



Universidad Nacional de Rosario

Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura

Escuela de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

Excitaciones magnéticas en antiferromagnetos frustrados dopados

Tesina presentada para optar por el grado de

Licenciado en Física

Autor

Ignacio Luciano Pomponio

Director

Dr. Luis O. Manuel

Septiembre de 2020

Agradecimientos

Principalmente tengo que agradecerle a Luis, por ser una fuente constante de motivación, y por haber allanado el camino, en conjunto con Adolfo y el Colo, para que esta tesina haya sido posible.

Estudiar esta carrera fue una montaña rusa de emociones, donde la pasión por la Física es lo que me mantuvo firme. Por eso les agradezco a todas y todos los docentes que se encargaron de transmitirme esa pasión por lo que hacen y enseñan.

A mi familia, por su paciencia. En particular a mis padres, mi abuela y sobre todo a mi hermana, quien nos dio un respiro de buenas noticias en pleno fin del mundo.

A Miri, el Viejo, Nico, Delfi y mis demás amigas y amigos de Exactas, por su carácter de *personas increíbles*, y por alegrarme todos los almuerzos en la facultad durante los últimos años (o al menos cuando podíamos ir!).

Y, por último, a la Educación Pública, Gratuita y de Calidad, y quienes lucharon y luchan por defenderla.

Contenidos

1. Antiferromagnetismo cuántico y sistemas itinerantes	5
1.1. Sistemas de electrones correlacionados	7
1.2. Fluctuaciones cuánticas o de punto cero	9
1.3. Frustración magnética	10
1.4. Ruptura espontánea de simetría	11
1.5. Teoría de ondas de espín	13
1.6. Diagrama de fases cuántico de un antiferromagneto triangular dopado .	14
1.7. Factor de estructura dinámico	16
2. Modelo t-J: bosones de Schwinger y fermiones esclavos	20
2.1. Representación de partículas auxiliares	21
2.1.1. Bosones de Schwinger	22
2.1.2. Fermiones esclavos	23
2.1.3. El modelo t-J en la representación de bosones de Schwinger y fermiones esclavos	23
2.2. Integral funcional del modelo t-J	24
2.2.1. Transformación de Hubbard-Stratonovich	25
2.2.2. Aproximación de punto de ensilladura	29
2.2.3. Ecuaciones de autoconsistencia	33
2.2.4. Algunas magnitudes evaluadas en el punto de ensilladura	34
2.3. Ruptura de simetría	36
2.3.1. Susceptibilidad magnética dinámica	39
3. Caracterización de las fases del modelo t-J en la red triangular	41
3.1. Dopajes pequeños: fase de 120°	42
3.2. Dopajes intermedios: fase espiral y orden de 120°	44

3.3. Dopajes altos: fase colineal de 180° y formación de cadenas ferromagnéticas	46
4. Excitaciones magnéticas en el modelo t-J sobre la red triangular	50
4.1. Caso de hopping positivo ($t > 0$)	51
4.1.1. Fase de 120°	51
4.1.2. Fase colineal de 180°	54
4.2. Caso de hopping negativo ($t < 0$)	56
4.2.1. Fase de 120°	56
4.2.2. Fases espirales	57
4.2.3. Fase de 180°	58
5. Conclusiones y perspectivas	61
A. Equivalencia entre la aproximación de campo medio y la aproximación de punto de ensilladura	63
Bibliografía	64

Resumen

En este trabajo se pretende estudiar los efectos combinados de la frustración magnética y la itinerancia electrónica sobre las propiedades de un antiferromagneto cuántico. Uno de los modelos más naturales que considera grados de libertad de carga y espín es el modelo $t - J$, que prohíbe la doble ocupación electrónica en un sitio y minimiza la energía de interacción de dos espines vecinos cuando estos apuntan en sentidos opuestos.

El procedimiento para tratar con este sistema de muchas partículas interactuantes consiste en descomponer los grados de libertad de espín y carga en bosones de Schwinger y fermiones esclavos, y una vez expresado al hamiltoniano en estas nuevas variables construir la función de partición mediante la formulación de integral de caminos. Esta integral no puede ser resuelta analíticamente, pero puede desacoplar interacciones mediante una transformación de Hubbard-Stratonovich, para realizar luego una aproximación de punto de ensilladura sobre dichos campos desacoplantes. Con los valores de los campos en el punto de ensilladura se pueden calcular, en función del dopaje, distintas propiedades del sistema, como la energía del estado fundamental y la magnetización local del antiferromagneto. Además, introduciendo un campo magnético que seleccione el orden magnético de la fase, se imita el fenómeno de ruptura de simetría en cálculos sobre redes finitas, el cual se produce espontáneamente en el límite termodinámico. Esto permite calcular correctamente la susceptibilidad magnética dinámica, relacionada con el factor de estructura dinámico, que revela el espectro de excitaciones magnéticas presentes en el sistema.

Estudiar los espectros de excitaciones dados por el factor de estructura dinámico es de gran interés, ya que además de brindar información sobre las excitaciones magnéticas, esta magnitud puede ser observada mediante experimentos de dispersión inelástica de neutrones. Con esa motivación, se computa el factor de estructura dinámico en función del dopaje y las distintas escalas de energía en las distintas fases antiferromagnéticas que presenta el modelo $t - J$ triangular a temperatura cero.

Capítulo 1

Antiferromagnetismo cuántico y sistemas itinerantes

A diferencia del ferromagnetismo, la propuesta de la existencia del antiferromagnetismo y su posterior entendimiento fue objeto de controversias a lo largo de la primera mitad del siglo XX. Los antiferromagnetos son sistemas físicos en los que los espines se disponen regularmente apuntando en direcciones opuestas a las de sus vecinos, dando como resultado una magnetización macroscópica nula. Mientras que en un modelo de Heisenberg ferromagnético obtener el estado fundamental no requiere más trabajo que pensar a todos los espines alineados en la misma dirección, el estado fundamental de un antiferromagneto presenta complicaciones. El comienzo del estudio de los antiferromagnetos se remonta hacia 1930, cuando Néel propuso que el estado fundamental de un antiferromagneto cuántico formado por dos redes cristalinas interpenetradas era análogo al estado clásico de mínima energía, esto es, un estado en el que los momentos magnéticos se ubican apuntando en una dirección o en la opuesta dependiendo de la subred sobre la que se encuentran [1]. Sin embargo, otros investigadores, entre los que se encontraba Landau, renegaron de esta hipótesis, alegando que la presencia de intensas fluctuaciones cuánticas propias de estos sistemas destruiría completamente el orden antiferromagnético [2]. En particular, Bethe demostró que el orden antiferromagnético era imposible en sistemas unidimensionales [3], dándole un fuerte sustento a las sospechas de quienes rechazaban la idea del ordenamiento antiferromagnético.

Tuvieron que pasar cerca de 20 años desde la propuesta de Néel hasta que se produzcan las primeras detecciones experimentales de sistemas que presentaban un orden

antiferromagnético [4]. Estas observaciones continuaron¹, motivando a Anderson a desarrollar su teoría de la ruptura espontánea de simetría, mediante la cual demostró que el orden antiferromagnético era posible a pesar de las fluctuaciones cuánticas presentes en dichos sistemas [5].

Por su parte, el interés en los antiferromagnetos dopados se despertó luego del descubrimiento del fenómeno de superconductividad de alta temperatura crítica [6]. Particularmente Anderson comentó que la física de aquellos cupratos superconductores debía estar correctamente capturada por el modelo de Hubbard de una banda en una red cuadrada [7], cuyo límite de acoplamiento fuerte es el modelo $t - J$, que da cuenta del movimiento de huecos en un trasfondo de interacciones antiferromagnéticas, y que a medio llenado se reduce al modelo de Heisenberg. Esto comenzó una carrera para intentar caracterizar dichos materiales y buscar nuevos materiales cuyas temperaturas críticas fueran aún más altas.

Por otro lado, en sistemas con fuerte correlación electrónica, el fenómeno de frustración magnética puede llegar a ser de gran importancia, ya que tiene como efecto una cuasi-degeneración de los estados de baja energía, lo que incrementa sustancialmente las fluctuaciones cuánticas de punto cero y conduce a que el sistema sea considerablemente más susceptible a cambios que en el caso no frustrado. En ocasiones la frustración puede llevar al sistema hacia estados de *líquido de espines* o de *enlaces de valencia resonantes* (RVB), un fenómeno completamente opuesto al ordenamiento magnético clásico, y que podría explicar la aparición de pares de huecos superconductores [8]. Además, los espectros de excitaciones magnéticas de antiferromagnetos triangulares presentan anomalías: excitaciones magnónicas con tiempos de vida cortos, un considerable continuo de excitaciones, entre otras [9].

Los efectos de la frustración y el dopaje actuando simultáneamente en aislantes de Mott es algo poco estudiado, y se conocen sistemas triangulares en los que al introducir dopaje se obtiene una fase superconductora [10], mientras que otros presentan espectros de excitaciones que se alejan de las teorías convencionales [11].

En este capítulo se introducirán los modelos microscópicos esenciales discutidos en esta tesina, en particular el modelo $t - J$, utilizado para describir a los antiferromagnetos dopados. Además se explorará el fenómeno de fluctuaciones cuánticas y el incremento de ellas producido por la frustración geométrica de la red. Se discutirá la importancia

¹Hoy se conocen muchos más materiales que presentan orden antiferromagnético que ferromagnetos.

del fenómeno de ruptura espontánea de simetría en estos sistemas y se presentará la teoría semiclásica de ondas de espín para antiferromagnetos con las predicciones de esta teoría para el caso de un antiferromagneto triangular. También se discutirán resultados conocidos del modelo $t - J$, como su diagrama de fases de ordenamiento magnético obtenido con una aproximación de campo medio. Finalmente se hará una breve descripción de la técnica experimental de dispersión de inelástica de neutrones, utilizada para medir el factor de estructura dinámico, magnitud que brinda información sobre el orden y las excitaciones magnéticas presentes en el sistema sobre el que se mide.

1.1. Sistemas de electrones correlacionados

Los modelos de electrones libres o casi libres no alcanzan para entender el origen de la mayoría de los fenómenos magnéticos presentes en los materiales [12]. La teoría de bandas incluso predice que ciertos materiales observados experimentalmente como aislantes deberían ser metales. Estos modelos desprecian completamente la interacción coulombiana de carácter repulsivo presente entre electrones, tratando a los sistemas como conjuntos de N electrones independientes que deben acomodarse en distintos niveles de energía respetando el principio de exclusión de Pauli.

Gran parte de los fenómenos magnéticos emergen al considerar la combinación del efecto repulsivo producido por la interacción coulombiana con la estadística fermiónica obedecida por los electrones. Estos sistemas físicos de muchos cuerpos donde las interacciones electrón-electrón deben ser tenidas en cuenta se conocen como *sistemas electrónicos fuertemente correlacionados*.

Uno de los modelos microscópicos más famoso y particularmente simple es el modelo propuesto por Hubbard en 1963 [13]. Este modelo describe una competencia entre la tendencia a la delocalización debida de la energía cinética de los electrones y la tendencia a la localización producida por la repulsión entre electrones. En el formalismo de segunda cuantización, el modelo de Hubbard viene descrito por el hamiltoniano

$$\hat{H}_{Hubbard} = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (1.1)$$

donde $\langle ij \rangle$ indica suma sobre los primeros vecinos de la red cristalina, t_{ij} es una integral de hopping presente entre los sitios i y j , $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ es un operador que crea un electrón en el sitio i con espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$; U es la energía potencial de la interacción coulombiana entre dos

electrones ubicados en un mismo orbital y $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ el operador número de ocupación de un electrón con espín σ en el sitio i . La interpretación de este hamiltoniano es sencilla: los electrones pueden tunelear entre sitios vecinos libremente, pero la doble ocupación de un sitio incurre en una penalización energética. Este sencillo modelo permite caracterizar a un tipo de materiales conocidos como *aislantes de Mott*. Se trata de materiales que pierden su característica de metal por alcanzar grandes valores para el cociente U/t . La interacción repulsiva gana tanta importancia que produce una transición de fase hacia un sistema aislante.

