{y} indican las posiciones de las celdas unitarias y los vectores \mathbf{r}_α localizan los átomos dentro de cada celda. Esta notación es la más conveniente si queremos estudiar redes con mas de un átomo por celda unidad como es el caso de la red hexagonal, Kagomé, etc. Aquí, $J_{\alpha\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ es la interacción de intercambio entre los espines situados en $\mathbf{x} + \mathbf{r}_\alpha$ e $\mathbf{y} + \mathbf{r}_\beta$.

Supondremos en adelante que el patrón magnético completo se construye mediante sucesivas traslaciones y rotaciones de espín con vector de onda \mathbf{Q} . De manera que, con los espines sobre el plano xz, el orden magnético clásico puede escribirse como

$$\hat{S}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}_\alpha}^x = S \sin \varphi_\alpha(\mathbf{x}) \quad (2.36)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}_\alpha}^y = 0 \quad (2.37)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}_\alpha}^z = S \cos \varphi_\alpha(\mathbf{x}) \quad (2.38)$$

donde $\varphi_\alpha(\mathbf{x}) = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{x} + \theta_\alpha$ y los θ_α son los ángulos relativos entre los espines clásicos dentro de cada celda unidad.

En la representación de Schwinger, cada variable de espín $\hat{\mathbf{S}}_i$ es reemplazada por dos bosones $\hat{b}_{i\sigma}$ ($\sigma = \pm$) de acuerdo a:

$$\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{r}}^\dagger \cdot \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{r}} \quad (2.39)$$

donde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ son las matrices de Pauli y $\hat{\mathbf{b}}_{\mathbf{r}} = \begin{pmatrix} \hat{b}_{\mathbf{r}\uparrow} \\ \hat{b}_{\mathbf{r}\downarrow} \end{pmatrix}$. Las componentes de espín se escriben entonces:

$$\hat{S}_{\mathbf{r}}^+ = \hat{b}_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{r}\downarrow} \quad (2.40)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{r}}^- = \hat{b}_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{r}\uparrow} \quad (2.41)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{r}}^z = \frac{1}{2}(\hat{b}_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{r}\uparrow} - \hat{b}_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{r}\downarrow}) \quad (2.42)$$

Esta es una representación fiel del álgebra de $SU(2)$ si se agrega la restricción holonómica

$$2S = \hat{b}_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{r}\uparrow} + \hat{b}_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{r}\downarrow} \quad (2.43)$$

En esta representación, el término de intercambio puede escribirse en la forma

$$\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}_\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{y}+\mathbf{r}_\beta} =: \hat{B}_{\alpha,\beta}^\dagger(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{B}_{\alpha,\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : - \hat{A}_{\alpha,\beta}^\dagger(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \hat{A}_{\alpha,\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (2.44)$$

donde $\hat{A}_{\alpha,\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ y $\hat{B}_{\alpha,\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ son los invariantes $SU(2)$ definidos como

$$\hat{A}_{\alpha,\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma \hat{b}_{\mathbf{x},\sigma}^{(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{y},-\sigma}^{(\beta)} \quad (2.45)$$

$$\hat{B}_{\alpha,\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \hat{b}_{\mathbf{x},\sigma}^{(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{y},\sigma}^{(\beta)} \quad (2.46)$$

y donde, como es usual, $\sigma = \pm$ y \hat{O} : indica el orden normal del operador \hat{O} . El operador $\hat{A}_{\alpha,\beta}^\dagger(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ crea un singlete entre los espines ubicados en las posiciones $\mathbf{x} + \mathbf{r}_\alpha$ e $\mathbf{y} + \mathbf{r}_\beta$, mientras que $\hat{B}_{\alpha,\beta}^\dagger(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ crea un estado ferromagnético entre dos espines situados en las posiciones \mathbf{x} e \mathbf{y} , lo que implica un hopping coherente entre los bosones ubicados en dichos sitios. Este desacople invariante rotacional es particularmente útil para describir sistemas magnéticos en las cercanías de estados desordenados ya que permite tratar el antiferromagnetismo y el ferromagnetismo en pie de igualdad.

Para poder escribir una teoría de campo medio realizamos un desacople de tipo Hartree-Fock

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}_\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{y}+\mathbf{r}_\beta})_{MF} &= [B_{\alpha\beta}^*(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{B}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - A_{\alpha\beta}^*(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{A}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + H.c] \\ &- \langle (\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}_\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{y}+\mathbf{r}_\beta})_{MF} \rangle \end{aligned} \quad (2.47)$$

con

$$A_{\alpha\beta}^*(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \langle \hat{A}_{\alpha\beta}^\dagger(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \quad (2.48)$$

$$B_{\alpha\beta}^*(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \langle \hat{B}_{\alpha\beta}^\dagger(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle \quad (2.49)$$

$$\langle (\vec{S}_{\vec{x}+\vec{r}_\alpha} \cdot \vec{S}_{\vec{y}+\vec{r}_\beta})_{MF} \rangle = |B_{\alpha\beta}^\dagger(\vec{x} - \vec{y})|^2 - |A_{\alpha\beta}^\dagger(\vec{x} - \vec{y})|^2 \quad (2.50)$$

y donde $\langle \rangle$ denota el valor de expectación en el estado fundamental a $T = 0$. Estas son las ecuaciones de campo medio que tendremos que resolver de forma autoconsistente. Explicaremos en mayor detalle la forma de resolver dichas ecuaciones en las siguientes secciones.

El hamiltoniano, a nivel campo medio queda entonces expresado como una forma cuadrática en los operadores

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MF} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}\mathbf{y}\alpha\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left(\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}_\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{y}+\mathbf{r}_\beta} \right)_{MF} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}\mathbf{y}\alpha\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left\{ \left[\frac{1}{2} \sum_{\sigma} B_{\alpha,\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{b}_{\mathbf{x},\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{y},\sigma}^{(\beta)} - \sigma A_{\alpha,\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{b}_{\mathbf{x},\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{y},-\sigma}^{\dagger(\beta)} + H.C. \right] \right. \\ &\quad \left. - [|B_{\alpha,\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})|^2 - |A_{\alpha,\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})|^2] \right\} \end{aligned} \quad (2.51)$$

Como varias de las funciones involucradas en el hamiltoniano dependen de la diferencia $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ es conveniente realizar un cambio en la suma, llamando $\mathbf{R} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$ podemos eliminar \mathbf{x} de las sumas y obtener

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MF} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{y}\alpha\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \left(\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{R}+\mathbf{y}+\mathbf{r}_\alpha} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{y}+\mathbf{r}_\beta} \right)_{MF} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{y}\alpha\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \left\{ \left[\frac{1}{2} \sum_{\sigma} B_{\alpha,\beta}(\mathbf{R}) \hat{b}_{\mathbf{R}+\mathbf{y},\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{y},\sigma}^{(\beta)} - \sigma A_{\alpha,\beta}(\mathbf{R}) \hat{b}_{\mathbf{R}+\mathbf{y},\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{y},-\sigma}^{\dagger(\beta)} + H.C. \right] \right. \\ &\quad \left. - [|B_{\alpha,\beta}(\mathbf{R})|^2 - |A_{\alpha,\beta}(\mathbf{R})|^2] \right\} \end{aligned} \quad (2.52)$$

Al ser cuadrático en los operadores bosónicos, este hamiltoniano ya podría ser diagonalizado en el espacio real. Sin embargo como buscamos soluciones invariantes traslacionales del problema, es conveniente transformar los operadores bosónicos al espacio de momentos. Esta transformación simplifica la imposición de las condiciones de contorno y permite obtener las excitaciones elementales del sistema en función del vector de onda \mathbf{k} .

Los operadores bosónicos pueden ser escritos en el espacio recíproco como

$$\hat{b}_{\mathbf{x},\sigma}^{(\alpha)} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}^{(\alpha)} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} + \mathbf{r}_\alpha)} \quad (2.53)$$

donde los vectores \mathbf{k} 's son los modos normales de la red con condiciones de contorno periódicas, pertenecientes a la primer zona de Brillouin. Después de algunos cálculos simples utilizando algunas propiedades de simetría como

$$\begin{aligned} J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) &= J_{\beta\alpha}(-\mathbf{R}) \\ A_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) &= -A_{\beta\alpha}(-\mathbf{R}) \\ B_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) &= B_{\beta\alpha}^*(-\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (2.54)$$

obtenemos la siguiente forma para el hamiltoniano

$$\hat{H}_{MF} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta} \sum_{\sigma} \left\{ \gamma_{\alpha\beta}^B(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{(\beta)} + \gamma_{\alpha\beta}^B(-\mathbf{k}) \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{(\beta)} \right. \quad (2.55)$$

$$\left. - \sigma \gamma_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{\dagger(\beta)} - \sigma \bar{\gamma}_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{(\alpha)} \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{(\beta)} \right\} \quad (2.56)$$

$$- \frac{N_c}{2} \sum_{\mathbf{R}\alpha\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) [|B_{\alpha\beta}(\mathbf{R})|^2 - |A_{\alpha\beta}(\mathbf{R})|^2] \quad (2.57)$$

donde

$$\gamma_{\alpha\beta}^B(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}} J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) B_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) e^{-i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta})} \quad (2.58)$$

$$\gamma_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}} J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) A_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) e^{-i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta})} \quad (2.59)$$

$$\bar{\gamma}_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}} J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \bar{A}_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) e^{-i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} + \mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta})} \quad (2.60)$$

Para que los bosones de Schwinger representen correctamente a los operadores de espín debe cumplirse la restricción $\sum_{\sigma} \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{(\alpha)} = 2S$ en cada sitio de la red. Imponemos esta condición, en promedio sobre cada subred α mediante multiplicadores de Lagrange $\lambda^{(\alpha)}$ que actúan como potenciales químicos que restringen el número de bosones en cada sitio a $2S$.

$$\hat{H}_{MF} \rightarrow \hat{H}_{MF} + \hat{H}_{\lambda} \quad (2.61)$$

donde

$$\hat{H}_{\lambda} = \sum_{\mathbf{x}\alpha} \lambda^{(\alpha)} \left(\sum_{\sigma} \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{(\alpha)} - 2S \right) \quad (2.62)$$

que en el espacio de momentos puede escribirse como

$$\hat{H}_{\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \frac{\lambda^{(\alpha)}}{2} \sum_{\sigma} (\hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{(\alpha)} + \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{(\alpha)}) - 2SN_c \sum_{\alpha} \lambda^{(\alpha)} \quad (2.63)$$

por lo que el hamiltoniano resulta

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta\sigma} \left\{ (\gamma_{\alpha\beta}^B(\mathbf{k}) + \lambda^{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta}) \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{(\alpha)\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{(\beta)} + (\gamma_{\alpha\beta}^B(-\mathbf{k}) + \lambda^{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta}) \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{(\alpha)\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{(\beta)} \right. \\
&- \left. \sigma \left(\gamma_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{(\alpha)\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{(\beta)} + \bar{\gamma}_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^{(\alpha)} \hat{b}_{-\mathbf{k}-\sigma}^{(\beta)} \right) \right\} \\
&- \frac{N_c}{2} \sum_{\mathbf{R}\alpha\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) [|B_{\alpha\beta}(\mathbf{R})|^2 - |A_{\alpha\beta}(\mathbf{R})|^2] - 2SN_c \sum_{\alpha} \lambda^{(\alpha)}
\end{aligned} \tag{2.64}$$

Usando las simetrías (2.54) puede verse fácilmente que las contribuciones de ambos tipos de bosones ($\sigma = \pm$) son idénticas. Por lo que podemos efectuar la suma sobre σ obteniendo

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta} \left\{ (\gamma_{\alpha\beta}^B(\mathbf{k}) + \lambda^{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta}) \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha)\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\beta)} + (\gamma_{\alpha\beta}^B(-\mathbf{k}) + \lambda^{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta}) \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\alpha)\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\beta)} \right. \\
&- \left. \sigma \left(\gamma_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha)\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\beta)} + \bar{\gamma}_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha)} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\beta)} \right) \right\} \\
&- \frac{N_c}{2} \sum_{\mathbf{R}\alpha\beta} J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) [|B_{\alpha\beta}(\mathbf{R})|^2 - |A_{\alpha\beta}(\mathbf{R})|^2] - 2SN_c \sum_{\alpha} \lambda^{(\alpha)}
\end{aligned} \tag{2.65}$$

Antes de diagonalizar este hamiltoniano vamos a definir una notación mas conveniente. Definimos el espinor $\hat{\mathbf{b}}^\dagger(\mathbf{k}) = \left(\vec{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, \vec{\mathbf{b}}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right)$ donde

$$\vec{\mathbf{b}}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger = \left(\hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha_1)\dagger}, \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha_2)\dagger}, \dots, \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha_{n_c})\dagger} \right) \tag{2.66}$$

$$\vec{\mathbf{b}}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = \left(\hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\alpha_1)\dagger}, \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\alpha_2)\dagger}, \dots, \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\alpha_{n_c})\dagger} \right) \tag{2.67}$$

donde n_c es el número de átomos en la celda unidad. Con todo esto podemos escribir el hamiltoniano como

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{b}}^\dagger(\mathbf{k}) \cdot D(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{b}}(\mathbf{k}) - (2S + 1)N_c \sum_{\alpha} \lambda^{(\alpha)} - \langle H_{MF} \rangle \tag{2.68}$$

donde $D(\mathbf{k})$ es la matriz dinámica de $2n_c \times 2n_c$

$$D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \gamma_{\alpha\beta}^B(\mathbf{k}) + \lambda^{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta} & -\gamma_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) \\ -\bar{\gamma}_{\beta\alpha}^A(\mathbf{k}) & \gamma_{\alpha\beta}^B(\mathbf{k}) + \lambda^{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta} \end{pmatrix} \tag{2.69}$$

Se verifica fácilmente que la matriz D cumple que $D^\dagger = D$ y puede mostrarse que los parámetros B son reales. En lo que sigue consideraremos el caso en que los parámetros A también son reales. Esta elección es consistente con el límite clásico si se toma el plano de los espines como el x - z . En consecuencia tenemos que:

$$\gamma_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k}) = -\bar{\gamma}_{\beta\alpha}^A(\mathbf{k}) \quad (2.70)$$

$$\gamma_{\alpha\beta}^B(\mathbf{k}) = \gamma_{\beta\alpha}^B(-\mathbf{k}) \quad (2.71)$$

y la matriz D puede escribirse en forma compacta

$$D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} D^1 & -D^2 \\ D^2 & D^1 \end{pmatrix} \quad (2.72)$$

con $D_{\alpha\beta}^1 = \gamma_{\alpha\beta}^B(\mathbf{k}) + \lambda^{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta}$ y $D^2 = \gamma_{\alpha\beta}^A(\mathbf{k})$. Ahora ya tenemos el hamiltoniano escrito de forma cuadrática en los operadores bosónicos y debemos diagonalizarlo teniendo en cuenta las relaciones de conmutación bosónicas

2.4.2. Diagonalización

La diagonalización del hamiltoniano (2.68) requiere una transformación para-unitaria de la matriz D que preserve las relaciones de conmutación bosónicas. Los detalles técnicos de esta transformación para-unitaria (o de Bogoliubov generalizada) están detalladamente explicadas en [80]. De esta manera podemos diagonalizar el hamiltoniano definiendo los operadores de cuasipartículas $\hat{\mathbf{a}} = F \cdot \hat{\mathbf{b}}$, donde la matriz de transformación puede escribirse como

$$F^{-1} = \begin{pmatrix} U & -V \\ V & U \end{pmatrix} \quad (2.73)$$

Esta matriz satisface la condición de paraunitariedad

$$(F^\dagger)^{-1} \cdot S \cdot (F)^{-1} = S, \quad (2.74)$$

donde

$$S = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (2.75)$$

el hamiltoniano de campo medio en términos de las nuevas cuasipartículas resultan

$$\hat{H}_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}}^\dagger \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}} - 2(S+1)N_c \sum_{\alpha} \lambda^{(\alpha)} - \langle \hat{H}_{MF} \rangle \quad (2.76)$$

donde $\mathbf{E}(\mathbf{k}) = (F^\dagger)^{-1} \cdot D \cdot (F)^{-1} = \text{diag}(\omega_1(\mathbf{k}), \omega_2(\mathbf{k}), \dots, \omega_n(\mathbf{k}), \omega_1(\mathbf{k}), \omega_2(\mathbf{k}), \dots, \omega_n(\mathbf{k}))$. Por lo que el hamiltoniano de campo medio puede ser escrito en la nueva base como

$$\hat{H}_{MF} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \omega_\alpha(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger(\alpha)} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha)} \quad (2.77)$$

2.4.3. Ecuaciones de auto-consistencia.

Los parámetros de campo medio que necesitamos calcular de forma autoconsistente fueron definidos a partir de los operadores

$$\hat{A}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{y}\sigma}^{(\beta)} \quad (2.78)$$

$$\hat{B}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \hat{b}_{\mathbf{y}\sigma}^{\dagger(\beta)} \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{(\alpha)} \quad (2.79)$$

y suponiendo un estado fundamental con invarianza traslacional con respecto a las celdas unidad, de manera que

$$A_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{y}} \langle \hat{A}_{\alpha\beta}(\mathbf{y} + \mathbf{R}, \mathbf{y}) \rangle \quad (2.80)$$

$$B_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{y}} \langle \hat{B}_{\alpha\beta}(\mathbf{y} + \mathbf{R}, \mathbf{y}) \rangle \quad (2.81)$$

obteniendo las siguientes expresiones para los parámetros de campo medio

$$A_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2N_c} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}+\mathbf{r}_\alpha-\mathbf{r}_\beta)} \langle \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha)} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\beta)} \rangle - e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}+\mathbf{r}_\alpha-\mathbf{r}_\beta)} \langle \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\beta)} \rangle \right\} \quad (2.82)$$

$$B_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2N_c} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}+\mathbf{r}_\alpha-\mathbf{r}_\beta)} \langle \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger(\beta)} \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha)} \rangle - e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}+\mathbf{r}_\alpha-\mathbf{r}_\beta)} \langle \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger(\beta)} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\alpha)} \rangle \right\} \quad (2.83)$$

La restricción al número de bosones en cada subred puede escribirse como

$$\sum_{\sigma} \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{(\alpha)} = 2S \quad (2.84)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{\sigma} \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{x}\sigma}^{(\alpha)} = S \quad (2.85)$$

$$\hat{B}_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = S \quad (2.86)$$

tratando esta restricción en valor medio tenemos que

$$B_{\alpha\alpha}(\mathbf{R} = 0) = S \quad (2.87)$$

y en el espacio de momentos la restricción puede escribirse como

$$\sum_{\mathbf{k}} \left\{ \langle \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{\mathbf{k}\uparrow}^{(\alpha)} \rangle + \langle \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger(\alpha)} \hat{b}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{(\alpha)} \rangle \right\} = 2SN_c \quad (2.88)$$

Esta ecuación tiene que ser resuelta para cada subred de forma autoconsistente junto con las ecuaciones para los parámetros de campo medio.

2.5. Ondas de espín y bosones de Holstein-Primakov.

Para entender como un modelo de espines acoplados antiferromagnéticamente puede no mostrar ningún tipo de orden a temperatura cero es útil repasar la aproximación estándar a las fases de Néel. El desarrollo semiclásico $1/S$ en ondas de espín parte de la configuración clásica que minimiza la energía, asumiendo que las desviaciones cuánticas a partir de la dirección de ordenamiento son pequeñas, y trata estas desviaciones como un conjunto de osciladores armónicos.

En esta aproximación el hamiltoniano es escrito en términos de operadores de creación y destrucción bosónicos, siendo cuadrático y pudiendo ser diagonalizado por medio de una transformación de Bogoliubov. Después de usar esta aproximación se puede chequear si las desviaciones a partir del orden clásico son realmente pequeñas. Si este no es el caso, estamos frente a una fuerte indicación de que el orden magnético de largo alcance es destruido por las fluctuaciones.

2.5.1. Ferromagneto

Aunque el principal objetivo de esta tesis es estudiar el antiferromagneto cuántico estudiaremos primero brevemente el ferromagneto usando bosones de Holstein-Primakov. Esto nos permitirá extender de manera natural el uso de estos operadores bosónicos para estudiar el antiferromagneto. Este primer acercamiento al problema del antiferromagneto se utiliza frecuentemente como base para un desarrollo más elegante del problema en la formulación de la integral de caminos.

Estudiaremos primero el modelo de Heisenberg correspondiente al siguiente hamiltoniano

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \quad (2.89)$$

donde el caso $J < 0$ corresponde a un sistema ferromagnético y entenderemos la notación $\langle i, j \rangle$ como una suma entre vecinos próximos en la red. Los operadores de espín satisfacen el álgebra de $SU(2)$

$$[\hat{S}_j^\alpha, \hat{S}_k^\beta] = i \delta_{j,k} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_k^\gamma \quad (2.90)$$

Dado el signo de la constante de acoplamiento J , el hamiltoniano favorece las configuraciones en las que todos los espines en sitios vecinos están alineados en la misma dirección. Un estado fundamental del sistema podría ser, por ejemplo

$$|gs\rangle = \bigotimes_j |\uparrow\rangle_j \quad (2.91)$$

donde $|\uparrow\rangle_j$ representa un estado con máxima componente z del espín en el sitio j . Si realizamos una rotación cualquiera de todos los espines simultáneamente no cambia la energía, por lo que el estado fundamental es altamente degenerado y el sistema posee una simetría continua de rotación global.

Para estudiar las pequeñas desviaciones alrededor del estado fundamental $|gs\rangle$ introducimos una representación de los operadores de espín en términos de operadores bosónicos conocidos como bosones de Holstein-Primakov

$$\hat{S}^z = S - \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (2.92)$$

$$\hat{S}^- = \sqrt{1 - \frac{\hat{a}^\dagger \hat{a}}{2S}} \sqrt{2S} \hat{a}^\dagger \quad (2.93)$$

El mapeo anterior reproduce las relaciones de conmutación exactas entre operadores de espín y el vínculo $S^2 = s(s+1)$. Sin embargo es muy difícil trabajar con el mismo sin hacer aproximaciones dada la complicada expresión en términos de los operadores bosónicos. Nótese que el estado de máximo espín corresponde a un estado sin bosones. El operador \hat{S}^- actúa entonces incrementando el número de bosones presentes en el sistema.

Podemos utilizar un desarrollo en potencias de $1/S$, para hacer el problema más fácil de resolver, desarrollando la raíz en la expresión anterior a orden más bajo tendremos que

$$\hat{S}^- \approx \sqrt{2S} \hat{a}^\dagger \quad (2.94)$$

$$\hat{S}^+ \approx \sqrt{2S} \hat{a} \quad (2.95)$$

$$\hat{S}^z = S - \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (2.96)$$

Para el caso ferromagnético podemos insertar estas expresiones en el hamiltoniano y obtener un hamiltoniano en los operadores bosónicos.

$$\hat{H} = JS \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \right) + J \sum_{\langle i,j \rangle} (S^2 + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j) \quad (2.97)$$

Aun al más bajo orden obtenemos un hamiltoniano que contiene un término de interacción generado por el término $\hat{S}^z \hat{S}^z$. Analizaremos la parte cuadrática, que es la que domina en el límite de S grande, con lo que ya podrán verse las primeras correcciones al comportamiento clásico. Nos referiremos a esta aproximación como aproximación lineal de ondas de espín.

$$\hat{H} = JS \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \right) \quad (2.98)$$

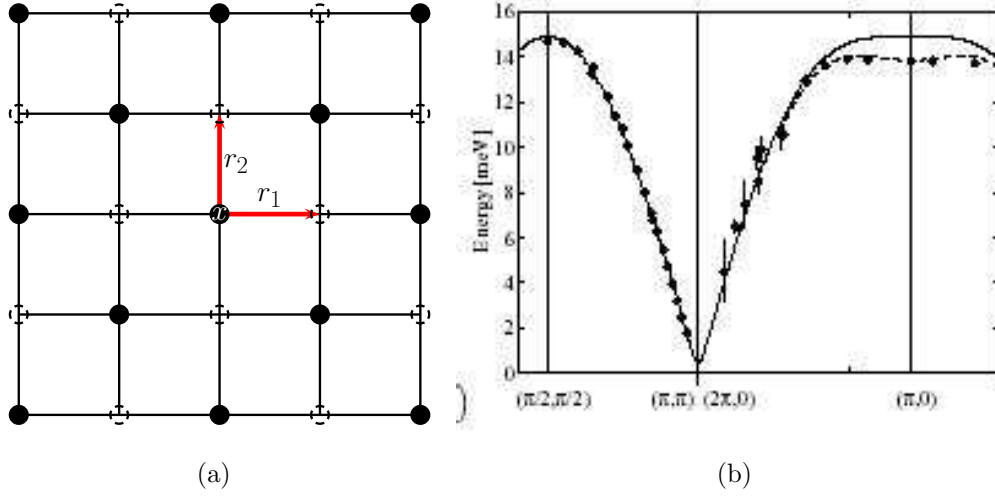


Figura 2.4: a) Representación esquemática de la manera seleccionada de realizar la suma sobre vecinos. b) Medidas experimentales (cond-mat/0101238) de la relación de dispersión para el compuesto antiferromagnético $CU(DCOO)_2 4D_2O$, donde D simboliza “Deuteron”.

Ahora escribiremos la suma de forma conveniente para poder separarla en una suma sobre los sitios y otra sobre vecinos cambiando la notación $i \leftrightarrow x$

$$\hat{H} = JS \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{r}} \left(\hat{a}_{\mathbf{x}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{x}} - \hat{a}_{\mathbf{x}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{x}} - \hat{a}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{x}+\mathbf{r}} \right) \quad (2.99)$$

La suma sobre \mathbf{x} recorre todas las posiciones de la red mientras que \mathbf{r} solo toma valores sobre la mitad de los vecinos de cada sitio de manera de no contar un par de vecinos dos veces. Por ejemplo en una red cuadrada (2D) puede entenderse por la suma en \mathbf{r} como la suma sobre el vecino de la derecha y el de arriba como se muestra en la figura 2.4.

Transformando Fourier los operadores bosónicos

$$\hat{a}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (2.100)$$

el hamiltoniano (2.99) queda en la forma

$$\hat{H} = JS \sum_{\mathbf{k}} \left(-z + \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (2.101)$$

$$= -JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{2}{z} \sum_{\mathbf{r}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (2.102)$$

$$\approx -JS \sum_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{r}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^2 \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (2.103)$$

$$\approx -JS \sum_{\mathbf{k}} |k|^2 \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (2.104)$$

de donde vemos que la relación de dispersión $\varepsilon(k) = -JS|k|^2$ es cuadrática y tiende a cero cuando $|k| \rightarrow 0$. Éste es el modo de Goldstone que corresponde a la ruptura de simetría del estado fundamental ferromagnético. Es importante notar que la física de bajas energías está dominada por el modo $k = 0$ donde la relación de dispersión tiende a cero.

2.5.2. Antiferromagneto

Ahora si podemos estudiar el antiferromagneto usando bosones de Holstein-Primakov. Aunque el hamiltoniano difiere del caso ferromagnético visto anteriormente solo en el signo de la constante de acoplamiento, la física del antiferromagneto es muy diferente. Para las llamadas redes bipartitas el estado de mínima energía clásica en el se alcanza con una configuración alternada de tipo Néel en el cual tenemos dos subredes dentro de las cuales todos los espines se encuentran paralelos, mientras que las dos subredes se encuentran rotadas 180 grados una respecto de la otra. De nuevo tenemos que el sistema posee una simetría global de rotación pero, a diferencia del caso ferromagnético, la configuración clásica de mínima energía no es un autoestado del hamiltoniano.

A continuación nos interesa repetir la metodología utilizada para estudiar el ferromagneto usando la representación de los operadores de espín en término de bosones, pero para esto es conveniente realizar antes una transformación canónica de los operadores de espín, donde los espines pertenecientes a una subred (digamos la subred B) son rotados 180 grados de manera que la proyección z del espín cambie de signo. En términos de estos operadores transformados la configuración clásica de mínima energía está dada por el estado donde todos los espines se son paralelos. Tendremos entonces que

$$\tilde{S}_B^x = \hat{S}_B^x \quad (2.105)$$

$$\tilde{S}_B^y = -\hat{S}_B^y \quad (2.106)$$

$$\tilde{S}_B^z = -\hat{S}_B^z \quad (2.107)$$

por lo que los operadores \tilde{S}^+ y \tilde{S}^- quedan

$$\tilde{S}_B^+ = \tilde{S}_B^x + i\tilde{S}_B^y = \hat{S}_B^x - i\hat{S}_B^y = \hat{S}_B^- \quad (2.108)$$

$$\tilde{S}_B^- = \tilde{S}_B^x - i\tilde{S}_B^y = \hat{S}_B^x + i\hat{S}_B^y = \hat{S}_B^+ \quad (2.109)$$

Luego el hamiltoniano para el antiferromagneto queda, en términos de los operadores transformados

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \tilde{S}_j^+ + \hat{S}_i^- \tilde{S}_j^-) - \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z. \quad (2.110)$$

Como al rotar los espines conseguimos la misma configuración de mínima energía que en el caso del ferromagneto, podemos usar la misma representación bosónica para los operadores de espín y esperar que las fluctuaciones de este estado produzcan el análogo antiferromagnético a las ondas de espín discutidas antes.

Para la subred A tenemos, como antes

$$\hat{S}_i^z = S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (2.111)$$

$$\hat{S}_i^- \simeq \sqrt{2S} \hat{a}_i^\dagger \quad (2.112)$$

$$\hat{S}_i^+ \simeq \sqrt{2S} \hat{a}_i \quad (2.113)$$

mientras que para la subred B

$$\tilde{S}_j^z = S - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \quad (2.114)$$

$$\tilde{S}_j^- \simeq \sqrt{2S} \hat{a}_j^\dagger \quad (2.115)$$

$$\tilde{S}_j^+ \simeq \sqrt{2S} \hat{a}_j \quad (2.116)$$

Nótese que nuevamente el estado con ausencia de bosones corresponde a todos los espines con proyección máxima. El hamiltoniano en términos de la representación bosónica queda

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S(\hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger) - (S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)(S - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j) \quad (2.117)$$

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-S^2 + S(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger) - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \right] \quad (2.118)$$

el último término es de orden S^0 por lo que podemos despreciarlo en el límite de S grande donde los términos que dominan serán los de orden $O(S)$ y $O(S^2)$

$$\hat{H} = -JNS^2 + JS \sum_{\langle i,j \rangle} \left[(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger) \right] \quad (2.119)$$

Ahora transformamos Fourier los operadores bosónicos de la siguiente manera

$$\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j} \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (2.120)$$

con lo que el hamiltoniano queda

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -JNS^2 + JS \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left[2\delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} + \left(\frac{1}{N} \sum_{\langle i, j \rangle} e^{-i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}_i + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}_j)} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{N} \sum_{\langle i, j \rangle} e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}_i + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}_j)} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \right] \end{aligned} \quad (2.121)$$

Ahora para poder realizar la suma en coordenadas escribimos $\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_i + \vec{a}_r$, donde \vec{a}_r es un vector que va desde \mathbf{x}_i hasta el r -esimo vecino. Luego tenemos

$$\left(\frac{1}{N} \sum_{\langle i, j \rangle} e^{-i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}_i + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}_j)} \right) = \left(\frac{1}{N} \sum_r e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{a}_r} \sum_i e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}_i} \right) = \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \sum_r e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{a}_r}$$

y una forma análoga para el otro término. Insertando esto en el hamiltoniano

$$\hat{H} = -JNS^2 + JS \sum_{\mathbf{k}} \left[2 \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \left(\sum_r e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_r} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + \left(\sum_r e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_r} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right]$$

como la suma sobre los \mathbf{k} es simétrica con respecto al límite superior e inferior (por ejemplo en 1D $-\pi < k < \pi$) podemos escribir

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -JNS^2 + JS \sum_{\mathbf{k}} \left[2 \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \left(\sum_r \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_r) \right) \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + \left(\sum_r \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_r) \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right] \\ = & -JNS^2 + JS \sum_{\mathbf{k}} \left[\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \right] \end{aligned} \quad (2.122)$$

donde $\gamma_{\mathbf{k}} = \sum_r \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_r)$. El hamiltoniano anterior puede ser diagonalizado fácilmente mediante una transformación de Bogoliubov, definiendo dos nuevos operadores $\hat{b}_{\mathbf{k}}$, $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ de la forma

$$\hat{b}_{\mathbf{k}} = \alpha_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad \hat{a}_{\mathbf{k}} = \alpha_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} - \beta_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (2.123)$$

$$\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger = \beta_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger = \alpha_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger - \beta_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \quad (2.124)$$

Con la condición $\alpha_{\mathbf{k}}^2 - \beta_{\mathbf{k}}^2 = 1$ para asegurar que los nuevos operadores cumplan con el álgebra bosónica. Al reemplazar en \hat{H} obtenemos

$$\hat{H} = JNS^2 + JS \sum_{\mathbf{k}} \left\{ (\alpha_{\mathbf{k}}^2 + \beta_{\mathbf{k}}^2 - 2\gamma_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}) [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}] \right. \quad (2.125)$$

$$\left. + ((\alpha_{\mathbf{k}}^2 + \beta_{\mathbf{k}}^2)\gamma_{\mathbf{k}} - 2\alpha_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}) [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}] + 2(\beta_{\mathbf{k}}^2 - \gamma_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}) \right\}. \quad (2.126)$$

Impondremos que el coeficiente que acompaña a los términos que no conservan el número de partículas se anule, junto con la condición sobre los coeficientes para que se cumplan las relaciones de conmutación bosónicas.

$$0 = \gamma_{\mathbf{k}}(\alpha_{\mathbf{k}}^2 + \beta_{\mathbf{k}}^2) - 2\alpha_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}} \quad (2.127)$$

$$1 = \alpha_{\mathbf{k}}^2 - \beta_{\mathbf{k}}^2 \quad (2.128)$$

de este sistema de ecuaciones obtenemos

$$\alpha_{\mathbf{k}}^2 + \beta_{\mathbf{k}}^2 - 2\gamma_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}} = \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} \quad (2.129)$$

$$2(\beta_{\mathbf{k}}^2 - \gamma_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}) = \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} - 1 \quad (2.130)$$

y reemplazando en el hamiltoniano

$$\hat{H} = JNS(S+1) + JS \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} + 1]. \quad (2.131)$$

De esta manera la relación de dispersión de las ondas de espín esta dada por

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = JS \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} \quad (2.132)$$

$$\sim \frac{2JS}{\sqrt{z}} |\mathbf{k}| \quad (2.133)$$

Por lo tanto, en el caso antiferromagnético la relación de dispersión de las excitaciones también va a cero cuando $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ y cuando $|\mathbf{k}| \rightarrow \pi$, es decir, tenemos dos modos que contribuyen a bajas energías. Es interesante notar que para valores pequeños de \mathbf{k} la relación de dispersión es prácticamente relativista con velocidad $v = \frac{2JS}{\sqrt{z}}$. En la figura 2.4-b puede verse el comportamiento de la relación de dispersión determinada experimentalmente.