En un sistema a medio llenado² y con alta repulsión electrónica, esto es, un sistema cuyos únicos grados de libertad relevantes no son más que los del espín de un electrón por sitio en la red, el término cinético del hamiltoniano de Hubbard desaparece y se arriba a un nuevo modelo, conocido como modelo de Heisenberg

$$\hat{H}_{Heisenberg} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (1.2)$$

donde $\hat{\mathbf{S}}_i$ es el operador espín en el sitio i , y $J_{ij} = 4t_{ij}^2/U$ es la interacción de superintercambio entre los espines i y j . Este modelo describe a materiales aislantes con interacciones antiferromagnéticas entre los espines vecinos. A su vez, el modelo de Heisenberg puede pensarse como un caso límite del modelo $t - J$ cuando se encuentra a medio llenado. Este modelo puede deducirse del modelo de Hubbard en el límite $U/t \gg 1$ y está asociado al hamiltoniano

$$\hat{H}'_{t-J} = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c.) + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_j}{4} \right) \quad (1.3)$$

donde $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger (1 - \hat{n}_{i\bar{\sigma}})$. El producto entre los operadores número de ocupación entre los sitios i y j , en general, puede despreciarse porque se buscan fases o estados fundamentales donde la ocupación electrónica es homogénea, en cuyo caso el término cumpliría el papel de correr las energías en una cantidad constante. En tal caso se arriba a una forma más simple del modelo $t - J$,

$$\hat{H}_{t-J} = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c.) + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j. \quad (1.4)$$

En este modelo los electrones presentan una interacción espín-espín con sus vecinos, y pueden trasladarse a sitios vecinos solo si estos sitios no están ocupados. Los operadores tildados $(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{i\sigma})$ son las proyecciones de los operadores creación y destrucción de

²Al hablar de medio llenado se hará referencia a la presencia de un electrón desapareado por sitio de la red.

un electrón en un sitio i con espín σ sobre el espacio que prohíbe la doble ocupación electrónica en un sitio. Por esto el término cinético no debe confundirse con un término de tight-binding, y puede simplificarse su interpretación pensando que describe el movimiento de huecos. En las próximas secciones se discutirá cómo la competencia entre la parte cinética y la parte de intercambio de este modelo dará lugar a distintos tipos de fases magnéticas aún a temperatura cero.

1.2. Fluctuaciones cuánticas o de punto cero

A temperatura cero, en ausencia de fluctuaciones térmicas, los sistemas antiferromagnéticos se caracterizan por la presencia de intensas fluctuaciones cuánticas. Esto se debe principalmente a que el orden antiferromagnético donde los espines se ubican en direcciones opuestas a las de sus vecinos, conocido como orden de Néel clásico, no es autoestado del hamiltoniano de Heisenberg. Puede verse de manera sencilla estudiando un modelo de Heisenberg de dos sitios

$$\hat{H} = J\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$$

que utilizando los operadores escalera de espín $\hat{S}_j^\pm = \hat{S}_j^x \pm i\hat{S}_j^y$ puede reescribirse como

$$\hat{H} = J\hat{S}_1^z\hat{S}_2^z + J\frac{1}{2}\left(\hat{S}_1^+\hat{S}_2^- + \hat{S}_1^-\hat{S}_2^+\right).$$

Aplicando este operador a un estado de Néel arbitrario (dos espines antiparalelos) $|\sigma\bar{\sigma}\rangle$ se tiene³

$$\hat{H}|\sigma\bar{\sigma}\rangle = -\frac{J}{4}|\sigma\bar{\sigma}\rangle + \frac{J}{2}|\bar{\sigma}\sigma\rangle. \quad (1.5)$$

Si pudiese considerarse únicamente al primer término de la derecha en (1.5), se tendría que el orden de Néel es un autoestado. Sin embargo, la presencia de un término extra no despreciable con los espines invertidos indica que no lo es. De manera práctica, preparando al sistema en un estado $|\sigma\bar{\sigma}\rangle$ y dejándolo evolucionar temporalmente a través del operador $e^{-i\hat{H}t}$, esperando un determinado tiempo se encuentra que los espines se “voltean”, es decir, pasan a un estado $|\bar{\sigma}\sigma\rangle$, y esto sucede indefinidamente. A este fenómeno de intercambio de espines constantemente es a lo que se denomina fluctuaciones cuánticas o de punto cero. En efecto, se sabe que el estado fundamental del modelo de Heisenberg de dos sitios es un singlete y conserva la simetría $SU(2)$ del hamiltoniano.

³A lo largo de esta tesina se toma $\hbar = k_B = 1$.

Las fluctuaciones cuánticas son las responsables de las transiciones de fase cuánticas, es decir, transiciones de fase a $T = 0$, y como se verá más adelante, se incrementan al aumentar la frustración geométrica del sistema. Además reducen la magnetización promedio de un sitio en los antiferromagnetos cuánticos respecto de la magnetización que tendría un sistema clásico.

1.3. Frustración magnética

En un material aislante, esto es, donde los electrones no se mueven de un sitio de la red a otro, la interacción que acapara todo el interés es la magnética entre los espines de sitios vecinos. Para una red cuadrada, si todos los espines se encuentran apuntando en la misma dirección, se dice que existe un orden ferromagnético, y el material presenta, macroscópicamente, una magnetización distinta de cero. En contraposición, se habla un orden antiferromagnético cuando todos los espines vecinos se ubican apuntando en direcciones opuestas. Esta configuración se conoce como orden de Néel de 180° , y puede pensarse como la superposición de dos subredes ferromagnéticas. Este orden de Néel es el estado fundamental en una red bipartita finita a temperatura cero para un sistema antiferromagnético.

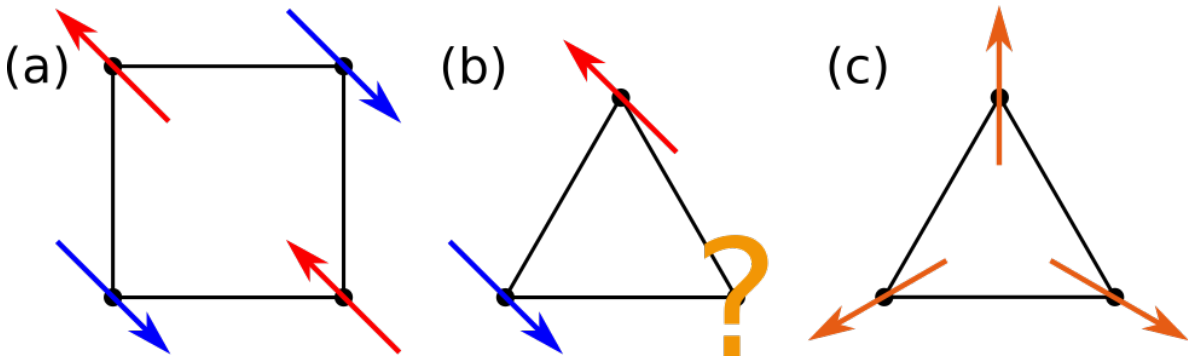


Figura 1.1: Orientación de los momentos magnéticos en la red cuadrada y la triangular. (a) Orden de 180° en la red cuadrada. (b) En la red triangular no pueden minimizar la energía simultáneamente todos los pares de espines en un orden de 180° . (c) Orden de Néel de 120° en la red triangular.

Por su parte, en una red triangular, al querer ubicar los espines vecinos de forma antiparalela, ocurre un fenómeno conocido como frustración magnética. Es imposible minimizar localmente las energías de todos los pares de espines en la red, y el orden de Néel de 180° deja de ser el estado fundamental del sistema (Fig. 1.1). Clásicamente

el sistema se ordena ubicando sus momentos magnéticos formando ángulos de 120° con sus vecinos. En este caso, el estado fundamental se degenera accidentalmente y el sistema debe optar entre distintos estados posibles que son igualmente insatisfactorios energéticamente respecto del orden de Néel de 180° . Es por esto que la energía del estado fundamental resulta mayor en la red triangular que en la red cuadrada.

A pesar que el origen de la frustración magnética puede deberse a la geometría de la red, otros fenómenos como la competencia entre interacciones de una misma subred –por ejemplo, al considerar interacciones entre sitios más lejanos que los primeros vecinos– también contribuyen a la frustración del sistema.

El principal efecto de la frustración en los antiferromagnetos cuánticos recae sobre las fluctuaciones cuánticas. Al incrementar la degeneración del estado fundamental, las fluctuaciones se vuelven aún más intensas. Esto fue lo que llevó a Fazekas y Anderson a proponer que en la red triangular, geoméricamente frustrada, el ordenamiento magnético era imposible debido a la intensidad de tales fluctuaciones [14]. Posteriormente esta idea se demostraría errónea, al comenzar a aparecer resultados numéricos que anunciaban la existencia de un ordenamiento de Néel de 120° en la red triangular [15][16].

1.4. Ruptura espontánea de simetría

En una red cuadrada el estado de Néel clásico no conserva la simetría rotacional $SU(2)$ del hamiltoniano de Heisenberg, es decir, no es autoestado del hamiltoniano, sino que posee una simetría menor $U(1)$ de invariancia ante rotaciones en el eje de ordenamiento de los espines. Se dirá que ocurre una *ruptura espontánea de simetría* cuando el estado fundamental posee una menor simetría respecto al hamiltoniano del sistema en cuestión. Esto se caracteriza mediante la presencia de un parámetro de orden no nulo, que en el caso de un antiferromagneto cuántico es la magnetización local o *staggered*

$$\hat{m}_z = \frac{1}{N} \sum_i e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} \hat{S}_i^z \quad (1.6)$$

donde N es el número de sitios, \mathbf{Q} el vector de onda magnético, que puede pensarse a partir del ángulo formado por dos espines ubicados en los sitios i y j : $\theta_{ij} = \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, por lo que cada término de la sumatoria contribuye con cierta proyección de una componente del espín de un sitio. A partir de esto se define al orden de Néel cuántico

como un estado con $m_z = \langle \hat{m}_z \rangle \neq 0$, que se verá reducido respecto de su valor clásico S debido a la existencia de fluctuaciones cuánticas.

El fenómeno de ruptura espontánea de simetría no se presenta en sistemas finitos, sino que solo puede darse al trabajar en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$)[5]. El teorema de Goldstone sostiene que en un sistema con interacciones de corto alcance, por cada simetría continua rota se presenta una excitación no masiva de energía nula, usualmente conocida como bosón de Goldstone. La aparición de estos bosones “compensa” al hecho de que el estado fundamental posee una simetría menor que el hamiltoniano. Para medir el grado de orden de un sistema magnético suele definirse a la función de correlación espín-espín antiferromagnética

$$C_{AF}(\mathbf{r}_i) = \langle e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_i \rangle. \quad (1.7)$$

Si esta función decae mediante una ley de potencias, se dice que hay orden de largo alcance, mientras que si el decaimiento es exponencial con una longitud característica ξ , existirá un orden de corto alcance, y dos espines separados por una distancia mayor a ξ no estarán correlacionados. Cuando exista orden de largo alcance, valdrá

$$\lim_{|\mathbf{r}_i| \rightarrow \infty} C_{AF}(\mathbf{r}_i) > 0$$

es decir, espines que se encuentran infinitamente alejados entre sí permanecerán correlacionados [17].

La presencia de temperatura en el sistema, como es de esperar, hará disminuir las correlaciones de espín. Esto indica que al incrementar la temperatura en una fase ordenada magnéticamente, se alcanzará una temperatura crítica, llamada temperatura de Néel, por encima de la cual el sistema presentará una fase desordenada. Sin embargo, Mermin y Wagner demostraron un teorema en el cual afirman que en sistemas unidimensionales o bidimensionales con interacciones de corto alcance, y cuyos estados fundamentales rompan una simetría continua del hamiltoniano, la temperatura de Néel es estrictamente cero [18]. Esto implica que el orden de largo alcance es inestable para cualquier espín en presencia de fluctuaciones térmicas. Aquí se observa nuevamente en la importancia de las transiciones de fase cuánticas, puesto que por encima del cero absoluto será imposible encontrar orden de largo alcance.

1.5. Teoría de ondas de espín

La relación de dispersión de las excitaciones magnéticas presentes en un antiferromagneto de Heisenberg puede obtenerse mediante la teoría de ondas de espín (LSWT) antiferromagnética propuesta originalmente por Anderson [5]. Se trata de una teoría semiclásica que, partiendo desde la solución clásica del problema, introduce posteriormente correcciones cuánticas.

En el caso de la red triangular puede tomarse un orden magnético de 120° ubicado en el plano xz y pensar a la red como la superposición de tres redes ferromagnéticas. Rotando los espines a un sistemas de ejes locales, de modo de simplificar cálculos posteriores, se transforma al hamiltoniano de Heisenberg a la forma

$$\hat{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J \left[\hat{S}_i^y \hat{S}_j^y + \cos(\theta_i - \theta_j) \left(\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z + \hat{S}_i^x \hat{S}_j^x \right) + \sin(\theta_i - \theta_j) \left(\hat{S}_i^z \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^x \hat{S}_j^z \right) \right]$$

donde $\theta_i = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i$, siendo \mathbf{R}_i un vector de la red cristalina. Luego, aplicando una transformación de Holstein-Primakoff (H-P)

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^z &= S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \\ \hat{S}_i^+ &= \sqrt{2S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i} \hat{a}_i \\ \hat{S}_i^- &= \hat{a}_i^\dagger \sqrt{2S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i} \end{aligned}$$

siendo los \hat{a}_i operadores bosónicos, y realizando una transformación de Fourier se llega a

$$\hat{H} = -\frac{3}{2}JS^2N + \sum_{\mathbf{k}} \left[3JS \left(1 + \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} - \frac{9}{4}JS\gamma_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} \right) \right] \quad (1.8)$$

donde se retuvieron únicamente términos de orden S^2 y S , y

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{3} \left(\cos(k_x) + \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}\right) \right).$$

El hamiltoniano expresado como en (1.8) posee términos anómalos, pero puede diagonalizarse mediante una transformación de Bogoliubov

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \hat{a} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger$$

donde $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$. Finalmente el hamiltoniano de la teoría de ondas de espín lineal adquiere la forma

$$\hat{H} = -\frac{3}{2}JS(S+1)N + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right)$$

Heisenberg triangular consiste en un orden de 120° [19]. Incluso se han logrado fabricar experimentalmente compuestos que pueden ser modelizados mediante un hamiltoniano de Heisenberg sobre una red triangular [9]. Sin embargo, esto cambia al tenerse en cuenta los efectos de la itinerancia electrónica. Dopar con huecos un antiferromagneto frustrado da lugar a interesantes diagramas de fase cuánticos de ordenamiento magnético cuando se estudia el estado fundamental en función del dopaje y los parámetros de hopping e intercambio (Fig. 1.3), y se sospecha que podrían encontrarse fases superconductoras exóticas [20]. Mediante una teoría de campo medio de bosones de Schwinger

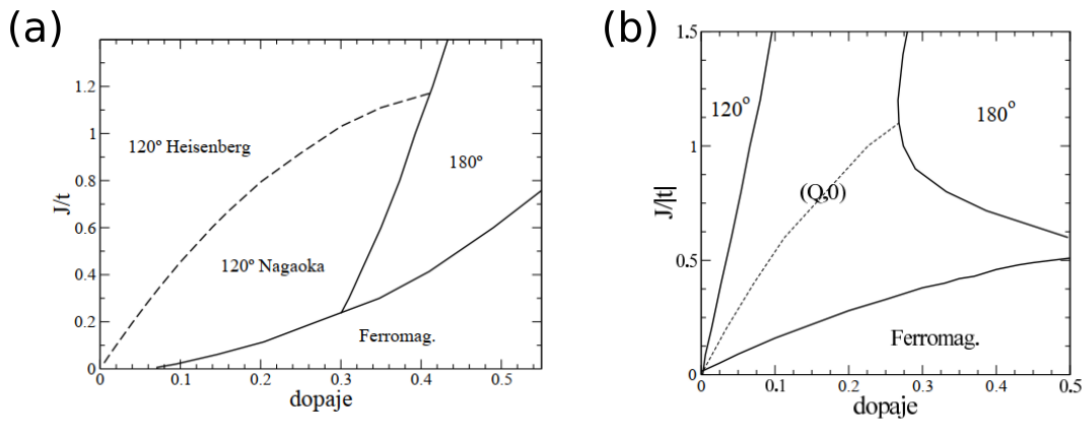


Figura 1.3: Diagramas de fases del modelo $t - J$ sobre la red triangular para (a) t positivo y (b) t negativo, obtenidos en una aproximación de campo medio [21].

y fermiones esclavos se ha encontrado que el modelo $t - J$ en la red triangular, además de presentar la fase de Néel de 120° para ciertos parámetros, presenta una fase de 180° , fases incommensuradas o espirales e incluso una fase ferromagnética [21]. Estas fases son caracterizadas por un vector de onda magnético. En el caso ferromagnético, tenemos que $\mathbf{Q}_{ferro} = (0, 0)$, mientras que en los ordenamientos de Néel podemos tener $\mathbf{Q}_{120^\circ} = (4\pi/3, 0)$ ó $\mathbf{Q}_{180^\circ} = (2\pi, 0)$ (Fig. 1.4). Para las fases espirales se sabe que la estructura es muy sensible a los parámetros del sistema y puede caracterizarse mediante $\mathbf{Q}_{esp} = (Q, 0)$. Las distintas fases se encuentran representadas en la figura 1.4.

En la fase de 120° de la figura 1.3, la línea de puntos indica un crossover entre un estado donde dominan las interacciones de intercambio y uno donde domina la energía cinética. Un fenómeno interesante que cabe mencionar en esta fase es la aparición de antiferromagnetismo de origen cinético [22]. Al hacer $J \rightarrow 0$, se encuentra que la propia energía cinética favorece un orden de Néel de 120° , debido a que un hueco adquiere una fase de Berry no trivial al moverse.

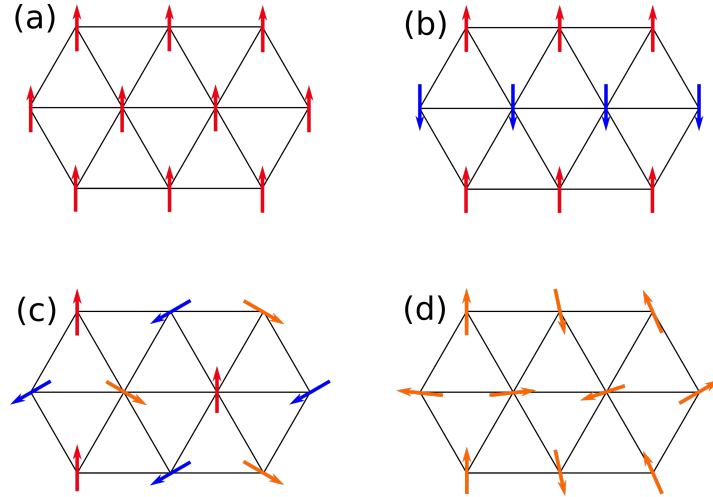


Figura 1.4: Ordenamiento magnético en la red triangular asumido en el plano xy . (a) Fase ferromagnética $\mathbf{Q} = (0, 0)$. (b) Orden de Néel de 180° $\mathbf{Q} = (2\pi, 0)$. (c) Orden de Néel de 120° $\mathbf{Q} = (\frac{4}{3}\pi, 0)$. (d) Fase incommensurada $\mathbf{Q} = (\frac{14}{15}\pi, 0)$.

La aparición de estas distintas fases magnéticas se debe tanto a la frustración como al efecto de la itinerancia electrónica, ya que en la red cuadrada, que no está frustrada, si el número de huecos se encuentra entre el 2% y el 5%, el sistema pierde su orden de largo alcance y entra en una fase desordenada tipo *vidrio de espines*, y para dopajes más altos el sistema se vuelve superconductor. Si, por el contrario, se dopa a un sistema cuadrado con electrones, el ordenamiento magnético se pierde para dopajes cercanos al 15% [23].

1.7. Factor de estructura dinámico

La dispersión inelástica de neutrones es una técnica experimental muy poderosa para obtener distinto tipo de información de una muestra cristalina. Al tratarse de partículas con espín $\frac{1}{2}$ y sin carga eléctrica, los neutrones interactúan magnéticamente con los espines de los electrones desapareados de la muestra y se dispersan brindando información sobre el orden magnético presente y el espectro de excitaciones magnéticas del sistema. Las perturbaciones que ejercen sobre el sistema de estudio son tan leves que, en el caso de dispersión elástica se conserva el estado fundamental, mientras que para la dispersión inelástica las excitaciones producidas quedan bien definidas [24].

Puede probarse que la sección eficaz de los neutrones dispersados está relacionado con el factor de estructura dinámico $S^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega)$, que se trata de la transformada de

Fourier de la función de correlación entre espines. El factor de estructura dinámico del sistema, a su vez, se encuentra íntimamente relacionado con la susceptibilidad magnética dinámica $\chi_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega)$, ya que según el teorema de fluctuación-disipación [25]

$$S^{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{1 - e^{-\omega\beta}} \left(-\frac{1}{\pi} \right) \text{Im}(\chi_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega)). \quad (1.10)$$

En particular, a temperatura cero el factor de estructura dinámico es proporcional a la parte imaginaria de la susceptibilidad dinámica, y la constante de proporcionalidad no depende de ninguna propiedad del sistema. Mientras que la señal obtenida en $\omega = 0$ indica el orden magnético existente⁴, las señales obtenidas en $\omega \neq 0$ dan cuenta de las excitaciones magnéticas presentes en el sistema. En la figura 1.5 se muestran los

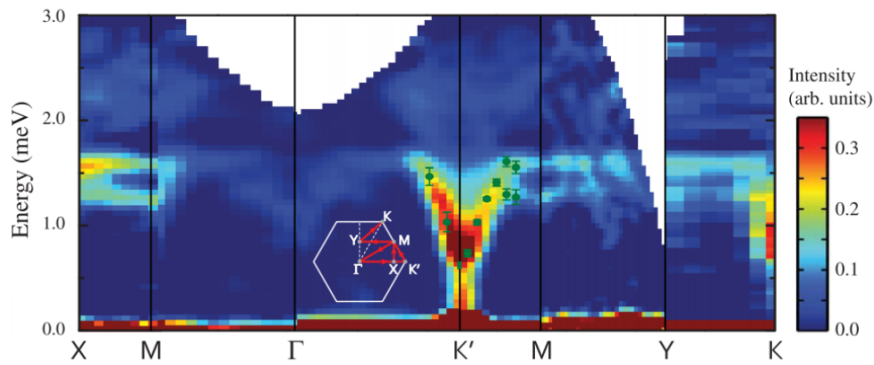


Figura 1.5: Factor de estructura dinámico obtenido mediante un experimento de dispersión inelástica de neutrones sobre el compuesto $Ba_3CoSb_2O_9$, que es la realización experimental de un modelo de Heisenberg XXZ triangular [9].

resultados de un experimento de dispersión inelástica de neutrones sobre un compuesto particular. Este espectro de excitaciones magnéticas ha logrado ser reproducido con buena precisión mediante una teoría de bosones de Schwinger que incluye correcciones gaussianas sobre la solución de campo medio (Fig. 1.6) [26].

Recientes trabajos experimentales han comenzado a explorar los efectos combinados de la itinerancia electrónica y la frustración magnética. En la figura 1.7 puede observarse la comparación entre el factor de estructura dinámico del compuesto CrB_2 con las predicciones que se obtienen de aplicar LSWT en un modelo de Heisenberg que contiene 6 parámetros asociados a las interacciones de intercambio entre distintos vecinos [11]. Este material se trata de un *metal magnético* formado por la superposición de dos tipos de redes: una red triangular donde se ubican los átomos magnéticos de Cromo y una

⁴El factor de estructura dinámico evaluado en $\omega = 0$ es conocido como factor de estructura estático.

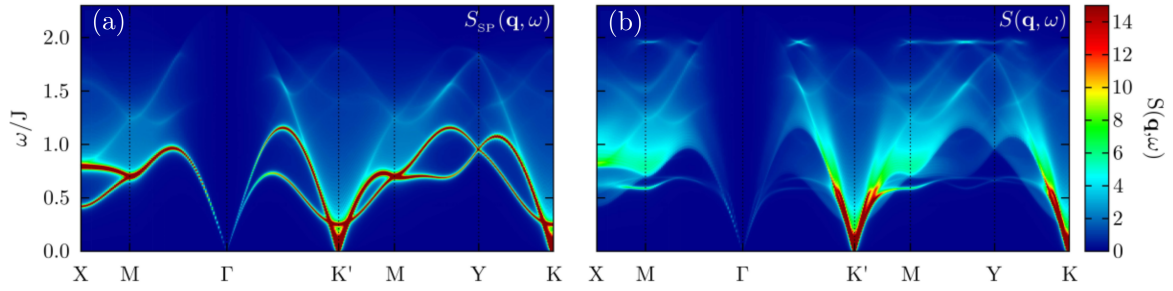


Figura 1.6: Factor de estructura dinámico de un modelo de Heisenberg triangular obtenido con una teoría de bosones de Schwinger a orden (a) campo medio (b) campo medio con correcciones gaussianas [26].

red tipo panal de abejas en la que yacen los átomos de Boro. En este ejemplo puede verse que la teoría de ondas de espín lineal resulta inadecuada para explicar el continuo de excitaciones magnéticas que aparece en altas energías.