En el caso antiferromagnético tenemos dos tipos de excitaciones distintas \hat{b} y \hat{c} que corresponden a los dos modos de Goldstone generados por la ruptura espontánea de la simetría $SO(3)$ en la simetría $SO(2)$ de las rotaciones alrededor del eje z . A partir de este resultado, puede usarse el hecho de que a bajas energías los modos de Fourier que predominan son $k = 0$ y $k = \pi$ para desarrollar una teoría efectiva alrededor de estos modos.

Capítulo 3

Sistemas altamente correlacionados.

Índice

3.1. Cristales líquidos	37
3.1.1. Resultados experimentales	40
3.1.2. Fases nemáticas en 2DEG	41
3.1.3. Fase nemática en $Sr_3Ru_2O_7$	42
3.1.4. Fases nemáticas y de tipo stripes en cupratos	43

Los sistemas altamente correlacionados son sistemas en los cuales cada una de las diferentes partes del mismo tienen una fuerte influencia sobre las demás. Esta influencia es tan importante que prácticamente no tiene sentido hablar del sistema en ausencia de tales correlaciones.

Examinemos el ejemplo simple de las diferentes fases de un sistema de moléculas. En un extremo tenemos la fase gaseosa diluida, donde las moléculas pueden ser descritas esencialmente como partículas que se mueven libremente sin interactuar unas con otras, y por lo tanto están descorrelacionadas. En el otro extremo tenemos la fase sólida, donde las moléculas forman un cristal y cada una de ellas tienen una posición fija relativa a las demás moléculas, esto es, las moléculas están fuertemente correlacionadas. Entre estos dos extremos se encuentra la fase líquida donde las moléculas pueden tener diferentes grados de correlación.

Como otro ejemplo podemos pensar en los electrones de conducción en un metal. Para algunos metales alcalinos como el Na o K, los electrones pueden ser bien descritos con una teoría de electrones que se mueven libremente, es decir que no interactúan entre sí, en un potencial periódico. Estos electrones son entonces modelados adecuadamente con lo que se llama un “gas de Fermi”. En el otro extremo podemos encontrar sólidos electrónicos que pueden formarse bajo ciertas condiciones favorables. Este estado sólido de electrones es conocido como cristal de Wigner [5].

Para describir electrones en sólidos diferentes a los metales alcalinos debemos tener en cuenta que los electrones interactúan entre si y por lo tanto están correlacionados. Por analogía con el líquido de moléculas a estos sistemas se los suele llamar *líquidos electrónicos*.

En teoría de materia condensada, como en otras áreas de la física, es común intentar predecir el comportamiento de un sistema usando modelos simplificados y teorías efectivas que describan los grados de libertad relevantes. En las secciones anteriores hemos repasado algunos de estos modelos y sus características más importantes. En un modelo dado, la inclusión de las interacciones puede realizarse de diferentes maneras y uno de los marcos teóricos más convencionales para hacerlo es la teoría de Landau del líquido de Fermi.

La teoría de Landau del líquido de Fermi es una exitosa teoría en materia condensada y repasaremos algunos de sus aspectos en el Capítulo 4. A pesar del éxito de esta teoría, hay muchos sistemas electrónicos que no pueden ser descritos por dicha teoría. Estos sistemas no pueden ser mapeados a sistemas débilmente interactuantes. Por el contrario, las fuertes interacciones entre los electrones generan un comportamiento muy diferente al predicho por la teoría del líquido de Fermi.

Un ejemplo interesante de este tipo de comportamiento es el caso de la fase superfluida que presenta el ^3He . Dicha fase no puede ser descrita por la teoría del líquido de Fermi a pesar de que la fase líquida normal es uno de los ejemplos paradigmáticos de dicha teoría. Como el ^3He está compuesto de fermiones, en principio no supondríamos que ellos puedan formar un superfluido por medio de una condensación de Bose-Einstein. Sin embargo, a causa de las fuertes correlaciones entre los fermiones, se genera un apareamiento de los mismos y el estado ligado de dos fermiones tiene estadística bosónica y puede condensar. Este tipo de apareamiento también es la causa de la ruptura del comportamiento tipo líquido de Fermi en superconductores. De acuerdo a la teoría BCS, un par ligado de electrones o par de Cooper es formado a causa de las vibraciones de la red que crean una interacción atractiva entre los electrones.

En el año 1986 Bednorz y Muller [6] descubrieron el primer superconductor de alta temperatura crítica, un descubrimiento que les otorgó el premio Nobel

en 1987. Ellos descubrieron superconductividad en el compuesto cerámico dopado $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$. Luego de este descubrimiento, una gran variedad de compuestos cerámicos que presentan superconductividad a altas temperaturas fueron descubiertos. Sin embargo, más de 20 años después del primer descubrimiento, aún no hay ninguna teoría global que explique satisfactoriamente el mecanismo por el cual se genera la superconductividad en estos compuestos.

Hay una fuerte creencia en que la explicación para este tipo de superconductividad esta escondida en el comportamiento anómalo del estado normal. Esto ha impulsado en los últimos años el interés en el estudio de las posibles causas de ruptura en la descripción del líquido de Fermi y de antiferromagnetos en 2 dimensiones. Este último esta motivado en el hecho de que los cupratos superconductores son antiferromagnetos cuando no están dopados. Cuando se los dopa, las correlaciones antiferromagneticas se ven desfavorecidas y eventualmente desaparecen, dando lugar a la superconductividad. Esta competencia, experimentalmente observada, entre antiferromagnetismo y superconductividad hace que sea importante entender el mecanismo por el cual un antiferromagneto en 2 dimensiones se desordena, y bajo qué condiciones se obtiene orden antiferromagnético a $T = 0$. Como veremos luego, algunos de los ingredientes importantes que controlan esta situación son: la magnitud del espín, el número de coordinación de la red y la frustración del sistema.

En varios de los trabajos citados se ha sugerido que mediante una inestabilidad del líquido de Fermi pueden generarse fases de tipo *nemática* o de tipo *stripe*, las cuales rompen alguna simetría espacial del sistema. En las siguientes secciones presentaremos brevemente algunos experimentos donde se han encontrado evidencias de este tipo de fases. El estudio de inestabilidades en la descripción del líquido de Fermi en redes bidimensionales será el contenido principal de la segunda parte de la tesis.

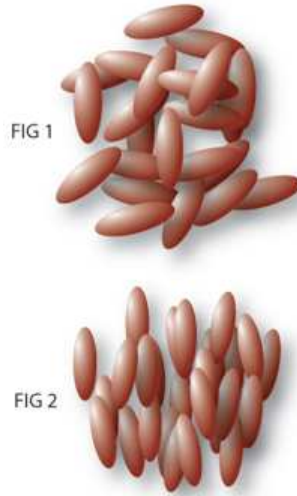
3.1. Fases electrónicas de tipo cristales líquidos y sistemas altamente correlacionados.

Los tres estados más comunes de la materia, el estado sólido, el líquido y el gaseoso. Estos estados son diferentes porque las moléculas en cada estado tienen diferente grado de orden. En el estado sólido cristalino existe una disposición rígida de las moléculas que permanecen en una posición fija con una pequeña variación a causa de las vibraciones moleculares. En la fase líquida las moléculas no tienen posición ni orientación fija y son libres de moverse de forma aleatoria, por lo que el estado líquido está menos ordenado que el estado sólido. Las fuerzas intermoleculares

atractivas que daban estructura rígida al sólido, son en el líquido más pequeñas, pero aún lo suficientemente fuertes para mantener a las moléculas bastante próximas entre sí. Los líquidos, por lo tanto, pueden ser fácilmente deformables. Finalmente en el estado gaseoso, el movimiento aleatorio de las moléculas se ha incrementado hasta superar las fuerzas intermoleculares y las moléculas se extienden hasta llenar cualquier recipiente que las contenga.

Una fase de tipo cristal líquido se produce en algunas sustancias en la región de temperatura entre los estados sólido y líquido. En este estado la sustancia posee algunas propiedades de líquidos y otras de sólidos. Un cristal líquido es un fluido como un líquido, pero puede ser anisotrópico en sus características ópticas y electromagnéticas como un sólido. Cuando el cristal líquido se forma a partir del estado isotrópico se obtiene una cierta cantidad de orden. Es este orden el que da cuenta de las anisotropías de la sustancia.

Al disminuir la temperatura de la fase isotrópica, en la que las moléculas están situadas y orientadas de forma aleatoria (ver fig. 1), llevamos al sistema hacia la fase nemática aumentando el orden orientacional pero no el orden posicional (Fig. 2). El orden orientacional que alcanzan las moléculas nos permite definir una dirección promedio de las moléculas en términos de un vector director que denotamos \mathbf{n} . El material es aún un fluido, pero en cada punto, \mathbf{r} , las moléculas prefieren orientarse a lo largo de la dirección $\mathbf{n}(\mathbf{r})$. Así, el material es anisotrópico.



Podemos definir un parámetro de orden que mide qué tan alineadas están las moléculas del sistema, una elección usual para este parámetro es

$$s = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2(\theta) - 1 \rangle \quad (3.1)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ es el promedio térmico y θ es el ángulo entre cada molécula y el vector director. Si las moléculas están muy alineadas con dicho vector tendremos $s = 1$, mientras que si están distribuidas de forma aleatoria obtendremos $s = 0$.

A diferencia de los cristales líquidos clásicos, los sistemas electrónicos tienen grados de libertad de carga y espín y presentan fuertes efectos cuánticos. Esto genera

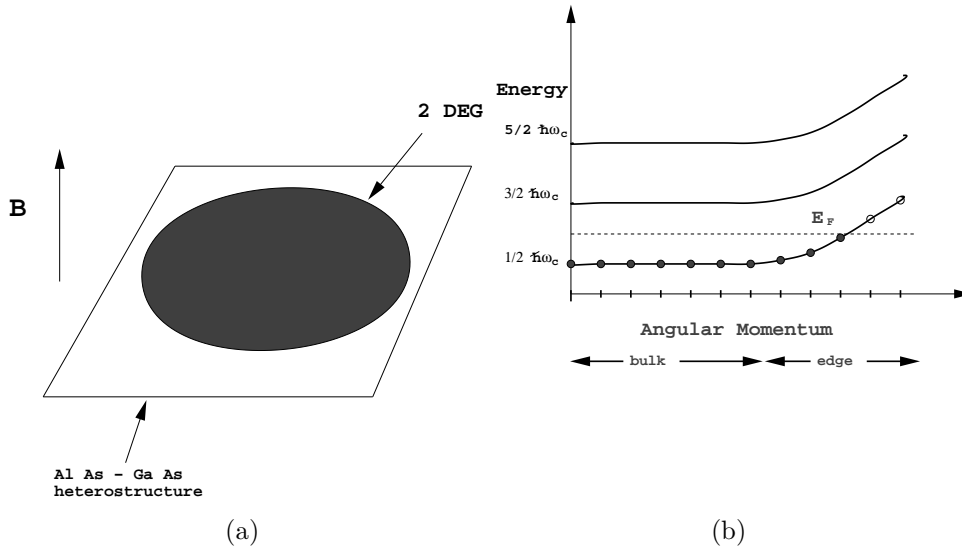


Figura 3.1: a) 2DEG en un campo magnético. b) Niveles de Landau.

una multitud de interesantes posibilidades para los estados ordenados en los cuales el carácter de cristal líquido compite con los grados de libertad internos del sistema electrónico. En este contexto es habitual que las fases cristalinas sean aisladoras o cuasi-aisladoras

Un aislador de Mott es un sistema electrónico que se encuentra en una fase en la cual hay un gap en el espectro de energías de una partícula, y este gap está generado por las correlaciones electrónicas y no por las características de la red. Uno de los problemas centrales en física de materia condensada es la comprensión de los aisladores de Mott dopados. Muchos de los sistemas más interesantes, como por ejemplo los superconductores de alta temperatura, son aisladores de Mott en el régimen no dopado.

Para estos sistemas la teoría de bandas predice que un comportamiento metálico y no aislador, por lo que el sistema debería poder ser descrito por una teoría de Landau del líquido de Fermi. Los sistemas electrónicos que se vuelven aisladores por efecto de las interacciones son estados de la materia con fuertes correlaciones. Los aisladores de Mott más conocidos y estudiados generalmente presentan fases ordenadas asociadas con la ruptura de alguna simetría global del sistema electrónico y tienen claramente definido un parámetro de orden. Típicamente el estado de Mott es un estado antiferromagnético (o alguna generalización del mismo). Sin embargo se ha encontrado substancial evidencia de posibles estados de Mott no magnéticos

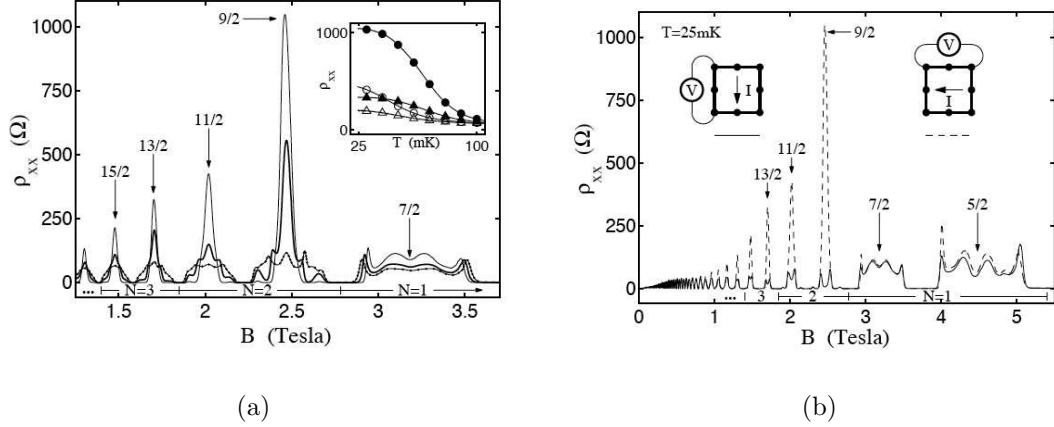


Figura 3.2: Anisotropía de magneto-transporte en 2DEG: a) picos en ρ_{xx} encontrados a baja T en los niveles de Landau altos (línea punteada: $T=100\text{mK}$; línea sólida: 65mK ; línea fina: 25mK). Inset: dependencia con la temperatura de los picos a $\nu = 9/2$ (círculos llenos), $11/2$ (círculos vacíos), $13/2$ (triángulos llenos) y $15/2$ (triángulos vacíos). b) Anisotropía de ρ_{xx} a $T=25\text{mK}$. (Lilly y otros[13]).

como pueden ser los estados dimerizados y varios tipos de líquidos de espín. Algunos de estos estados no admiten una descripción por medio de un parámetro de orden bien definido (como es el caso de las llamadas fases topológicas).

3.1.1. Resultados experimentales

Durante la última década se encontró una gran cantidad de evidencia experimental de la existencia de fases de tipo cristales líquidos en una amplia variedad de sistemas electrónicos altamente correlacionados. En esta sección repasaremos brevemente algunos de los experimentos realizados sobre superconductores de alta temperatura crítica en cupratos, en materiales como los rutenatos ($Sr_3Ru_2O_7$) y en gases electrónicos en 2 dimensiones (2DEG) expuestos a campos magnéticos grandes donde se presentan fases de tipo nemáticas. Esto nos dará un panorama de las posibles fases existentes que necesitan ser entendidas desde el punto de vista teórico.

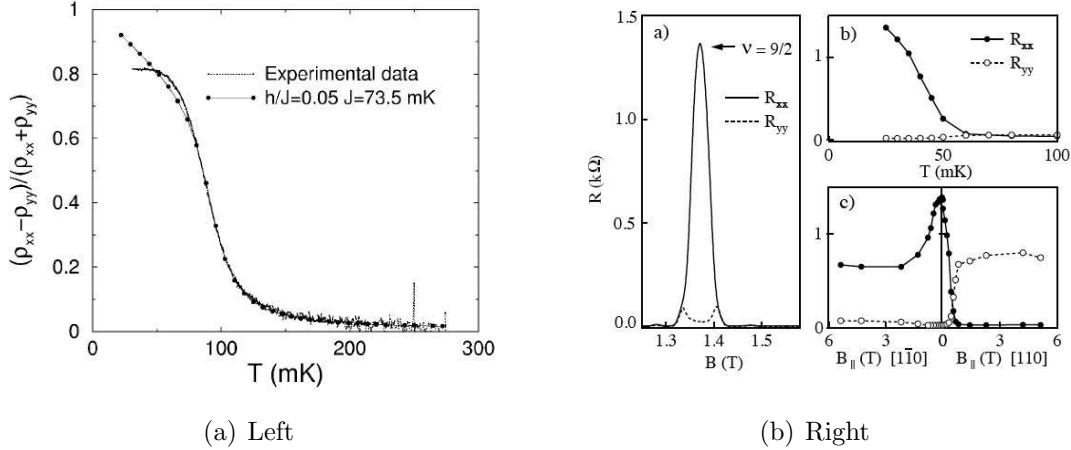


Figura 3.3: Izquierda: Orden nemático en 2DEG; ajuste de la anisotropía en la resistencia con un modelo XY en 2D. Simulación Monte Carlo.[16]. Derecha: a) Anisotropía en la resistencia longitudinal cerca de $\nu = 9/2$ at $T = 25$ mK. Línea sólida: R_{xx} ; flujo de corriente promedio en la dirección $[110]$. b) Dependencia de la resistencia con la temperatura a $\nu = 9/2$. c) R_{xx} y R_{yy} a $\nu = 9/2$ con $T = 25$ mK *vs* campo magnético en la dirección $[110]$ y $[1\bar{1}0]$. (Cooper et al[17]).

3.1.2. Fases nemáticas en 2DEG

Hasta la fecha, el estado nemático mejor documentado es el estado anisotrópico observado en gases de electrones en dos dimensiones (2DEG) sometidos a campos magnéticos altos [13, 12, 14, 15] (Fig.3.2).

En muestras de ultra alta movilidad de un 2DEG en heteroestructuras de AlAs-GaAs, los experimentos de transporte en el segundo nivel de Landau (y mayores) cerca del centro del nivel de Landau muestran una pronunciada anisotropía de la resistencia longitudinal, aumentando bruscamente debajo de $T \simeq 80$ mK, con una anisotropía que aumenta en varios órdenes de magnitud cuando se reduce la temperatura. Este efecto solo es observado en muestras ultra puras, con camino libre medio de alrededor de $0.5 \mu\text{m}$ y movilidades cercanas a $10\text{-}30 \times 10^6$.

Se puede construir fenomenológicamente un parámetro de orden nemático a partir de las medidas del tensor de resistividad, tomando la parte simétrica de traza nula del mismo. Este parámetro de orden fue usado en la Ref. [16], donde los autores realizaron un ajuste de los datos obtenidos en las referencias [13, 12], mostrando que los resultados pueden explicarse a partir de un modelo XY en 2 dimensiones

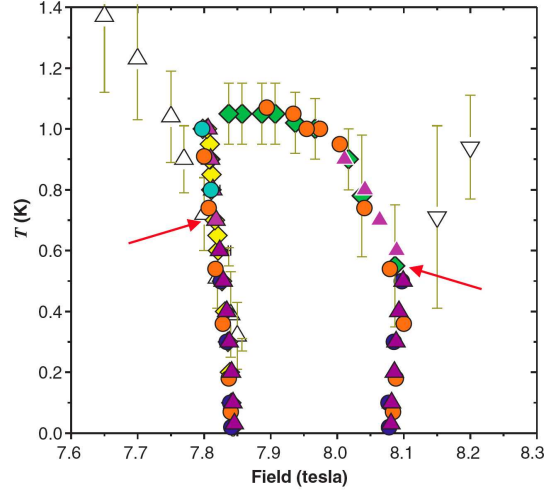


Figura 3.4: Diagrama de fases para el $Sr_3Ru_2O_7$ en el plano $T - H$. (Grigera et al[29]).

Estos experimentos fueron originalmente interpretados como evidencia de una fase de tipo *quantum Hall smetic* (stripe) [18, 19, 20, 21, 22]. Sin embargo, otros experimentos [23, 17, 24] (Fig.3.3, panel derecho) sugieren un estado electrónico cristalizado. Esto, junto con un análisis detallado de los datos experimentales, sugiere que el estado compresible es una fase nemática electrónica [20, 16, 25, 26, 27].

La visión alternativa de una fase nemática generada mediante una inestabilidad de Pomeranchuk del líquido de Fermi podría encajar bien pero es difícil de justificar miscorscópicamente [28, 27]. Este es uno de los ejemplos en los cuales es interesante entender los canales en los cuales estas inestabilidades de Pomeranchuk tienen lugar, a partir de modelos microscópicos.

3.1.3. Fase nemática en $Sr_3Ru_2O_7$

Experimentos recientes [7] de magneto-transporte en Rutenatos cuasi-bidimensionales $Sr_3Ru_2O_7$ arrojaron claras evidencias de una fuerte dependencia con la temperatura de la anisotropía en materiales altamente correlacionados a bajas temperaturas $T \lesssim 800mK$ y para una ventana de campos magnéticos perpendiculares de alrededor de 7,5 Tesla (ver Figura 3.4).

El compuesto $Sr_3Ru_2O_7$ es un material cuasi-bidimensional de dos capas del cual

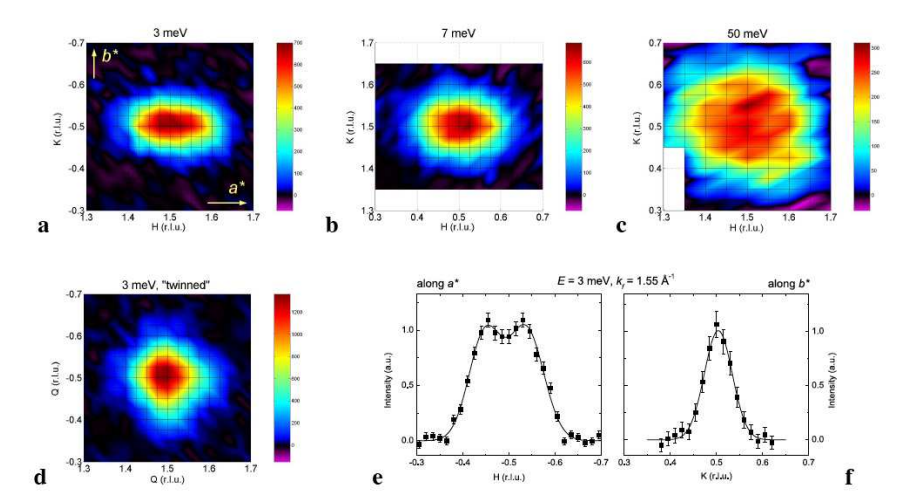


Figura 3.5: Orden nemático en el compuesto $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($y = 6,45$). (de a) hasta c)) Intensidad de el espectro de excitaciones a 3, 7, y 50 meV, respectivamente. Las direcciones a^* y b^* estan indicadas en (a). (d) mapa color de la intensidad a 3 meV. (e y f) Escaneos a lo largo de a^* y b^* en \mathbf{Q}_{AF} . (De Hinkov et al[32]).

se sabe que presenta una transición metamagnética en función del campo magnético perpendicular aplicado y la temperatura. La anisotropía en las propiedades de transporte aparece en el régimen de muy bajas temperaturas y sólo en muestras extremadamente puras.

Estos experimentos nos brindan evidencia de que el sistema se encuentra en una fase nemática en el rango de campos magnéticos antes mencionado [7, 8]. Una de las propuestas para entender este tipo de transición es la idea de una inestabilidad de Pomeranchuk donde la superficie de Fermi es deformada de forma anisotrópica.

3.1.4. Fases nemáticas y de tipo stripes en cupratos

Además de la superconductividad de alta temperatura crítica, los cupratos muestran una fuerte tendencia a tener estados electrónicos ordenados. Tal es el caso de las famosas fases tipo *stripes*. La relación entre estos estados ordenados y los mecanismos que generan la superconductividad de alta temperatura son uno de los temas de actual interés en materia condensada.

Las fases de *stripe* fueron intensamente estudiadas en superconductores de alta temperatura y actualmente pueden encontrarse en la literatura distintos *reviews* del

tema [30, 31].

Las fases de *stripe* en los superconductores de alta temperatura presentan un orden unidireccional, ya sea en los grados de libertad electrónicos o de espín, y generalmente no conmensurado.

En general el orden de *stripe* (usando scattering inelástico de neutrones de baja energía) en $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ y $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ no es estático sino fluctuante. Esto significa que realmente no hay un verdadero orden de largo alcance unidireccional sino que el sistema está en una fase cuántica desordenada, muy cerca de una transición de fase cuántica hacia una fase ordenada.

Parte II

Inestabilidades electrónicas

Capítulo 4

Líquidos de Fermi.

Índice

4.1. Excitaciones elementales	48
4.1.1. El concepto de cuasipartícula	48
4.1.2. Energía de las cuasipartículas	53
4.2. Teoría de Landau	54
4.3. Inestabilidades	56

En un sistema de partículas fuertemente interactuantes como un líquido cuántico, sólo podemos hacer referencia a los estados estacionarios del líquido y no a los de las partículas individuales. Al calcular la función de partición a temperaturas suficientemente bajas tomaremos, en general, solo estados excitados del líquido muy cercanos al estado fundamental. De esta forma los estados excitados pueden ser pensados como un conjunto de *excitaciones elementales* o *cuasipartículas* que poseen energía ϵ y momento \mathbf{k} definidos. El espectro de energía de un líquido de Fermi tiene una estructura similar al gas ideal de Fermi, su estado fundamental corresponde a ocupar todos los estados con momento $|\mathbf{k}| < k_F$.

Una condición necesaria para poder describir al sistema utilizando la teoría de Landau del líquido de Fermi es que las *cuasipartículas* estén bien definidas a bajas energías, para esto es necesario que el ancho Δk de la función de onda de la cuasipartícula sea pequeño comparado con la energía de la misma. Este ancho está determinado por la interacción de las *cuasipartículas*, que en la teoría de Landau está parametrizada por los llamados *Parámetros de Landau*.

En la teoría de Landau del líquido de Fermi, la estabilidad termodinámica requiere que los parámetros de Landau no sean demasiado grandes y negativos. Este argumento, presentado por Pomeranchuk [36], implica que si la interacción se vuelve suficientemente negativa (atractiva), el líquido de Fermi se vuelve inestable ante una deformación de la superficie de Fermi.

En sistemas definidos sobre una red, este tipo de análisis se vuelve un poco más complejo. En la red, la simetría continua de rotación esta siempre rota, lo que no permite expresar los parámetros de Landau en una base de momentos angulares. En el caso de la red, los parámetros de Landau pueden ser clasificados de acuerdo a las representaciones irreducibles del grupo puntual de simetría de la red, por ejemplo para la red cuadrada correspondería el grupo C_4 , lo que lo hace más complicado y altamente dependiente de la geometría de la red que estemos estudiando.

En el presente capítulo presentamos una breve introducción a la teoría de Landau del líquido de Fermi y la inestabilidad de Pomeranchuk. Mientras que en el siguiente nos concentraremos en desarrollar un método para diagnosticar inestabilidades de Pomeranchuk en sistemas sobre la red, independizándonos del uso de los parámetros de Landau, que puede ser utilizado de forma sistemática para cualquier red.

4.1. Excitaciones elementales en un líquido de Fermi cuántico

4.1.1. El concepto de cuasipartícula

Primero consideremos un sistema de N fermiones no interactuantes de masa m y espín $S = 1/2$ encerrados en un volumen V . Los autoestados del sistema total son combinaciones antisimetrizadas de los N diferentes estados de partícula individual. Cada estado de una partícula es caracterizado por dos números cuánticos, su momento \mathbf{k} y su espín $\sigma = \pm\frac{1}{2}$. La función de onda normalizada correspondiente a una partícula en el espacio de configuración es una onda plana:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (4.1)$$

La función de onda correspondiente a N partículas es el producto antisimetrizado de N ondas planas. Tales autoestados pueden ser caracterizados por la función de distribución $n_{\mathbf{k}\sigma}$, que toma el valor 1 si el estado correspondiente a los números cuánticos $\mathbf{k} \sigma$ está ocupado y cero en caso contrario.

Una partícula con momento \mathbf{k} posee una energía cinética $\mathbf{k}^2/2m$ ¹. En ausencia

¹De aquí y en lo que sigue tomaremos $\hbar = 1$.

de interacción las energías de los estados de una partícula simplemente se suman para calcular la energía total.

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}^2}{2m} n_{\mathbf{k}\sigma} \quad (4.2)$$

El estado fundamental se obtiene llenando los N estados de menor energía. La función de distribución es la mostrada en la figura 4.1, el momento de Fermi k_F está dado por

$$\frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (4.3)$$

donde V es el volumen del sistema, y todos los estados de una partícula ocupados se encuentran dentro de la superficie de Fermi S_F , que en este caso corresponde a la esfera de radio k_F .

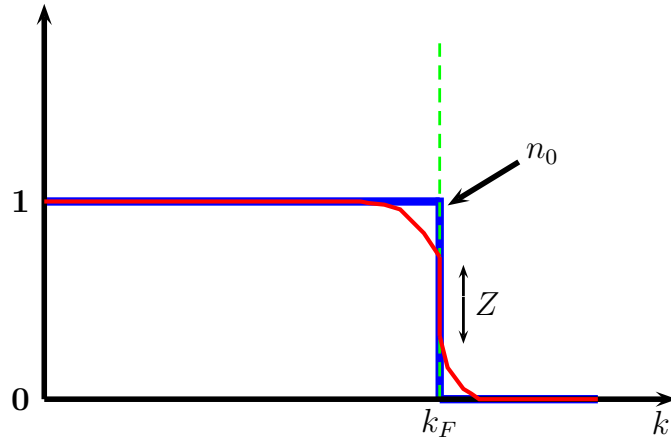


Figura 4.1: Distribución de cuasipartículas en el estado fundamental.

Si agregamos una partícula al sistema, el estado fundamental del sistema de $N+1$ partículas se obtiene si la partícula adicional es colocada en el estado disponible de menor energía, es decir, sobre la superficie de Fermi S_F . Podemos definir aquí el potencial químico de manera que

$$\mu = E(N+1) - E(N) = \frac{\partial E}{\partial N} \quad (4.4)$$

esto es

$$\mu = \frac{k_F^2}{2m} \quad (4.5)$$

El potencial químico es igual a la energía de una partícula cuyo momento se sitúa sobre la superficie de Fermi. Puede demostrarse que este resultado es válido igualmente en presencia de interacción.

Es conveniente especificar los estados excitados del sistema con respecto al estado fundamental. Un estado excitado dado es obtenido desplazando un cierto número de partículas a través de la superficie de Fermi. Este procedimiento es equivalente a crear un número igual de partículas fuera de la S_F que de huecos dentro de la misma. Los huecos y partículas entonces constituyen las *excitaciones elementales* del sistema. La cantidad de excitaciones está caracterizada por el corrimiento de la función de distribución de su valor en el estado fundamental.

$$\delta n_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}}^0 \quad (4.6)$$

Una partícula excitada con momento $|\mathbf{k}'| > k_F$ corresponde a $\delta n_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$, mientras que una excitación de tipo hueco con momento $|\mathbf{k}'| < k_F$ corresponde a $\delta n_{\mathbf{k}} = -\delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$. Para un sistema no interactuante, la energía de las excitaciones es simplemente

$$E - E_0 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \delta n_{\mathbf{k}} \quad (4.7)$$

A bajas temperaturas, las partículas y huecos pueden ser excitados cerca de la superficie de Fermi, por lo que $\delta n_{\mathbf{k}}$ será típicamente diferente de cero y de orden de 1 en una pequeña región alrededor de S_F . En un sistema aislado el número total de partículas se conserva por lo que el número de partículas excitadas debe ser igual al número de huecos.

$$\sum_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k}} = 0 \quad (4.8)$$

Es preferible en muchos casos trabajar con la energía libre de Landau en lugar de la energía. En el caso $T = 0$, la misma está dada por $F = E - \mu N$. Con esta elección el sistema queda caracterizado por su potencial químico en lugar del número de partículas. De la ecuación (4.7) vemos que la energía libre asociada con la función de distribución $\delta n_{\mathbf{k}}$ está dada por

$$F - F_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \mu \right) \delta n_{\mathbf{k}} \quad (4.9)$$

La ecuación (4.9) se reduce a (4.7) cuando el número de partículas se conserva, es decir cuando se cumple que $\sum_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k}} = 0$.

Ahora pasemos al caso de un líquido de Fermi interactuante. Estamos interesados en la naturaleza de sus excitaciones elementales. Un ataque frontal al problema podría hacerse por medio de funciones de Green y la artillería matemática de la teoría de perturbaciones de muchos cuerpos como el que utilizamos en [37]. En este caso utilizaremos una aproximación alternativa, que consiste en comparar el líquido real interactuante con un gas ideal sin interacción y establecer una correspondencia uno a uno entre los autoestados de los dos sistemas. Esta aproximación nos permitirá entender cualitativamente el espectro de excitaciones del sistema interactuante.

Consideremos un autoestado del sistema ideal, caracterizado por una función de distribución $n_{\mathbf{k}}$. Para establecer una conexión con el sistema real, imaginemos que la interacción entre las partículas es encendida de forma infinitamente lenta. Bajo esta condición adiabática, los autoestados del gas ideal se transformarán de forma progresiva en algún estado del sistema interactuante. Sin embargo, no hay *a priori* ninguna razón por la cual podamos asegurar que este procedimiento nos generará *todos* los autoestados reales. Por ejemplo un estado superconductor no puede ser obtenido de esta manera. Por lo tanto, el asumir que el estado fundamental real puede ser adiabáticamente generado partiendo de algún autoestado del sistema ideal caracterizado por una función de distribución $n_{\mathbf{k}}^0$, constituye una hipótesis no trivial. Esta suposición puede ser considerada como la definición de un sistema fermiónico *normal*.

Por razones de simetría, la distribución $n_{\mathbf{k}}^0$ de un sistema totalmente isotrópico es esférica. Como resultado, la superficie de Fermi es esférica y no cambia cuando la interacción entre las partículas es encendida, esto es, el estado fundamental real es generado adiabáticamente a partir del estado fundamental ideal.

Ahora procediendo de forma similar, sumamos una partícula con momento \mathbf{k} a la distribución del sistema ideal $n_{\mathbf{k}}^0$ y luego encendemos la interacción entre las partículas adiabáticamente. De esta manera generamos un estado excitado del líquido real, el cual podemos asegurar que posee momento \mathbf{k} ya que el momento se conserva en las colisiones entre partículas. A medida que se va incrementando la interacción, podemos imaginarnos que la partícula que agregamos perturba a las demás partículas que se encuentran cercanas a ella. Según nuestras hipótesis, si el cambio en la interacción es lo suficientemente lento; el sistema de $N + 1$ partículas permanecerá en equilibrio. Una vez que la interacción está completamente encendida, encontraremos que nuestra partícula se mueve junto con la nube de partículas que la rodean distorsionadas por la interacción. En el lenguaje de la teoría de campos, podemos decir que la partícula está *vestida* por una nube de autoenergía. Consideraremos a esta vestida por la interacción como una entidad independiente, a la que llamaremos *cuasipartícula*. El estado excitado anterior corresponde al estado fundamental real

más una cuasipartícula de momento \mathbf{k} .

Sea S_F la superficie de Fermi que caracteriza la distribución sin perturbar $n_{\mathbf{k}}^0$ a partir del cual construimos el estado fundamental real. Por causa del principio de exclusión de Pauli, las excitaciones de cuasipartículas pueden ser generadas solo si poseen momento \mathbf{k} fuera de la S_F . La distribución de cuasipartículas en el espacio \mathbf{k} está abruptamente limitada por la superficie de Fermi. Usando el mismo argumento, encendiendo adiabáticamente la interacción, podemos definir *cuasihuecos* con momento \mathbf{k} dentro de la superficie de Fermi. Las cuasipartículas y cuasihuecos aparecen entonces como las *excitaciones elementales* del sistema real y cuando se combinan generan una extensa clase de estados excitados.

En realidad, nuestro procedimiento adiabático puede darnos dificultades cuando el estado real, que se obtiene adiabáticamente a partir del estado libre, es desfavorecido por la presencia de la interacción. Si el tiempo que tardamos en encender la interacción es mayor que el tiempo de vida media del estado que queremos generar, el proceso ya no puede ser considerado como reversible ya que el estado decaerá antes de que se alcance el valor físico de la interacción. Por otro lado, si para evitar esto la interacción se enciende demasiado rápido, el proceso ya no es adiabático y no generaremos autoestados del sistema interactuante.

Sin embargo, estas dificultades no surgen en el estado fundamental, el cual es estable, y puede ser especificado de forma precisa. Debemos tener presente que una cuasipartícula está estrictamente definida si se encuentra justo sobre la superficie de Fermi y para que nuestra teoría tenga sentido, debemos tener cuidado de introducir cuasipartículas solo en la región inmediatamente cercana a la superficie de Fermi. En las secciones siguientes veremos que si se trata adecuadamente la teoría, la evaluación de la distribución de cuasipartículas sobre la superficie de Fermi puede obtenerse como consecuencia. En sistemas puros a $T = 0$ el tiempo de vida varía como la inversa del cuadrado de la separación de energías con respecto a la energía de Fermi. De forma que las cuasipartículas están mejor y mejor definidas cuanto más cerca estemos de la S_F . El tiempo de vida de las cuasipartículas se vuelve suficientemente grande en la región inmediatamente cercana a la S_F , y el concepto de cuasipartícula tiene sentido en esa región.

Consideremos nuevamente un autoestado del sistema no interactuante, caracterizado por una función de interacción $n_{\mathbf{k}}$ correspondiente a las partículas sin interacción. Encendiendo la interacción adiabáticamente, obtenemos un autoestado del sistema real, que puede ser caracterizado por la misma distribución $n_{\mathbf{k}}$. La excitación del sistema se mide por la desviación $\delta n_{\mathbf{k}}$ a partir de la distribución del estado fundamental.

$$\delta n_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}}^0 \quad (4.10)$$

A bajas temperaturas, solo nos interesan los estados excitados de bajas energías, para los cuales $\delta n_{\mathbf{k}}$ esta restringido a la región inmediatamente cercana a la superficie de Fermi. Bajo estas condiciones el decaimiento de las cuasipartículas es despreciable. Hay que destacar que la cantidad física relevante es la desviación $\delta n_{\mathbf{k}}$ en vez de $n_{\mathbf{k}}$. Debemos tener mucho cuidado entonces en formular nuestra teoría en términos de $\delta n_{\mathbf{k}}$ y usar $n_{\mathbf{k}}^0$ solo como un paso intermedio. De hecho nuestros resultados generalmente dependerán de $\vec{\nabla} n_{\mathbf{k}}^0$, una cantidad localizada sobre la superficie de Fermi.

4.1.2. Energía de las cuasipartículas

Para un gas ideal, existe una simple relación lineal entre la energía de un dado estado y la función de distribución. Cuando la interacción entre las partículas es tomada en cuenta, la relación entre la energía de un estado, E , y la función de distribución, $n_{\mathbf{k}}$, se vuelve más complicada. Esta puede ser expresada como una funcional de la forma $E[n_{\mathbf{k}}]$, la cual generalmente no podemos especificar de forma exacta. Si $n_{\mathbf{k}}$ está lo suficientemente cerca de la función de distribución de equilibrio $n_{\mathbf{k}}^0$, podemos desarrollar en serie de Taylor esta funcional.

$$E[n_{\mathbf{k}}] = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k}} + O(\delta n^2) \quad (4.11)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es la primer derivada funcional de E .

En la práctica, necesitamos solo los valores de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ cercanos a la superficie de Fermi, donde podemos usar una expansión en serie. El gradiente de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ juega el rol de velocidad de grupo de la cuasipartícula

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \vec{\nabla} \varepsilon_{\mathbf{k}} \quad (4.12)$$

En ausencia de campo magnético y para un sistema invariante ante reflexiones, $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ y $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ no dependen del espín σ . Para un sistema isotrópico $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ solo depende de $k = |\mathbf{k}|$. La velocidad $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ es paralela a \mathbf{k} , de manera que, sobre la superficie de Fermi, podemos escribir

$$v_{k_F} = \frac{d\varepsilon(k)}{dk} \equiv k_F/m^* \quad (4.13)$$

donde m^* es la llamada masa efectiva de las cuasipartículas.

En un sistema anisotrópico la velocidad de Fermi varia sobre la superficie de Fermi y la noción de masa efectiva es un poco mas complicada. Por esta razón es

conveniente introducir la densidad de estados $\nu(\epsilon)$ como

$$\nu(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - \epsilon) \quad (4.14)$$

A temperatura cero todas las cantidades físicas dependerán de la densidad de estados sobre la superficie de Fermi $\nu(0)$.

4.2. Interacción entre las cuasipartículas: teoría de Landau

Como mencionamos antes, la cantidad de interés físico para describir un sistema es la energía libre de Landau $F = E - \mu N$. Para una excitación, la energía libre medida desde el valor F_0 correspondiente al estado fundamental esta dada por

$$F - F_0 = E - E_0 - \mu(N - N_0) \quad (4.15)$$

donde N_0 es el número de partículas en el estado fundamental. Para poder generalizar la expresión (4.11) necesitamos calcular $N - N_0$. Esto puede hacerse siguiendo nuestra definición adiabática de *cuasipartícula*; el estado con una *cuasipartícula* extra se deriva a partir de un estado del gas ideal con $N + 1$ partículas, y el número total de partículas se conserva cuando la interacción es encendida adiabáticamente. Por esto, al sumar una cuasipartícula al estado fundamental del líquido estamos sumando exactamente una partícula al conjunto de partículas del gas. La diferencia $N - N_0$ puede ser escrita entonces como

$$\begin{aligned} N - N_0 &= \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^0 \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Usando las ecuaciones (4.11) y (4.16) obtenemos

$$F - F_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \delta n_{\mathbf{k}} + O(\delta n^2) \quad (4.17)$$

La mayor parte de las propiedades que consideraremos envuelven un desplazamiento de la superficie de Fermi en una pequeña cantidad δ . El valor correspondiente de $\delta n_{\mathbf{k}}$ es igual a ± 1 en una pequeña banda de ancho δ centrada en la superficie de Fermi y se hace cero fuera de ella. En la región donde $\delta n_{\mathbf{k}}$ es distinto de cero

podemos usar el desarrollo de $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ para ver que $\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ es también de orden δ . Luego la diferencia $F - F_0$ dado por la ecuación (4.17) es de orden δ^2 . El desarrollo (4.17), que parecía un desarrollo a primer orden, es en realidad de segundo orden con respecto al desplazamiento de la superficie de Fermi. Este punto es fundamental al intentar estudiar las inestabilidades del líquido de Fermi ante distorsiones de la superficie de Fermi y se pondrá en evidencia cuando desarrollemos nuestro método en el capítulo 5.

Nuestra aproximación es entonces consistente sólo si desarrollamos la funcional $(F - F_0)$ hasta incluir todos los términos posibles de segundo orden en el desplazamiento con respecto a la superficie de Fermi. Escribimos entonces

$$F - F_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \delta n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta n_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k}'} + O(\delta n^3) \quad (4.18)$$

La ecuación (4.18) es la base de la teoría fenomenológica del líquido de Fermi propuesta por Landau [38]. Su característica más importante es el nuevo término que describe la interacción entre las cuasipartículas. Este tipo de término está ausente en la teoría de Sommerfeld y tiene considerables consecuencias en las propiedades físicas del sistema.

La ecuación (4.18) nos proporciona los principales términos de la expansión de $(F - F_0)$ en potencias de el número relativo de cuasipartículas excitadas. Esta cantidad puede ser caracterizada por el siguiente parámetro

$$\alpha = \frac{\sum_{\mathbf{k}} |\delta n_{\mathbf{k}}|}{N} \quad (4.19)$$

La aproximación de Landau es válida si α es pequeño. Esto equivale a deformar la superficie de Fermi de forma infinitesimal. El coeficiente del desarrollo $f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ es la segunda derivada variacional de F con respecto a $n_{\mathbf{k}}$ y como tal es invariante ante la permutación de \mathbf{k} y \mathbf{k}' . Por supuesto aquí asumimos que $f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ es continua cuando \mathbf{k} y \mathbf{k}' cruzan la superficie de Fermi. Otra vez, esto puede ser considerado como una característica de un *sistema normal*. En la práctica, sólo necesitaremos el valor de $f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ sobre la superficie de Fermi, por lo que $f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ sólo dependerá de la dirección de \mathbf{k} y \mathbf{k}' .

Si no hay campo magnético aplicado y el sistema es invariante ante inversión temporal tendremos que

$$f_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} = f_{-\mathbf{k}-\sigma, -\mathbf{k}'-\sigma'} \quad (4.20)$$

Nótese que aquí hemos escrito explícitamente los índices de espín, que por simplicidad habían sido omitidos. Si además la superficie de Fermi es invariante ante

reflexión $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, la ecuación anterior queda

$$f_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'} = f_{\mathbf{k}-\sigma,\mathbf{k}'-\sigma'} \quad (4.21)$$

que nos indica que la función $f_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}$ depende solo de la orientación relativa de los espines. Es decir, hay solo dos componentes independientes que corresponden respectivamente a los espines orientados de forma paralela y antiparalela. Es conveniente escribir esto de la siguiente manera

$$f_{\mathbf{k}\uparrow,\mathbf{k}'\uparrow} = f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s + f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^a \quad (4.22)$$

$$f_{\mathbf{k}\uparrow,\mathbf{k}'\downarrow} = f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s - f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^a \quad (4.23)$$

donde $f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s$ y $f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^a$ son las partes de espín simétrica y antisimétrica respectivamente. En los casos en los que el sistema es isotrópico podemos simplificar aun más estas expresiones ya que en este caso, para \mathbf{k} y \mathbf{k}' sobre la superficie de Fermi, $f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s$ y $f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^a$ dependen solo del ángulo θ entre los momentos y cada una de las funciones de interacción pueden ser desarrolladas en serie de polinomios de Legendre

$$f_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{s(a)} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l^{s(a)} P_l(\cos(\theta)). \quad (4.24)$$

La función f esta completamente determinada por el conjunto de coeficientes f_l^s y f_l^a . Es conveniente expresar estos coeficientes en términos de

$$F_l^{s(a)} = \nu(0) f_l^{s(a)} = \frac{Vm^*k_F}{\pi^2} f_l^{s(a)} \quad (4.25)$$

Las cantidades $F_l^{s(a)}$ se conocen como parámetros de Landau, tienen la ventaja de ser adimensionales y miden la magnitud de la interacción comparada con la energía cinética.

4.3. Inestabilidades de Pomeranchuk del líquido de Fermi: generalidades.

Tiempo después del desarrollo de la teoría de Landau, I. J. Pomeranchuk [36] desarrollo un método para detectar inestabilidades del líquido de Fermi, deformando la superficie de Fermi y estudiando el cambio en la energía libre del sistema. En su forma original el método puede ser aplicado a sistemas en tres dimensiones con superficies de Fermi esféricas. En esta sección daremos una breve introducción a dicho método.

4.

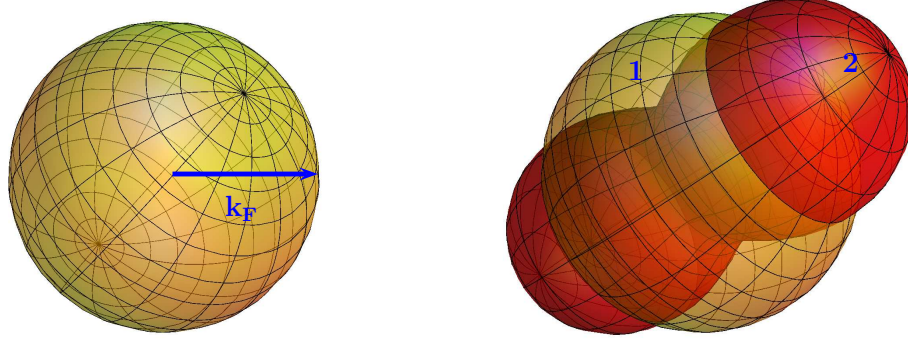


Figura 4.2: *Izquierda:* Superficie de Fermi sin perturbar. *Derecha:* Esquema de la deformación de la superficie de Fermi. En las regiones 1 tenemos $\delta n = -1$, mientras que en las regiones 2, $\delta n = 1$

Como vimos en las secciones anteriores, en la teoría del líquido de Fermi propuesta por Landau, la energía libre del sistema es una funcional de la distribución de cuasipartículas. Cuando la función de distribución de las excitaciones tiene solo pequeñas desviaciones con respecto a la distribución de equilibrio, correspondiente a llenar todos los estados con $k < k_F$ (donde $k = |\mathbf{k}|$). La energía puede escribirse como

$$E = \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \varepsilon(k) \delta n(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int \int \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^6} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta n(\mathbf{k}) \delta n(\mathbf{k}'). \quad (4.26)$$

El sistema será estable ante pequeñas deformaciones $\delta n(\mathbf{k})$ si $E > 0$ para $\delta n(\mathbf{k})$ arbitraria. Si trabajamos a $T = 0$ los valores de k en las integrales de la ecuación (4.26) son cercanos a k_F . Por lo que podemos desarrollar la relación de dispersión

$$\varepsilon(k) \simeq v_F (k - k_0). \quad (4.27)$$

Las variaciones δn que aparecen en la ecuación (4.26) están generadas por la deformación de la superficie de Fermi, y queremos encontrar un criterio para detectar cuando el sistema se vuelve inestable ante tales deformaciones (ver figura 4.2).

Desarrollamos el momento k correspondiente a la superficie de Fermi deformada esquematizada en el lado derecho de la figura 4.2 en serie de armónicos esféricos

$$k = k_F + \sum_{l,m} \Phi_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4.28)$$

con $Y_{l0}(\theta, \phi) = 1$. Con este desarrollo, el primer término de la ecuación (4.26) toma la forma

$$\frac{2v_F k_F^2}{(2\pi)^3} \int d\Omega \int_0^{k-k_F} dk' (k' - k_F) = \frac{v_F k_F^2}{(2\pi)^3} \sum_{l,m} \Phi_{lm}^2 \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \quad (4.29)$$

mientras que el segundo término se reduce a

$$\frac{2k_F^4}{(2\pi)^6} \int \int d\Omega_1 d\Omega_2 f(\theta_{1,2}) [k(\theta_1, \phi_1) - k_F] [k(\theta_2, \phi_2) - k_F] \quad (4.30)$$

donde el ángulo $\theta_{1,2}$ esta definido por

$$\cos(\theta_{1,2}) = \cos(\theta_1) \cos(\theta_2) + \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) \cos(\phi_1 - \phi_2) \quad (4.31)$$

Ahora podemos desarrollar $f(\theta_{1,2})$ en serie de polinomios de Legendre

$$\begin{aligned} f(\theta_{1,2}) &= \sum_l f_l P_l(\cos(\theta_{1,2})) \\ &= \sum_l \sum_{m'} Y_{lm'}(\theta_1, \phi_1) Y_{lm'}(\theta_2, \phi_2) \frac{(l-m')!}{(l+m')!} f_l \end{aligned} \quad (4.32)$$

con

$$f_l = \frac{2l+1}{4\pi} \int d\Omega f(\theta) P_l(\cos(\theta)) \quad (4.33)$$

Sustituyendo la ecuación (4.32) en (4.30) y combinando con la ecuación (4.29) obtenemos para la energía la siguiente expresión

$$E = \frac{k_F^2 v_F}{(2\pi)^3} \sum_{l,m} \Phi_{lm}^2 \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \quad (4.34)$$

$$+ \frac{2k_F^4}{(2\pi)^6} \sum_{l,m} \Phi_{lm}^2 \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right)^2 f_l \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \quad (4.35)$$

Para cada valor de lm , Φ_{lm} parametriza la magnitud de la deformación de la superficie de Fermi *en el canal* lm . Un dado canal será inestable si la deformación asociada tiene energía negativa. Las condiciones para la estabilidad del sistema pueden ser escritas de forma separada para cada valor de l y m

$$1 + \frac{8\pi}{2l+1} \frac{k_F^2 f_l}{v_F (2\pi)^3} > 0 \quad (4.36)$$

Capítulo 5

Inestabilidades del líquido de Fermi en redes bidimensionales.

Índice

5.1. Pomeranchuk en redes 2 D	60
5.1.1. Desarrollo del método.	60
5.1.2. Una alternativa al cambio de variables.	67
5.2. Ejemplo: inestabilidades en la red cuadrada.	69
5.2.1. Inestabilidad del tipo onda s	71
5.2.2. Inestabilidad de Pomeranchuk del tipo onda d	72
5.3. Inestabilidades en Grafeno.	75
5.3.1. Grafeno: conceptos básicos	75
5.3.2. Hamiltoniano libre	78
5.3.3. Interacciones en grafeno	80
5.3.4. Parametrización de la superficie de Fermi.	82
5.3.5. Inestabilidades y diagrama de fases.	84
5.4. Generalización a varias bandas	86
5.5. Temperatura finita	90
5.5.1. Ejemplo: red cuadrada a temperatura finita.	94
5.6. Conclusiones	98

La teoría de Landau del líquido de Fermi es uno de los marcos teóricos más importantes para describir a los sistemas metálicos convencionalmente débilmente interactuantes. La física de bajas energías de sistemas de electrones interactuantes en tres dimensiones es generalmente descrita por la teoría de Landau, cuya hipótesis central es la existencia de excitaciones fermiónicas de partícula simple o *cuasipartículas* con un tiempo de vida grande a muy bajas energías. Sin embargo, en bajas dimensiones la situación es mucho más interesante. En sistemas unidimensionales las quasipartículas son típicamente inestables dando lugar al llamado líquido de Luttinger. Por otro lado en dos dimensiones los modelos son un tanto más complicados de tratar ya que aparecen divergencias infrarrojas como consecuencia del anidamiento (*nesting*) de la superficie de Fermi y las singularidades de tipo van-Hove. En este capítulo desarrollamos una generalización del método de Pomeranchuk explicado en el capítulo anterior para el estudio de inestabilidades en redes bidimensionales que puede ser utilizado en sistemas con superficies de Fermi de forma arbitraria.

5.1. Inestabilidades de Pomeranchuk en redes bidimensionales.

5.1.1. Desarrollo del método.

La dinámica libre de un sistema de electrones está determinada por la relación de dispersión $\varepsilon(\mathbf{k})$. Es conveniente definir, en términos de esta, la siguiente función

$$g(\mathbf{k}) \equiv \mu - \varepsilon(\mathbf{k}). \quad (5.1)$$

La superficie de Fermi del sistema puede definirse entonces como el conjunto de puntos pertenecientes al espacio recíproco que satisfacen la ecuación

$$g(\mathbf{k}) \equiv 0. \quad (5.2)$$

Una variación de esta función induce una deformación en la superficie de Fermi y la ecuación anterior toma la forma

$$g'(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k}) + \delta g(\mathbf{k}) \equiv 0. \quad (5.3)$$

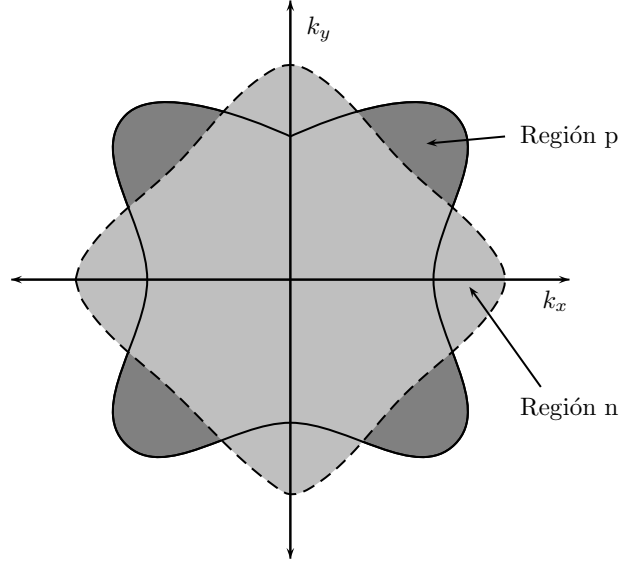


Figura 5.1: Esquema de la deformación de la superficie de Fermi en 2 D. En las regiones p tenemos $\delta n = -1$, mientras que en las regiones n , $\delta n = 1$

Como explicamos en el capítulo anterior, la variación de la energía libre, como una funcional del cambio en la función de distribución de equilibrio, puede ser escrita, a primer orden, como

$$\delta E = \int d^2k \varepsilon(\mathbf{k}) \delta n(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \int d^2k \int d^2k' f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta n(\mathbf{k}) \delta n(\mathbf{k}'), \quad (5.4)$$

donde $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ es la llamada función de interacción y contiene la información de la interacción entre las cuasipartículas.

A $T = 0$ el cambio en la distribución de cuasipartículas es $\delta n = \pm 1$. Esto nos permite escribir

$$\delta n(\mathbf{k}) = H[g'(\mathbf{k})] - H[g(\mathbf{k})], \quad (5.5)$$

donde $H(x)$ es la función escalón definida como $H(x) = 1$ si $x > 0$ y 0 en otro caso.

Podemos usar (5.5) en (5.4) para escribir la energía libre de las cuasipartículas como una funcional de $g(\mathbf{k})$ y $g'(\mathbf{k})$, obteniendo

$$\delta E = \int d^2k \varepsilon(\mathbf{k}) (H[g'(\mathbf{k})] - H[g(\mathbf{k})]) \quad (5.6)$$

$$+ \frac{1}{2} \int d^2k \int d^2k' f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') (H[g'(\mathbf{k})] - H[g(\mathbf{k})]) (H[g'(\mathbf{k}')] - H[g(\mathbf{k}')]) .$$

Donde hemos tenido en cuenta el vínculo impuesto por el teorema de Luttinger [73],

$$\int d^2k \delta n(\mathbf{k}) \equiv 0, \quad (5.7)$$

o en otras palabras la conservación del área de la superficie de Fermi ante una deformación infinitesimal de la misma. Sólo evaluaremos los cambios en la energía libre provocados por deformaciones de la superficie de Fermi que cumplan con dicho vínculo y por lo tanto preserven el número de partículas del sistema. Este vínculo puede ser escrito como una funcional de $g(\mathbf{k})$ y $g'(\mathbf{k})$ de la siguiente manera

$$\int d^2k H[g'(\mathbf{k})] = \int d^2k' H[g(\mathbf{k}')]. \quad (5.8)$$

donde redefinimos las variables de integración en el lado derecho de la igualdad llamándolas k'_i . En dos dimensiones es simple resolver este vínculo. Primero reescribimos $g'(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k}) + \delta g(\mathbf{k})$ en el lado derecho y $k'_i = k'_i(\mathbf{k})$ en el lado izquierdo de la igualdad, obteniendo

$$\int d^2k H[g(\mathbf{k}) + \delta g(\mathbf{k})] = \int d^2k \left| \frac{\partial \mathbf{k}'}{\partial \mathbf{k}} \right| H[g(\mathbf{k}'(\mathbf{k}))]. \quad (5.9)$$

escribiendo $k'^i = k^i + \delta k^i$, la condición anterior queda de la forma

$$\int d^2k H[g(\mathbf{k}) + \delta g(\mathbf{k})] = \int d^2k |1 + \partial_j \delta k^i| H[g(\mathbf{k} + \delta \mathbf{k}(\mathbf{k}))]. \quad (5.10)$$

El conjunto de soluciones puede obtenerse si hacemos la correspondencia

$$\begin{aligned} |1 + \partial_j \delta k^i| &= 1 \\ g(\mathbf{k}) + \delta g(\mathbf{k}) &= g(\mathbf{k} + \delta \mathbf{k}(\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (5.11)$$

La primera línea implica que el cambio de variables que realizamos cambiando k'^i por k^i es un difeomorfismo que preserva el área. Mientras que la segunda línea puede ser interpretada diciendo que la variación $\delta g(\mathbf{k})$ es una traslación de $g(\mathbf{k})$ en una cantidad δk^i . Ahora podemos resolver la ecuación (5.11) en términos de $\delta k_i(\mathbf{k})$ infinitesimal como

$$\delta k^i = (e^{\epsilon^{ij} \partial_i \lambda \partial_j} - 1) k^i, \quad (5.12)$$

$$\delta g = (e^{\epsilon^{ij} \partial_i \lambda \partial_j} - 1) g \quad (5.13)$$

donde λ es una función arbitraria que parametriza la deformación. Si asumimos que la deformación de la superficie es infinitesimal, entonces inmediatamente tenemos que $\delta g(k)$ es pequeña y podemos escribir

$$\delta g \simeq \epsilon^{ij} \partial_j \lambda \partial_i g + \frac{1}{2} \epsilon^{ij} \epsilon^{kl} \partial_i \lambda \partial_j (\partial_k \lambda \partial_l g). \quad (5.14)$$

Ahora que resolvimos el vínculo, debemos volver a la energía libre (5.7) y escribirla en términos de la función sin restricciones λ . Para esto evaluaremos por separado el primer término de (5.7) que representa la contribución de la parte libre y el segundo término que representa la energía de interacción de las cuasipartículas. Escribimos entonces

$$\delta E = L + I. \quad (5.15)$$

Para el primer término tenemos

$$\begin{aligned} L &= \int d^2 k \, \varepsilon(\mathbf{k}) (H[g + \delta g] - H[g]) = \\ &\simeq \int d^2 k \, \varepsilon(\mathbf{k}) \left(\delta[g] \delta g + \frac{1}{2} \delta'[g] \delta g^2 + o(\delta g)^3 \right). \end{aligned}$$

Nótese que en la expresión anterior aparecen derivadas de la distribución δ de Dirac. Esta no es realmente una expansión de distribuciones sino una notación que resulta apropiada para la identidad que puede ser obtenida analíticamente, desarrollando $\varepsilon(k)$ en potencias de la distancia a la superficie de Fermi. Podemos escribir esto en términos de λ como

$$\begin{aligned} L &= \int d^2 k \, \varepsilon(k) (\delta[g] \epsilon_{ij} \partial_i \lambda \partial_j g \\ &+ \frac{1}{2} \left(\delta[g] \epsilon^{ij} \epsilon^{kl} \partial_i \lambda \partial_j (\partial_k \lambda \partial_l g) + \delta'[g] \epsilon^{ij} \epsilon^{kl} \partial_i \lambda \partial_j g \partial_k \lambda \partial_l g \right)). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Para simplificar esta ecuación necesitamos un cambio de variables a un sistema de coordenadas más conveniente. En este caso elegimos un conjunto especial de variables, más adelante veremos que estas son las coordenadas naturales para atacar el problema. Usamos entonces el cambio

$$g = g(k_x, k_y) \quad (5.17)$$

$$s = s(k_x, k_y) \quad (5.18)$$

donde la nueva variable g esta dada por la ecuación (5.3) y aumenta en la dirección ortogonal a la superficie de Fermi sin perturbar. Luego, elegimos la variable s para que sea ortogonal a g . De esta manera, las nuevas variables tendrán que satisfacer

$$\partial_i s \partial_i g = 0. \quad (5.19)$$

Para poder realizar el cambio de variables en el integrando de (5.7) haremos uso de la identidad

$$\begin{aligned} \epsilon^{ij} \partial_i g \partial_j \lambda &= \epsilon^{ij} (\partial_i g \partial_g g + \partial_i s \partial_s g) (\partial_j g \partial_g \lambda + \partial_j s \partial_s \lambda) \\ &= \epsilon^{ij} \partial_i g \partial_j s \partial_s \lambda \equiv J^{-1} \partial_s \lambda, \end{aligned} \quad (5.20)$$

donde usamos el hecho que, según nuestra definición, $\partial_g g = 1$ y $\partial_s g = 0$. En la última línea de la ecuación anterior $J = |\partial(k_x, k_y)/\partial(g, s)|$ es el Jacobiano de la transformación. También necesitaremos usar

$$\epsilon^{ij} \partial_i \lambda \partial_j (J^{-1} \partial_s \lambda) = J^{-1} \partial_g \lambda \partial_s (J^{-1} \partial_s \lambda) - J^{-1} \partial_s \lambda \partial_g (J^{-1} \partial_s \lambda).$$

Reemplazando en (5.17) obtenemos

$$\begin{aligned} L &= -\int dg ds J \varepsilon(g, s) \left(\delta[g] J^{-1} \partial_s \lambda + \frac{1}{2} \left(\delta[g] (J^{-1} \partial_g \lambda \partial_s (J^{-1} \partial_s \lambda) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - J^{-1} \partial_s \lambda \partial_g (J^{-1} \partial_s \lambda)) - \delta'[g] (\partial_s \lambda)^2 J^{-2} \right) \right). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Integrando con respecto a g en el primer término obtenemos una derivada total con respecto a s evaluada sobre la superficie de Fermi, que puede ser integrada en s usando el hecho de que la superficie de Fermi es una curva cerrada. Por otro lado, integrando por partes en el segundo término obtenemos

$$L = \frac{1}{2} \int dg \delta[g] \int ds J^{-1} (\partial_s \varepsilon(g, s) \partial_s \lambda \partial_g \lambda - \partial_g \varepsilon(g, s) (\partial_s \lambda)^2), \quad (5.22)$$

calculando la integral en g y teniendo en cuenta que $\partial_s \varepsilon(g, s)|_{g=0} \equiv 0$ y $\partial_g \varepsilon(g, s)|_{g=0} = \partial_g(\mu - g)|_{g=0} \equiv -1$ obtenemos finalmente

$$L = \frac{1}{2} \int ds [J^{-1} (\partial_s \lambda)^2]_{g=0}. \quad (5.23)$$

El cálculo para I es totalmente análogo y da como resultado

$$I = \frac{1}{2} \int ds \int ds' [f(g, s; g', s') (\partial_s \lambda)(\partial_{s'} \lambda)]_{g=g'=0}. \quad (5.24)$$

Sumando las dos contribuciones finalmente obtenemos para la energía libre

$$\delta E = \frac{1}{2} \int ds \int ds' \left(J^{-1}(0, s) \delta(s - s') + f(0, s; 0, s') \right) \partial_s \lambda(0, s) \partial_{s'} \lambda(0, s'). \quad (5.25)$$

Como las funciones $\lambda(0, s)$ son arbitrarias, llamaremos $\psi(s) = \partial_s \lambda(g, s)|_{g=0}$ y supondremos por el momento que $\psi(s) \in L_2[0, S]$.