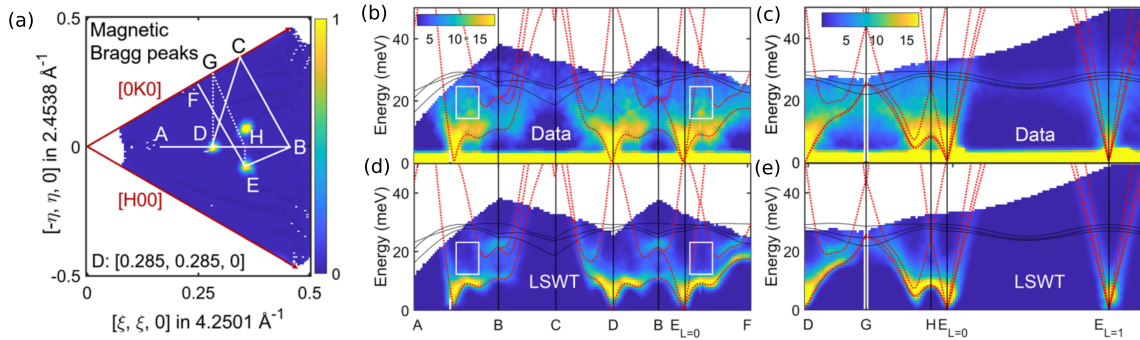


Figura 1.7: Resultados obtenidos en un experimento de dispersión inelástica de neutrones sobre el compuesto CrB_2 [11]. (a) La línea sólida blanca indica el camino recorrido para graficar el factor de estructura dinámico. (b) (c) Factor de estructura dinámico medido para el compuesto CrB_2 . (d) (e) Simulaciones del mismo espectro obtenidas mediante LSWT. En líneas de puntos rojos se encuentran graficadas las relaciones de dispersión dadas por LSWT, en líneas sólidas negras las relaciones de dispersión fonónicas. Los cuadrados blancos muestran un continuo de excitaciones no puede ser explicado mediante LSWT.

En un antiferromagneto de Heisenberg la única escala de energía es J , por lo que si experimentalmente se logra trabajar con temperaturas que sean pequeñas fracciones de dicha escala, podría asegurarse que las excitaciones de carácter térmico son despreciables y hablarse de que el sistema se comporta como si estuviese a temperatura cero. En el modelo $t - J$, por su parte, J suele ser la escala de menor energía, y generalmente puede afirmarse lo mismo que para el antiferromagneto de Heisenberg. Entonces traba-

jando a temperaturas lo suficientemente bajas, las excitaciones originadas térmicamente desaparecen, dejando en evidencia únicamente a las excitaciones magnéticas presentes por encima del estado fundamental del sistema. En conclusión, la factibilidad del uso de un modelo para describir a un dado sistema puede testearse mediante la comparación entre la susceptibilidad dinámica del mismo y el espectro de excitaciones magnéticas obtenidas por dispersión inelástica de neutrones.

El objetivo central de esta tesina será comenzar a extender la teoría de bosones de Schwinger desarrollada para antiferromagnetos de Heisenberg hacia sistemas que contemplen la itinerancia electrónica, particularmente hacia un modelo $t - J$, y computar la susceptibilidad magnética dinámica en este modelo sobre la red triangular. De esa forma se podrán estudiar los cambios producidos en el espectro de excitaciones magnéticas al introducir y modificar el dopaje del sistema.

Capítulo 2

Modelo t - J : bosones de Schwinger y fermiones esclavos

Arovas y Auerbach introdujeron en 1988 la teoría *Large \mathcal{N}* de bosones de Schwinger [27], mediante la cual hacen uso del formalismo de integrales de camino, o integrales funcionales, para representar formalmente a la función de partición de un modelo de Heisenberg sobre una red cristalina y luego poder realizar aproximaciones sobre ella. En esta teoría se transforman a los operadores de espín en operadores bosónicos, reescribiendo al hamiltoniano de Heisenberg en función de estos operadores, de modo que posteriormente se pueda escribir la función de partición como una suma ponderada sobre todos los “caminos” posibles descritos por los estados coherentes de aquellos operadores, aprovechándose la equivalencia entre el operador evolución temporal y el factor de Boltzmann

$$e^{-iHt} \longleftrightarrow e^{-\beta H}$$

cuando se realiza una rotación de Wick¹ [28].

Por otro lado, en el afán por caracterizar al modelo $t - J$ producido tras el descubrimiento de los cupratos superconductores, casi simultáneamente, Sarker *et al* lograron asociar el ordenamiento magnético en una red cuadrada con una condensación de los bosones de Schwinger [29] y encontraron una forma de representar a los huecos conductores del modelo $t - J$ a través de fermiones esclavos [30]. De este modo, no tardaría en aparecer la aplicación de la teoría desarrollada por Arovas y Auerbach a antiferromagnetos dopados [31][32].

¹Transformación a tiempo imaginario.

Como se ha comentado en el capítulo anterior, la aplicación de esta teoría a antiferromagnetos frustrados, con la correcta introducción del campo de ruptura de simetría y utilizando aproximaciones que van más allá del campo medio ha empezado a dar resultados prometedores para describir espectros de excitaciones magnéticas [26][33]. Por ello mismo esta tesina pretende ser un primer paso en la extensión de dicha teoría a sistemas antiferromagnéticos que presenten dopaje.

En este capítulo se introducen las representaciones de bosones de Schwinger y fermiones esclavos, reescribiendo al hamiltoniano del modelo $t - J$ en función de los operadores creación y destrucción de estas nuevas partículas. En particular se definen unos operadores de *link* ferromagnéticos y antiferromagnéticos que serán de utilidad a lo largo del cálculo y además poseen un significado físico propio. Luego se escribirá formalmente a la función de partición del modelo $t - J$ mediante una integral funcional en autovalores de los estados coherentes de los nuevos bosones y fermiones. Para continuar el tratamiento de la integral funcional se introducen transformaciones —de *Hubbard-Stratonovich*— que desacoplan interacciones de bosones y fermiones a cambio de introducir unos nuevos campos. De esta manera se llega a una acción efectiva que dependerá de una matriz dinámica para los fermiones y otra para los bosones. Aplicando luego una aproximación de punto de ensilladura se pueden computar el valor de las energías fermiónicas y bosónicas a partir de las funciones de Green de las partículas. La sección concluye con la obtención de las ecuaciones de autoconsistencia para los operadores de *link* y el espín, y ecuaciones para la energía y la magnetización local del estado fundamental del modelo en dicha aproximación. Finalmente se introduce un campo magnético externo con la simetría de la fase que se obtendría en el límite termodinámico, de modo que interactúe con los espines del sistema e imite el fenómeno de ruptura espontánea de simetría en redes finitas. Una vez introducido este campo, se vuelven a obtener las ecuaciones de autoconsistencia y se computa la susceptibilidad magnética dinámica del modelo $t - J$.

2.1. Representación de partículas auxiliares

Aunque el modelo $t - J$ en segunda cuantización (1.4) posee una interpretación sencilla, la presencia de operadores de espín introduce complicaciones a futuro dado que al ser momentos angulares sus relaciones de conmutación resultan en operadores cuya acción sobre algunos estados es no trivial. Para solucionar ese problema, en esta sección

se presenta la representación bosónica de Schwinger para tratar los grados de libertad de espín y la representación de fermiones esclavos para lidiar con los huecos. Estas nuevas representaciones satisfarán relaciones de conmutación bosónicas y fermiónicas respectivamente, simplificando enormemente el problema original y permitiendo posteriormente trabajar en estados coherentes, es decir, los autoestados de los operadores destrucción de una partícula.

2.1.1. Bosones de Schwinger

La representación de bosones de Schwinger consiste en expresar a los operadores de espín mediante operadores bosónicos de espín $\frac{1}{2}$ en la forma

$$\hat{\mathbf{S}}_i = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{b}}_i^\dagger \cdot \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{b}}_i \quad (2.1)$$

donde $\hat{\mathbf{b}}_i^\dagger$ es el espinor $(\hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger)$ y $\vec{\sigma} = (\sigma_x \sigma_y \sigma_z)$ es el vector formado por las matrices de Pauli. Estos nuevos operadores satisfacen las relaciones de conmutación bosónicas

$$\begin{aligned} [\hat{b}_{i\sigma}, \hat{b}_{j\sigma'}] &= 0 \\ [\hat{b}_{i\sigma}^\dagger, \hat{b}_{j\sigma'}^\dagger] &= 0 \\ [\hat{b}_{i\sigma}^\dagger, \hat{b}_{j\sigma'}] &= \delta_{i\sigma, j\sigma'}. \end{aligned}$$

Los operadores escalares de espín en función de los operadores bosónicos resultan

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^+ &= \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} \\ \hat{S}_i^- &= \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} \\ \hat{S}_i^z &= \frac{1}{2} (\hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} - \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow}). \end{aligned}$$

Por último, en el caso de un modelo de espines localizados, debe tenerse en cuenta la restricción $\mathbf{S}_i^2 = S(S+1)$ del álgebra de espines, que se traduce en un vínculo holónimo sobre cada sitio

$$\hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} + \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} = 2S. \quad (2.2)$$

En particular, si se trabaja con $S=1/2$,

$$\hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} + \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} = 1$$

lo que indica la presencia un único bosón de Schwinger por sitio.

2.1.2. Fermiones esclavos

Mediante los bosones de Schwinger solo se puede representar a los grados de libertad de espín presentes en el hamiltoniano del modelo $t-J$. Para incluir los grados de libertad de carga, deben introducirse unas nuevas partículas conocidas como fermiones esclavos, que indiquen la presencia de un hueco en un sitio dado. Entonces en cada sitio se podrá tener tres tipos de partículas distintas: un bosón de espín $1/2$, con el operador asociado $\hat{b}_{i\uparrow}$, un bosón con espín $-1/2$ cuyo operador asociado es $\hat{b}_{i\downarrow}$ y por último un fermión sin espín para el cual se introduce un nuevo operador \hat{f}_i . De esta manera puede realizarse la siguiente correspondencia entre los estados electrónicos presentes en el subespacio que prohíbe la doble ocupación en un sitio, debido a la fuerte correlación electrónica, con los estados de las partículas auxiliares

$$\{\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger |0\rangle, \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger |0\rangle, |0\rangle\} = \{\hat{b}_{i\uparrow}^\dagger |vac\rangle, \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger |vac\rangle, \hat{f}_i^\dagger |vac\rangle\} \quad (2.3)$$

aquí $|0\rangle$ es el estado de sitio sin electrones y $|vac\rangle$ representa un estado donde no hay bosones de Schwinger ni fermiones esclavos.

Debe imponerse una nueva restricción sobre el espacio de Fock que contemple a la anterior (2.2) para eliminar los estados doblemente ocupados

$$\hat{f}_i^\dagger \hat{f}_i + \hat{b}_{i\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i\uparrow} + \hat{b}_{i\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i\downarrow} = 2S \quad (2.4)$$

es decir, para $S = 1/2$, en cada sitio puede haber un bosón \uparrow , un bosón \downarrow o un hueco. Luego, debido a este vínculo y la correspondencia (2.3) se llega a la relación

$$\hat{c}_{i\sigma} = \hat{f}_i^\dagger \hat{b}_{i\sigma}. \quad (2.5)$$

2.1.3. El modelo t-J en la representación de bosones de Schwinger y fermiones esclavos

A partir de las consideraciones anteriores, el hamiltoniano del modelo $t-J$ (1.4) puede escribirse como

$$\hat{H}_{t-J} = \sum_{\langle ij \rangle} 2t_{ij} [\hat{F}_{ij} \hat{B}_{ij}^\dagger + h.c.] + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} [: \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij}] \quad (2.6)$$

donde se introdujeron los operadores de *link*

$$\begin{aligned}\hat{A}_{ij}^\dagger &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma \hat{b}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{j\bar{\sigma}}^\dagger \\ \hat{B}_{ij}^\dagger &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \hat{b}_{i\sigma}^\dagger \hat{b}_{j\sigma}^\dagger \\ \hat{F}_{ij}^\dagger &= \hat{f}_i^\dagger \hat{f}_j\end{aligned}$$

y la notación de un producto operadores ubicado entre dos puntos indica ordenamiento normal de los mismos. Para que la transformación sea correcta también debe tenerse en cuenta la restricción sobre el espacio de Fock (2.4). Notemos que el operador \hat{A}_{ij}^\dagger actuando sobre $|0\rangle$ crea un estado de singlete entre los sitios i y j (correlación antiferromagnética), mientras que el operador \hat{B}_{ij}^\dagger está asociado a correlaciones ferromagnéticas entre dichos sitios. Esto puede verse mejor mediante las identidades

$$\begin{aligned}\hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} &= \frac{1}{4} (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_j)^2 - \frac{S}{2} \\ : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : &= \frac{1}{4} (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j)^2 - \frac{S}{2}\end{aligned}$$

donde inmediatamente se nota que $\hat{A}^\dagger \hat{A}$ maximiza su valor cuando los espines vecinos se ubican de forma antiparalela, mientras que $: \hat{B}^\dagger \hat{B} :$ lo hace con espines vecinos paralelos. También satisfacen la relación

$$\hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} + : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : = S^2$$

mediante la cual se puede expresar a la interacción entre espines a partir de un único tipo de operadores de link. Sin embargo este esquema de cálculo ha demostrado ser menos apropiado que el que conserva a ambos operadores \hat{A}_{ij} , \hat{B}_{ij} para el tratamiento de sistemas frustrados [34]. Actualmente se sabe que para conservar la simetría correcta frente a la operación de reversión temporal de los espines en el límite de *Large - N* se deben mantener a ambos operadores en los cálculos [35].

2.2. Integral funcional del modelo t-J

La función de partición para el modelo $t - J$ dado por el hamiltoniano (2.6) considerando el vínculo (2.4) puede escribirse formalmente como la siguiente integral funcional sobre autovalores de los estados coherentes de bosones de Schwinger y fermiones esclavos [36]

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\bar{b}, b] \mathcal{D}[\bar{f}, f] e^{-\int_0^\beta d\tau \mathcal{L}(\bar{b}, b, \bar{f}, f)} \prod_{i\tau} \delta(\bar{f}_i^\tau f_i^\tau + \sum_{\sigma} \bar{b}_{i\sigma}^\tau b_{i\sigma}^\tau - 2S) \quad (2.7)$$

donde la función que juega el rol de lagrangiano está formada por

$$\mathcal{L}(\bar{b}, b, \bar{f}, f) = \sum_i \left(\sum_{\sigma} \bar{b}_{i\sigma}^{\tau} \partial_{\tau} b_{i\sigma}^{\tau} + \bar{f}_i^{\tau} \partial_{\tau} f_i^{\tau} \right) + \mathcal{H}_{t-J}(\bar{b}, b, \bar{f}, f) \quad (2.8)$$

siendo (\bar{b}, b) las variables complejas conjugadas, (\bar{f}, f) las variables de Grassmann y $\mathcal{H}_{t-J}(\bar{b}, b, \bar{f}, f)$ el hamiltoniano del modelo expresado en estas variables. Las medidas son

$$\mathcal{D}[\bar{b}, b] = \prod_{j\sigma\tau} \frac{d\bar{b}_{j\sigma}^{\tau} db_{j\sigma}^{\tau}}{2\pi i}$$

$$\mathcal{D}[\bar{f}, f] = \prod_{j\tau} d\bar{f}_j^{\tau} df_j^{\tau}$$

y aquí las productorias se hacen sobre un índice j para evitar confusión con la unidad imaginaria i . La integración se realiza sobre variables complejas que satisfacen condiciones de contorno periódicas para bosones $b_{j\sigma}^{\beta} = b_{j\sigma}^0$ y variables de Grassmann que satisfacen condiciones de contorno antiperiódicas para fermiones $f_j^{\beta} = -f_j^0$ (condiciones de Matsubara). Las funciones delta de Dirac presentes en (2.7) pueden escribirse en función de un nuevo campo λ mediante la representación

$$\delta(\bar{f}_j^{\tau} f_j^{\tau} + \sum_{\sigma} \bar{b}_{j\sigma}^{\tau} b_{j\sigma}^{\tau} - 2S) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda_j^{\tau}}{2\pi} e^{-i\lambda_j^{\tau}(\bar{f}_j^{\tau} f_j^{\tau} + \sum_{\sigma} \bar{b}_{j\sigma}^{\tau} b_{j\sigma}^{\tau} - 2S)}. \quad (2.9)$$

Entonces la función de partición puede reescribirse como

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\bar{b}, b] \mathcal{D}[\bar{f}, f] \mathcal{D}[\lambda] e^{-\int_0^{\beta} d\tau \mathcal{L}'(\bar{b}, b, \bar{f}, f, \lambda)} \quad (2.10)$$

donde la nueva medida es

$$\mathcal{D}[\lambda] = \prod_{j\tau} \frac{d\lambda_j^{\tau}}{2\pi}$$

y

$$\mathcal{L}'(\bar{b}, b, \bar{f}, f, \lambda) = \mathcal{L}(\bar{b}, b, \bar{f}, f) + i \sum_j \lambda_j^{\tau} \left(\bar{f}_j^{\tau} f_j^{\tau} + \sum_{\sigma} \bar{b}_{j\sigma}^{\tau} b_{j\sigma}^{\tau} - 2S \right). \quad (2.11)$$

2.2.1. Transformación de Hubbard-Stratonovich

La parte magnética del hamiltoniano posee dependencia cuártica en los estados coherentes de los bosones de Schwinger. Para eliminar esto es necesario introducir las transformaciones de Hubbard-Stratonovich, que no son más que las integrales gaussianas

$$e^{J_{ij} \bar{A}_{ij}^{\tau} A_{ij}^{\tau}} = J_{ij} \int \frac{d\bar{W}_{ij}^{(A)\tau} dW_{ij}^{(A)\tau}}{2\pi i} e^{-J_{ij} \bar{W}_{ij}^{(A)\tau} W_{ij}^{(A)\tau} + J_{ij} (\bar{W}_{ij}^{(A)\tau} A_{ij}^{\tau} + W_{ij}^{(A)\tau} \bar{A}_{ij}^{\tau})}$$

para A_{ij}^τ y

$$e^{-J_{ij}\bar{B}_{ij}^\tau B_{ij}^\tau} = J_{ij} \int \frac{d\bar{W}_{ij}^{(B)\tau} dW_{ij}^{(B)\tau}}{2\pi i} e^{-J_{ij}\bar{W}_{ij}^{(B)\tau} W_{ij}^{(B)\tau} + J_{ij}(-\bar{W}_{ij}^{(B)\tau} B_{ij}^\tau + W_{ij}^{(B)\tau} \bar{B}_{ij}^\tau)}$$

para B_{ij}^τ . Esto elimina los términos cuárticos introduciendo una interacción de los bosones con unos nuevos campos auxiliares $\bar{W}_{ij}^{(r)}$, $W_{ij}^{(r)}$ ($r = A, B$), llamados campos de Hubbard-Stratonovich. Entonces puede escribirse

$$e^{-\int_0^\beta d\tau \mathcal{H}_J(\tau)} = \int \mathcal{D}[\bar{W}, W] e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}(\bar{W}_{ij}^{(A)\tau} W_{ij}^{(A)\tau} + \bar{W}_{ij}^{(B)\tau} W_{ij}^{(B)\tau})} \cdot e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}(\bar{W}_{ij}^{(B)\tau} B_{ij}^\tau - W_{ij}^{(B)\tau} \bar{B}_{ij}^\tau - \bar{W}_{ij}^{(A)\tau} A_{ij}^\tau - W_{ij}^{(A)\tau} \bar{A}_{ij}^\tau)} \quad (2.12)$$

donde se llamó \mathcal{H}_J al término que incluye las interacciones de intercambio del hamiltoniano. La medida resulta

$$\mathcal{D}[\bar{W}, W] = \prod_{ij\tau r} \frac{d\bar{W}_{ij}^{(r)\tau} dW_{ij}^{(r)\tau}}{2\pi i/J_{ij}}.$$

En la parte cinética del hamiltoniano (primer sumatoria de 2.6), se pueden desacoplar las interacciones presentes entre bosones de Schwinger y fermiones esclavos introduciendo unos nuevos campos $\bar{V}_{ij}^{(l)}$, $V_{ij}^{(l)}$ con $l = 1, 2$ mediante las integrales gaussianas

$$e^{-2t_{ij}F_{ij}^\tau \bar{B}_{ij}^\tau} = 2t_{ij} \int \frac{d\bar{V}_{ij}^{(1)\tau} V_{ij}^{(1)\tau}}{2\pi i} e^{-2t_{ij}\bar{V}_{ij}^{(1)\tau} V_{ij}^{(1)\tau} + 2t_{ij}(\bar{V}_{ij}^{(1)\tau} F_{ij}^\tau - \bar{B}_{ij}^\tau V_{ij}^{(1)\tau})}$$

y

$$e^{-2t_{ij}\bar{F}_{ij}^\tau B_{ij}^\tau} = 2t_{ij} \int \frac{d\bar{V}_{ij}^{(2)\tau} V_{ij}^{(2)\tau}}{2\pi i} e^{-2t_{ij}\bar{V}_{ij}^{(2)\tau} V_{ij}^{(2)\tau} + 2t_{ij}(\bar{F}_{ij}^\tau V_{ij}^{(2)\tau} - \bar{V}_{ij}^{(2)\tau} B_{ij}^\tau)}$$

de manera que para la parte cinética resulta

$$e^{-\int_0^\beta d\tau \mathcal{H}_t(\tau)} = \int \mathcal{D}[\bar{V}, V] e^{-\int_0^\beta \sum_{\langle ij \rangle} 2t_{ij}(\bar{V}_{ij}^{(1)\tau} V_{ij}^{(1)\tau} + \bar{V}_{ij}^{(2)\tau} V_{ij}^{(2)\tau})} \cdot e^{-\int_0^\beta \sum_{\langle ij \rangle} 2t_{ij}(\bar{B}_{ij}^\tau V_{ij}^{(1)\tau} - \bar{V}_{ij}^{(1)\tau} F_{ij}^\tau - \bar{F}_{ij}^\tau V_{ij}^{(2)\tau} + \bar{V}_{ij}^{(2)\tau} B_{ij}^\tau)} \quad (2.13)$$

y la medida es

$$\mathcal{D}[\bar{V}, V] = \prod_{ij\tau k} \frac{d\bar{V}_{ij}^{(k)\tau} dV_{ij}^{(k)\tau}}{2\pi i/(2t_{ij})}$$