Como el signo de δE en la ecuación (5.25) determina la estabilidad del líquido ante una deformación de la superficie de Fermi, podemos expresar la condición de estabilidad como

$$\delta E = \int ds' \int ds \psi(s') \frac{1}{2} \left(J^{-1}(s) \delta(s - s') + f(s, s') \right) \psi(s) > 0, \quad (5.26)$$

donde hemos definido

$$f(s, s') = f(g, s; g', s')|_{g=g'=0} \quad (5.27)$$

$$J^{-1}(s) = J^{-1}(g, s)|_{g=0}. \quad (5.28)$$

Es importante notar que la condición de estabilidad tiene dos términos. Uno que contiene información acerca de la forma de la superficie de Fermi sin perturbar a través del Jacobiano $J^{-1}(s)$, mientras que el otro término contiene la forma específica de la interacción evaluada sobre la superficie de Fermi $f(s, s')$. Hay entonces una clara competencia entre la función de interacción y la geometría de la superficie de Fermi sin perturbar. Más adelante veremos que esta competencia hace que no solo importe la magnitud de la interacción entre las cuasipartículas sino que la simetría de la función de interacción juega un papel importante en la estabilidad del sistema.

Podemos ver que δE es una forma bilineal, actuando sobre funciones reales $\psi(s)$ que parametrizan las deformaciones de la superficie de Fermi

$$\delta E = \langle \psi, \psi \rangle. \quad (5.29)$$

Luego, la condición de estabilidad es equivalente a preguntarse cuando esta forma bilineal es definida positiva para cualquier deformación

$$\forall \psi : \langle \psi, \psi \rangle > 0. \quad (5.30)$$

En consecuencia, la forma adecuada de diagnosticar inestabilidades del sistema es diagonalizar esta forma bilineal y buscar autovalores negativos. Para esto, podemos desarrollar las funciones $\psi(s)$ en alguna base de funciones ortogonales $\{\xi_i(s)\}$

$$\psi(s) = \sum_i a_i \xi_i(s). \quad (5.31)$$

De esta manera podemos escribir

$$\delta E = \sum_{i_1, i_2} a_{i_1} a_{i_2} \langle \xi_{i_1}, \xi_{i_2} \rangle, \quad (5.32)$$

con

$$\langle \xi_{i_1}, \xi_{i_2} \rangle = \int ds' \int ds \xi_{i_1}(s) \frac{1}{2} \left(f(s, s') + J^{-1}(s) \delta(s-s') \right) \xi_{i_2}(s'), \quad (5.33)$$

donde $\langle \xi_{i_1}, \xi_{i_2} \rangle$ puede ser tomado como un producto pseudo escalar, el cual es lineal y simétrico pero, en general, no es definido positivo. Solo en el caso libre $f(s, s') \equiv 0$ la positividad del producto esta asegurada. Si las funciones de la base $\{\xi_i(s)\}$ son elegidas de forma que sean ortogonales con respecto a este producto, entonces la funcional (5.26) estará dada por

$$\delta E = \sum_i a_i^2 \chi_i^\mu, \quad (5.34)$$

donde $\chi_i^\mu = \langle \xi_i, \xi_i \rangle$ es la pseudonorma cuadrada de las funciones ortogonales y pueden ser tomadas como los parámetros que determinan la estabilidad del sistema. Un valor negativo de χ_i^μ indica una inestabilidad correspondiente a lo que llamaremos de ahora en más el canal i -esimo.

Realizaremos la diagonalización de la forma bilineal eligiendo una base sobre $L_2[0, S]$ como un dado conjunto de funciones $\{\psi_i\}$ y luego usaremos un proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt para transformarla en una base ortogonal $\{\xi_i\}$ con respecto a el pseudo producto interno antes definido. Con esta nueva base evaluaremos los χ_i^μ y escribiremos la condición de estabilidad del sistema como

$$\forall i : \chi_i^\mu > 0. \quad (5.35)$$

Si alguno de ellos es negativo, la superficie de Fermi es inestable. Es importante notar que este formalismo sólo permite predecir inestabilidades del líquido, pero es insuficiente para determinar la estabilidad del mismo.

Antes de continuar haremos un repaso de los puntos importantes del método. Esto nos servirá para identificar cada uno de los pasos en las siguientes secciones, en las que haremos algunas mejoras y modificaciones.

Paso 1: Obtener la relación de dispersión y la función de interacción de nuestro modelo.

Paso 2: Cambiar variables de acuerdo a (5.18). La variable g esta completamente definida por la relación de dispersión de acuerdo a (5.3). La elección de s es arbitraria, a excepción del vínculo impuesto por $\partial_i s \partial_i g = 0$

Paso 3: Escribir la forma bilineal para E como en (5.26)

Paso 4: Seleccionar una base de funciones $\{\psi_i\}$ de $L_s[0, S]$

Paso 5: Aplicar un proceso de ortogonalización de tipo Gram-Schmidt, verificando en cada paso si se cumple la condición $\chi_i^\mu = \langle \xi_i, \xi_i \rangle > 0$

Paso 6: Si para un dado canal i , encontramos que $\chi_i^\mu < 0$, diremos que tenemos una inestabilidad en el canal i -esimo.

5.1.2. Una alternativa al cambio de variables.

En el formalismo presentado hasta ahora tuvimos que introducir un cambio de variables conveniente para poder resolver el vínculo impuesto por el teorema de Luttinger (5.7). Este cambio se basa en definir convenientemente la variable s de forma tal de obtener un par de variables ortogonales que aumenten de forma transversal y longitudinal a la superficie de Fermi libre. En algunos casos el proceso de hallar este cambio de variables puede ser muy complicado matemáticamente. Por esa razón, en esta sección presentamos un procedimiento alternativo para calcular el Jacobiano evaluado sobre la superficie de Fermi $J(s)$.

Comenzamos definiendo una parametrización de la superficie de Fermi

$$\mathbf{k}(t) = (k_x(t), k_y(t)) , \quad -\pi < t < \pi , \quad (5.36)$$

en términos de un parámetro arbitrario t . En otras palabras, dada la función $g(\mathbf{k})$ definida en (5.18), elegimos $\mathbf{k}(t)$ tal que $\forall t : g(\mathbf{k}(t)) = 0$. En términos de tal parametrización podemos descomponer la delta de Dirac de la siguiente manera

$$\delta(g(\mathbf{k})) = \int dt \frac{|\dot{\mathbf{k}}(t)|}{|\nabla g(\mathbf{k}(t))|} \delta^{(2)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}(t)) , \quad (5.37)$$

(una prueba de esta formula se presenta en el apéndice).

La integral I de una función arbitraria $F(g, s)$ en la superficie de Fermi puede ser escrita como

$$I = \int ds F(g, s)|_{g=0} , \quad (5.38)$$

o en otras palabras

$$I = \int ds dg F(g, s) \delta(g) . \quad (5.39)$$

Cambiando variables a \mathbf{k}

$$I = \int d^2\mathbf{k} F(s(\mathbf{k}), g(\mathbf{k})) J^{-1}(s(\mathbf{k}), g(\mathbf{k})) \delta(g(\mathbf{k})) , \quad (5.40)$$

y reemplazando (5.37) obtenemos

$$I = \int d^2\mathbf{k} F(s(\mathbf{k}), g(\mathbf{k})) J^{-1}(s(\mathbf{k}), g(\mathbf{k})) \times \\ \times \int dt \frac{|\dot{\mathbf{k}}(t)|}{|\nabla g(\mathbf{k}(t))|} \delta^{(2)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}(t)), \quad (5.41)$$

o, intercambiando el orden de integración y realizando las integrales en \mathbf{k}

$$I = \int dt F(s(\mathbf{k}(t)), g(\mathbf{k}(t))) J^{-1}(s(\mathbf{k}(t)), g(\mathbf{k}(t))) \frac{|\dot{\mathbf{k}}(t)|}{|\nabla g(\mathbf{k}(t))|}. \quad (5.42)$$

Ahora, usando el hecho que $g(\mathbf{k}(t)) = 0$ y definiendo el parámetro t de manera que $s(\mathbf{k}(t)) = t$, tenemos

$$I = \int ds F(s, g)|_{g=0} J^{-1}(s) \frac{|\dot{\mathbf{k}}(s)|}{|\nabla g(\mathbf{k}(s))|}, \quad (5.43)$$

que para que sea compatible con (5.38) implica que

$$J^{-1}(s) = \frac{|\nabla g(\mathbf{k}(s))|}{|\dot{\mathbf{k}}(s)|}. \quad (5.44)$$

Luego con todo lo anterior, podemos reemplazar el paso 2 en el procedimiento general por una nueva versión del mismo, que podemos llamar paso 2'

Paso 2' Con la ayuda de la relación de dispersión $\varepsilon(\mathbf{k})$ obtenida en el paso 1, parametrizar la superficie de Fermi y obtener el Jacobiano evaluado en la superficie de Fermi usando la ecuación (5.44).

Entonces, aún cuando puede ser muy difícil resolver la ecuación diferencial en derivadas parciales (5.19) para encontrar explícitamente el Jacobiano, todo lo que necesitamos es su valor sobre la superficie de Fermi y éste puede ser fácilmente obtenido mediante una parametrización de la misma.

Antes de generalizar el método a casos más complejos, como el caso de modelos de varias bandas o temperatura finita, presentaremos algunas aplicaciones del mismo a modelos simples sobre redes bidimensionales.

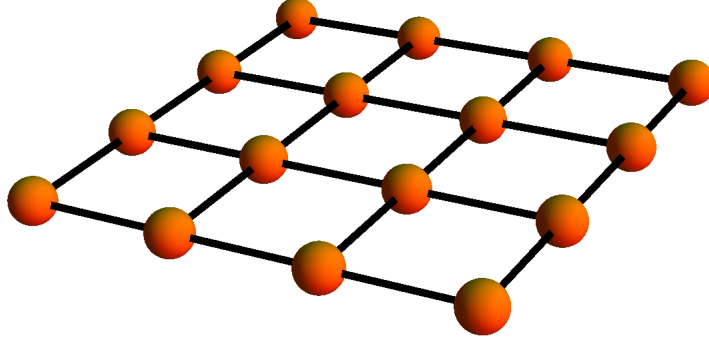


Figura 5.2: Red cuadrada.

5.2. Ejemplo: inestabilidades en la red cuadrada.

Consideremos un modelo de fermiones libres en 2 dimensiones, en este caso particular sobre la red cuadrada. El hamiltoniano puede ser escrito como

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) \hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}} \quad (5.45)$$

donde la relación de dispersión $\varepsilon(\mathbf{k})$ esta dada por

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y). \quad (5.46)$$

Como en este caso solo tenemos en cuenta la posibilidad de hopping a primeros vecinos, la superficie de Fermi está definida por

$$g(\mathbf{k}) = \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) = \mu + 2t(\cos k_x + \cos k_y) = 0, \quad (5.47)$$

donde μ representa el potencial químico del sistema.

Nótese que $g > 0$ dentro del área limitada por la superficie de Fermi y negativo fuera de ella.

Introducimos ahora el cambio de variables definido en (5.18) Y obtenemos

$$g(k_x, k_y) = \mu + 2t(\cos k_x + \cos k_y) \quad (5.48)$$

$$s(k_x, k_y) = \arctan \left(\frac{\tan(k_y/2)}{\tan(k_x/2)} \right) \quad (5.49)$$

Es inmediato comprobar que g y s son variables ortogonales. Usando la siguiente notación

$$\begin{aligned}\alpha &= \cos k_x \\ \beta &= \cos k_y\end{aligned}\tag{5.50}$$

podemos escribir

$$\begin{aligned}g &= \mu + 2t(\alpha + \beta) \\ \tan^2(s) &= \left(\frac{1-\beta}{1+\beta}\right) \left(\frac{1+\alpha}{1-\alpha}\right)\end{aligned}\tag{5.51}$$

esto nos permite simplificar algunos cálculos y obtener la siguiente expresión para el Jacobiano

$$J = t \left(\frac{\alpha\beta - 1}{\alpha^2 + \beta^2 - 2} \right)\tag{5.52}$$

Escribiendo α y β en función de g y s obtenemos para el Jacobiano evaluado en $g = 0$ la siguiente expresión

$$J[g = 0, s] = \frac{1}{2t\sqrt{1 - \beta(\mu) \cos^2(2s)}}$$

donde $\beta(\mu) = 1 - (\frac{\mu}{4t})^2$. Los límites de la variable s pueden ser tomados como $-\pi \leq s \leq \pi$.

El Jacobiano depende de s a través de la función $\cos^2(2s)$ por lo que es conveniente desarrollarlo en serie de $\sin(ns)$ y $\cos(ns)$. Fácilmente puede verificarse que solo los coeficientes de $\cos(4ns)$ son distintos de cero, por lo que el desarrollo queda

$$J^{-1}(s) = \sum_n j_n^\mu \cos(4ns).\tag{5.53}$$

Los coeficientes de este desarrollo pueden ser calculados analíticamente, aunque sus expresiones resultan bastante complicadas por depender de funciones elípticas.

En lo que sigue analizamos algunos ejemplos de aplicación, para las posibles inestabilidades en este modelo de fermiones sobre la red cuadrada. En particular, estamos interesados en funciones de interacción de la forma [46].

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \text{Cte} \times d(\mathbf{k})d(\mathbf{k}')\tag{5.54}$$

y analizaremos los casos con

$$\begin{aligned}d(\mathbf{k}) &= 1 && \text{(onda } s) \\ d(\mathbf{k}) &= (\cos k_x + \cos k_y) && \text{(onda } s \text{ extendida)} \\ d(\mathbf{k}) &= (\cos k_x - \cos k_y) && \text{(onda } d \text{ tipo } d_{x^2-y^2})\end{aligned}\tag{5.55}$$

5.2.1. Inestabilidad del tipo onda s .

Primero consideraremos una función de interacción constante correspondiente a tomar $d(\mathbf{k}) = 1$ [46]. En este caso

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = U_0. \quad (5.56)$$

Donde U_0 mide la intensidad de la interacción. Puede verse fácilmente que esta interacción es equivalente a usar una aproximación de campo medio al orden más bajo en un desarrollo perturbativo para la interacción en el sitio del modelo de Hubbard. [74, 75]

Usando el producto definido en la ecuación (5.33) podemos calcular exáctamente los primeros parámetros de inestabilidad.

$$\begin{aligned} \chi_0(\mu) &= 2\pi(U_0\pi + j_0^\mu) \\ \chi_{1,2}(\mu) &= \pi j_0^\mu \\ \chi_3(\mu) &= \pi(j_0^\mu - \frac{1}{2}j_1^\mu) \\ \chi_4(\mu) &= \pi(j_0^\mu + \frac{1}{2}j_1^\mu) \\ \chi_{5,6}(\mu) &= -\frac{\pi j_1^{\mu 2}}{2 j_0^\mu} + j_0^\mu \left(\pi + \frac{\pi}{4} \left(\frac{j_1^\mu}{j_0^\mu} \right)^2 \right) \\ \chi_7(\mu) &= 2\pi(j_0^\mu - \frac{1}{2}j_2^\mu) \\ \chi_8(\mu) &= \pi(j_0^\mu - \frac{1}{2}j_2^\mu) \\ \chi_{16}(\mu) &= \frac{\pi^2 U_0 j_1^{\mu 2}}{2(\pi U_0 + j_0^\mu)^2} - \frac{\pi j_1^{\mu 2}}{\pi U_0 + j_0^\mu} \\ &\quad + j_0^\mu \left(\pi + \frac{\pi j_1^{\mu 2}}{2(\pi U_0 + j_0^\mu)^2} \right) + \frac{\pi j_2^\mu}{2}. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Los parámetros correspondientes a los primeros canales como función de μ para diferentes valores de U_0 , son presentados en la Figura 5.3. Como esperamos, en el caso libre $U_0 = 0$, todos los χ_n^μ son positivos. Cuando aumentamos la interacción, sólo las funciones χ_0^μ , χ_8^μ y χ_{16}^μ cambian.

Con estos primeros canales podemos dibujar el diagrama de fases cualitativo que se muestra en la figura 5.4 donde pueden apreciarse las primeras zonas de inestabilidad y se puede construir un diagrama fases global.

Es importante notar que, cuando se aumenta la interacción, los primeros modos que se vuelven inestables corresponden a los modos altos. Este comportamiento se mantiene para los siguientes modos de manera que podemos asumir que habrá inestabilidad a medio llenado para interacciones arbitrariamente pequeñas, pero estas inestabilidades serán producidas en los modos mas altos. Siguiendo este comportamiento vemos que las inestabilidades para grandes valores de i se producen muy cerca de $\mu = 0$.

El comportamiento para las inestabilidades del tipo onda s extendida con factores de forma del tipo $d(\mathbf{k}) = (\cos k_x + \cos k_y) = \alpha + \beta$ puede ser estudiado fácilmente escribiendo $d(\mathbf{k})$ en términos de g y s , usando las soluciones de (5.51) y evaluando en $g = 0$ tenemos $d(s) = \frac{-\mu}{2t}$ y la función de interacción queda en la forma

$$f(s, s') = U_0 \left(\frac{\mu}{2t} \right)^2. \quad (5.58)$$

Aquí $f(s, s')$ es independiente de las variables s y s' pero ahora depende del potencial químico μ . Los parámetros (5.57) son todavía válidos si cambiamos U_0 by $U_0 \left(\frac{\mu}{2t} \right)^2$.

5.2.2. Inestabilidad de Pomeranchuk del tipo onda d

En esta sección investigaremos las deformaciones de la superficie de Fermi de tipo onda d (dFSD)[76] en el llamado canal de carga. La interacción de tipo *forward scattering* que genera una deformación espontánea del tipo onda d tiene la forma [46]

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -G d(\mathbf{k})d(\mathbf{k}') \quad (5.59)$$

donde $G > 0$ es la constante de acoplamiento y factores de forma dados por $d(\mathbf{k}) = (\cos k_x - \cos k_y)$. La expresión efectiva (5.59) que utilizamos para esta interacción fue presentada por Metzner et al [46] usando Grupo de Renormalización. Usando la notación (5.50) la interacción puede escribirse de la siguiente manera

$$f(s, s') = -G (\alpha - \beta)(\alpha' - \beta') \quad (5.60)$$

y usando la solución de la ecuación (5.51) tenemos que

$$d(s) = \frac{2}{\cos(2s)} \left(\frac{J^{-1}(s)}{2} - 1 \right) \quad (5.61)$$

El Jacobiano contenido en esta expresión tiene un origen totalmente independiente del tratamiento desarrollado en las secciones anteriores.

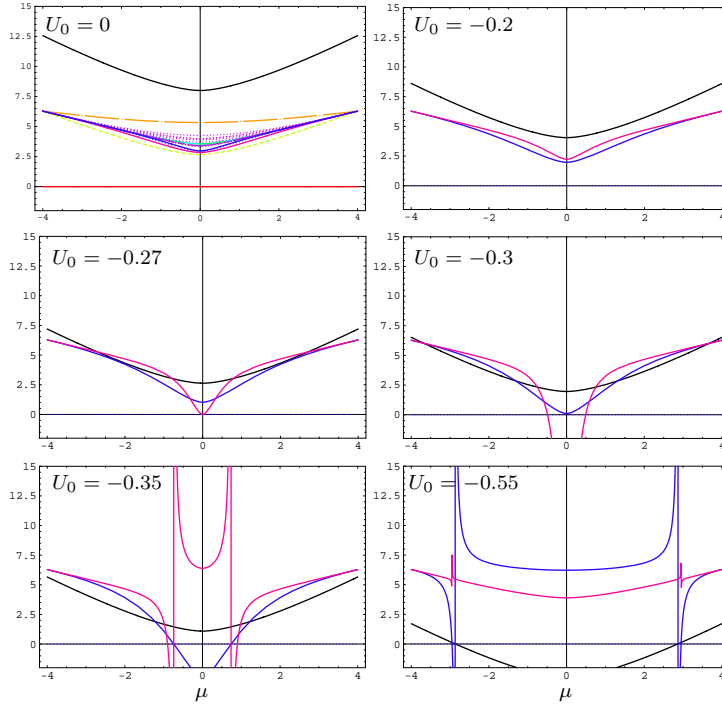


Figura 5.3: Parámetros de inestabilidad. Para $U = 0$ mostramos los primeros 10 parámetros $\chi(\mu)$. Para otros valores de la interacción solo se muestran los parámetros correspondientes a los tres modos más bajos que presentan inestabilidad. Nótese que cuando se incrementa el valor de U_0 , la ruptura en la descripción del líquido de Fermi se presenta primero cerca de medio llenado.

El factor de forma $d(s)$ puede ser desarrollado en serie de la siguiente manera

$$d(s) = \sum_{n=0}^{\infty} d_n \cos((4n + 2)s) \quad (5.62)$$

Con lo anterior realizamos los pasos definidos en el desarrollo del método para encontrar la base ortogonal donde δE es diagonal. Los parámetros χ_i^μ dependen de los coeficientes del desarrollo de $J(s)$ y $d(s)$. Los primeros parámetros que muestran inestabilidad del sistema son

$$\chi_0 = -2G\pi^2 d_0^2 + \pi j_0 + \frac{\pi j_1}{2} \quad (5.63)$$

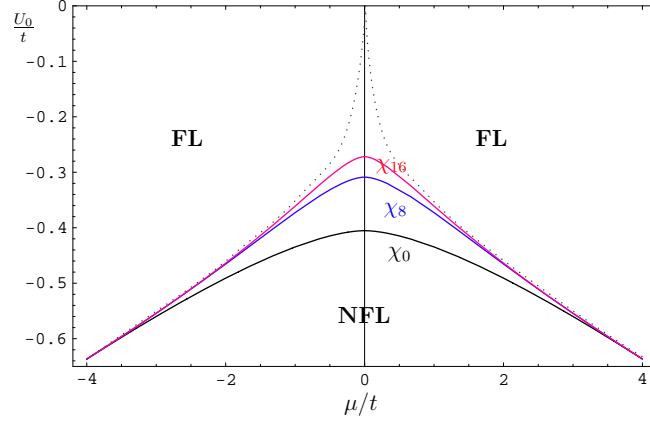


Figura 5.4: Diagrama de fases correspondiente a la función de interacción $f(s, s') = U_0$, con las regiones de inestabilidad para los primeros tres canales. Los modos más altos son inestables cerca de medio llenado para valores pequeños de la interacción.

$$\begin{aligned}
 \chi_8 = & \frac{1}{2g\pi 4d_0^2 - 2(2j_0 + j_1)} \left(\pi (-4j_0^2 + j_1^2 + 2j_1j_2 \right. \\
 & + j_2^2 - j_1j_3 - 2j_0(j_1 + j_3) + g\pi (2d_1^2(2j_0 + j_1) \\
 & \left. - 8d_0d_1(j_1 + j_2) + 4d_0^2(2j_0 + j_3))) \right) \quad (5.64)
 \end{aligned}$$

Siguiendo el procedimiento explicado en las secciones anteriores podemos determinar el diagrama de fases para este tipo de interacción. Las tres primeras regiones inestables son mostradas en la figura 5.5. La línea de trazos corresponde al valor crítico de la interacción encontrada en [64] usando una aproximación de campo medio. Nótese que los modos más bajos cubren la mayor parte del diagrama de fases de la figura 5.5, esto es consistente con los resultados presentados en [64, 67].

A diferencia de los tratamientos de campo medio utilizadas hasta ahora en la literatura, con el presente formalismo es posible identificar la región del espacio de parámetros donde cada uno de los modos presenta una inestabilidad.

Hasta ahora hemos presentado el método para detectar inestabilidades en su forma más simple y su aplicación a un modelo de fermiones sobre la red cuadrada. Antes de generalizar este método para estudiar casos más complejos presentamos una aplicación del mismo para estudiar fermiones sobre la red hexagonal, donde debemos usar la forma alternativa al cambio de variables (Paso 2') presentada en la sección 5.1.2.

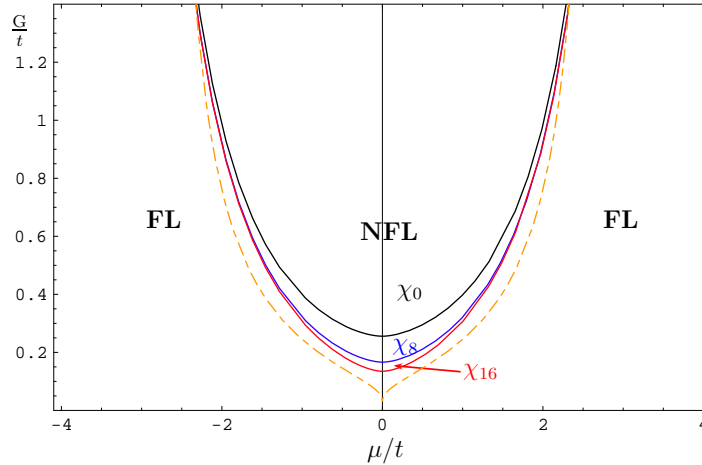


Figura 5.5: Diagrama de fases para una interacción de tipo onda d. Se muestran los primeros tres canales inestables. La línea de trazos representa el valor crítico del parámetro de interacción F_2N_0 correspondiente a la referencia [64].

5.3. Aplicación: inestabilidades en una placa de grafeno.

En esta sección presentamos un análisis de las posibles inestabilidades del que presenta un modelo de fermiones sobre la red hexagonal. Este modelo puede ser visto como una forma simplificada de describir el comportamiento de los portadores de carga en grafeno. Primero presentaremos una breve introducción a la física de una placa de Grafeno y luego nos concentramos en describir los resultados obtenidos utilizando el método que presentamos en las secciones anteriores.

5.3.1. Grafeno: conceptos básicos

El grafeno está compuesto íntegramente por átomos de carbono en un arreglo hexagonal como el que está esquematizado en la figura 5.6. La estructura cristalina no es una red de Bravais pero puede ser vista como una red triangular con dos átomos en cada celda unidad, dando origen a dos subredes que llamaremos A y B. Los vectores de la base de la red real pueden ser escritos como

$$a_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}) \quad a_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}) \quad (5.65)$$

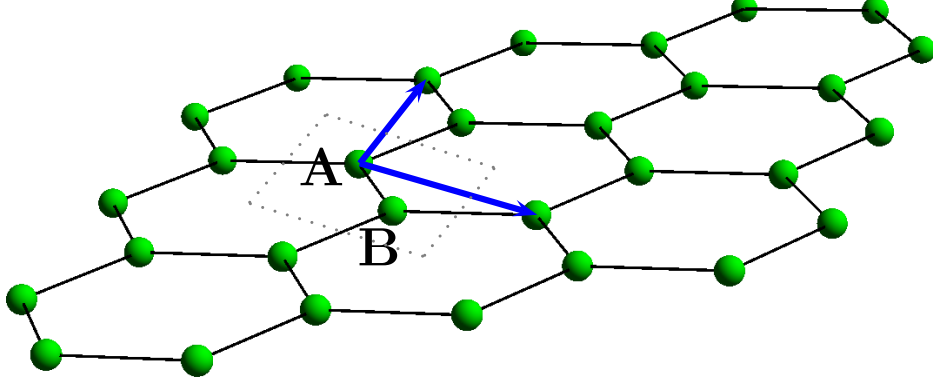


Figura 5.6: Red hexagonal. La línea de puntos indica la celda unidad seleccionada. Dentro de ella hay dos átomos que definen las dos subredes (A y B). También se muestran esquemáticamente los vectores de la red real.

donde $a \approx 1,42 \text{ \AA}$ es la distancia entre átomos de carbono. Los vectores de la red recíproca están dados por

$$b_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \quad b_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \quad (5.66)$$

Dentro de la zona de Brillouin existen dos puntos de particular importancia para describir la física de bajas energías que llamaremos K y K' . La posiciones de estos puntos en el espacio de momentos están dadas por

$$K = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \quad K' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right). \quad (5.67)$$

Un modelo simple que es extensamente usado para estudiar las propiedades electrónicas en grafeno es el modelo de Hubbard de una banda. El hamiltoniano correspondiente puede ser separado en dos partes

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_U. \quad (5.68)$$

El primer término es el hamiltoniano de tight-binding para los electrones, considerando que los electrones pueden saltar sólo entre sitios que son vecinos más próximos. Tiene la forma

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\hat{a}_{\sigma i}^\dagger \hat{b}_{\sigma j} + \text{H.c.} \right), \quad (5.69)$$

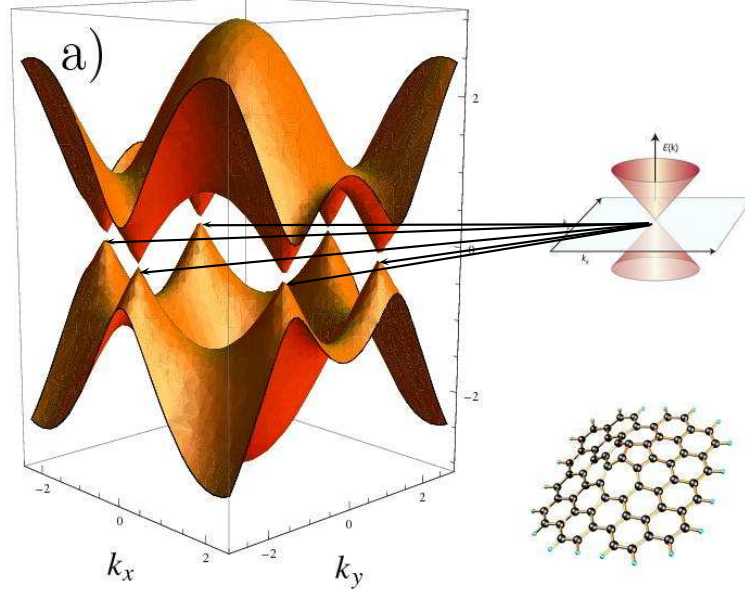


Figura 5.7: Relación de dispersión para el hamiltoniano de tight binding. a bajas energías la relación de dispersión es lineal con el momento.

donde $\hat{a}_{\sigma i}, \hat{b}_{\sigma i}$ son los operadores de destrucción relacionados a cada uno de los 2 sitios de la celda unidad i -ésima y t es la integral de hopping $t \sim 2,7$ eV. El hamiltoniano (5.69) es cuadrático y por lo tanto puede ser diagonalizado. El espectro de autovalores de este hamiltoniano posee simetría agujero-partícula y por lo tanto es simétrico con respecto al cero de energía, como puede verse en la figura 5.8-a. Las bandas de energía obtenidas al diagonalizar este hamiltoniano pueden escribirse en la forma

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)}. \quad (5.70)$$

El hamiltoniano de tight-binding ha mostrado ser un modelo que describe correctamente la estructura electrónica del grafeno. Sin embargo, tenemos que introducir en el modelo las interacciones entre electrones si queremos describir el origen del magnetismo en el mismo. En el modelo de Hubbard estas interacciones son introducidas mediante la interacción repulsiva entre electrones que ocupan el mismo sitio.

$$H_U = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (5.71)$$

donde $n_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$, con $\hat{c} = \hat{a}(\hat{b})$ si el sitio i pertenece a la subred A(B) respectivamente. El parámetro U define la magnitud de la interacción Coulombiana en el sitio. Este modelo considera sólo interacciones de corto alcance, de forma que dos electrones interactúan solo si ocupan el orbital p_z del mismo átomo. Aunque este modelo puede parecer muy simple, no es para nada trivial desde el punto de vista computacional.

Este modelo puede ser extendido si se quiere tener en cuenta interacciones de mayor alcance. Por ejemplo, podemos incluir interacciones entre electrones que están en sitios vecinos con términos de la forma

$$H_V = V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j. \quad (5.72)$$

5.3.2. Hamiltoniano libre: aproximación de tight-binding

Uno de los grandes logros de aplicar la teoría cuántica a los metales es poder entender que, aunque algunos metales pueden ser estructuralmente muy diferentes entre si, la física de bajas energías puede ser esencialmente idéntica y depender solo de unos pocos parámetros. Esta es una de las bases de la teoría de Landau del líquido de Fermi.

En sistemas donde la física de bajas energías es invariante ante transformaciones de Galileo, el parámetro más relevante es la masa efectiva de los portadores, la cual puede usarse para definir la escala de energías del sistema y calcular varias cantidades físicas relevantes como calor específico, susceptibilidad magnética, compresibilidad, etc. La diferencia básica entre el grafeno y otros materiales es que la física de bajas energías en el grafeno no es invariante de Galileo sino que posee una invarianza de Lorentz, como ocurre en física de altas energías, con partículas de Dirac como excitaciones elementales. En este caso, el proceso de renormalización es diferente al de los otros materiales, ya que en ausencia de masa (lo que en grafeno indica la ausencia de gap en el espectro) todas las cantidades físicas dependen de la velocidad efectiva, la cual juega un papel análogo al de la velocidad de la luz en mecánica cuántica relativista. Sin embargo, a diferencia de los verdaderos sistemas relativistas, las cuasipartículas de Dirac en grafeno se propagan a una velocidad que es mucho más pequeña que la velocidad de la luz con la cual se propagan las interacciones coulombianas. Entonces el campo de Coulomb puede ser considerado como instantáneo en primera aproximación, haciendo que la electrodinámica del grafeno sea una mezcla entre un problema relativista y uno no relativista. Claramente esta situación inusual requiere una reevaluación y un estudio de la estabilidad de la descripción de la teoría del líquido de Fermi para este material.