Para simplificar los exponentes presente en la función de partición, ahora puede definirse a las funciones

$$\Omega_{HS}(\tau) = \sum_{\langle ij \rangle} \left(\sum_l 2t_{ij} \bar{V}_{ij}^{(l)\tau} V_{ij}^{(l)\tau} + \sum_r J_{ij} \bar{W}_{ij}^{(r)\tau} W_{ij}^{(r)\tau} \right)$$

$$\Omega_{ferm}(\tau) = \sum_i \bar{f}_i^\tau (\partial_\tau + i\lambda_i^\tau) f_i^\tau + \sum_{\langle ij \rangle} 2t_{ij} (-\bar{V}_{ij}^{(1)\tau} F_{ij}^\tau - \bar{F}_{ij}^\tau V_{ij}^{(2)\tau})$$

$$\begin{aligned} \Omega_{bos}(\tau) = & \sum_{i\sigma} \bar{b}_{i\sigma} (\partial_\tau + i\lambda_i^\tau) b_{i\sigma}^\tau + \sum_{\langle ij \rangle} 2t_{ij} (\bar{B}_{ij}^\tau V_{ij}^{(1)\tau} + \bar{V}_{ij}^{(2)\tau} B_{ij}^\tau) + \\ & + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (\bar{W}_{ij}^{(B)\tau} B_{ij}^\tau - W_{ij}^{(B)\tau} \bar{B}_{ij}^\tau - \bar{W}_{ij}^{(A)\tau} A_{ij}^\tau - W_{ij}^{(A)\tau} \bar{A}_{ij}^\tau) \end{aligned}$$

de modo que la función de partición resulte

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & \int \mathcal{D}[\bar{V}, V] \mathcal{D}[\bar{W}, W] \mathcal{D}[\lambda] e^{-\int_0^\beta d\tau [\Omega_{HS}(\tau) - 2Si\Sigma_i \lambda_i^\tau]} \mathcal{Z}_{ferm}(\bar{V}^{(1)}, V^{(2)}, \lambda) \cdot \\ & \cdot \mathcal{Z}_{bos}(V^{(1)}, \bar{V}^{(2)}, \bar{W}, W, \lambda) \end{aligned} \quad (2.14)$$

siendo

$$\mathcal{Z}_{ferm}(\bar{V}^{(1)}, V^{(2)}, \lambda) = \int \mathcal{D}[\bar{f}, f] e^{-S_{ferm}(\bar{V}^{(1)}, V^{(2)}, \bar{f}, f, \lambda)} \quad (2.15)$$

$$\mathcal{Z}_{bos}(V^{(1)}, \bar{V}^{(2)}, \bar{W}, W, \lambda) = \int \mathcal{D}[\bar{b}, b] e^{-S_{bos}(V^{(1)}, \bar{V}^{(2)}, \bar{W}, W, \bar{b}, b, \lambda)} \quad (2.16)$$

con

$$S_{ferm} = \int_0^\beta d\tau \Omega_{ferm}(\tau) \equiv \int_0^\beta d\tau \sum_{\langle ij \rangle} \bar{f}_i^\tau \mathcal{C}_{ij} f_j^\tau \quad (2.17)$$

$$S_{bos} = \int_0^\beta d\tau \Omega_{bos} \equiv \int_0^\beta d\tau \sum_{\langle ij \rangle} \bar{b}_i^{\tau\dagger} \mathcal{M}_{ij} \bar{b}_j^\tau \quad (2.18)$$

donde \mathcal{C} es una matriz dinámica para los fermiones, \mathcal{M} una matriz dinámica para los bosones y $\bar{b}_i^{\tau\dagger}$ el espinor $(\bar{b}_{i\uparrow}^\tau, \bar{b}_{i\downarrow}^\tau)$. Los elementos de matriz resultan

$$\mathcal{C}_{ij} = (\partial_\tau + i\lambda_i^\tau) \delta_{ij} - 2t_{ij} (\bar{V}_{ji}^{(1)\tau} + V_{ij}^{(2)\tau}) \quad (2.19)$$

y

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{ij}^{11} &= (\partial_\tau + i\lambda_i^\tau) \delta_{ij} + t_{ij} (V_{ij}^{(1)\tau} + \bar{V}_{ji}^{(2)\tau}) + \frac{J_{ij}}{2} (\bar{W}_{ji}^{(B)\tau} - W_{ij}^{(B)\tau}) \\ \mathcal{M}_{ij}^{12} &= \frac{J_{ij}}{2} (W_{ji}^{(A)\tau} - W_{ij}^{(A)\tau}) \\ \mathcal{M}_{ij}^{21} &= \frac{J_{ij}}{2} (\bar{W}_{ij}^{(A)\tau} - \bar{W}_{ji}^{(A)\tau}) \\ \mathcal{M}_{ij}^{22} &= (-\partial_\tau + i\lambda_i^\tau) \delta_{ij} + t_{ij} (V_{ji}^{(1)\tau} + \bar{V}_{ij}^{(2)\tau}) + \frac{J_{ij}}{2} (\bar{W}_{ij}^{(B)\tau} - W_{ji}^{(B)\tau}). \end{aligned} \quad (2.20)$$

De esta manera se pasa inicialmente de tener un problema de bosones y fermiones interactuando entre sí a uno de bosones y fermiones acoplados a los campos de Hubbard-Stratonovich $V^{(k)}$, $W^{(\tau)}$ y el campo λ . Las integrales (2.15) y (2.16) se pueden calcular

a través de la integral gaussiana

$$\int \mathcal{D}[\bar{x}, x] e^{-\sum_{ij} \bar{x}_i \mathcal{D}_{ij} x_j} = [\det \mathcal{D}]^{-\xi} \quad (2.21)$$

con $\xi = -1$ para fermiones y $\xi = +1$ para bosones. Luego se pueden eliminar formalmente los fermiones esclavos y bosones de Schwinger de la función de partición, quedando

$$\mathcal{Z}_{ferm}(\bar{V}^{(1)}, V^{(2)}, \lambda) = \det \mathcal{C}(\bar{V}^{(1)}, V^{(2)}, \lambda) \quad (2.22)$$

$$\mathcal{Z}_{bos}(V^{(1)}, \bar{V}^{(2)}, \bar{W}, W, \lambda) = [\det \mathcal{M}(V^{(1)}, \bar{V}^{(2)}, \bar{W}, W, \lambda)]^{-1}. \quad (2.23)$$

Finalmente la función de partición se puede escribir de la forma

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\bar{V}, V] \mathcal{D}[\bar{W}, W] \mathcal{D}[\lambda] e^{-S_{ef}} \quad (2.24)$$

donde la acción efectiva resulta

$$S_{ef} = \int_0^\beta d\tau \left(\Omega_{HS}(\tau) - 2Si \sum_i \lambda_i^\tau \right) + \beta \mathcal{F}_{ferm}(\bar{V}^{(1)}, V^{(2)}, \lambda) + \beta \mathcal{F}_{bos}(V^{(1)}, \bar{V}^{(2)}, \bar{W}, W, \lambda) \quad (2.25)$$

siendo posible identificar

$$\mathcal{F}_{ferm}(\bar{V}^{(1)}, V^{(2)}, \lambda) = -\frac{1}{\beta} \ln(\mathcal{Z}_{ferm}) = -\frac{1}{\beta} Tr(\ln(\mathcal{C})) \quad (2.26)$$

$$\mathcal{F}_{bos}(V^{(1)}, \bar{V}^{(2)}, \bar{W}, W, \lambda) = -\frac{1}{\beta} \ln(\mathcal{Z}_{bos}) = \frac{1}{\beta} Tr(\ln(\mathcal{M})). \quad (2.27)$$

A la hora de evaluar la traza, se debe sumar sobre el índice de sitio i , el índice de tiempo imaginario τ y, para el caso bosónico, el índice de Nambu (\uparrow, \downarrow). \mathcal{F}_{ferm} (\mathcal{F}_{bos}) representa la energía libre de un gas de fermiones (bosones) acoplado a campos de Hubbard-Stratonovich, y cuyo potencial químico es λ .

Hasta ahora todas las transformaciones que se realizaron sobre la integral funcional de la función de partición son exactas, es decir, no se utilizó ninguna aproximación. Puede notarse que la acción efectiva a la que se llegó ya no posee ningún término cuadrático aislado en alguna de las variables de integración, de modo que no es posible seguir evaluando integrales gaussianas. En consecuencia, el siguiente paso consistirá realizar una aproximación sobre la integral funcional.

2.2.2. Aproximación de punto de ensilladura

El método utilizado a continuación se conoce como aproximación de fase estacionaria, de punto de ensilladura o directamente de *saddle point* (SP). Consiste en realizar una expansión de Taylor de la acción efectiva alrededor de un punto estacionario, esto es, un punto donde se anulen las primeras derivadas de dicha acción, y quedarse con la contribución de ese punto. El parámetro grande que permite realizar la aproximación es el número de flavours de los bosones de Schwinger \mathcal{N} , que es igual a 2 en el hamiltoniano utilizado. Para encontrar los valores de los campos en el saddle point se debe derivar parcialmente la acción efectiva respecto de cada campo y resolver el sistema de ecuaciones

$$\left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial \vec{\phi}_\alpha} \right|_{sp} = \vec{\eta}_{sp}^\dagger - Tr \left(\mathcal{C}_{sp}^{-1} \left. \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial \vec{\phi}_\alpha} \right|_{sp} \right) + Tr \left(\mathcal{M}_{sp}^{-1} \left. \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \vec{\phi}_\alpha} \right|_{sp} \right) = 0 \quad (2.28)$$

donde se utilizó la notación $\vec{\phi}_\alpha^\dagger = (\bar{V}_\alpha, V_\alpha, \bar{W}_\alpha, W_\alpha, \lambda_\alpha)$, con α representando los índices de sitio y tiempo, y $\vec{\eta}_{sp}^\dagger$ consiste en $(2tV_\alpha, 2t\bar{V}_\alpha, JW_\alpha, J\bar{W}_\alpha, -2Si)$. Puede simplificarse la interpretación de las ecs. (2.28) reescribiéndolas como

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial \bar{V}_{ij}^{(1)\tau}} \right|_{sp} &= 2t_{ij} (V_{ij}^{(1)\tau} |_{sp} - \langle F_{ij}^\tau \rangle_{sp}) = 0 & \left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial \bar{W}_{ij}^{(A)\tau}} \right|_{sp} &= J_{ij} (W_{ij}^{(A)\tau} |_{sp} - \langle A_{ij}^\tau \rangle_{sp}) = 0 \\ \left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial V_{ij}^{(1)\tau}} \right|_{sp} &= 2t_{ij} (\bar{V}_{ij}^{(1)\tau} |_{sp} + \langle \bar{B}_{ij}^\tau \rangle_{sp}) = 0 & \left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial W_{ij}^{(A)\tau}} \right|_{sp} &= J_{ij} (\bar{W}_{ij}^{(A)\tau} |_{sp} - \langle \bar{A}_{ij}^\tau \rangle_{sp}) = 0 \\ \left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial \bar{V}_{ij}^{(2)\tau}} \right|_{sp} &= 2t_{ij} (V_{ij}^{(2)\tau} |_{sp} + \langle B_{ij}^\tau \rangle_{sp}) = 0 & \left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial \bar{W}_{ij}^{(B)\tau}} \right|_{sp} &= J_{ij} (W_{ij}^{(B)\tau} |_{sp} + \langle B_{ij}^\tau \rangle_{sp}) = 0 \\ \left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial V_{ij}^{(2)\tau}} \right|_{sp} &= 2t_{ij} (\bar{V}_{ij}^{(2)\tau} |_{sp} - \langle \bar{F}_{ij}^\tau \rangle_{sp}) = 0 & \left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial W_{ij}^{(B)\tau}} \right|_{sp} &= J_{ij} (\bar{W}_{ij}^{(B)\tau} |_{sp} - \langle \bar{B}_{ij}^\tau \rangle_{sp}) = 0 \\ \left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial \lambda_i^\tau} \right|_{sp} &= i(\langle \sum_\sigma \bar{b}_{i\sigma}^\tau b_{i\sigma} \rangle_{sp} + \langle \bar{f}_i f_i \rangle_{sp} - 2S) = 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

donde se utilizaron las definiciones

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle_{sp} &= \frac{1}{\mathcal{Z}_{bos}} \int \mathcal{D}[\bar{b}, b] \mathcal{O}(\bar{b}, b, \lambda) e^{-\bar{b}^\dagger \mathcal{M}_{sp} \bar{b}} \\ \langle \mathcal{Q} \rangle_{sp} &= \frac{1}{\mathcal{Z}_{ferm}} \int \mathcal{D}[\bar{f}, f] \mathcal{Q}(\bar{f}, f, \lambda) e^{-\bar{f} \mathcal{C}_{sp} f} \end{aligned} \quad (2.30)$$

que se trata de los valores esperados de operadores bosónicos \mathcal{O} o fermiónicos \mathcal{Q} en el punto de ensilladura. Estos valores esperados equivalen a los valores medios que se obtienen mediante una aproximación de campo medio (ver Apéndice A). Es posible notar de (2.28) que en el punto de ensilladura se verifica $-\bar{V}_{ij}^{(1)\tau} |_{sp} = \bar{W}_{ij}^{(B)\tau} |_{sp}$ y $V_{ij}^{(2)\tau} |_{sp} = W_{ij}^{(B)\tau} |_{sp}$, es decir, no todos los campos de HS son independientes en el SP.

La presencia de las inversas de las matrices \mathcal{C} y \mathcal{M} en la ec. (2.28) puede traer complicaciones si se continua trabajando en el espacio directo. En efecto, se verá que estas matrices pueden diagonalizarse si se aplican transformaciones de Fourier a los estados coherentes

$$f_i^\tau = \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_k f_k e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i - \omega_n\tau)} \quad (2.31)$$

$$b_{i\sigma}^\tau = \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_k b_{k\sigma} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i - \omega_n\tau)} \quad (2.32)$$

dónde \mathbf{k} son los vectores del espacio recíproco, ω_n una frecuencia determinada por las condiciones de contorno periódicas ($\omega_n = 2n\pi/\beta$) o antiperiódicas ($\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$) a la que están sometidas las distintas funciones en τ , \mathbf{r}_i el vector posición en el sitio i de la red y se define a $k \equiv (\mathbf{k}, \omega_n)$. Por su parte, para los campos de Hubbard-Stratonovich y el campo λ las transformaciones son

$$U_{i,i+\mathbf{R}}^\tau = \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_k U_{k,\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i - \omega_n\tau)} \quad (2.33)$$

$$\lambda_i^\tau = \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_k \lambda_k e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i - \omega_n\tau)},$$

y se pasó de la notación U_{ij}^τ a $U_{i,i+\mathbf{R}}^\tau$ ($U = V, W$) donde \mathbf{R} puede ser cualquier vector de la red. Mediante estas transformaciones se puede escribir a (2.17) y (2.18) en el espacio recíproco como

$$S_{ferm} = \sum_{k,k'} \bar{f}_k \mathcal{C}_{kk'} f_{k'} \quad (2.34)$$

$$S_{bos} = \sum_{k,k'} \bar{b}_k^\dagger \mathcal{M}_{kk'} \vec{b}_{k'} \quad (2.35)$$

donde \bar{b}_k^\dagger es el espinor $(\bar{b}_{k\uparrow} \ b_{-k\downarrow})$. Los elementos de matriz resultan

$$\mathcal{C}_{kk'} = -i\omega\delta_{kk'} + \frac{i\lambda_{k-k'}}{\sqrt{N\beta}} - \frac{2}{\sqrt{N\beta}} \sum_{\mathbf{R}} t_{\mathbf{R}} (\bar{V}_{k'-k,\mathbf{R}}^{(1)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} + V_{k-k',\mathbf{R}}^{(2)} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}) \quad (2.36)$$

y

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{kk'}^{11} = & -i\omega\delta_{kk'} + \frac{i\lambda_{k-k'}}{\sqrt{N\beta}} + \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_{\mathbf{R}} t_{\mathbf{R}} (V_{k-k',\mathbf{R}}^{(1)} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}} + \bar{V}_{k'-k,\mathbf{R}}^{(2)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}) + \\ & + \sum_{\mathbf{R}} \frac{J_{\mathbf{R}}}{2\sqrt{N\beta}} (\bar{W}_{k'-k,\mathbf{R}}^{(B)} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} - W_{k-k',\mathbf{R}}^{(B)} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}) \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\mathcal{M}_{kk'}^{12} = \sum_{\mathbf{R}} \frac{J_{\mathbf{R}}}{2\sqrt{N\beta}} W_{k-k',\mathbf{R}}^{(A)} (e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} - e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}) \quad (2.38)$$

$$\mathcal{M}_{kk'}^{21} = \sum_{\mathbf{R}} \frac{J_{\mathbf{R}}}{2\sqrt{N\beta}} \overline{W}_{k'-k, \mathbf{R}}^{(A)} (e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}} - e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}) \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{kk'}^{22} = & i\omega\delta_{kk'} + \frac{i\lambda_{k'-k}}{\sqrt{N\beta}} + \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \sum_{\mathbf{R}} t_{\mathbf{R}} (V_{k-k', \mathbf{R}}^{(1)} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} + \overline{V}_{k'-k, \mathbf{R}}^{(2)} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}}) + \\ & + \sum_{\mathbf{R}} \frac{J_{\mathbf{R}}}{2\sqrt{N\beta}} (\overline{W}_{k'-k, \mathbf{R}}^{(B)} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}} - W_{k-k', \mathbf{R}}^{(B)} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}) \quad (2.40) \end{aligned}$$

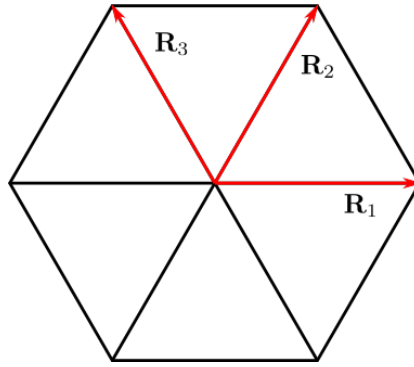


Figura 2.1: Vectores posición de tres primeros vecinos independientes en la red triangular. Se identifican como $\mathbf{R} > 0$.

Si se buscan soluciones en el saddle point que sean estáticas y homogéneas, los campos de HS sólo dependerán de los vectores $\mathbf{R} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$, siendo independientes del sitio i y el tiempo τ , por lo que las sumatorias en \mathbf{R} solo deberán realizarse sobre un conjunto de vectores primeros vecinos que sea independiente y que se identificarán como $\mathbf{R} > 0$ (Ver fig. 2.1). Por el mismo motivo, los campos λ_i^τ también serán independientes del sitio y el tiempo, lo que se traduce como relajar en la restricción local (2.4) para reemplazarla por una restricción global al número de fermiones y bosones del sistema². En conclusión, las transformadas de Fourier de los campos presentes en (2.33) serán de la forma $\psi_k = \sqrt{N\beta}\psi_{sp}\delta_{k,0}$, garantizando que las matrices \mathcal{C} y \mathcal{M} sean diagonales en el espacio recíproco. De esta manera las matrices dinámicas evaluadas en el saddle point resultan

$$\mathcal{C}_{sp}(k) = -i\omega + \lambda_{sp} + \Xi_{\mathbf{k}}^{(B)} \quad (2.41)$$

²Esto también puede observarse en la última ecuación de (2.29). La suma de los valores medios de número de bosones y fermiones en un sitio es uno. En la red entera, la suma de todos los valores medios de bosones y fermiones será el número de sitios N .

y

$$\mathcal{M}_{sp}(k) = \begin{pmatrix} -i\omega + \lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}}^{(F+B)} & -i\gamma_{\mathbf{k}}^{(A)} \\ i\gamma_{\mathbf{k}}^{(A)} & i\omega + \lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}}^{(F+B)} \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

redefiniendo $i\lambda_{sp}$ directamente como λ_{sp} y usando que

$$\begin{aligned} \Xi_{\mathbf{k}}^{(B)} &= \sum_{\mathbf{R}>0} 4t_{\mathbf{R}} B_{\mathbf{R}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \\ \gamma_{\mathbf{k}}^{(A)} &= \sum_{\mathbf{R}>0} J_{\mathbf{R}} A_{\mathbf{R}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \\ \gamma_{\mathbf{k}}^{(F+B)} &= \sum_{\mathbf{R}>0} (2t_{\mathbf{R}} F_{\mathbf{R}} + J_{\mathbf{R}} B_{\mathbf{R}}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (2.43)$$

donde se tomaron $A_{\mathbf{R}}$, $B_{\mathbf{R}}$ y $F_{\mathbf{R}}$ como los valores esperados de dichos operadores actuando sobre los sitios i, j en el tiempo τ , evaluados en el SP, y se utilizaron gauges que eliminaran sus partes imaginarias. Las inversas de las matrices dinámicas evaluadas en el SP $\tilde{\mathcal{G}}_{sp}(k) \equiv \mathcal{C}_{sp}^{-1}(k)$ y $\mathcal{G}_{sp}(k) \equiv \mathcal{M}_{sp}^{-1}(k)$ son

$$\tilde{\mathcal{G}}_{sp}(k) = \frac{-1}{i\omega - \epsilon_{f,\mathbf{k}}} \quad (2.44)$$

y

$$\mathcal{G}_{sp}(k) = \begin{pmatrix} \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{i\omega + \epsilon_{b,\mathbf{k}}} - \frac{u_{\mathbf{k}}^2}{i\omega - \epsilon_{b,\mathbf{k}}} & \frac{i\gamma_{\mathbf{k}}^{(A)}}{2\epsilon_{b,\mathbf{k}}} \left[\frac{1}{i\omega + \epsilon_{b,\mathbf{k}}} - \frac{1}{i\omega - \epsilon_{b,\mathbf{k}}} \right] \\ \frac{i\gamma_{\mathbf{k}}^{(A)}}{2\epsilon_{b,\mathbf{k}}} \left[-\frac{1}{i\omega + \epsilon_{b,\mathbf{k}}} + \frac{1}{i\omega - \epsilon_{b,\mathbf{k}}} \right] & \frac{u_{\mathbf{k}}^2}{i\omega + \epsilon_{b,\mathbf{k}}} - \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{i\omega - \epsilon_{b,\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

donde se definió

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}}^{(F+B)}}{2\epsilon_{b,\mathbf{k}}} + \frac{1}{2}, \quad v_{\mathbf{k}}^2 = u_{\mathbf{k}}^2 - 1 \quad (2.46)$$

y

$$\epsilon_{f,\mathbf{k}} = \lambda_{sp} + \Xi_{\mathbf{k}}^{(B)} \quad (2.47)$$

$$\epsilon_{b,\mathbf{k}} = \sqrt{(\lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}}^{(F+B)})^2 - |\gamma_{\mathbf{k}}^{(A)}|^2}. \quad (2.48)$$

Introduciendo unas fuentes \bar{h} y h que interactúen con los fermiones esclavos, y evaluando la derivada $(\partial/\partial\bar{h}_k)(\partial \ln \mathcal{Z}_{ferm}/\partial h_k)|_{\bar{h}_k=h_k=0}$ en el punto de ensilladura se llega a que $\tilde{\mathcal{G}}_{sp}(k)$ es la función de Green de una partícula, es decir, las componentes de la matriz $\tilde{\mathcal{G}}_{sp}$ son los propagadores fermiónicos

$$\tilde{\mathcal{G}}_{sp}(k) = \langle \bar{f}_k f_k \rangle_{sp}. \quad (2.49)$$

Mediante un razonamiento análogo se puede probar que las componentes de la matriz $\mathcal{G}_{sp}(k)$ también son propagadores, en este caso bosónicos, resultando

$$\mathcal{G}_{sp}(k) = \begin{pmatrix} \langle \bar{b}_{k\uparrow} b_{k\uparrow} \rangle_{sp} & \langle b_{-k\downarrow} b_{k\uparrow} \rangle_{sp} \\ \langle \bar{b}_{k\uparrow} \bar{b}_{-k\downarrow} \rangle_{sp} & \langle b_{-k\downarrow} \bar{b}_{-k\downarrow} \rangle_{sp} \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

Los polos de las funciones de Green ocurren en las energías de excitación del sistema en el SP, por lo que resulta evidente que (2.47) se trata de las energías fermiónicas mientras que (2.48) son las energías bosónicas.

2.2.3. Ecuaciones de autoconsistencia

A continuación se presentan las ecuaciones que deben resolverse en simultáneo para obtener los valores medios $A_{\mathbf{R}}$, $B_{\mathbf{R}}$ y $F_{\mathbf{R}}$, que según (2.29) equivalen a los campos HS en el saddle point. La ecuación (2.28) puede reescribirse en el espacio de Fourier, donde las matrices dinámicas y sus inversas son diagonales. Supongamos que derivamos respecto del campo $\bar{V}_{\mathbf{R}}^{(1)}$, entonces la traza suma solo sobre k pues no hay índice de Nambu y la ecuación resulta

$$\left. \frac{\partial S_{ef}}{\partial \bar{V}_{\mathbf{R}}^{(1)}} \right|_{sp} = 2t_{\mathbf{R}} \sqrt{N\beta} V_{sp,\mathbf{R}}^{(1)} - \sum_k \tilde{\mathcal{G}}_{sp}(k) \left. \frac{\partial \mathcal{C}_{kk}}{\partial \bar{V}_{\mathbf{R}}^{(1)}} \right|_{sp} = 0$$

que puede reescribirse como

$$V_{sp,\mathbf{R}}^{(1)} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \omega_n) = 0.$$

La suma sobre frecuencias puede obtenerse mediante la fórmula

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} v(\omega_n) e^{i\omega_n \eta} = -\xi \sum_{z_p} Res[v, z_p] \frac{1}{e^{z_p} - \xi} \quad (2.51)$$

con ξ igual a 1 para bosones, -1 para fermiones y $Res[v, z_p]$ es el residuo de la función v en el polo z_p . El factor $e^{i\omega_n \eta}$ se introduce para garantizar la convergencia de la sumatoria³. De esta manera, recordando que $F_{\mathbf{R}} = V_{sp,\mathbf{R}}^{(1)}$ y eliminando la parte imaginaria, se llega a

$$F_{\mathbf{R}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) n_F(\epsilon_{f,\mathbf{k}}) \quad (2.52)$$

donde $n_F(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon+\mu)} + 1}$ es la distribución de Fermi. El potencial químico μ debe introducirse para regular el número de huecos presentes en el sistema. Para obtener la