El hamiltoniano diagonalizado puede ser escrito en términos de los números de ocupación de los operadores correspondientes a la red rotada, definidos por:

$$n_{\sigma\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{1}{2} \left(b_{\sigma\mathbf{k}}^{\dagger} \pm \frac{h^*(\mathbf{k})}{\varepsilon(\mathbf{k})} a_{\sigma\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \left(b_{\sigma\mathbf{k}} \pm \frac{h(\mathbf{k})}{\varepsilon(\mathbf{k})} a_{\sigma\mathbf{k}} \right), \quad (5.73)$$

donde la función $h(\mathbf{k})$ satisface $|h(\mathbf{k})|^2 = \varepsilon(\mathbf{k})^2$ y está dada por

$$h(\mathbf{k}) = t \left(\cos(k_x) - 2i \sin(k_x - 1) + 2 \cos^2\left(\frac{k_x}{2}\right) + \right. \\ \left. + 4i \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right) \sin\left(\frac{k_x}{2}\right) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right) \cos(k_x) \right). \quad (5.74)$$

De esta manera tenemos

$$H_0 = \int d^2\mathbf{k} \sum_{\sigma} (\varepsilon_{\sigma}^{+}(\mathbf{k}) n_{\sigma\mathbf{k}}^{+} + \varepsilon_{\sigma}^{-}(\mathbf{k}) n_{\sigma\mathbf{k}}^{-}), \quad (5.75)$$

donde definimos las bandas de energía $\varepsilon_{\sigma}^{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\varepsilon(\mathbf{k})$, siendo

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = t \sqrt{3 + 4 \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) + 2 \cos\left(\sqrt{3}k_y a\right)}, \quad (5.76)$$

La estructura de bandas es la que se muestra en la figura 5.8a. La densidad de estados es presentada en la Figura 5.8b donde puede verse que una singularidad de van-Hove en $\mu = \pm t$. Las superficies de Fermi para distintos valores del llenado se muestran en la figura 5.8c.

El cambio en la energía producido por una pequeña variación en los números de ocupación en (5.75) a un valor finito del potencial químico es

$$E_0 = \int d^2\mathbf{k} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) (\delta n_{\mathbf{k}}^{+} - \delta n_{\mathbf{k}}^{-}), \quad (5.77)$$

donde usamos el hecho que la relación de dispersión no contiene al índice de espín para escribir la expresión resultante en términos de las variaciones $n_{\mathbf{k}}^{\pm} = n_{\uparrow\mathbf{k}}^{\pm} + n_{\downarrow\mathbf{k}}^{\pm}$.

Para fijar ideas consideremos sólo variaciones de los números de ocupación en la banda superior, *i.e.* $\delta n_k^{-} = 0$, $\delta n_k^{+} \neq 0$. Podemos hacer esto sin perder generalidad

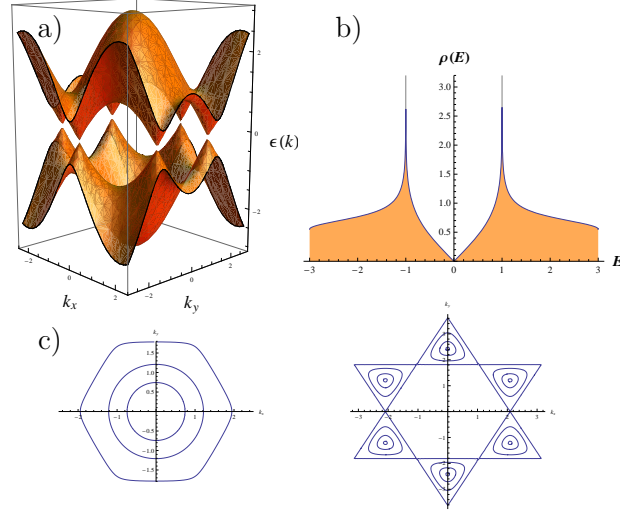


Figura 5.8: a) Espectro de energía obtenido mediante la aproximación de tight-binding. b) Densidad de estados por celda en función de la energía. Todas las cantidades están dadas en unidades de t . c) Izquierda: Superficies de Fermi para $t < \mu < 3t$. Derecha: Superficies de Fermi para $0 < \mu < t$

gracias a la simetría del sistema ante intercambio de las bandas superior e inferior. Tenemos entonces

$$E_0 = \int d^2\mathbf{k} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) \delta n_{\mathbf{k}}^+ . \quad (5.78)$$

Esto tiene la misma forma que el término libre de (5.4), dándonos uno de los ingredientes necesarios para nuestro Paso 1 definido anteriormente,

5.3.3. Efecto de las interacciones en grafeno

Para completar con todos los ingredientes necesarios para el Paso 1, necesitamos conocer la función de interacción de las cuasipartículas $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. En las siguientes líneas describiremos brevemente como derivar una expresión a primer orden en un desarrollo perturbativo [47, 42]. Aunque nuestro método que desarrollamos es totalmente independiente de la forma de obtener la función de interacción, esto nos ayudará definir la notación que usaremos luego.

Consideremos una interacción de tipo densidad-densidad, ya sea en el sitio (U) o entre primeros vecinos (V), de manera que nuestro término de interacción en el

hamiltoniano tenga la forma

$$H_{int} = \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \quad (5.79)$$

donde $\langle i, j \rangle$ indica que la suma debe realizarse sobre pares de sitios que son primeros vecinos y el operador densidad $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ hace referencia a los operadores originales sobre la red real a_i, b_i .

Podemos calcular la energía en una aproximación de campo medio y el resultado puede ser escrito en términos los valores de campo medio de los números de ocupación de los operadores de la red rotados que diagonalizan el hamiltoniano H_0 , esto es

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{MF} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \alpha, \beta} \left(n_{\mathbf{k}\alpha}^- n_{\mathbf{k}'\beta}^- + n_{\mathbf{k}\alpha}^+ n_{\mathbf{k}'\beta}^+ + n_{\mathbf{k}\alpha}^+ n_{\mathbf{k}'\beta}^- + n_{\mathbf{k}\alpha}^- n_{\mathbf{k}'\beta}^+ \right) \times \\ &\quad \times \left(U \sigma_{\alpha\beta}^1 + \frac{V}{2} (F(0)(\sigma_{\alpha\beta}^0 + \sigma_{\alpha\beta}^1)) \right) - \\ &\quad - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \alpha, \beta} \left(n_{\mathbf{k}\alpha}^- n_{\mathbf{k}'\beta}^- + n_{\mathbf{k}\alpha}^+ n_{\mathbf{k}'\beta}^+ - n_{\mathbf{k}\alpha}^+ n_{\mathbf{k}'\beta}^- - n_{\mathbf{k}\alpha}^- n_{\mathbf{k}'\beta}^+ \right) \times \\ &\quad \times \frac{V}{2} \left(\sigma_{\alpha\beta}^0 F(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{\varepsilon(\mathbf{k})\varepsilon(\mathbf{k}')}{h^*(\mathbf{k})h(\mathbf{k}')} \right), \end{aligned} \quad (5.80)$$

donde N es el número de sitios y

$$F(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_\alpha}, \quad \text{con} \quad \begin{cases} \delta_1 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \\ \delta_2 = a\left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \\ \delta_3 = a(-1, 0). \end{cases} \quad (5.81)$$

Nos concentraremos por ahora en variaciones de los números de ocupación que mantengan constante la magnetización total. En otras palabras asumimos que $\delta n_{\uparrow\mathbf{k}}^+ = \delta n_{\downarrow\mathbf{k}}^+$. De la misma manera que la parte libre, la interacción entre las partículas puede ser escrita en términos de la variación total $n_{\mathbf{k}}^+ = n_{\uparrow\mathbf{k}}^+ + n_{\downarrow\mathbf{k}}^+$ como

$$E_{int} = \int d\mathbf{k} d\mathbf{k}' f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta n_{\mathbf{k}}^+ \delta n_{\mathbf{k}'}^+. \quad (5.82)$$

La función $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ se obtiene entonces del valor medio de la energía

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv \frac{\delta^{(2)} \langle H \rangle_{MF}}{\delta n_{\mathbf{k}}^+ \delta n_{\mathbf{k}'}^+} =$$

$$= \frac{1}{2(2\pi)^2} \left(U + \frac{V}{2} \left(F(0) - F(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \frac{\varepsilon(\mathbf{k})\varepsilon(\mathbf{k}')}{h^*(\mathbf{k})h(\mathbf{k}')} \right) \right). \quad (5.83)$$

Hemos completado hasta aquí el paso 1, obteniendo la relación de dispersión (5.76) y la función de interacción (5.83)

5.3.4. Parametrización de la superficie de Fermi.

El paso 2' presentado anteriormente requiere una parametrización previa de la superficie de Fermi. Para esto es necesario estudiar por separado los distintos llenados por arriba y por debajo del llenado de van-Hove. En esta sección presentamos las curvas parametrizadas que usaremos para estudiar las inestabilidades en una placa de grafeno.

Sector de altas energías: $|\mu| > t$

Llamaremos sector de altas energías al caso en el que el potencial químico se encuentra en el rango de valores $t < |\mu| < 3t$, es decir que los llenados tienen valores mayores al llenado de van-Hove.

Como puede verse en la figura 5.8c, para $\mu/t \sim 3$ la superficie de Fermi es aproximadamente circular, mientras que para valores cercanos a 1 toma forma de hexágono.

En este sector la superficie de Fermi puede ser parametrizada de la siguiente manera

$$\mathbf{k}^H(s) = (k_x^H(s), k_y^H(s)), \quad -\pi < s < \pi, \quad (5.84)$$

donde

$$\begin{aligned} k_x^H(s) &= \frac{2}{3a} \text{sign}(s) \arccos[G(k_y^H(s))], \\ k_y^H(s) &= \frac{1}{\sqrt{3}a} (\phi_H - \omega_H |s|), \end{aligned} \quad (5.85)$$

con ω_H , ϕ_H y la función auxiliar $G(x)$ definidas como

$$\begin{aligned} \omega_H &= \frac{4}{\pi} \arccos\left(\frac{\mu-t}{2t}\right), \quad \phi_H = 2 \arccos\left(\frac{\mu-t}{2t}\right), \\ G(x) &= \frac{1}{4} \left(\frac{\mu^2}{t^2} - 2 \cos(\sqrt{3}x) - 3 \right) \sec\left(\frac{\sqrt{3}x}{2}\right). \end{aligned} \quad (5.86)$$

Sector de bajas energías: $|\mu| < t$

El sector de bajas energías corresponde a los valores del potencial químico que satisfacen $0 < |\mu| < t$. En este caso la superficie de Fermi consiste en piezas discontinuas o *pockets* centrados en los vértices de la zona de Brillouin, como puede verse en la figura 5.8c. Usando la periodicidad del plano de momentos podemos ver que sólo dos de ellos son inequivalentes. En consecuencia podemos describir la superficie total como los dos pockets centrados en los dos puntos de Dirac $\mathbf{k}_F = (0, \pm \frac{4\pi}{3a})$.

Por ejemplo, para la superficie de Fermi centrada en $(0, \frac{4\pi}{3a})$ podemos elegir una parametrización de la forma

$$\mathbf{k}^L(s) = (k_x^L(s), k_y^L(s)), \quad -\pi < s < \pi, \quad (5.87)$$

con

$$\begin{aligned} k_x^L(s) &= \frac{2}{3a} \text{sign}(s) \arccos[G(k_y^L(s))], \\ k_y^L(s) &= \frac{1}{\sqrt{3}a} (\phi_L - \omega_L |s|), \end{aligned} \quad (5.88)$$

y

$$\begin{aligned} \omega_L &= \frac{2}{\pi} \left(\arccos\left(\frac{-t-\mu}{2t}\right) - \arccos\left(\frac{\mu-t}{2t}\right) \right), \\ \phi_L &= 2 \arccos\left(\frac{-t-\mu}{2t}\right), \end{aligned} \quad (5.89)$$

y la expresión para G es idéntica a la anterior.

Con las parametrizaciones anteriores correspondientes a los sectores de altas y bajas energías, podemos evaluar el jacobiano correspondiente al cambio de coordenadas canónico de acuerdo a (5.44), obteniendo

$$J^{-1}(s) = \begin{cases} \frac{3\sqrt{3}}{4|\mu|\omega_H} \sqrt{6\mu^2 - \mu^4 + 4(\mu^2 - 1) \cos(\omega_H(\frac{\pi}{2} - |s|)) - 2 \cos(\omega_H(\pi - 2|s|)) - 3}, & t < |\mu| < 3t \\ \frac{3\sqrt{3}}{4|\mu|\omega_L} \sqrt{6\mu^2 - \mu^4 + 4(\mu^2 - 1) \cos(\phi_L - \omega_L |s|) - 2 \cos(2(\phi_L - \omega_L |s|)) - 3} & 0 < |\mu| < t. \end{cases}$$

Con esto se completa nuestro paso 2', permitiéndonos trabajar con los valores del Jacobiano evaluado sobre la superficie de Fermi.

La función de interacción evaluada sobre la superficie de Fermi puede ser obtenida simplemente reemplazando la parametrización en (5.83). Esto nos permite completar el paso 3 construyendo la energía libre como una forma bilineal.

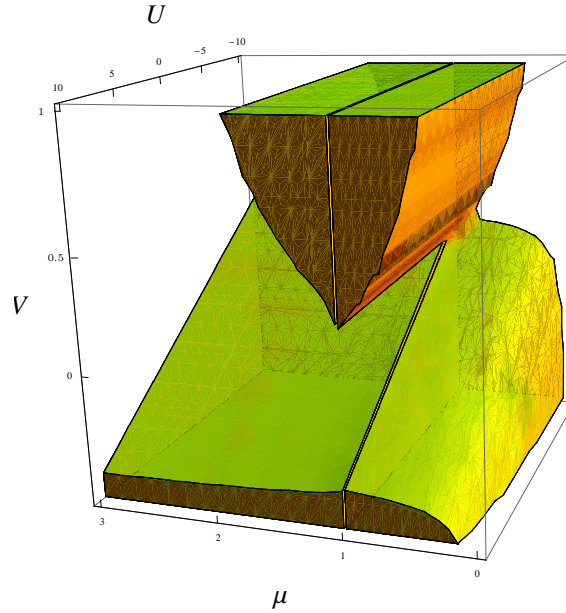


Figura 5.9: Diagrama de fases 3D para el Grafeno. El diagrama fue construido explorando los primeros 20 modos, la región sombreada corresponde a las inestabilidades encontradas. Los primeros tres modos cubren la mayor parte de la región de inestabilidad, los modos restantes terminan de definir los límites de la región. Nótese que para interacciones puramente repulsivas se encuentra una región que presenta inestabilidad cerca del llenado de Van-Hove $\mu \simeq 1$. Por otro lado, cerca de medio llenado $\mu \simeq 0$ el líquido de Fermi es estable.

5.3.5. Inestabilidades y diagrama de fases.

Para proceder de acuerdo al punto 4, elegimos una base del espacio de funciones $L_2[\text{FS}]$. En este caso por simplicidad tomamos una base de funciones trigonométricas

$$\{\psi_n(s)\}_{n \in N} = \{\cos(ms), \sin(ms)\}_{m \in N}. \quad (5.90)$$

De acuerdo al paso 5 usando un procedimiento de ortogonalización, obtenemos la nueva base de funciones mutuamente ortogonales $\{\xi_n\}_{n \in N}$. En términos de esta base calculamos los parámetros de inestabilidad $\chi_i^\mu = \langle \xi_i, \xi_i \rangle$. Éstas son funciones sobre el espacio de parámetros (μ, U, V) que pueden tomar valores negativos en algunas regiones. Si este es el caso, en tales regiones el líquido de Fermi es inestable. En nuestros cálculos para este sistema, este último paso fue realizado numéricamente,

debido a la complejidad de las integrales que deben ser calculadas para obtener las pseudonormas $\{\chi_n\}_{n \in N}$.

Resultados en Grafeno.

El diagrama de fases sobre el espacio de parámetros generado por U , V y el potencial químico μ es presentado en la figura 5.9. En esta figura graficamos la región de inestabilidad determinada por los canales dominantes

Nuestro método nos permite explorar todos los posibles llenados y desarrollar un diagrama de fases para el grafeno válido tanto en la región de llenados pequeños como la de grandes llenados. La ventaja principal del método consiste en que puede ser utilizado sistemáticamente siguiendo los pasos descritos en las secciones anteriores para estudiar de forma independiente cada uno de los diferentes modos de deformación de la superficie de Fermi.

Para llenados cercanos al llenado de van-Hove la inestabilidad de Pomeranchuk se ve ampliamente favorecida. En el caso de repulsión coulombiana en el sitio y a primeros vecinos ($U > 0$ y $V > 0$) encontramos una región del espacio de parámetros donde el sistema presenta una inestabilidad. Nuestros resultados están en excelente acuerdo con los encontrados usando una aproximación diferente en [61].

Por otro lado, no se detectó ninguna inestabilidad alrededor de medio llenado. Este hecho también está en buen acuerdo con resultados anteriores presentados por Sarma *et al* en [62] para placas de grafeno dopadas, en ese trabajo, los autores encontraron que para bajas energías la teoría de líquido de Fermi está bien definida mediante una descripción en términos de fermiones de Dirac.

Además, nuestros resultados están en buen acuerdo con los resultados experimentales encontrados mediante ARPES presentados en [63], los que muestran evidencia que el grafeno se comporta como un líquido de Fermi para bajos dopajes.

Para interacciones atractivas, la región donde la inestabilidad es detectada depende fuertemente de la interacción entre primeros vecinos.

Encontramos que aún las deformaciones más suaves de la superficie de Fermi, aquellas descritas por los modos más bajos en nuestra base ortogonal, presentan inestabilidad. Más aún, estos modos cubren la mayor parte de la región inestable.

En la figura 5.10 mostramos las regiones de inestabilidad correspondientes a los primeros modos. En la figura 5.10a mostramos el diagrama de fases en el plano $V = 0$, las superficies de Fermi correspondientes son mostradas en la figura 5.10c. En la figura 5.10b y 5.10d mostramos las regiones de inestabilidad para los primeros modos en los planos $U-V$ y $\mu-V$ respectivamente. En ambas figuras la inestabilidad del modo χ_0 es apreciada y una nueva región inestable aparece cuando consideramos

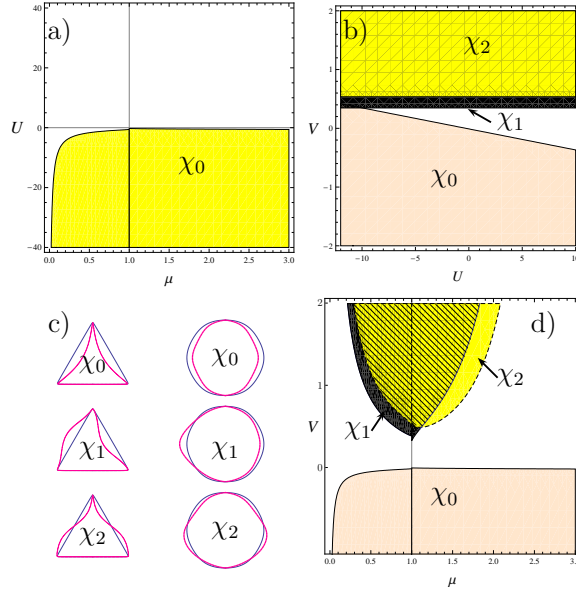


Figura 5.10: Sectores de inestabilidad para los primeros modos inestables. *a)* Inestabilidad para el modo χ_0 en el plano $V = 0$. Esta inestabilidad es lograda solo para interacciones atractivas en el sitio ($U < 0$). *b)* Regiones de inestabilidad en el plano $\mu = 0,99$: los modos χ_1 y χ_2 son inestables para $U > 0$ y $V > 0$. *c)* Deformaciones de la superficie de Fermi correspondientes a los primeros modos inestables: *d)* Inestabilidades para χ_0 , χ_1 y χ_2 en el plano $U = 0$. Remarcablemente, las inestabilidades están presentes para interacciones repulsivas ($U > 0, V > 0$).

los modos χ_1 and χ_2 . Esta inestabilidad aparece para valores positivos del parámetro de interacción y cerca del llenado de van-Hove.

Los resultados presentados en este trabajo confirman las predicciones anteriores y proveen una descripción más completa del diagrama de fases total, teniendo en cuenta todo el rango de llenados.

5.4. Generalización del método a modelos de varias bandas.

En esta sección generalizaremos el formalismo presentado anteriormente para incluir los casos de varias especies de fermiones (por ejemplo distintas componentes

del espín, modelos con varias bandas, etc).

Como en tales modelos es necesario trabajar con una superficie de Fermi para cada especie, haremos referencia a ellas con un nuevo índice interno α , que toma valores de 1 a N , por ejemplo en el caso de fermiones de espín 1/2 tenemos $N = 2$. Luego, las ecuaciones que definen las superficies de Fermi estarán dadas por:

$$g^\alpha(\mathbf{k}) \equiv \mu^\alpha - \varepsilon^\alpha(\mathbf{k}) = 0$$

y la restricción impuesta por el teorema de Luttinger sobre $\delta n^\alpha(\mathbf{k})$ queda en la forma

$$\sum_{\alpha=1}^N \int d^2\mathbf{k} \delta n^\alpha(\mathbf{k}) = 0. \quad (5.91)$$

Tenemos que realizar ahora un cambio de variables en cada superficie de Fermi, cambiando (k_x, k_y) por variables ortogonales (g^α, s^α) , de esta manera

$$\begin{aligned} g^\alpha &= g^\alpha(\mathbf{k}) \equiv \mu^\alpha - \varepsilon^\alpha(\mathbf{k}), \\ s^\alpha &= s^\alpha(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (5.92)$$

donde g^α es normal a la superficie de Fermi que corresponde a la especie α y la variable tangente a la misma s^α toma valores entre $-\pi$ y π .

El Jacobiano asociado a cada uno de estos cambios esta dado por

$$J_\alpha^{-1}(g^\alpha, s^\alpha) = \left| \frac{\partial(g^\alpha, s^\alpha)}{\partial\mathbf{k}} \right|, \quad (5.93)$$

y la restricción impuesta por el teorema de Luttinger puede ser escrita como

$$\sum_{\alpha=1}^N \int dg^\alpha ds^\alpha J_\alpha(g^\alpha, s^\alpha) \delta n^\alpha(g^\alpha, s^\alpha) = 0. \quad (5.94)$$

Parametrizando como antes

$$\delta n^\alpha(g, s) = H[g^\alpha + \delta g^\alpha(g, s)] - H[g^\alpha], \quad (5.95)$$

y reemplazando en la ecuación de la restricción (5.94) tenemos

$$\sum_{\alpha=1}^N \int ds^\alpha \int_0^{\delta g^\alpha(g^\alpha, s^\alpha)} dg^\alpha J_\alpha(g^\alpha, s^\alpha) = 0. \quad (5.96)$$

Calculando las integrales sobre las variables g^α al menor orden en δg^α obtenemos

$$\sum_{\alpha=1}^N \int ds^\alpha J_\alpha(s^\alpha) \delta g^\alpha(s^\alpha) = 0. \quad (5.97)$$

donde $J_\alpha(s^\alpha) = J_\alpha(g^\alpha, s^\alpha)|_{g^\alpha=0}$ y $\delta g^\alpha(s^\alpha) = \delta g^\alpha(g^\alpha, s^\alpha)|_{g^\alpha=0}$. Siendo las s^α variables mudas, podemos usar el mismo nombre sobre cada superficie de Fermi y reescribir la expresión anterior como una sola integral sobre una variable s

$$\int ds \left(\sum_{\alpha=1}^N J_\alpha(s) \delta g^\alpha(s) \right) = 0. \quad (5.98)$$

que puede ser parcialmente resuelta escribiendo

$$\sum_{\alpha=1}^N J_\alpha(s) \delta g^\alpha(s) = \partial_s \lambda(s) \quad (5.99)$$

con $\lambda(s)$ una función arbitraria de s . Esta expresión puede ser ahora totalmente resuelta escribiendo

$$\delta g^\alpha = \frac{1}{|\mathbf{J}|^2} (\partial_s \lambda(s) J_\alpha + J_\alpha^\perp) \quad (5.100)$$

donde J_α^\perp es un vector arbitrario en el espacio interno de los índices α perpendicular a J_α (nótese que en el caso sin espín esta parte está ausente) y $|\mathbf{J}|^2 = \sum_\alpha J_\alpha J_\alpha$.

En el caso de espín 1/2, tenemos que $\alpha = 1, 2$ correspondiente a las superficies de Fermi de los espines up y down respectivamente, y cualquier vector perpendicular a J_α puede ser escrito como

$$J_\alpha^\perp = \eta(s) \sum_{\beta} \epsilon^{\alpha\beta} J_\beta \quad (5.101)$$

donde $\epsilon^{\alpha\beta}$ es el tensor antisimétrico de Levi-Civita y $\eta(s)$ es otra función arbitraria de s necesaria para parametrizar la parte de δg^α perpendicular a J_α .

Ahora calculamos la variación de la energía libre que corresponde a variaciones en los números de ocupación $\delta n^\alpha(\mathbf{k})$

$$\delta E = \sum_{\alpha=1}^N \int d^2\mathbf{k} (\varepsilon^\alpha(\mathbf{k}) - \mu^\alpha) \delta n^\alpha(\mathbf{k}) + \sum_{\alpha,\beta=1}^N \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{k} \int d^2\mathbf{k}' f^{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta n^\alpha(\mathbf{k}) \delta n^\beta(\mathbf{k}'). \quad (5.102)$$

Cambiamos variables como en (5.92) y reescribimos $\delta n^\alpha(\mathbf{k})$ usando (5.95) para obtener

$$\begin{aligned} \delta E = & - \sum_{\alpha=1}^N \int_{-\delta g^\alpha}^0 dg^\alpha \int ds^\alpha J_\alpha(g^\alpha, s^\alpha) g^\alpha \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^N \int_{-\delta g^\alpha}^0 dg^\alpha \int_{-\delta g^\alpha}^0 dg^\beta \int ds^\alpha \int ds^\beta f^{\alpha\beta}(g^\alpha, s^\alpha, g^\beta, s^\beta) J_\alpha(g^\alpha, s^\alpha) J_\beta(g^\beta, s^\beta). \end{aligned} \quad (5.103)$$

Desarrollando al orden más bajo en δg^α y renombrando a la variable muda s^α obtenemos

$$\delta E = \int ds \int ds' \sum_{\alpha, \beta=1}^N \delta g^\alpha(s) \delta g^\beta(s') \frac{1}{2} \left(J_\alpha(s) \delta_{\alpha\beta} \delta(s-s') + f^{\alpha\beta}(s, s') J_\alpha(s) J_\beta(s') \right) \quad (5.104)$$

Ahora podemos usar la solución explícita que encontramos para los δg^α que respetan el vínculo impuesto por el teorema de Luttinger como en (5.100) y escribir

$$\delta E = \int ds \int ds' \sum_{a, b=1, 2} \psi^a(s) K^{ab}(s, s') \psi^b(s') \quad (5.105)$$

donde los índices $a, b = 1, 2$ hacen referencia a las dos funciones arbitrarias que parametrizan las distintas deformaciones de la superficie de Fermi (como en (5.100), (5.101)):

$$\psi^1(s) = \partial_s \lambda(s), \quad \psi^2(s) = \eta(s) \quad (5.106)$$

y el núcleo $K^{a,b}(s, s')$ es en consecuencia una matriz de 2×2 , cuyos elementos están dados explícitamente por

$$\begin{aligned} K^{11}(s, s') &= \frac{1}{2|J(s)|^2 |J(s')|^2} \left(\sum_{\alpha} J_\alpha^3(s) \delta(s-s') + \sum_{\alpha, \beta} J_\alpha^2(s) f^{\alpha\beta}(s, s') J_\beta^2(s') \right) \\ K^{22}(s, s') &= \frac{1}{2|J(s)|^2 |J(s')|^2} \left(\sum_{\alpha, \beta, \gamma} \epsilon^{\alpha\beta} \epsilon^{\alpha\gamma} J_\alpha J_\beta J_\gamma \delta(s-s') - \right. \\ &\quad \left. \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \epsilon^{\alpha\beta} \epsilon^{\gamma\delta} J_\alpha(s) J_\beta(s) J_\gamma(s') J_\delta(s') f_{\alpha, \delta}(s, s') \right) \\ K^{12}(s, s') &= \frac{1}{2|J(s)|^2 |J(s')|^2} \left(\sum_{\alpha, \beta} \epsilon^{\alpha\beta} J_\alpha^2 J_\beta \delta(s-s') + \right. \end{aligned}$$

$$K^{21}(s, s') = \frac{1}{2|J(s)|^2|J(s')|^2} \left(\sum_{\alpha, \beta, \delta} \epsilon^{\alpha\beta} J_\alpha(s) J_\beta(s) J_\delta(s') J_\delta(s') f^{\alpha\delta}(s, s') + \sum_{\alpha, \gamma, \delta} \epsilon^{\gamma\delta} J_\alpha^2(s) J_\gamma(s') J_\delta(s') f^{\alpha\gamma}(s, s') \right)$$

Este núcleo tiene que ser diagonalizado mediante un proceso de tipo Gram-Schmidt. La principal diferencia con los casos vistos anteriormente es que obtenemos una estructura matricial en el espacio de dos dimensiones de las variaciones δg , paralelas y perpendiculares al Jacobiano J . Por lo que la base de funciones a utilizar tendrá ahora un nuevo índice $\{\psi_i^a(s)\}$

5.5. Temperatura finita

Para generalizar el procedimiento a temperatura finita, la variación en el número de ocupación $\delta n(g, s)$ en (5.5) tiene que ser reemplazada por la correspondiente expresión a temperatura finita, por lo que en lugar de la función Heaviside usaremos la distribución de Fermi f_F a temperatura T

$$f_F(x) = \frac{1}{e^{-x/k_B T} + 1} \quad (5.107)$$

Como luego trabajaremos con el cambio de variables $g = \mu - \varepsilon$ es más conveniente usar la función

$$F(x) = \frac{1}{e^{x/k_B T} + 1} \quad (5.108)$$

luego

$$\delta n(g, s) = F[g + \delta g(g, s)] - F[g], \quad (5.109)$$

y como antes $\delta g(g, s)$ es una pequeña perturbación que parametriza la deformación de la SF. Reemplazando en la restricción (5.7), cambiando variables de integración de acuerdo a la eq. (5.18) tenemos

$$\int dg ds J[g, s] (F[g + \delta g(g, s)] - F[g]) = 0 \quad (5.110)$$

y desarrollando a primer orden en $\delta g(g, s)$ tenemos

$$\int dg \int ds F_{,g}(g) J(g, s) \delta g(g, s) = 0 \quad (5.111)$$

donde para cualquier función $F(g, s)$, $f_{,g}$ denota la derivada de f con respecto a g . Esta es la versión a temperatura finita de la restricción (5.7), que debe ser resuelta para obtener los grados de libertad independientes de las deformaciones.

Para obtener una solución, usamos el hecho que las deformaciones $\delta g(g, s)$ que satisfacen

$$\int ds J(g, s) \delta g(g, s) = 0 \quad (5.112)$$

constituyen un conjunto particular de soluciones de (5.111). En lo que sigue, restringimos nuestra búsqueda de las deformaciones que generan inestabilidad a este conjunto particular de soluciones, teniendo en mente que soluciones más generales solo pueden agrandar la región de inestabilidad. La solución de (5.112) puede ser escrita como

$$\delta g(g, s) = J^{-1}(g, s) \partial_s \lambda(s, g) \quad (5.113)$$

Reemplazando (5.109) en la expresión para la energía de una perturbación (5.4), desarrollando a segundo orden en $\delta g(g, s)$, y usando la solución (5.113) tenemos

$$\begin{aligned} E = & \int ds ds' \int dg dg' \psi(s, g) \frac{1}{2} \left(-g J^{-1}(g, s) F_{,gg}[g] \delta(s - s') \delta(g - g') \right. \\ & \left. + f(g, s; g', s') F_{,g}[g] F_{,g'}[g'] \right) \psi(s', g') \end{aligned} \quad (5.114)$$

donde $\psi(g, s) = \partial_s \lambda(g, s)$. Nótese que el término lineal en $\partial_s \lambda(g, s)$ se hace cero usando (5.112). Esta expresión es la versión para temperatura finita de (5.26), y nos permite escribir la energía como una forma bilineal que depende de la temperatura

$$E = \langle \psi, \psi \rangle_T \quad (5.115)$$

La principal diferencia es que ahora las dos variables de Fermi g y s aparecen en las integrales y a partir de este punto, el resto del procedimiento tiene que ser modificado convenientemente.

Ya que ahora las deformaciones $\psi(g, s)$ son funciones definidas en todo el plano tenemos que elegir una base de funciones $\{\psi_n\}_{n \in \mathbf{N}}$ definidas en el espacio $L_2[\mathbf{R}^2]$.

Es fácil ver que el resto del procedimiento sigue en líneas generales los mismos pasos y las inestabilidades pueden ser diagnosticadas de manera similar a la que usábamos para los casos anteriores, aplicando un procedimiento de ortogonalización de Gram-Schmidt a la base de funciones elegida para encontrar los modos que tienen pseudonorma negativa.

Es importante notar que, aunque en este punto puede decirse que el método está completo, en la práctica los cálculos pueden volverse realmente complejos. Como ya mencionamos en la sección 5.5, puede ser muy difícil obtener la forma explícita del jacobiano para un problema dado. Más aún, las integrales requeridas en la ecuación (5.114) pueden ser muy costosas desde el punto de vista computacional para una implementación numérica práctica. Por otro lado, puede no estar tan claro cuando una inestabilidad encontrada a temperatura finita sobrevive $T = 0$. Por estas razones, vamos a perfeccionar el presente análisis.

Primero, es importante notar que aunque las funciones $F_{,g}[g]$ y $F_{,gg}[g]$ tienen soporte no compacto, están fuertemente reducidas fuera de la región de ancho $k_B T$ alrededor del origen. Esto implica que a bajas temperaturas, la principal contribución a la integral (5.114) viene de los valores que esta toma de las funciones $J(g, s)$, $f(g, s; g', s')$ y $\psi(g, s)$ cerca del origen. En particular, como el máximo de la función $F_{,g}[g]$ se encuentra en $g = 0$, la función de interacción puede ser desarrollada de la siguiente manera

$$f(g, s; g', s') = \sum_{n,m} f_{nm}(s, s') g^n g^m \quad (5.116)$$

mientras que el Jacobiano toma la forma

$$J^{-1}(g, s) = \sum_n J_n^{-1}(s) g^n \quad (5.117)$$

Escribiendo la deformación $\psi(g, s)$ como

$$\psi(g, s) = \sum_n \psi_n(s) g^n \quad (5.118)$$

obtenemos

$$E = \sum_{n,m,r,t} \int ds ds' \psi_n(s) \frac{1}{2} \left((n+m+r+1) J_r^{-1}(s) F_{,g}^{n+m+r} \delta_{rt} \delta(s-s') + f_{rt}(s, s') F_{,g}^{n+r} F_{,g}^{m+t} \right) \psi_m(s')$$

donde llamamos $F_{,g}^n$ al momento n -ésimo de la función $F_{,g}[g]$, es decir

$$F_{,g}^n = \int dg F_{,g}[g] g^n \quad (5.119)$$

Es importante destacar que, como $F_{,g}[g]$ es una función par, sólo los momentos pares contribuirán a la suma anterior. Usando ésto, la expresión anterior puede ser escrita como

$$E = \sum_{n,m} \int ds ds' \psi_n(s) \frac{1}{2} \sum_{jk} \left((2k+1) J_{2k-n-m}^{-1}(s) F_{,g}^{2k} \delta_{jk} \delta(s-s') \right. \\ \left. + f_{2k-n,2j-m}(s,s') F_{,g}^{2k} F_{,g}^{2j} \right) \psi_m(s') \quad (5.120)$$

Como $F_{,g}^{2k}$ escala como $(k_B T)^{2k}$, a bajas temperaturas podemos quedarnos solo al menor orden en k y j en las expresiones anteriores. Por otro lado, como suponemos que $J^{-1}(g, s)$ y $f(g, s; g', s')$ son regulares en $g = 0$, ellas contienen solo potencias positivas de g , luego en la suma anterior tenemos $2k - n - m > 0$, $2k - n > 0$ y $2j - m > 0$. Podemos concluir que valores pequeños de k y j implican valores pequeños de n y m . Esto se verá más claramente después de desarrollar explícitamente los primeros ordenes en el desarrollo en temperaturas.

Para empezar, nos concentraremos en el caso más simple, manteniéndonos en el régimen de muy bajas temperaturas, lo que nos permite desarrollar hasta orden $(k_B T)^0$, lo que implica $k = 0$. Por lo tanto las deformaciones permitidas son independientes de g y tenemos que

$$E = \int ds ds' \psi_o(s) \frac{1}{2} \left(J_o^{-1}(s) \delta(s-s') + f_{oo}(s,s') \right) \psi_o(s') \quad (5.121)$$

donde usamos que $F_{,g}^o = 1$. Vemos que de esta manera se recupera la expresión (5.26) para el caso de temperatura cero.

Si desarrollamos hasta el siguiente orden no nulo en temperatura $(k_B T)^2$, obtenemos una expresión de la forma

$$E = \int ds ds' \sum_{n,m=0}^1 \psi_n(s) M_{nm}(s,s') \psi_m(s') \quad (5.122)$$

donde $M_{nm}(s, s')$ es una matriz simétrica de 2×2 escrita en términos de los $J_n^{-1}(s)$ y $f_{nm}(s, s')$, la cual puede ser fácilmente diagonalizada obteniendo

$$E = \int ds ds' \left(\tilde{\psi}_0(s) \tilde{M}_{00} \tilde{\psi}_0(s') + \tilde{\psi}_1(s) \tilde{M}_{11} \tilde{\psi}_1(s') \right) \quad (5.123)$$

donde $\tilde{\psi}_0(s)$ y $\tilde{\psi}_1(s)$ son nuevas funciones arbitrarias y elementos no nulos de la matriz diagonal son

$$\begin{aligned}\tilde{M}_{00} &= \frac{1}{2} \left(J_0^{-1}(s) + \pi^2 (kT)^2 J_2^{-1}(s) \right) \delta(s - s') + \\ &\quad + \frac{1}{2} f_{o0}(s, s') + \frac{\pi^2}{3} (kT)^2 f_{o2}(s, s') \\ \tilde{M}_{11} &= \frac{\pi^2 (kT)^2}{2} J_0^{-1}(s) \delta(s - s')\end{aligned}\tag{5.124}$$

Debemos notar que aquí la diagonalización fue realizada a orden $(kT)^2$. Notar que el segundo término de la ecuación (5.123), que contiene a los modos $\tilde{\psi}_1(s)$, corresponde a la energía libre de los fermiones libres a temperatura cero. De esta observación se hace evidente que no puede haber inestabilidades generadas a partir de estos modos y que podemos independizarnos de ellos.

5.5.1. Ejemplo: interacción de tipo onda s en la red cuadrada a temperatura finita.

En esta sección aplicamos el formalismo desarrollado en la sección anterior en un modelo de fermiones sobre la red cuadrada sometidos a una interacción de tipo onda s , el cual fue estudiado a temperatura cero en la sección 5.2.1.

La comparación de los casos a $T = 0$ y temperatura finita es de interés por sí misma, pero el principal objetivo de esta sección es estudiar un ejemplo simple donde se aplique el procedimiento presentado antes.

Comenzamos considerando fermiones libres en la red cuadrada con una relación de dispersión dada por

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y))\tag{5.125}$$

donde solo tenemos en cuenta el hopping entre electrones situados en sitios adyacentes. A $T = 0$ la superficie de Fermi está definida por

$$g(\mathbf{k}) = \mu - \epsilon(\mathbf{k}) = 0\tag{5.126}$$

Ahora realizamos un cambio de variables de acuerdo a (5.18) de la siguiente manera

$$g(\mathbf{k}) = \mu + 2t(\cos(k_x) + \cos(k_y))\tag{5.127}$$

$$s(\mathbf{k}) = \arctan\left(\frac{\tan(k_y/2)}{\tan(k_x/2)}\right)\tag{5.128}$$

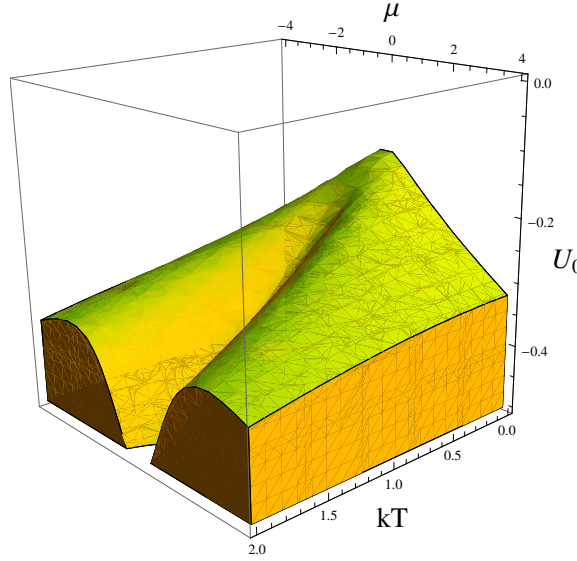


Figura 5.11: Diagrama de Fases a temperatura finita. La región sombreada corresponde a las inestabilidades encontradas explorando los primeros 40 modos.

El Jacobiano de este cambio de variables esta dado por

$$J^{-1}(g, s) = 2t\sqrt{1 - \beta(g - \mu) \cos^2(2s)} \quad (5.129)$$

donde

$$\beta(x) = 1 - \left(\frac{x}{4t}\right)^2 \quad (5.130)$$

Este Jacobiano puede ser desarrollado en potencias de g como en (5.117), obteniendo

$$J_0^{-1}(s) = 2t\sqrt{1 - \beta(\mu) \cos^2(2s)} \quad (5.131)$$

$$J_1^{-1}(s) = -\frac{\mu \cos^2(2s)}{4J_0^{-1}(s)} \quad (5.132)$$

$$J_2^{-1}(s) = \frac{\cos^2(2s)}{4J_0^{-1}(s)} \left(1 - \frac{\mu^2 \cos^2(2s)}{4J_0^{-12}(s)}\right) \quad (5.133)$$

En lo que sigue nos concentraremos en la inestabilidad de Pomeranchuk del tipo onda s estudiada en [1], de manera que usaremos una función de interacción para el

líquido de Fermi de la forma

$$f(k, k') = U_0 \quad (5.134)$$

donde U_0 es simplemente una constante que mide la magnitud de la interacción.

Desarrollamos en temperatura de manera que la forma bilineal que tenemos que estudiar es dada por la expresión (5.123). Para el caso especial de la interacción (5.134) tenemos

$$E = \frac{1}{2} \int ds ds' \tilde{\psi}_0(s) \left((J_o^{-1}(s) + \pi^2 (kT)^2 J_2^{-1}(s)) \delta(s - s') + U_0 \right) \tilde{\psi}_0(s') \quad (5.135)$$

Vemos que esta expresión que nos queda es análoga a (5.26) pero con un Jacobiano modificado, por lo que podemos aplicar directamente el método de la sección 5.1.1 para analizar las inestabilidades.

Como explicamos antes, debemos seleccionar una base de $L^2[\text{FS}]$, que en el presente caso elegimos como $\{\sin(ns), \cos(ns)\}$. La conveniencia de esta elección puede verse fácilmente por el hecho que los coeficientes del desarrollo (5.117) pueden escribirse como

$$J_n^{-1}(s) = \sum_k j_n^{(k)} \cos(4ks). \quad (5.136)$$

Ahora realizamos el procedimiento de ortogonalización y obtenemos la base ortogonal $\{\xi_i(s)\}$, cuyas pseudonormas χ_i^μ evaluaremos para detectar los modos inestables. Si para algún i tenemos que la pseudonorma correspondiente es negativa, entonces una deformación de la superficie de Fermi parametrizada por $\xi_i(s)$ tendrá una variación de la energía libre negativa y podremos decir que hemos detectado una inestabilidad en el canal i -ésimo.

Para este caso hemos estudiado los primeros 40 canales para detectar cuales de ellos son inestables y se hemos construido un diagrama de fases en el plano (μ, kT, U_0) que es presentado en la figura 5.11.

Cuando se aumenta la temperatura manteniendo constante el valor de la interacción U_0 el sistema se vuelve más estable. Este efecto es particularmente evidente cerca de $\mu = 0$. Este comportamiento es esquematizado en la figura 5.12a donde mostramos el plano (μ, U_0) para diferentes valores de kT ($kT = 0,01, 0,5, 1$ y 2), las áreas coloreadas corresponden a las regiones donde se detectó algún tipo de inestabilidad.

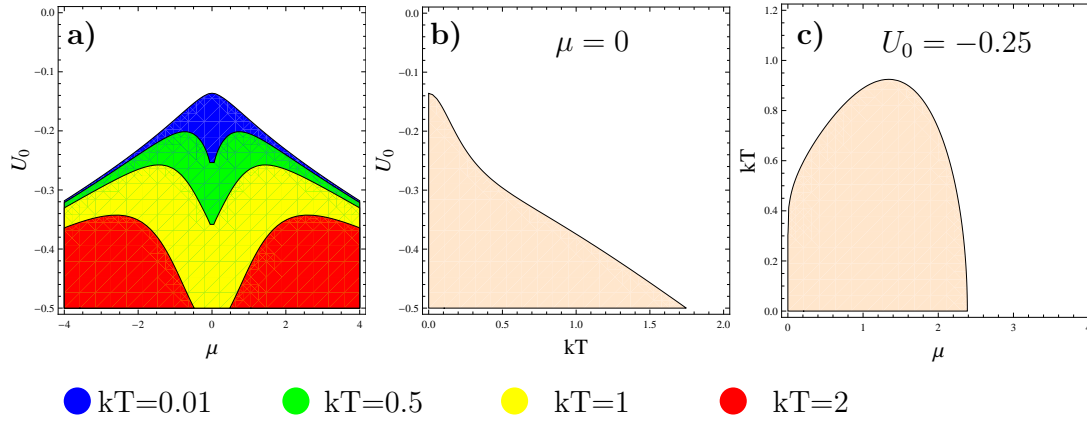


Figura 5.12: **a)** Regiones de inestabilidad en el plano (μ, U_0) para diferentes valores de kT . **b)** Diagrama de fases U_0 vs. kT : el diagrama de fases corresponde al caso de medio llenado, se muestra la región de inestabilidad para los primeros 40 modos. A $T = 0$ el sistema se vuelve mas inestable que a temperatura finita. **c)** Regiones de inestabilidad en el plano (μ, kT) , el límite de la región coloreada define el valor crítico $T_c(\mu)$ donde la inestabilidad es alcanzada.

El diagrama de fases U_0 vs μ de la referencia [1] es recuperado con este formalismo cuando nos acercamos al límite $T = 0$ y el comportamiento para diferentes valores de T puede ser apreciado en la figura 5.12a.

Una característica interesante es el cambio en la estabilidad del sistema cerca del llenado de van-Hove. Cuando la temperatura es aumentada el líquido de Fermi se mantiene estable mas allá de un valor crítico definido $U_c(T)$.

En la figura 5.12b mostramos las regiones de inestabilidad a medio llenado correspondientes al plano U_0-kT , el valor de $U_c(T)$ corresponde al borde de la región solida. Finalmente en la figura 5.12c se encuentran los resultados correspondientes al plano $U_0 = -0.25$. El borde de la región de inestabilidad tiene una fuerte dependencia con el potencial químico μ y puede verse claramente la presencia de un valor óptimo μ_c donde el líquido de Fermi es inestable para temperaturas mayores.

Aunque el presente modelo es muy simple, su diagrama de fases presenta varias características interesantes desde el punto de vista teórico. En el presente análisis hemos analizado solo los primeros 40 modos para propósitos demostrativos, sin embargo puede realizarse un escaleo de la región inestable como función del número de modo i que muestra que la región de inestabilidad es finita.

5.6. Conclusiones

En resumen, en este capítulo presentamos una generalización del método de Pomeranchuk para detectar inestabilidades del líquido de Fermi que puede aplicarse a sistemas en dos dimensiones. En la sección 5.1.1 presentamos detalladamente el desarrollo del mismo en su forma más simple. En la sección 5.2 utilizamos los conceptos desarrollados para estudiar las inestabilidades en un modelo sobre la red cuadrada y comparamos los resultados con los encontrados por medio de otras técnicas en la literatura, encontrando un excelente acuerdo entre ellos.

En la sección 5.3 aplicamos el método para estudiar las posibles inestabilidades que presenta un modelo de fermiones sobre la red hexagonal. Primero presentamos una breve introducción a la física del Grafeno y luego nos concentramos analizar los resultados obtenidos. En este modelo se observó que para llenados cercanos al llenado de van-Hove la inestabilidad de Pomeranchuk se ve ampliamente favorecida. Este resultado muestra un excelente acuerdo con los encontrados usando una aproximación diferente en [61]. Por otro lado, no se detectó ninguna inestabilidad alrededor de medio llenado. Este hecho también está en buen acuerdo con resultados anteriores presentados por Sarma *et al* en [62] para placas de Grafeno dopadas. Mas aun, nuestros resultados están en buen acuerdo con los resultados experimentales encontrados mediante ARPES presentados en [63], los que muestran evidencia que el Grafeno se comporta como un líquido de Fermi para bajos dopajes.

Finalmente presentamos una generalización del método para poder estudiar modelos de varios orbitales, con grados de libertad magnéticos y temperatura finita. Presentamos también un análisis simple a modo de ejemplo de aplicación.

Parte III

Fases magnéticas

Capítulo 6

Introducción.

A temperaturas suficientemente bajas, los sistemas de materia condensada tienden a ordenarse. Una interesante excepción a este comportamiento es el caso de los llamados líquidos de espín cuánticos, en los cuales las fluctuaciones cuánticas evitan la transición hacia la fase ordenada. Al presente se han observado fases en algunos compuestos orgánicos bidimensionales que se supone corresponden a líquidos de espín. En el siguiente capítulo veremos algunos ejemplos en los que se cree que estos estados conforman el estado fundamental del sistema.

Los estados cuánticos desordenados tienen un profundo interés teórico ya que podrían explicar el mecanismo por el cual algunos sistemas presentan propiedades exóticas. En este contexto, por ejemplo los estados de tipo valence bond resonantes fueron propuestos por Anderson para explicar el estado superconductor no convencional que presentan los cupratos.

Aunque la principal motivación surgió de los cupratos, que son modelados sobre una red cuadrada, en los últimos años se ha incrementado enormemente el estudio de posibles fases exóticas sobre redes con características especiales como la red de Kagomé y la red hexagonal. La red hexagonal presenta varias particularidades que la hacen muy interesante desde el punto de vista teórico. Por otro lado tenemos a disposición una realización experimental a partir de la síntesis del primer material bidimensional, el grafeno.

El grafeno presenta varias propiedades interesantes y algunas de ellas están íntimamente relacionadas con las características propias de la red. Al resolver el modelo más simple sobre la red hexagonal, es decir electrones libres con probabilidad de hopping sólo a primeros vecinos, encontramos que la relación de dispersión a bajas energías es lineal en los impulsos.

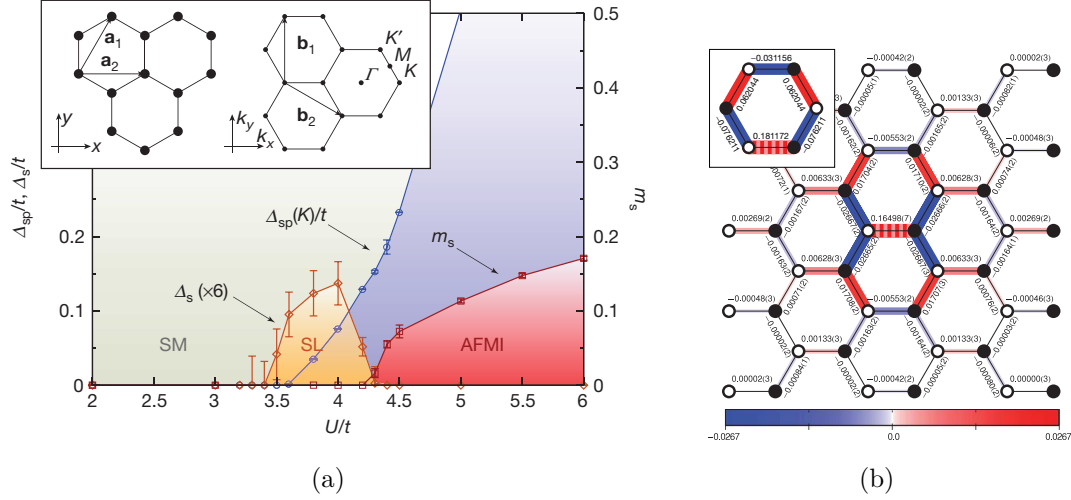


Figura 6.1: Resultados obtenidos para el modelo de Hubbard en la red hexagonal mediante Montecarlo Cuántico [9]. a) Diagrama de fases. b) Correlaciones dimerodimero.

La descripción cuántica de los electrones relativistas fue obtenida por Dirac. En el caso de fermiones sin masa en reposo la energía de los fermiones de Dirac es una función lineal del momento. De esta manera, las excitaciones de bajas energías en grafeno pueden ser tratadas mediante una teoría de electrones relativistas sin masa. La presencia de tales fermiones sin masa fue recientemente observada en grafeno [114, 115] y las superficies de compuestos basados en Bismuto. En grafeno, que como vimos se compone de una sola capa de átomos de Carbono en una estructura hexagonal, varios comportamientos inusuales debidos a la relación de dispersión tipo Dirac a bajas energías, fueron predichos teóricamente y parcialmente verificados experimentalmente en los últimos años.

Cuando incluimos interacciones entre los electrones, es de esperarse que a causa de las mismas, cerca de medio llenado, se genere una transición de fase cuántica entre un estado semi metálico y un aislador de Mott (que como vimos es un estado aislador que no se genera a partir de la teoría de bandas sino por efecto de las interacciones). Los efectos de las correlaciones pueden ser obtenidos a partir del modelo de Hubbard en la red.

Mientras se concluía esta tesis, Muramatsu *et. al.* [9], estudiaron el modelo de Hubbard a medio llenado sobre la red hexagonal utilizando una variante del método Montecarlo cuántico, encontrando claras evidencias de la existencia de un estado

cuántico desordenado de tipo valence bond resonante. Este resultado sugiere la posibilidad de obtener un estado superconductor no convencional por medio del dopaje del sistema. El diagrama de fases obtenido se muestra en la Figura 6.1 junto con la correlación dímero-dímero en la región desordenada. Más adelante veremos que utilizando un modelo de Heisenberg sobre la red hexagonal se obtienen similares resultados reforzando la evidencia de posibles estados de tipo líquido de espín pueden ser favorecidos en esta red.

Puede desarrollarse un modelo efectivo para el modelo de Hubbard a medio llenado si se supone que no hay estados doblemente ocupados, en este régimen el modelo efectivo que describe los grados de libertad magnéticos es el modelo de Heisenberg.

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (6.1)$$

Donde $J = \frac{4t^2}{U}$. Este desarrollo puede continuarse al siguiente orden en potencias de t/U [10, 11] y para la red hexagonal se obtiene que

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_1} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + J_2 \sum_{\langle i,j \rangle_2} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (6.2)$$

con $J_1 = \frac{4t^2}{U} - 24t^4/U^3$, $J_2 = \frac{4t^4}{U^3}$ y la notación $\langle i,j \rangle_n$ indica suma sobre vecinos n -esimos. El desarrollo al siguiente orden además de introducir interacciones entre pares de espines a terceros vecinos introduce además términos de plaquetas de seis espines que hacen extremadamente difícil trabajar con el modelo.

El hamiltoniano anterior fue estudiado parcialmente por Mattsson y colaboradores usando aproximaciones de campo medio y encontrando indicios de que el estado de Néel se desestabiliza sin poder concluir sobre la existencia de posibles estados desordenados. En el capítulo 2.4 estudiaremos una variante de este modelo con interacciones a terceros vecinos

Capítulo 7

Antiferromagnetos cuánticos en 2 dimensiones.

Índice

7.0.1. Modelo de Heisenberg en 2 dimensiones.	106
7.1. Modelo $J_1 - J_2$ sobre la red cuadrada.	107
7.1.1. Estado fundamental clásico y aproximación semiclásica. . .	108
7.1.2. Región no magnética $J_2 \simeq J_1/2$	109
7.2. Valence bond solids	110
7.2.1. Métodos analíticos y cálculos numéricos	111

En las siguientes secciones presentamos algunos de los avances teóricos en el campo del magnetismo cuántico en sistemas bidimensionales. Haciendo incapié en el hecho que la competencia entre frustración, número de coordinación pequeño e interacciones puede generar fases cuánticas sin orden magnético de largo alcance. El interés sobre estas cuestiones se ha incrementado notablemente debido a la existencia de fases superconductoras de alta temperatura en cupratos dopados, esto implica que los resultados teóricos en este tema pueden ser contrastados con la enorme cantidad de resultados experimentales accesibles.

Las siguientes secciones deben ser entendidas como una introducción general para presentar, en el siguiente capítulo, nuestro estudio de las fases desordenadas en la red hexagonal, y no como una enumeración completa de los resultados de la

literatura.

En la sección 7.1 discutimos, como ejemplo de las posibles fases de interés, los resultados conocidos para el modelo de Heisenberg de espín $\frac{1}{2}$ sobre la red cuadrada. Este modelo es uno de los más estudiados y en dicha sección resumimos algunos de los resultados más importantes de la literatura. Existen varios reviews donde pueden consultarse estos resultados en detalle [78, 79].

En la sección 7.2 presentamos las propiedades generales de los cristales tipo valence bond (VBC) y los estados relacionados, como ejemplo de fases simples que tienen realizaciones en sistemas de espín frustrados sin orden de largo alcance.

7.0.1. Modelo de Heisenberg en 2 dimensiones.

El modelo de Heisenberg ha sido estudiado desde la década del '30, a partir de los trabajos pioneros de Heisenberg y Dirac. Desde entonces se aplica este modelo al estudio de las propiedades de los aisladores magnéticos. El descubrimiento de los superconductores de alta temperatura crítica generó un gran interés en los antiferromagnetos cuánticos bidimensionales.

A diferencia de lo que ocurre en una dimensión, donde el modelo de Heisenberg puede resolverse exactamente por medio del famoso anzatz de Bethe, para estudiar el modelo en dos dimensiones necesitamos realizar algún tipo de aproximación. Por claridad, en lo que sigue escribiremos el hamiltoniano de Heisenberg de forma de hacer evidente el acoplamiento entre sitios mas alejados. Esto es

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_1} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + J_2 \sum_{\langle i,j \rangle_2} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + J_3 \sum_{\langle i,j \rangle_3} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + \dots \quad (7.1)$$

En redes frustradas, los metodos numéricos basados en procesos estocásticos como Montecarlo cuántico son muy difíciles de implementar por causa del llamado problema del signo. Por lo que este tipo de problemas tiene que ser atacado usando otros métodos aproximados, como por ejemplo expansiones en serie, la aproximación basada en bosones de Schwinger, técnicas variacionales, etc. Uno de los métodos numéricos más poderosos es el método de diagonalización exacta de Lanczos que permite obtener resultados exactos para redes pequeñas.

Una comparación de los resultados obtenidos para el modelo de Heisenberg en la red cuadrada mediante diferentes técnicas numéricas es presentada en [81]. En ese trabajo se compararon los resultados obtenidos para el modelo con acoplamientos a primeros vecinos mediante: diagonalización exacta, simulaciones Montecarlo y cálculos variacionales (ver figura 7.1 y 7.2).

Method	Energy per site
Linear Spin-Wave Theory	-0.658
Spin-Wave Theory	-0.6705
Series expansions (Singh, 1989)	-0.6696±0.0003
Green's function Monte Carlo (Trivedi-Ceperley, 1989)	-0.6692±0.0002
Green's function Monte Carlo (Carlson, 1989)	-0.6692±0.0002
Variational Monte Carlo (Yokoyama-Shiba, 1987)	-0.642
Variational Monte Carlo (Liang <i>et al.</i> , 1988)	-0.6682±0.0004
Variational Monte Carlo (Huse-Elser, 1988)	-0.6638
Variational Monte Carlo (Horsch-Linden, 1988)	-0.644
Variational Monte Carlo (Manousakis, 1989)	-0.6635±0.0002
Variational Monte Carlo (Liu-Manousakis, 1989)	-0.6637±0.0002
World-line Monte Carlo (Reger-Young, 1988)	-0.670±0.001
Projector Monte Carlo (Gross <i>et al.</i> , 1989)	-0.6661±0.0002
Projector Monte Carlo (Barnes <i>et al.</i> , 1989)	-0.669±0.001
Projection technique (Becker <i>et al.</i> , 1989)	-0.6674
Exact diagonalization (Dagotto-Moreo, 1988)	-0.675±0.01
Exact diagonalization (Tang-Hirsch, 1989)	-0.672±0.001

Figura 7.1: Comparación de la energía del estado fundamental por sitio, extrapolada al límite termodinámico, calculada mediante diferentes métodos en ref [81].

7.1. Modelo $J_1 - J_2$ sobre la red cuadrada.

Todos los estudios realizados indican que el hamiltoniano de Heisenberg con $S = \frac{1}{2}$ con acoplamiento sólo a primeros vecinos, tiene un estado fundamental ordenado antiferromagnéticamente [81]. La magnetización escalonada calculada, $m_s \sim 0,3$, esta en buen acuerdo con los resultados experimentales obtenidos sobre el compuesto La_2CuO_4 . En virtud de ello, el hamiltoniano de Heisenberg con acoplamiento a primeros vecinos es un modelo adecuado para la descripción teórica de las fases aislantes en los cupratos superconductores. Sin embargo orden en estos compuestos se destruye rápidamente al doparlos. El sistema dopado es mas complejo de modelar teóricamente debido a que entran en juego los grados de libertad electrónicos. Existe, sin embargo, una forma alternativa de perturbar y destruir el orden magnético; añadir frustración al modelo mediante la inclusión de interacciones antiferromagnéticas entre vecinos mas alejados. El colapso del orden antiferromagnético en este tipo de modelos frustrados es un caso paradigmático de una transición de fase cuántica y ha motivado en los últimos años el estudio del hamiltoniano de Heisenberg con interacciones a primeros y segundos vecinos realizado.

Comenzamos considerando entonces el modelo de Heisenberg sobre la red cuadrada con acoplamiento a primeros y segundos vecinos. Éste es uno de los prototipos de modelos frustrados y por ello es también uno de los más estudiados en la literatura.

El hamiltoniano puede escribirse como

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j + J_2 \sum_{\langle i,j \rangle_2} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \quad (7.2)$$

Aunque este modelo es simple en apariencia, presenta una serie de fenómenos que son relevantes para una gran cantidad de sistemas magnéticos frustrados en 2 dimensiones: degeneración clásica del estado de menor energía, fenómeno de orden desde el desorden, destrucción del orden de largo alcance por fluctuaciones cuánticas, inestabilidad de la descripción de ondas de espín, apertura de gap en el espectro de excitaciones y posiblemente ruptura espontánea de la simetría de traslación. Por esta razón, comenzaremos con una revisión general de algunos resultados importantes encontrados para este modelo, prestando particular atención a las propiedades relacionadas con la frustración.

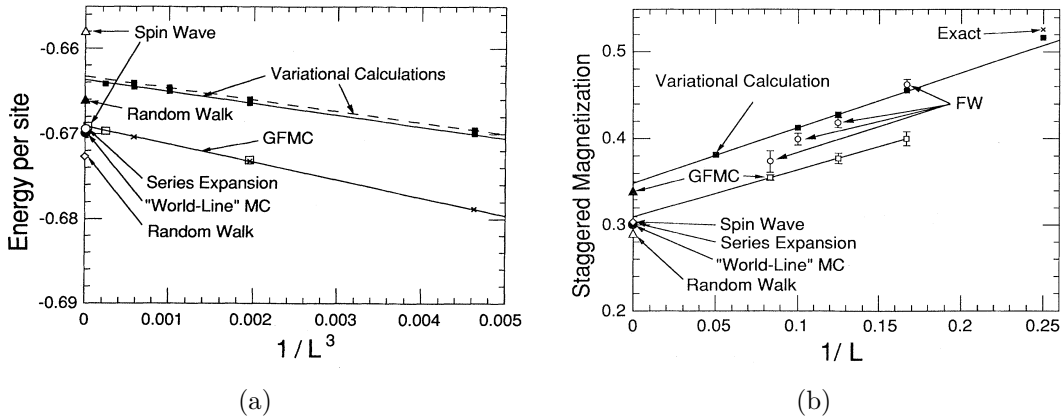


Figura 7.2: Resultados obtenidos mediante diferentes técnicas en ref. [81]. a) Comparación de los resultados para la energía del estado fundamental. b) Comparación de los resultados para la magnetización alternada.

7.1.1. Estado fundamental clásico y aproximación semiclásica.

Un ejemplo claro de los efectos de la frustración se aprecia estudiando el límite clásico del modelo de Heisenberg. Clásicamente la energía de una dada configuración se obtiene reemplazando en (7.2) los operadores de espín por vectores de modulo

constante. Por ejemplo, es simple encontrar algunos de los estados de mínima energía clásica en un modelo de Heisenberg con invarianza traslacional en una red de Bravais, ya que la energía puede ser minimizada parametrizando los vectores de espín clásicos de la forma

$$\mathbf{S}_r = \mathbf{e}_1 \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{e}_2 \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (7.3)$$

y escribiendo la energía del hamiltoniano (7.2) en términos de esta parametrización

$$E(\mathbf{q}) = 2J_1(\cos(q_x) + \cos(q_y)) + 2J_2(\cos(q_x + q_y) + \cos(q_x - q_y)). \quad (7.4)$$

Minimizando con respecto al vector de ordenamiento \mathbf{q} podemos ver fácilmente que el modelo clásico presenta las siguientes fases:

- ▶ Néel: Para $J_2 < J_1/2$ la energía presenta un mínimo en $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$
- ▶ CAF: Para $J_2 > J_1/2$ la energía presenta dos mínimos diferentes en $\mathbf{q} = (0, \pi)$ y $\mathbf{q} = (\pi, 0)$. Estas soluciones corresponden a cadenas ferromagnéticas acopladas entre si de manera antiferromagnética. Las dos soluciones corresponden a las cadenas ferromagnéticas alineadas en la dirección x e y respectivamente. A estas fases se las suele identificar con el nombre fase colineal antiferromagnética (CAF). En realidad, en esta región existen infinitas configuraciones clásicas degeneradas con las fases colineales. Las dos subredes que conforman la red cuadrada se desacoplan, estando cada una de ellas ordenada antiferromagnéticamente. Sin embargo, esta degeneración accidental desaparece cuando se incluyen las fluctuaciones cuánticas. Las mismas seleccionan las fases colineales $\mathbf{q} = (0, \pi)$ y $\mathbf{q} = (\pi, 0)$. Este fenómeno de selección entre estados clásicos degenerados, debido al aspecto cuántico del problema, es conocido como *orden desde el desorden*.
- ▶ En la línea especial del espacio de parámetros $J_2 = J_1/2$ el estado fundamental clásico es altamente degenerado. En este punto podemos escribir el hamiltoniano como $H = cte + J_2 \sum_{\square} (S_1 + S_2 + S_3 + S_4)^2$, donde la suma \sum_{\square} es sobre todas las plaquetas cuadradas fundamentales.

7.1.2. Región no magnética $J_2 \simeq J_1/2$

Consideremos los dos estados clásicos (estados “tipo Ising”) vistos anteriormente, que corresponden a los vectores de ordenamiento $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ y $\mathbf{q} = (0, \pi)$. Podemos tomar a estos estados como estados variacionales para el hamiltoniano (7.2).

Las energías correspondientes a estos estados son $E_{\pi\pi} = -J_1 + J_2$ y $E_{\pi 0} = -J_2$. Como vimos antes estos estados se unen en la línea $J_2 = J_1/2$. Sin embargo, podemos considerar también cualquier estado formado por singletes a primeros vecinos que cubran toda la red como un estado variacional. En tal estado completamente dimerizado el valor de expectación de la energía por sitio es $E_{dimeros} = -\frac{3}{4}J_1$, que es menor que los dos estados tipo Ising en la región cercana a $J_2 \simeq J_1/2$. Por supuesto este argumento tan simple no es concluyente ya que renormalizando los estados clásicos con fluctuaciones cuánticas la energía de dichos estados cambiará.

Sin embargo da indicios que los estados no magnéticos pueden ser un mecanismo por el cual se minimiza la energía en un magneto frustrado. Por otro lado existen claras evidencias teóricas que apoyan la existencia de este tipo de fases desordenadas en la región intermedia ($J_2 \simeq J_1/2$). Trumper [112] *et. al.*, usando una aproximación basada en la formulación de bosones de Schwinger, encontraron claras evidencias de que en la región $0,53 < J_2/J_1 < 0,64$ el estado fundamental consiste en una fase cuántica magnéticamente desordenada.

El primer estudio del modelo cuántico fue realizado por Chandra y Doucot [82], quienes mediante la teoría de ondas de espín calcularon las correcciones a orden $\frac{1}{S}$, de la frontera clásica entre la fase Néel y la colineal en $J_2/J_1 = 0,5$. Encontraron una región alrededor de dicho punto donde ninguna de las dos fases es estable y conjeturaron la existencia de una fase de tipo líquido de espín en esa región, con invarianza traslacional y rotacional. Sin embargo, las contribuciones de orden superior en potencias de $1/S$ presentan divergencias logarítmicas [83, 84], lo que hace que las predicciones de la teoría lineal sean al menos cuestionables. Por otro lado, Hirsch y Tang [85] compararon resultados obtenidos con ondas de espín con resultados exactos y dedujeron que el tratamiento con ondas de espín sobreestima la capacidad de la frustración para destruir el orden magnético. A pesar de esto, al utilizar otras aproximaciones se obtienen resultados cualitativamente similares a los obtenidos mediante ondas de espín [86, 87, 88, 112].

7.2. Valence bond solids

De todas las diferentes soluciones cuánticas compatibles con la frustración del sistema las soluciones tipo valence bond crystals (VBC) constituyen el escenario más simple. En este tipo de fases los espines más cercanos se arreglan formando singletes: ya sea dimeros, cuadrumeros o $2n$ -meros con plaquetas de $S = 0$. La estabilización de este tipo de fases se debe a la extrema estabilidad de pequeños clusters con $S = 0$ (recordemos que la energía de un singlete formado por dos espines $\frac{1}{2}$ es $-\frac{3}{4}J$ que puede ser comparada con la energía de dos espines clásicos o tipo Ising, $-\frac{1}{4}J$) y

eventualmente al hecho de que las ligaduras frustradas entre dos singletes diferentes no contribuyen a la energía total.

En una fase del tipo VBC no hay ruptura espontanea de la simetría $SU(2)$ y no hay orden de largo alcance en las correlaciones espín-espín, pero si puede verse dicho orden en las correlaciones dimero-dimero. Salvo en el punto crítico cuántico todas las excitaciones de un VBC poseen gap¹.

Dependiendo del tipo de geometría, la función de onda de estos estados puede romper espontaneamente alguna simetría de la red (VBC espontáneo) o preservar la simetría total (VBC explícito). Para ser estrictos el nombre VBC tendría que ser usado para sistemas que rompen espontaneamente alguna simetría de la red. Sin embargo como estos dos tipos de sistemas comparten muchas de las propiedades discutiremos ambos sin hacer distinciones.

7.2.1. Métodos analíticos y cálculos numéricos

El desarrollo para valores de S grande (ondas de espín) y la teoría de campo medio basada en la representación de bosones de Schwinger, son dos métodos simples y aplicables a una gran variedad de sistemas para estudiar el diagrama de fases, aún en sistemas altamente frustrados. Por supuesto, como todos los métodos aproximados, presentan ventajas y desventajas. Por un lado la aproximación de ondas de espín por medio de bosones de Holstein Primakov da información aproximada del rango de existencia de las fases ordenadas tipo Néel. Por otro lado la aproximación por medio de bosones de Schwinger ha mostrado ser mucho mas efectiva en cuanto a considerar las fluctuaciones cuánticas, pero se vuelve extremadamente difícil incluir en ella correcciones mas allá de la aproximación de campo medio.

Aunque los estados de tipo VBC son descriptos naturalmente con la ayuda de operadores de bond o bosones de Schwinger, la existencia de estos estados en el límite de espín pequeño puede ser muchas veces anticipada utilizando una aproximación en potencias de $1/S$

Entre las técnicas numéricas, las simulaciones de tipo Montecarlo cuántico han mostrado un excelente desempeño, comparadas con otras técnicas numéricas para el caso de sistemas no frustrados. Sin embargo, este método tiene la gran desventaja de que falla cuando se introduce frustración en el sistema.

Por último, las técnicas de diagonalización exacta se han transformado en un referente para realizar comparaciones de los resultados obtenidos con las técnicas aproximadas. La desventaja que estas técnicas presentan radica en la limitación de

¹Veremos luego que estas características pueden ser usadas para identificar la existencia de este tipo de fases.

los tamaños accesibles con la potencia de cálculo actual.

En lo que sigue haremos uso de algunas de estas técnicas para estudiar las fases magnéticas que presenta el modelo de Heisenberg en la red hexagonal. Usaremos primero una aproximación semiclásica y luego contrastaremos los resultados de ésta con una aproximación basada en bosones de Schwinger. Haremos uso de cálculos exactos sobre redes pequeñas para comparar con los resultados analíticos y veremos así que la aproximación de bosones de Schwinger resulta ser excelente incluso para tamaños pequeños.

Capítulo 8

Desorden cuántico en la red hexagonal.

Índice

8.1. Aspectos clásicos y semiclásicos	115
8.2. Resultados mediante bosones de Schwinger	120
8.3. Conclusiones	126

Como discutimos brevemente en las secciones anteriores, el modelo de Heisenberg en dos dimensiones ha sido motivo de intensos estudios en los últimos años [91, 92, 93, 94]. Una de las razones de este interés es la existencia de una gran cantidad de evidencia, tanto teórica como experimental, de que la frustración geométrica en sistemas bidimensionales aumenta el efecto de las fluctuaciones cuánticas sobre el estado fundamental del sistema y tiende a suprimir el orden magnético de largo alcance. Esto puede generar fases exóticas como por ejemplo los llamados líquidos de espín [95]. Ya hemos discutido un argumento muy simplificado por el cual, en cierto rango de valores de la frustración, los estados de tipo valence bond son energéticamente favorables cuando los comparamos con el estado clásico tipo Ising.

Como la energía de un estado clásico generalmente depende del número de coordinación del sistema z , disminuyendo cuanto mayor es éste número, es interesante estudiar sistemas con el menor número de coordinación posible, ya que es ahí donde la competencia entre los estados magnéticos y desordenados podría favorecer aun

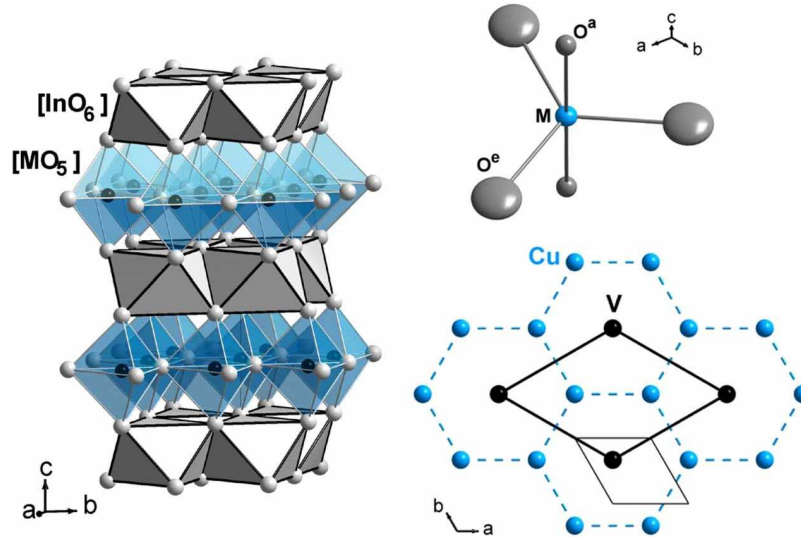


Figura 8.1: Vista en perspectiva de la estructura cristalina del compuesto $\text{InCu}_{2/3}\text{V}_{1/3}\text{O}_3$. A la derecha (abajo) se muestra la estructura hexagonal formada por los planos de Cu-V.

más a los últimos.

El menor número de coordinación para una red no trivial es $z = 2$, y este corresponde a una red en una dimensión, es decir una cadena de espines. En dos dimensiones, cualquier red deberá tener un número de coordinación $z > 2$. Por ejemplo, en el caso de la red cuadrada tenemos $z = 4$, en la red triangular $z = 6$, etc. La red hexagonal en dos dimensiones o honeycomb es un tanto especial, tiene el menor número de coordinación posible ($z = 3$) para una red en 2 dimensiones. Por lo tanto, podríamos esperar que las fluctuaciones cuánticas sean más fuertes que en la red cuadrada y que sean capaces de destruir el orden antiferromagnético de largo alcance.

El estudio de antiferromagnetos cuánticos frustrados sobre la red hexagonal tiene también fuertes motivaciones experimentales. Por un lado, existen experimentos recientes utilizando grandes campos magnéticos en el material $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$, el cual se cree puede describirse utilizando un modelo de Heisenberg sobre la red hexagonal con $S = \frac{3}{2}$, que motivan la conjetura de que la frustración geométrica juega un rol importante en la desaparición del orden de largo alcance [96]. Por otro lado, existe también una buena cantidad de datos experimentales en compuestos como

el $\text{InCu}_{2/3}\text{V}_{1/3}\text{O}_3$ [89] mostrado en la figura 8.1, el $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$ y $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ [90], ver figura 8.2. Los dos últimos presentan evidencia de transiciones metamagnéticas.

La familia de compuestos $\text{BaM}_2(\text{XO}_4)_2$ con $M = \text{Co}, \text{Ni}$ y $X = \text{P}, \text{As}$, consiste en iones magnéticos M dispuestos en redes hexagonales débilmente acopladas, con espín $S = 1/2$ para el Co y $S = 1$ para el Ni [97], por lo que estos compuestos podrían ser modelados con un modelo de Heisenberg sobre la red hexagonal.

Por último, pero no menos importante, cabe mencionar que las nuevas posibilidades para diseñar sistemas interactuantes sobre redes con una geometría controlada son cada vez más accesibles: la construcción controlada de redes ópticas de átomos fríos permitiría la creación de geometrías arbitrarias [99, 100]. Por otro lado las modernas estrategias en química permiten abrir nuevas rutas para sintetizar nuevos materiales con las estructuras reticulares y la interacción entre los sitios que se desee.

En lo que sigue presentamos los resultados obtenidos al estudiar el modelo de Heisenberg sobre la red hexagonal con primeros (J_1), segundos (J_2) y terceros vecinos (J_3). Haremos especial hincapié en la línea $J_2 = J_3$ por razones que se explicarán en más detalle en las siguientes secciones. Para esto, utilizamos diferentes técnicas analíticas y numéricas. Estudiamos primero el diagrama de fases clásico, en primer lugar porque éste da una idea clara de las posibles fases ordenadas en el sistema, y por otro lado porque a partir de las soluciones clásicas podemos introducir fluctuaciones cuánticas mediante un desarrollo semiclásico para valores grandes de S . Usamos la descripción de ondas de espín para estudiar dichas correcciones cuánticas y una representación de los operadores de espín en términos de bosones de Schwinger con un desacople invariante rotacional, que ha mostrado tener un gran poder predictivo en estudios anteriores sobre sistemas frustrados. Estas técnicas fueron complementadas con cálculos numéricos exactos sobre redes pequeñas.

Aunque los resultados presentados en esta sección corresponden a una línea particular del espacio de parámetros, conjeturamos que las fases que presentan desorden cuántico se extienden a una región finita.

8.1. Aspectos clásicos y semiclásicos

En esta sección discutiremos brevemente el diagrama de fases clásico que presenta el modelo de Heisenberg sobre la red hexagonal y las consecuencias de considerar las primeras fluctuaciones cuánticas en un desarrollo semiclásico.

Un procedimiento estándar para estudiar sistemas de espines consiste en comenzar el análisis del sistema desde su límite clásico (grandes valores de S) y luego

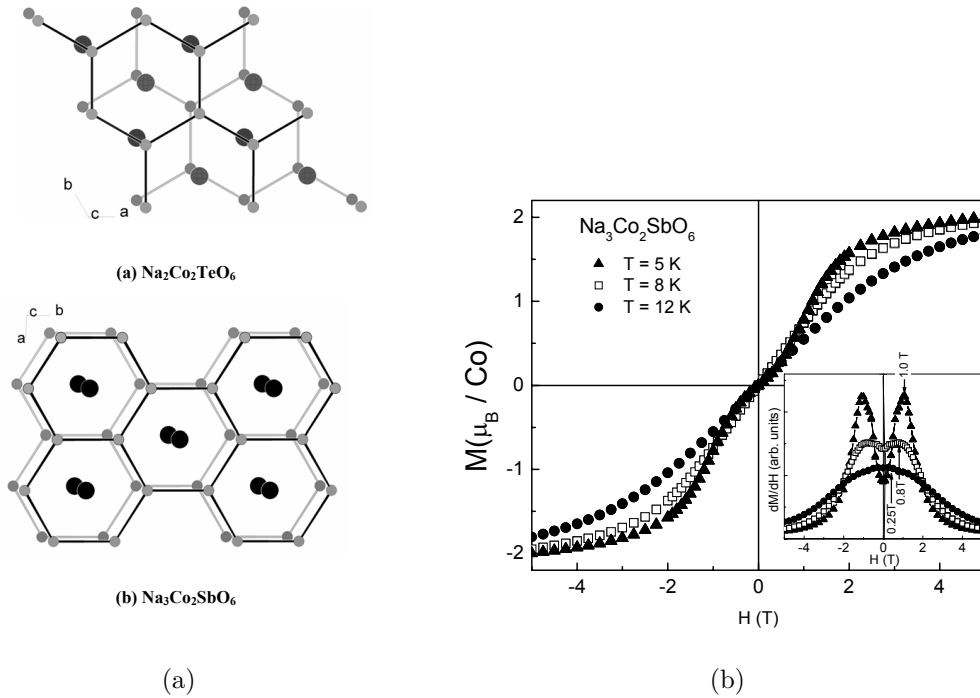


Figura 8.2: a) Vista de los planos adyacentes Co-M ($M=\text{Te,Sb}$) en $\text{Na}_2\text{Co}_2\text{TeO}_6$ y $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$, mostrando el apilamiento de las redes hexagonales de Cobalto. En ambos casos los planos han sido corridos ligeramente para que los átomos sean visibles. b) Dependencia con el campo magnético a $T = 5\text{ K}$, 8 K y 12 K de la magnetización para el $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$, en el inset se muestra la derivada de la magnetización dM/dH donde puede observarse claramente una transición metamegnética.

introducir las fluctuaciones cuánticas de forma sistemática. En muchos casos, este procedimiento proporciona una descripción razonable del problema, que de otra manera sería prácticamente intratable. Por otro lado, en algunos casos, el estudio de las fases clásicas que presenta un sistema de espines es interesante por sí mismo, ya sea porque el sistema es modelado por un hamiltoniano de espines con valores grandes de S (como podría ser el caso de los rutenatos) o simplemente por que el diagrama de fases en el límite clásico puede contener una rica variedad de fases y algunas de las características de dicho diagrama pueden ser importantes aún luego de introducir fluctuaciones cuánticas.

En el caso de esta tesis, el modelo clásico es estudiado como punto de partida para introducir luego fluctuaciones, pero eventualmente nos detendremos a analizar

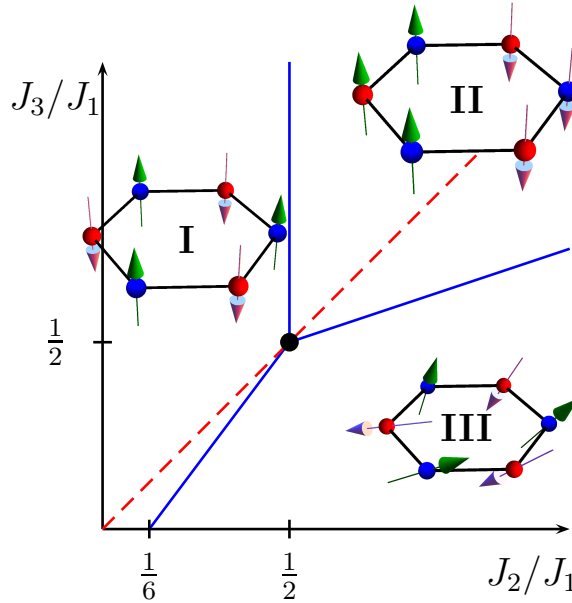


Figura 8.3: Diagrama de fases clásico correspondiente al modelo (8.1). Hay tres fases diferentes que están esquematizadas en las figuras: (I) La fase Néel que consta de subredes triangulares (esferas rojas y azules) ordenadas de forma antiparalela. (II) La fase colineal en donde se forman cadenas ferromagnéticas ordenadas de forma antiferromagnética entre ellas y (III) una fase espiral. Prestamos especial atención a la línea correspondiente a $J_2 = J_3$ que incluye el punto especial ($J_2 = J_3 = J_1/2$) donde el estado fundamental es altamente degenerado.

algunos puntos interesantes del mismo.

Comenzamos considerando el modelo de Heisenberg con acoplamientos a primeros, segundos y terceros vecinos sobre la red hexagonal, de manera que el hamiltoniano puede ser escrito como

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_1} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + J_2 \sum_{\langle i,j \rangle_2} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j + J_3 \sum_{\langle i,j \rangle_3} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (8.1)$$

El modelo clásico [101, 102] presenta las diferentes fases a temperatura cero que se muestran en la figura (8.3), con un punto crítico en $J_2 = J_3 = \frac{1}{2}J_1$ donde las tres fases se unen. En este punto la degeneración de los estados de mínima energía clásica es muy grande y el hamiltoniano puede ser escrito, a menos de términos constantes,

como una suma sobre plaquetas hexagonales que comparten un lado.

$$\hat{H} = \frac{J_1}{2} \sum_{\gamma} |\hat{\mathbf{S}}_{\gamma}|^2, \quad (8.2)$$

donde $\hat{\mathbf{S}}_{\gamma} = \sum_{l \in \gamma} \hat{\mathbf{S}}_l$ es el espín total en la plaqueta γ . En este punto particular, cualquier estado con espín total cero por hexágono es un estado fundamental clásico generando una gran degeneración. Este tipo de situaciones es reminiscente de lo que ocurre, por ejemplo, en la red cuadrada con acoplamientos a primeros y segundos vecinos $J_1 - J_2$ en el punto $J_2/J_1 = 0,5$ [103], el cual presenta evidencia de una fase desordenada con un gap de espín alrededor de este punto a nivel cuántico.

Por otro lado, en la primera parte de la tesis vimos que en el caso más simple del modelo de Majumdar-Gosh, el hamiltoniano podía escribirse también como suma sobre terna de espines. En ese caso particular, podemos obtener el estado fundamental exacto (doblemente degenerado) que resulta ser un estado de tipo VB esquematizado en la figura 2.3. En geometrías más complicadas que la del modelo de Majumdar-Gosh, generalmente no es posible acomodar en la red un autoestado del hamiltoniano compuesto de singletes que la cubran completamente y que represente un estado fundamental del mismo, por lo que se requiere un estudio aproximado de las propiedades del estado fundamental.¹

Motivados por las analogías con modelos sobre otras redes, como la red cuadrada o la red de Kagomé, donde el punto de máxima degeneración clásica presenta características interesantes, estudiamos para la red hexagonal la región cercana al punto de máxima degeneración $J_2 = J_3 = \frac{1}{2}J_1$, manteniéndonos en la línea $J_2 = J_3$ como se muestra en la figura 8.3.

En lo que sigue construiremos paso a paso el diagrama de fases magnético correspondiente, usando los resultados obtenidos mediante la aproximación lineal de los operadores de Holstein-Primakov. En las siguientes secciones completaremos este análisis utilizando técnicas más eficientes como la representación de los operadores de espín en términos de bosones de Schwinger y cálculos numéricos complementarios utilizando diagonalización exacta.

Comenzamos aquí con el diagrama de fases clásico y con la introducción de fluctuaciones cuánticas a primer orden en el desarrollo en potencias de $\frac{1}{S}$.

El diagrama de fases clásico para el modelo $J_1 - J_2 - J_3$ fue estudiado por Rastelli [102] y luego por Fouet *et. al.* [101] y es el que se muestra esquemáticamente en la

¹Por supuesto que podemos encontrar excepciones. Se puede siempre armar un modelo a partir de un estado de este tipo tal que el estado sea un estado fundamental del modelo. Sin embargo en general estos modelos no son realistas y contienen términos de plaquetas que son muy difíciles de tratar si se modifica ligeramente el hamiltoniano

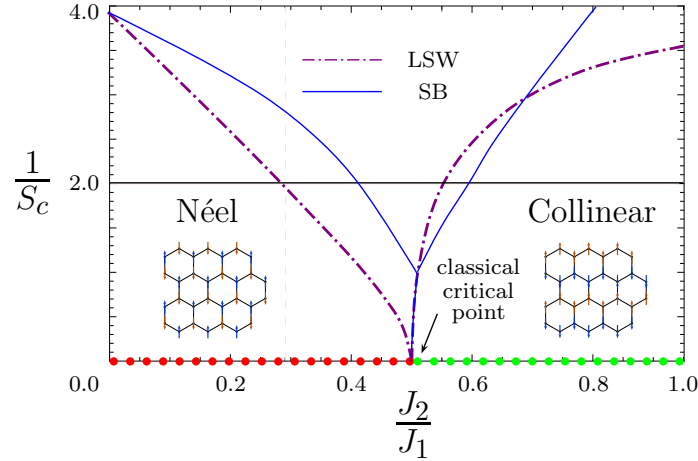


Figura 8.4: Inversa del valor crítico del espín S_c en función de J_2 : La línea de trazos muestra el borde de la región obtenido mediante ondas de espín. Debajo de esta línea, las fluctuaciones cuánticas destruyen el orden magnético de largo alcance, y el parámetro de orden magnético tiende a cero. Para $S = 1/2$ (línea negra sólida), hay un pequeño rango $0,29 \lesssim J_2/J_1 \lesssim 0,55$ donde no se detectó ningún tipo de orden magnético; la línea azul corresponde al borde encontrado mediante Bosones de Schwinger. Para el caso $S = 1/2$, hay un rango de valores $0,41 \lesssim J_2/J_1 \lesssim 0,6$ donde el sistema presenta un gap indicando una fase cuánticamente desordenada (ver Fig. 8.6). La línea punteada corresponde al límite clásico $S \rightarrow \infty$ donde el estado fundamental corresponde a la fase de Néel en la región $J_2/J_1 < 0,5$, mientras que para $J_2/J_1 > 0,5$ el estado fundamental corresponde a la fase CAF.

figura 8.3. El sistema presenta dos fases colineales y una fase de tipo espiral.

Cuando $J_2 = J_3$, el diagrama de fases clásico se reduce a la línea $1/S_c = 0$ de la figura 8.4 donde las fases tipo Néel y colinear se unen en el punto $J_2/J_1 = 0,5$. Para describir este tipo de orden podemos parametrizar los espines clásicos de la siguiente manera

$$\vec{S}_{\vec{R},\alpha} = S(\cos(\vec{Q} \cdot \vec{R} + \phi_\alpha) \check{e}_1 + \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R} + \phi_\alpha) \check{e}_2) \quad (8.3)$$

donde \vec{R} es la posición de la celda unidad donde se encuentra el espín y \check{e}_1, \check{e}_2 son los versores en las direcciones x e y . Una dada configuración magnética está caracterizada por el vector de ordenamiento \vec{Q} y la fase interna ϕ_α , donde $\alpha = A, B$ es el índice interno correspondiente a cada una de las dos subredes.

Para $J_2/J_1 < 0,5$ el estado fundamental corresponde a la fase Néel con un vector

de ordenamiento $\vec{Q} = (0, 0)$ y $\phi_A - \phi_B = \pi$, mientras que para $J_2/J_1 > 0,5$ el estado fundamental corresponde a la fase colineal con $\vec{Q} = (2\pi/\sqrt{3}, 0)$ y $\phi_A - \phi_B = \pi$. En lo que sigue nos referiremos a las fases Néel y colineal como NAF y CAF respectivamente.

Usando el desarrollo en ondas de espín [104, 105] presentado en la sección 2.5, estudiamos la estabilidad del diagrama de fases clásico ante fluctuaciones cuánticas. Algunos de los resultados están resumidos en la figura 8.4 en función de la magnitud del espín S y la frustración (J_2/J_1).

El valor crítico de la magnitud del espín donde las fases ordenadas se vuelven inestables fue obtenido calculando el valor de frustración en el cual las fluctuaciones cuánticas destruyen el orden clásico, es decir, donde el parámetro de orden correspondiente a cada fase se anula.

Nuestros resultados muestran que las fluctuaciones reducen la estabilidad del orden de Néel alrededor del punto clásico $J_2/J_1 = 1/2$. Para $S = \frac{1}{2}$ el orden de Néel se mantiene estable en el rango $0 < J_2/J_1 \lesssim 0,29$ y el orden colineal para $0,55 \lesssim J_2/J_1$.

Un análisis más detallado de la región $0,29 \lesssim J_2/J_1 \lesssim 0,55$ utilizando la representación de bosones de Schwinger y diagonalización exacta será presentado en la siguiente sección.

8.2. Resultados de campo medio mediante la aproximación de bosones de Schwinger.

En esta sección estudiamos el modelo de Heisenberg (8.1) usando una versión invariante rotacional de la aproximación de campo medio mediante la representación de los operadores de espín en términos de bosones de Schwinger presentada en la sección 2.4. Esta aproximación ha mostrado un excelente desempeño incorporando las fluctuaciones cuánticas [109, 110, 112].

En la representación de bosones de Schwinger la interacción de intercambio puede ser escrita en una forma bicuadrática. En esta representación, los operadores de espín en cada sitio son reemplazados por dos especies de bosones por medio de la relación

$$\vec{\mathbf{S}}_{\vec{x}} = \frac{1}{2} \vec{\mathbf{b}}_{\vec{x}}^{\dagger} \cdot \vec{\sigma} \cdot \vec{\mathbf{b}}_{\vec{x}}, \quad (8.4)$$

donde $\vec{\mathbf{b}}_{\vec{x}}^{\dagger} = (\mathbf{b}_{\vec{x}\uparrow}^{\dagger}, \mathbf{b}_{\vec{x}\downarrow}^{\dagger})$ es un espinor bosónico, $\vec{\sigma}$ es el vector de matrices de Pauli y hay que tener en cuenta la restricción en el número de bosones en cada sitio.

$$\sum_{\sigma} \mathbf{b}_{\vec{x}\sigma}^{\dagger} \mathbf{b}_{\vec{x}\sigma} = 2S. \quad (8.5)$$

Con esta representación el término de intercambio puede ser escrito en una forma invariante rotacional

$$\vec{\mathbf{S}}_{\vec{x}} \cdot \vec{\mathbf{S}}_{\vec{y}} =: \mathbf{B}_{\vec{x},\vec{y}}^{\dagger} \mathbf{B}_{\vec{x},\vec{y}} : - \mathbf{A}_{\vec{x},\vec{y}}^{\dagger} \mathbf{A}_{\vec{x},\vec{y}}, \quad (8.6)$$

donde $\sigma = \pm$, $: \mathbf{O} :$ indica orden normal del operador \mathbf{O} y definimos los operadores invariantes $SU(2)$

$$\mathbf{A}_{\vec{x},\vec{y}} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{b}_{\vec{x},\sigma} \mathbf{b}_{\vec{y},-\sigma} \quad (8.7)$$

$$\mathbf{B}_{\vec{x},\vec{y}}^{\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \mathbf{b}_{\vec{x},\sigma}^{\dagger} \mathbf{b}_{\vec{y},\sigma}. \quad (8.8)$$

El operador $\mathbf{A}_{\vec{x},\vec{y}}$ crea un singlete de espines entre los sitios \vec{x} y \vec{y} y $\mathbf{B}_{\vec{x},\vec{y}}$ crea un enlace ferromagnético, lo cual implica un hopping coherente de los bosones entre esos sitios.

El presente desacople, el cual a diferencia de otros que se pueden encontrar en la literatura, permite tratar ferromagnetismo y antiferromagnetismo en pie de igualdad, fue presentado por primera vez por Ceccato y otros [109]. Luego Flint y Coleman [110] presentaron una generalización para grandes valores de N que muestra sustanciales mejoras con respecto a las aproximaciones anteriores del tipo $Sp(N)$.

Para generar una teoría de campo medio, realizamos una aproximación de tipo Hartree-Fock

$$\begin{aligned} (\vec{\mathbf{S}}_{\vec{x}+\vec{r}_{\alpha}} \cdot \vec{\mathbf{S}}_{\vec{y}+\vec{r}_{\beta}})_{MF} &= [B_{\alpha\beta}^*(\vec{x}-\vec{y}) \mathbf{B}_{\vec{x}+\vec{r}_{\alpha},\vec{y}+\vec{r}_{\beta}} \\ &- A_{\alpha\beta}^*(\vec{x}-\vec{y}) \mathbf{A}_{\vec{x}+\vec{r}_{\alpha},\vec{y}+\vec{r}_{\beta}} + H.c.] \\ &- \langle (\vec{\mathbf{S}}_{\vec{x}+\vec{r}_{\alpha}} \cdot \vec{\mathbf{S}}_{\vec{y}+\vec{r}_{\beta}})_{MF} \rangle, \end{aligned} \quad (8.9)$$

donde

$$\begin{aligned} A_{\alpha\beta}^*(\vec{x}-\vec{y}) &= \langle \mathbf{A}_{\vec{x}+\vec{r}_{\alpha},\vec{y}+\vec{r}_{\beta}}^{\dagger} \rangle \\ B_{\alpha\beta}^*(\vec{x}-\vec{y}) &= \langle \mathbf{B}_{\vec{x}+\vec{r}_{\alpha},\vec{y}+\vec{r}_{\beta}}^{\dagger} \rangle \end{aligned} \quad (8.10)$$

$$\langle (\vec{S}_{\vec{x}+\vec{r}_\alpha} \cdot \vec{S}_{\vec{y}+\vec{r}_\beta})_{MF} \rangle = |B_{\alpha\beta}(\vec{x} - \vec{y})|^2 - |A_{\alpha\beta}(\vec{x} - \vec{y})|^2. \quad (8.11)$$

Estas son las ecuaciones de campo medio que debemos resolver de manera auto-consistente junto con el vínculo en el número de bosones que podemos escribir en términos del parámetro de campo medio B en la forma

$$B_{\alpha\alpha}(R=0) = 2N_c S, \quad (8.12)$$

donde N_c es el número total de celdas unidad y S es la magnitud del espín.

Obtener las soluciones de (8.10) y (8.12) implica encontrar las raíces de 24 ecuaciones no lineales para los parámetros de campo medio A y B más las ecuaciones del vínculo para determinar los multiplicadores de Lagrange $\lambda^{(\alpha)}$ que fijan el número de bosones.

En este caso, realizamos todos los cálculos para redes finitas (pudiendo realizarlo en tamaños muy grandes) y finalmente extrapolamos los resultados al límite termodinámico².

El proceso de autoconsistencia consiste en resolver numéricamente las ecuaciones (8.10) y (8.12). Con los valores obtenidos para los parámetros de campo medio y los multiplicadores de Lagrange calculamos la energía del sistema y los nuevos valores de los parámetros A y B . Repetimos este procedimiento hasta que tanto la energía como los parámetros converjan. Después de alcanzar la convergencia podemos calcular varias cantidades físicas como energía, correlaciones espín-espín, gap de las excitaciones, etc.

Para complementar los resultados de campo medio, realizamos cálculos numéricos sobre redes de 18, 24 y 32 sitios usando Lanczos con condiciones de contorno periódicas. Con esta técnica podemos calcular la energía, correlaciones espín-espín, correlaciones dímero-dímero, etc. Estos resultados fueron contrastados con los obtenidos mediante la aproximación de bosones de Schwinger, obteniendo excelentes acuerdos para redes pequeñas (ver, por ejemplo, la figura 8.5).

Las técnicas de diagonalización exacta son herramientas muy útiles a la hora de caracterizar las propiedades del estado fundamental de un sistema de espines, pero su principal desventaja reside en el hecho de que solo pueden estudiarse sistemas pequeños, donde los efectos de tamaño finito no pueden ser descartados. Aunque en los últimos años la potencia de cálculo ha aumentado notablemente, todavía los tamaños que se pueden resolver numéricamente utilizando diagonalización exacta no son suficientes para poder extrapolar las propiedades en el límite termodinámico de manera satisfactoria. Es por eso que la utilización de técnicas aproximadas como

²Generalmentelos resultados para tamaños grandes (mayores a 2000 sitios) ya no muestran una fuerte dependencia con el tamaño.

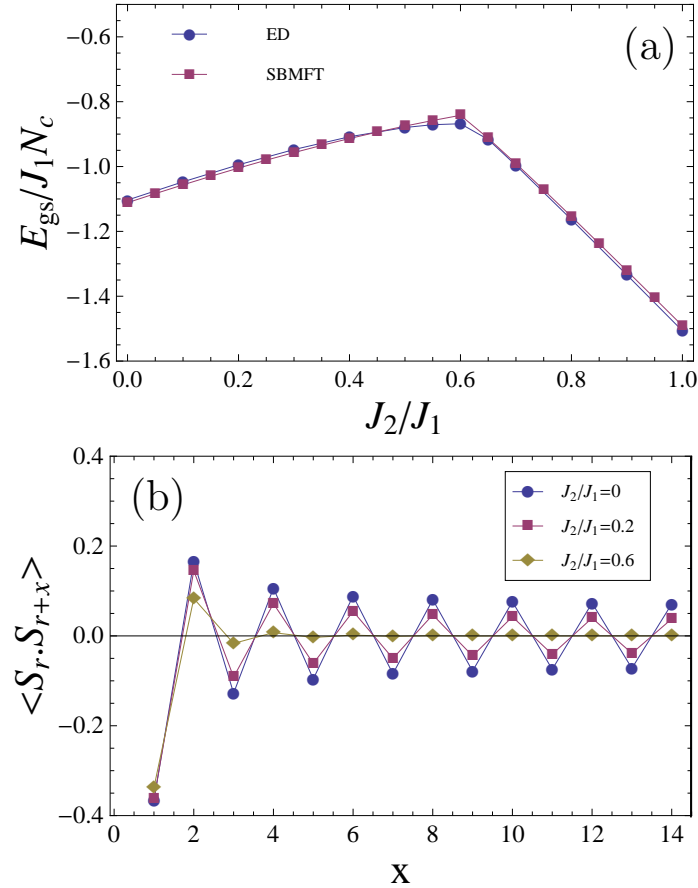


Figura 8.5: (a): Energía del estado fundamental por celda en función de J_2/J_1 para una red de 32 sitios. Los círculos corresponden a cálculos exactos y los cuadrados son los resultados obtenidos mediante bosones de Schwinger. (b): Función de correlación espín-espín en función de la distancia entre sitios x en la dirección zig-zag obtenida mediante bosones de Schwinger. Para $0 < J_2/J_1 \lesssim 0,41$, la función de correlación se corresponde con un estado de tipo Néel de largo alcance. Para $0,41 \lesssim J_2/J_1 \lesssim 0,6$ la función de correlación es de corto alcance. Este resultado es consistente con la presencia del gap en la relación de dispersión de los bosones.

la teoría de campo medio basada en bosones de Schwinger utilizada en esta tesis, contrastadas con los resultados exactos para tamaños finitos, suele ser la estrategia mas efectiva a la hora de describir este tipo de sistemas. El uso de estas técnicas en conjunto a mostrado tener un gran poder de predicción.

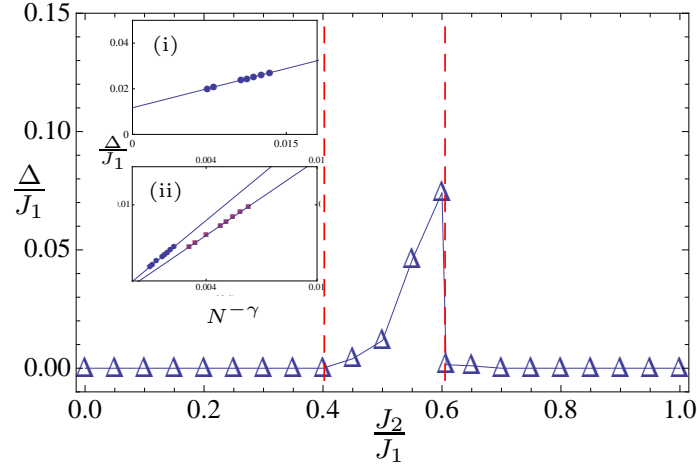


Figura 8.6: (a): Gap en la relación de dispersión bosónica en función del parámetro de frustración J_2/J_1 para el caso $S = 1/2$. En la región $J_2/J_1 \sim 0,6$ el sistema presenta un gap en el espectro. Inset: Extrapolación al límite termodinámico para diferentes valores del gap. (i) $J_2/J_1 = 0,5$ ($\gamma = 0,6451$), (ii): Los círculos corresponden a $J_2/J_1 = 0,05$ ($\gamma = 0,911$) y los cuadrados corresponden a $J_2/J_1 = 0,35$ ($\gamma = 0,758$).

En la figura 8.5(a) se muestra la energía del estado fundamental como función de la frustración para un sistema de 32 sitios, calculada mediante bosones de Schwinger y diagonalización exacta. Como puede apreciarse, existe un excelente acuerdo entre las dos técnicas implementadas. En la misma figura puede verse también la función de correlación espín-espín calculada mediante bosones de Schwinger para $J_2/J_1 = 0,0,2$ y $J_2/J_1 = 0,6$. Para el último valor se observa claramente que el estado presenta un orden de corto alcance, consistente con la presencia de gap en el espectro bosónico. Las mismas características son observadas en sistemas pequeños mediante diagonalización exacta, pero en este caso se hace extremadamente difícil determinar en que región del espacio de parámetros el sistema presenta orden de corto alcance real, ya que la función de correlación solo puede calcularse para algunos pocos vecinos, y los efectos de tamaño finito cobran mayor importancia en las cantidades que son dependientes de la posición.

Una de las ventajas de utilizar bosones de Schwinger es que nos permite estudiar sistemas de gran tamaño y reducir así los efectos de tamaño finito en los cálculos. En este caso se han estudiado sistemas de hasta 3000 sitios y luego se realizó una extrapolación al límite termodinámico. Para los tamaños mas grandes casi no se observa dependencia con el tamaño del sistema, por lo que se espera que los resultados

extrapolados al límite termodinámico sean representativos.

Para el caso $J_2 = J_3$, en el modelo (8.1) solo se encontraron fases colineales conmensuradas, es decir, fases en las cuales el vector de ordenamiento magnético Q_0 se mantiene fijo en un punto de la zona de Brillouin, independientemente del valor de J_2/J_1 . Esta característica es esperable ya que en el límite clásico todas las fases en la línea estudiada son colineales. Sin embargo, esto no implica que el sistema esté ordenado ya que podemos encontrar que el sistema no presenta correlaciones de largo alcance.

En el límite termodinámico $N_c \rightarrow \infty$, un estado con orden de largo alcance es caracterizado en la aproximación de bosones de Schwinger por una condensación de los bosones en el punto Q_0 de la zona de Brillouin. Esto implica que la relación de dispersión para los bosones en un estado con largo alcance no debe presentar gap.

Para detectar si el sistema presenta orden de largo alcance resolvemos las ecuaciones (8.10) y (8.12) para sistemas finitos, calculamos el gap en la relación de dispersión en función de J_2/J_1 para diferentes tamaños, y realizamos un escaleo para determinar el gap en el límite termodinámico. Con esto encontramos que el sistema presenta una región de valores de J_2/J_1 donde el gap se mantiene finito en el límite termodinámico.

La extrapolación del gap calculado mediante la aproximación de bosones de Schwinger en función de J_2/J_1 es presentada en la figura 8.6. Las figuras insertadas muestran ejemplos de la extrapolación realizada para distintos valores de J_2/J_1 . En el rango de valores $0,41 < J_2/J_1 < 0,6$ el sistema presenta una región donde la relación de dispersión de los bosones tiene un gap finito. Como dijimos antes, la existencia de este gap sugiere que en esta región el sistema no presenta orden de largo alcance. Para verificar esto y comprender mejor la estructura de las diferentes fases podemos calcular función de correlación espín-espín.

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{y}} \rangle. \quad (8.13)$$

Estas correlaciones fueron calculadas tanto en la aproximación de bosones de Schwinger como con Lanczos. La primera es más útil a la hora de comprender el orden presente en el sistema dado que pueden calcularse correlaciones para sistemas de gran tamaño y verificar así el comportamiento de las mismas a grandes distancias.

Para $J_2/J_1 < 0,41$ la función de correlación es antiferromagnética y de largo alcance en todas las direcciones.

Por otro lado para $0,6 < J_2/J_1$ encontramos correlaciones ferromagnéticas de largo alcance en la dirección zig-zag, mientras que en la otra dirección las correlaciones son ferromagnéticas. Esto se corresponde con el orden clásico CAF.

El resultado más interesante se encuentra en la región intermedia $0,41 < J_2/J_1 < 0,6$ donde la función de correlación es consistente con la presencia del gap en la

relación de dispersión. En esta región encontramos que las correlaciones son de corto alcance de tipo Néel. Un gráfico de las correlaciones para $J_2/J_1 = 0, 0,2$ y $0,6$ obtenidas mediante la aproximación de bosones de Schwinger es presentada en la figura 8.5b.

En la figura 8.4 mostramos el diagrama de fases en función de $1/S$. Por un lado para valores de $1/S$ menores a un valor crítico $1/Sc(J_2/J_1)$ la función de correlación presenta orden de largo alcance, caracterizado por una condensación de los bosones en el vector de onda Q_0 . Por otro lado cuando $1/S$ es mayor que $1/Sc(J_2/J_1)$ la función de correlación es de corto alcance indicando la presencia de desorden cuántico.

Para comprender un poco mejor la naturaleza de la fase en la región donde el sistema no presenta orden de largo alcance calculamos la función de correlación dímero-dímero. Primero definimos el operador

$$d(i, j) = \frac{1}{4} - \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j. \quad (8.14)$$

Luego a partir de este, podemos definir la correlación dímero-dímero entre un par de sitios de referencia (i, j) y el par (k, l) como

$$D_{i,j}(k, l) = \langle d(i, j)d(k, l) \rangle - \langle d(i, j) \rangle \langle d(k, l) \rangle. \quad (8.15)$$

La función de correlación dímero-dímero es presentada en la figura 8.7 para $J_2/J_1 = 0,55$.

Podemos notar que el patrón encontrado mediante el cálculo de este tipo de correlaciones es similar al que fue encontrado para el modelo de Hubbard por Muramatsu *et. al* [9], ver figura 6.1. Aunque el modelo de bajas energías que se obtiene a partir del modelo de Hubbard a medio llenado no es exactamente el modelo que estamos estudiando aquí, puede verse que al desarrollar a órdenes superiores en potencias de t/U se obtiene un modelo de Hubbard sobre la red hexagonal con primeros, segundos y terceros vecinos, además de términos de plaqueta que se cree favorecen estados sin orden magnético.

8.3. Conclusiones

En resumen, los resultados encontrados con las diferentes técnicas utilizadas en esta parte de la tesis sugieren la existencia de una región en el régimen de frustración

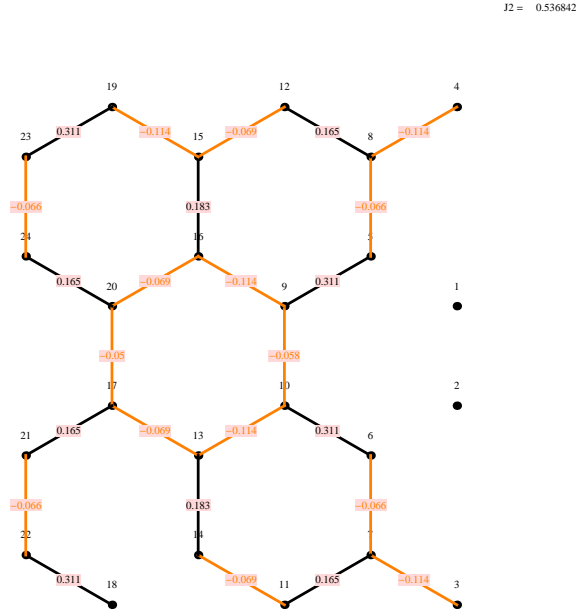


Figura 8.7: Correlacion dimero-dimero correspondiente a $J_2/J_1 = 0,537$.

fuerte donde el sistema no presenta ningún tipo de orden magnético para $S = 1/2$.

Por un lado, el análisis realizado mediante bosones de Holstein-Primakov predice que la región que presenta orden de Néel se extiende hasta $J_2/J_1 \approx 0,29$ y el orden de largo alcance de tipo colineal antiferromagnético esta presente para $J_2/J_1 \gtrsim 0,55$. En la región intermedia no se encontró evidencia de ningún tipo de orden magnético con esta técnica.

Hay que destacar que aunque la técnica de ondas de espín en la aproximación lineal introduce fluctuaciones cuánticas solo a primer orden y puede considerarse una aproximación muy simplificada, normalmente tiende a sobreestimar el orden de Néel. Por lo tanto, obtener una región donde este orden es inestable nos motiva a buscar mediante otras técnicas indicios de una fase sin orden magnético de largo alcance.

Por otro lado, los resultados encontrados mediante Bosones de Schwinger predicen una fase magnéticamente desordenada para $0,41 \lesssim J_2/J_1 \lesssim 0,6$. En esta región se abre un gap en la relación de dispersión bosónica y el análisis de la función de correlación espín-espín muestra que existe un orden de corto alcance seguido de una fase colineal de largo alcance para $J_2/J_1 \gtrsim 0,6$. Finalmente en la región donde no se encontró orden de largo alcance analizando las correlaciones espín-espín, se

estudió la correlación dímero-dímero, la que presenta evidencias de orden.

Apéndice A

Apendice: Función delta

Dada una curva definida por $g(\mathbf{k}) = 0$, podemos elegir una parametrización en términos de una función vectorial

$$\mathbf{k}(t) = (k_x(t), k_y(t)) , \quad -\pi < t < \pi , \quad (\text{A.1})$$

que dependa de un parámetro arbitrario t , y definida de forma que $\forall t : g(\mathbf{k}(t)) = 0$. En términos de esta parametrización queremos probar que la delta de Dirac puede ser escrita como

$$\delta(g(\mathbf{k})) = \int dt \frac{|\dot{\mathbf{k}}(t)|}{|\nabla g(\mathbf{k}(t))|} \delta^{(2)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}(t)) . \quad (\text{A.2})$$

Para eso, escribimos de forma explícita el lado derecho de la igualdad

$$\delta(g(\mathbf{k})) = \int dt \frac{|\dot{\mathbf{k}}(t)|}{|\nabla g(\mathbf{k}(t))|} \delta(k_x - k_x(t)) \delta(k_y - k_y(t)) , \quad (\text{A.3})$$

y reescribimos la delta en k_x usando la formula

$$\delta(f(x)) = \frac{\delta(x - \bar{x})}{f'(\bar{x})} \quad \text{donde} \quad f(\bar{x}) = 0 , \quad (\text{A.4})$$

obtenemos entonces

$$\delta(g(\mathbf{k})) = \int dt \frac{|\dot{\mathbf{k}}(t)|}{|\nabla g(\mathbf{k}(t))|} \frac{\delta(t - t(k_x))}{\dot{k}_x(t)} \delta(k_y - k_y(t)) , \quad (\text{A.5})$$

donde llamamos $t(k_x)$ a la solución de $k_x - k_x(t) = 0$. Calculando la integral en t

$$\delta(g(\mathbf{k})) = \frac{|\dot{\mathbf{k}}(k_x)|}{|\nabla g(k_x)|} \frac{\delta(k_y - k_y(k_x))}{\dot{k}_x(k_x)} , \quad (\text{A.6})$$

donde usamos la notación $f(k_x) = f(t(k_x))$. Escribiendo explícitamente la raíz cuadrada de las normas

$$\delta(g(\mathbf{k})) = \frac{\sqrt{\dot{k}_x^2(k_x) + \dot{k}_y^2(k_x)} \delta(k_y - k_y(k_x))}{\sqrt{(\partial_x g(k_x, k_y(k_x)))^2 + (\partial_y g(k_x, k_y(k_x)))^2} \dot{k}_x(k_x)}. \quad (\text{A.7})$$

y reordenando tenemos

$$\delta(g(\mathbf{k})) = \frac{\sqrt{1 + \left(\frac{dk_y(k_x)}{dk_x}\right)^2} \delta(k_y - k_y(k_x))}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial_x g(k_x, k_y(k_x))}{\partial_y g(k_x, k_y(k_x))}\right)^2} \partial_y g(k_x, k_y(k_x))}, \quad (\text{A.8})$$

donde podemos identificar la derivada en el numerador con las derivadas del denominador para cancelar la raíz cuadrada, obteniendo

$$\delta(g(\mathbf{k})) = \frac{\delta(k_y - k_y(k_x))}{\partial_y g(k_x, k_y(k_x))}. \quad (\text{A.9})$$

Esta es una identidad en virtud de (A.4) si k_y toma el lugar de x .

De esta manera mostramos la validez de (A.3).

Bibliografía

- [1] C. A. Lamas, D. C. Cabra, N. Grandi, *Physical. Review. B* **78**, 115104 (2008).
- [2] C.A. Lamas, D.C. Cabra, N. Grandi, *Physical. Review. B* **80**, 075108 (2009).
- [3] C. A. Lamas, D. C. Cabra, N. Grandi. Submitted to *Physical. Review. B*.
- [4] D. C. Cabra, C. A. Lamas, H. D. Rosales. Submitted to *Eur. Phys. Lett.*
- [5] E. Wigner, *Transactions of the Faraday Society* **34** 678-685 (1938).
- [6] J. G. Bednorz and K. A. Muller, *Zeitschrift fur Physik B*, **64** 189-193 (1986).
- [7] R. A. Borzi, S. A. Grigera, J. Farrell, R. S. Perry, S. J. S. Lister, S. L. Lee, D. A. Tennant, Y. Maeno, A. P. Mackenzie, *Science* **315**, 214-217 (2007)
- [8] *Science* **315**, 196-197 (2007)
- [9] Z. Y. Meng, T. C. Lang, S. Wessel, F. F. Assaad and A. Muramatsu, *Nature* **464**, 847 (2010)
- [10] M. Takahashi, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, 1289 (1977)
- [11] J.-Y. P. Delannoy, M. J. P. Gingras, P. C. W. Holdsworth, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **72**, 115114 (2005)
- [12] M. P. Lilly, K. B. Cooper, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999), 824–827.
- [13] M. P. Lilly, K. B. Cooper, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999), 394.
- [14] R. R. Du, D. C. Tsui, H. L. Störmer, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West, *Solid State Comm.* **109** (1999), 389.

- [15] W. Pan, R. R. Du, H. L. Störmer, D. C. Tsui, L.Ñ. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999), 820.
- [16] Eduardo Fradkin, Steven A. Kivelson, Efstratios Manousakis, and Kwangsik Nho, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000), 1982.
- [17] K. B. Cooper, M. P. Lilly, J. P. Eisenstein, L.Ñ. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **65** (2002), 241313.
- [18] A. A. Koulakov, M. M. Fogler, and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996), 499.
- [19] R. Moessner and J. T. Chalker, *Phys. Rev. B* **54** (1996), 5006.
- [20] Eduardo Fradkin and Steven A. Kivelson, *Phys. Rev. B* **59** (1999), 8065.
- [21] A. H. MacDonald and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B* **61** (2000), 5724
- [22] Daniel G. Barci, Eduardo Fradkin, Steven A. Kivelson, and Vadim Oganesyan, *Phys. Rev. B* **65** (2002), no. 24, 245319.
- [23] K. B. Cooper, M. P. Lilly, J. P. Eisenstein, T. Jungwirth, L.Ñ. Pfeiffer, and K. W. West, *Sol. State Commun.* **119** (2001), 89.
- [24] K. B. Cooper, J. P. Eisenstein, L.Ñ. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **90** , 226803, (2003).
- [25] C. Wexler and A. T. Dorsey, *Phys. Rev. B* **64** (2001), 115312.
- [26] L. Radzihovsky and A. T. Dorsey, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002), 216802.
- [27] Q. M. Doan and E. Manousakis, *Phys. Rev. B* **75** , 195433, (2007).
- [28] Vadim Oganesyan, Steven A. Kivelson, and Eduardo Fradkin, *Phys. Rev. B* **64** (2001), 195109.
- [29] S. A. Grigera, P. Gegenwart, R. A. Borzi, F. Weickert, A. J. Schofield, R. S. Perry, T. Tayama, T. Sakakibara, Y. Maeno, A. G. Green, and A. P. Mackenzie, *Science* **306** (2004), 1154–1157.
- [30] Steven A. Kivelson, Eduardo Fradkin, Vadim Oganesyan, Ian Bindloss, John Tranquada, Aharon Kapitulnik, and Craig Howald, *Rev. Mod. Phys.* **75** , 1201, (2003).

- [31] John M. Tranquada, *Treatise of High Temperature Superconductivity* (New York) (J. R. Schrieffer and J. Brooks, eds.), Springer-Verlag, 2007, pp. 257–298.
- [32] V. Hinkov, D. Haug, B. Fauqué, P. Bourges, Y. Sidis, A. Ivanov, C. Bernhard, C. T. Lin, and B. Keimer, *Science* **319** (2008), 597.
- [33] S. Taniguchi *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 2758 (1995).
- [34] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952).
- [35] A Clear and interesting introduction to Fermi Liquid theory can be found in: A. J. Leggett, *Rev. of Mod. Phys.* **47**, 331 (1975).
- [36] I. J. Pomeranchuk, *Sov. Phys. JETP* **8**, 361 (1958).
- [37] C. A. Lamas, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78** 014602 (2009).
- [38] *Statistical physics, Volumen 2*, L. D. Landau, E. M. Lifshits, Lev Petrovich Pitaevskii, Pergamon Press. (1986)
- [39] H. Yamase, W. Metzner, *cond-mat/0701660* (2007).
- [40] A. Numayr, W. Metzner, *Physical Review B* **67**, 035112 (2003).
- [41] W. Metzner, J. Reiss, D. Rohe, *cond-mat/0701660* (2007).
- [42] J. Quintanilla, A. J. Shofield, *cond-mat/0601103* (2006).
- [43] J. Quintanilla, C. Hooley, B. J. Powell, A. J. Shofield, M. Haque, *cond-mat/07042231* (2007).
- [44] C. Wu K. Sun, E. Fradkin, S. Zhang, *cond-mat/06010326* (2006).
- [45] J. Nilson, A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **72**, 195104 (2005)
- [46] C. J. Halboth, W. Metzner, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5162 (2000).
- [47] A. A. Abrikosov and I. M Khalatnikov; *JETP* **6** 888 (1958)
- [48] S. A. Kivelson and V. J. Emery, *Synth. Met.* **80**, 151 (1996), and references therein; S. A. Kivelson, E. Fradkin, and V. J. Emery, *Nature (London)* **393**, 550 (1998); E. Fradkin and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. B* **59**, 8065 (1999); E. Fradkin, S.A. Kivelson, E. Manousakis, K. Nho, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1982 (2000)

- [49] R. A. Borzi *et al*, Science **315** 214 (2007).
- [50] P. Santini and G. Amoretti, Phys. Rev. Lett. **73**, 1027 (1994); V. Barzykin and L. P. Gorkov, Phys. Rev. Lett. **74**, 4301 (1995); P. Chandra *et al.*, Nature (London) **417**, 831 (2002).
- [51] C. M. Varma, Lijun Zhu, Phys. Rev. Lett. **96**, 036405 (2006).
- [52] C.M. Varma, Philosophical Magazine, **85**, 1657 (2005).
- [53] H. Yamase, H. Kohno, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 2151 (2000); A. Miyanaga, H. Yamase, Phys. Rev. **B 73**, 174513 (2006); H. Yamase, W. Metzner, Phys. Rev. **B 73**, 214517 (2006); H. Yamase, Phys. Rev. **B75**, 014514 (2007).
- [54] R. Gonczarek, M. Krzyzosiak, M. Mulak, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 4899 (2004).
- [55] Belen Valenzuela, Maria A.H Vozmediano; Phys. Rev. B **63**, 153103 (2001)
- [56] J. González; Phys. Rev. B **63**, 045114 (2001)
- [57] C.A. Lamas, D.C. Cabra, N. Grandi; Phys. Rev. B **78**, 115104 (2008).
- [58] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov; Science **306** 666 (2004)
- [59] J. González, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano; Phys. Rev. Lett. **77**, 3589 (1996)
- [60] J. González, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano; Phys. Rev. B **59**, R2474 (1999)
- [61] Belen Valenzuela, Maria A.H Vozmediano; New J. Phys. **10** (2008) 113009, arXiv:0807.5070v1.
- [62] S. Das Sarma, E. H. Hwang, and Wang-Kong Tse; Phys. Rev. B **75**, 121406(R) (2007)
- [63] A Bostwick, T Ohta, T Seyller, K Horn, E Rotenberg; Nature Physics **3**, 36 (2007), cond-mat/0609660
- [64] I. Khavkine, Chung-Hou Chung, Vadim Oganessian, Hae-Young Kee, Phys. Rev. B **70**, 155110 (2004).

- [65] V. Hankevich, F. Wegner, Physical Review B **31**, 333 (2003).
- [66] A. P. Kampf, A. A. Katanin, Physical Review B **67**, 125104 (2003).
- [67] Ying-Jer Kao, Hae-Young Kee, Phys. Rev. B **76**, 045106 (2007).
- [68] C. Puetter, H. Doh, Hae-Young Kee, cond-mat/07061069 (2007).
- [69] S. A. Grigera, P. Gegenwart, R. A. Borzi, F. Weickert, A. J. Schofield, R. S. Perry, T. Tayama, T. Sakakibara, Y. Maeno, A. G. Green, et al, Science. **306**, 1154 (2004).
- [70] S. A. Grigera, R. A. Borzi, A. P. Mackenzie, S. R. Julian, R. S. Perry, Y. Maeno, A. G. Green, et al, Phys. Rev. B **67**, 214427 (2003).
- [71] H. -Y. Kee, A. A. Katanin, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 073706 (2007).
- [72] H. Yamase, Y. B. Kim, Phys. Rev. B **71**, 184402 (2005).
- [73] J. M. Luttinger, Phys Rev **119** 1153 (1960).
- [74] P. A. Frigeri, C. Honerkamp, T. M. Rice, cond-mat/0204380 (2002).
- [75] Y. Fuseya, H. Maebashi, S. Yotsuhashi, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 2158 (2000).
- [76] For an excellent report about $d_{x^2-y^2}$ pairing in cuprate superconductors see: D. J. Scalapino, Phys. Rep. **250**, 329 (1995).
- [77] D. C. Cabra, N. Grandi, C. A. Lamas, Work in progress.
- [78] Claire Lhuillier, Lecture notes (fall 2002) *Ecole de troisième cycle de Suisse Romande*, arXiv:cond-mat/0502464, (2005).
- [79] Subir Sachdev, Lectures at the Les Houches School on "Modern theories of correlated electron systems", France, May 2009; arXiv:1002.3823v3.
- [80] J. H. P. Colpa, Physica **93A**, 327 (1978).
- [81] E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991)
- [82] P. Chandra, B. Douçot, Phys. Rev. B **38**, 9335 (1988)
- [83] A. Chubukov, Phys. Rev. B **44**, 392 (1991)
- [84] C. Bruder y F. Mila, Europhys. Lett. **17**, 463 (1992)

- [85] J. E. Hirsch y S. Tang, Phys. Rev. B 39, 2850 (1989)
- [86] F. Figueirido, A. Karlhede, S. Kivelson, S. Sondhi, M. Rocek y D. R. Rokhsar, Phys. Rev. B 41, 4619 (1990)
- [87] H. Schulz y T. A. L. Ziman, Europhys. Lett. 18, 355 (1992)
- [88] N. Read y S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. 62, 1694 (1989)
- [89] A. Moller, U. Low, T. Taetz, M. Kriener, G. André, F. Damay, O. Heyer, M. Braden, and J. A. Mydosh Phys. Rev. B **78**, 024420 (2008)
- [90] L. Viciua, Q. Huangb, E. Morosana, H.W. Zandbergenc, N.I. Greenbauma, T. McQueenena and R.J. Cavaa, Journal of Solid State Chemistry, **180**, 1060 (2007).
- [91] M. Metlitski, S. Sachdev, Phys. Rev. B **77**, 054411 (2008).
- [92] R. Kaul *et al.*, Phys. Rev. B **78**, 045110 (2008).
- [93] L. Wang, A.W. Sandvik, Phys. Rev. B **81**, 054417 (2010).
- [94] A. Ralko, M. Mambrini, D. Poilblanc, Phys. Rev. B **80**, 184427 (2009).
- [95] P.W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [96] S. Okubo *et al.*, J. Phys.: Conf. Series **200**, 022042 (2010).
- [97] *Magnetic Properties of Layered Transition Metal Compounds*, Ed. L.J. De Jongh, Kluwer, Dordrecht (1990).
- [98] R. Arita *et al.*, Phys. Rev. Lett. **88**, 127202 (2002); Y. Suwa *et al.*, Phys. Rev. B **68**, 174419 (2003); A. Harrison, J. Phys.: Condens. Matter **16**, S553 (2004); Y. Z. Zheng *et al.*, Angew. Chem. Int. Ed. **46**, 6076 (2007).
- [99] D. Jaksch, P. Zoller, Ann. Phys. (N.Y.) **315**, 52 (2005).
- [100] M. Lewenstein *et al.*, Adv. Phys. **56**, 243 (2007).
- [101] J.B. Fouet, P. Sindzingre, C. Lhuillier, Eur. Phys. J. B **20**, 241 (2001)
- [102] E. Rastelli, A. Tassi, L. Reatto, Physica 97B, 1 (1979).

- [103] P. Chandra, B. Doucot, Phys. Rev. B 38, 9335 (1988); E. Dagotto and A. Moreo, Phys. Rev. Lett. 63, 2148 (1989); N. Read and S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. 66, 1773 (1991); H.J. Schulz and T.A.L. Ziman, Europhys. Lett. 18, 355 (1992); F. Figueirido et al., Phys. Rev. B 41, 4619 (1990); M.E. Zhitomirsky and K. Ueda, ibid. 54 9007 (1996); R.R.P. Singh et al., ibid. 60, 7278 (1999); V.N. Kotov et al., ibid. 60, 14613 (1999); L. Capriotti and S. Sorella, Phys. Rev. Lett. 84, 3173 (2000).
- [104] A. Auerbach, *Interacting Electrons And Quantum Magnetism* (Springer-Verlag, New York, 1994).
- [105] The $J_1 - J_2 - J_3$ Heisenberg model on the honeycomb lattice was analyzed previously using LSWT in [101], but the intermediate phase along the line $J_2 = J_3$, which is the main aim of the present paper, was not analyzed in detail.
- [106] A. Altland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2006).
- [107] A.E. Trumper, L. Capriotti, S. Sorella, Phys. Rev. B **61**, 11529 (1999).
- [108] A. Mattson, P. Frojdh, Phys. Rev. B **49**, 3997 (1994).
- [109] H.A. Ceccato, C.J. Gazza, A.E. Trumper, Phys. Rev. B **47**, 12329 (1993).
- [110] R. Flint *et al.*, Phys. Rev. B **79**, (2008).
- [111] J.H.P. Colpa, Physica 93A, 327-353 (1978)
- [112] A.E. Trumper *et al.*, Phys. Rev. Lett. **78**, 2216 (1997)
- [113] J. Schulenburg, program package SPINPACK, <http://www-e.uni-magdeburg.de/jschulen/spin/>
- [114] M Orlita and M Potemski, Semicond. Sci. Technol. **25**, 063001, (2010)
- [115] S. Y. Zhou et al. Nature **2**, 595, (2006)

Índice alfabético

- Bogoliubov, 25, 28, 33
Bose-Einstein, 36
bosones de Schwinger, 19
Brillouin, 125
- campo medio, 20, 26
cristal líquido, 37
Cupratos, 40
- fase nemática, 37, 41
fases magnéticas, 101
Fermi, 7, 37
Fourier, 30, 33, 34
- Goldstone, 31, 34
- Hartree-Fock, 21
Heisenberg, 7, 13, 20
Holstein-Primakov, 28, 31
Hubbard, 7
- inestabilidad, 42
inestabilidades electrónicas, 47
introducción, 3
Ising, 7
- límite clásico, 13, 25
líquido de espín, 15, 16
líquido de Fermi, 36, 39, 42
líquidos electrónicos, 36
Lagrange, 23
Landau, 36, 41
- Majumdar-Gosh, 18
metal, 35
modelos, 7, 36
motivaciones, 3
Mott, 39
- número de coordinación, 37
- ondas de espín, 28, 29
- Pomeranchuk, 42
- Rutenatos, 42
- sistemas correlacionados, 35, 37
Sommerfeld, 7
superconductividad, 36, 43
superconductor, 36
superficie de Fermi, 43
- Valence Bond, 16
- Wigner, 35