³Estos factores de convergencia aparecen naturalmente cuando se trabaja con sumatorias discretas en el tiempo imaginario, pero se pierden en el pasaje al continuo al escribir la sumatoria como integral, por lo que deben introducirse para sumar correctamente en las frecuencias de Matsubara.

magnitud $B_{\mathbf{R}}$ derivamos a la acción efectiva respecto del campo $\bar{V}_{\mathbf{R}}^{(2)}$ e igualamos a cero, obteniendo

$$V_{sp,\mathbf{R}}^{(2)} + \frac{1}{2N\beta} \sum_k \left[\mathcal{G}_{sp}^{11}(k)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} + \mathcal{G}_{sp}^{22}(k)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \right] = 0.$$

Vemos que aquí la traza suma sobre k y sobre los índices de Nambu por tratarse de un campo presente en la matriz dinámica bosónica. Luego se puede obtener la ecuación

$$B_{\mathbf{R}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}}^{(F+B)}}{\epsilon_{b,\mathbf{k}}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \left(n_B(\epsilon_{b,\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \right) \quad (2.53)$$

siendo $n_B(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1}$ la distribución de Bose. Continuando de manera análoga, se obtienen el resto de las ecuaciones

$$A_{\mathbf{R}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^{(A)}}{\epsilon_{b,\mathbf{k}}} \text{sen}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \left(n_B(\epsilon_{b,\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \right) \quad (2.54)$$

$$S + \frac{1}{2} - \frac{\delta}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}}^{(F+B)}}{\epsilon_{b,\mathbf{k}}} \left(n_B(\epsilon_{b,\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \right). \quad (2.55)$$

En esta última ecuación se introdujo al dopaje $\delta = \frac{N-N_e}{N}$, que no es más que la fracción del número de huecos $\frac{1}{N} \sum_i \bar{f}_i f_i$ ⁴.

2.2.4. Algunas magnitudes evaluadas en el punto de ensilladura

La energía interna del gas de fermiones y del gas de bosones en el saddle point puede derivarse de $E_{ferm}|_{sp} = \partial(\beta\mathcal{F}_{ferm}|_{sp})/\partial\beta$ y $E_{bos}|_{sp} = \partial(\beta\mathcal{F}_{bos}|_{sp})/\partial\beta$ y tras realizar nuevamente una suma sobre las frecuencias (2.51) se obtiene

$$E_{ferm}|_{sp} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{f,\mathbf{k}} n_F(\epsilon_{f,\mathbf{k}}) \quad (2.56)$$

$$E_{bos}|_{sp} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{b,\mathbf{k}} \left(n_B(\epsilon_{b,\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \right) \quad (2.57)$$

La energía total en el saddle point puede calcularse mediante la expresión $E_{sp} = \partial(\beta\mathcal{F}_{sp})/\partial\beta$, donde $\mathcal{F}_{sp} = S_{ef}|_{sp}/\beta$, recordando que la acción efectiva en el saddle point

⁴Si el dopaje es $\delta = 0$, no hay huecos en el sistema y el modelo $t - J$ se convierte en un modelo de Heisenberg.

resulta

$$S_{ef}|_{sp} = N\beta \left(\sum_{\mathbf{R}>0} (2t_{\mathbf{R}} \sum_l \bar{V}_{sp,\mathbf{R}}^{(l)} V_{sp,\mathbf{R}}^{(l)} + J_{\mathbf{R}} \sum_r \bar{W}_{sp,\mathbf{R}}^{(r)} W_{sp,\mathbf{R}}^{(r)}) \right) - 2N\beta S \lambda_{sp} + \\ + \beta \mathcal{F}_{ferm}(\bar{V}_{sp}^{(1)}, V_{sp}^{(2)}, \lambda_{sp}) + \beta \mathcal{F}_{bos}(V_{sp}^{(1)}, \bar{V}_{sp}^{(2)}, \bar{W}_{sp}, W_{sp}, \lambda_{sp})$$

De esta manera, reemplazando los campos de HS evaluados en SP por los valores medios de los operadores a los que son iguales (2.29), se llega a la energía por sitio del estado fundamental para el modelo $t - J$

$$E_{sp} = - \sum_{\mathbf{R}>0} [4t_{\mathbf{R}} B_{\mathbf{R}} F_{\mathbf{R}} + J_{\mathbf{R}} (B_{\mathbf{R}}^2 - A_{\mathbf{R}}^2)] - \lambda_{sp} 2S + \\ + \frac{1}{N} \sum_{|\mathbf{k}| < |\mathbf{k}_F|} \epsilon_{f,\mathbf{k}} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{b,\mathbf{k}} \quad (2.58)$$

donde $|\mathbf{k}_F|$ es el módulo de \mathbf{k} en la superficie de Fermi. Si se compara esta energía con la que se obtiene utilizando la teoría de campo medio se encuentra una discrepancia. El origen de dicha discrepancia radica en que durante el pasaje al continuo de la sumatoria sobre los índices de Matsubara se generan problemas. Esto se debe a que en la teoría de campo medio, la energía del estado fundamental se obtiene conmutando operadores bosónicos que no se encuentran ordenados normalmente, mientras que en el formalismo de integral funcional, como se trabaja con los autovalores de los estados coherentes, solo se permutan variables complejas. Entonces, la energía del estado fundamental del modelo $t - J$ en la aproximación de punto de ensilladura resulta de sustraerle λ_{sp} a (2.58), y se tiene

$$E'_{sp} = - \sum_{\mathbf{R}>0} [4t_{\mathbf{R}} B_{\mathbf{R}} F_{\mathbf{R}} + J_{\mathbf{R}} (B_{\mathbf{R}}^2 - A_{\mathbf{R}}^2)] - \lambda_{sp} (2S + 1) + \\ + \frac{1}{N} \sum_{|\mathbf{k}| < |\mathbf{k}_F|} \epsilon_{f,\mathbf{k}} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{b,\mathbf{k}}. \quad (2.59)$$

Por otro lado, en una red finita no se rompe la simetría $SU(2)$ del hamiltoniano, por lo que la magnetización local $\langle \hat{m} \rangle$, que podría tomarse como el parámetro de orden, permanece nula. La existencia de un parámetro de orden no nulo en la teoría de campo medio está asociada a una condensación de bosones de Schwinger cuando el gap presente en la relación de dispersión magnónica (2.48) se anula en el límite termodinámico [29]. Este problema puede resolverse en redes finitas evaluando, en lugar de la magnetización local, la raíz cuadrática media $m = \sqrt{\langle \hat{m}^2 \rangle}$. En tal caso la magnetización puede calcularse a través de los picos de Bragg presentes en el factor de estructura estático

o directamente conservando los dos modos de la sumatoria (2.55) que minimizan la relación de dispersión, esto es, $\mathbf{k} = \pm \mathbf{Q}/2$, resultando en

$$m = \frac{1}{N} \frac{\lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{Q}/2}^{(F+B)}}{\epsilon_{b, \mathbf{Q}/2}}. \quad (2.60)$$

2.3. Ruptura de simetría

Debe tenerse presente que en una red finita no se produce el fenómeno de ruptura espontánea de simetría. Si se desea tener en cuenta este fenómeno de manera correcta en los cálculos que se realizan sobre redes finitas, debe romperse la simetría $SU(2)$ del hamiltoniano explícitamente, es decir, introduciendo un término que considere la interacción entre los espines de la red con un pequeño campo magnético que posea la simetría de la fase que se desee obtener en el sistema al hacer $N \rightarrow \infty$. De esta manera, el nuevo hamiltoniano consiste en

$$\mathcal{H}'_{t-J}(\bar{b}, b, \bar{f}, f) = \mathcal{H}_{t-J}(\bar{b}, b, \bar{f}, f) + \mathcal{J}(\bar{b}, b) \quad (2.61)$$

donde

$$\mathcal{J}(\bar{b}, b) = \sum_i \frac{h_i^\mu}{2} \mathbf{b}_i^{\tau\dagger} \sigma^\mu \mathbf{b}_i^\tau \quad (2.62)$$

con $\mu = x, y, z$ y h el campo de ruptura de simetría, que por simplicidad se tomará contenido en el plano xy ,

$$\mathbf{h}_i = (h \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i), h \sin(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i), 0) \quad (2.63)$$

siendo \mathbf{Q} el vector de onda magnético. La nueva acción bosónica será

$$S'_{bos} = S_{bos} + \int_0^\beta d\tau \sum_i \frac{h_i^\mu}{2} \mathbf{b}_i^{\tau\dagger} \sigma^\mu \mathbf{b}_i^\tau \quad (2.64)$$

que puede reescribirse como

$$S'_{bos} = S_{bos} + \int_0^\beta d\tau \sum_j \frac{h}{2} (\bar{b}_{j\uparrow}^\tau e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} b_{j\downarrow}^\tau + \bar{b}_{j\downarrow}^\tau e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} b_{j\uparrow}^\tau). \quad (2.65)$$

Conservar la invariancia traslacional preservará la diagonalidad de la matriz dinámica, por lo que debe realizarse una rotación local de los espines para que el campo \mathbf{h} permanezca uniforme en el plano xy . Rotar a los bosones de Schwinger no es más que aplicar la transformación

$$\hat{\mathbf{b}}_{i\sigma} \longrightarrow e^{-i\sigma \frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}}{2}} \hat{\mathbf{b}}_{i\sigma}.$$

A partir de la definición del espinor $\vec{b}_k^\dagger = (\bar{b}_{k\uparrow} \ b_{-k\downarrow} \ \bar{b}_{k\downarrow} \ b_{-k\uparrow})$ y su conjugado podemos volver a transformar a la acción bosónica al espacio de momentos y frecuencias de modo que pueda escribirse como

$$S'_{bos} = \sum_{k \ k'} \vec{b}_k^\dagger \mathcal{G}_{kk'}^{-1} \vec{b}_{k'} \quad (2.66)$$

donde la matriz dinámica es

$$\mathcal{G}_{kk'}^{-1} = \begin{pmatrix} P_{\mathbf{Q}}^{F+B}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) & P_{\mathbf{Q}}^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}') & \frac{\hbar}{2} \delta_{k,k'} & 0 \\ \bar{P}_{\mathbf{Q}}^A(\mathbf{k}', \mathbf{k}) & P_{-\mathbf{Q}}^{F+B}(-\mathbf{k}', -\mathbf{k}, -\omega) & 0 & \frac{\hbar}{2} \delta_{k,k'} \\ \frac{\hbar}{2} \delta_{k,k'} & 0 & P_{-\mathbf{Q}}^{F+B}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) & -P_{-\mathbf{Q}}^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\ 0 & \frac{\hbar}{2} \delta_{k,k'} & -\bar{P}_{-\mathbf{Q}}^A(\mathbf{k}', \mathbf{k}) & P_{\mathbf{Q}}^{F+B}(-\mathbf{k}', -\mathbf{k}, -\omega) \end{pmatrix}$$

con

$$\begin{aligned} P_{\mathbf{Q}}^{F+B}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) &= i\omega \delta_{k,k'} + \frac{i\lambda_{k-k'}}{\sqrt{N}\beta} + \\ &+ \sum_{\mathbf{R}} \frac{t_{\mathbf{R}}}{\sqrt{N}\beta} \left(V_{k-k',\mathbf{R}}^{(1)} e^{-i(\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{R}} + \bar{V}_{k-k',\mathbf{R}}^{(2)} e^{i(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{R}} \right) + \\ &+ \sum_{\mathbf{R}} \frac{J_{\mathbf{R}}}{2\sqrt{N}\beta} \left(\bar{W}_{k-k',\mathbf{R}}^{(B)} e^{i(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{R}} - W_{k-k',\mathbf{R}}^{(B)} e^{-i(\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{R}} \right) \end{aligned}$$

y

$$P_{\mathbf{Q}}^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{R}} \frac{J_{\mathbf{R}} W_{k-k',\mathbf{R}}^{(A)}}{2\sqrt{N}\beta} \left(e^{i(\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{R}} - e^{-i(\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{Q}}{2})\cdot\mathbf{R}} \right).$$

Debe tenerse en cuenta que al introducir estos nuevos espinores y operar con ellos la integral gaussiana resultante para la parte bosónica modifica su estructura, de modo que al integrar la nueva expresión se obtiene uno de los términos de la acción efectiva

$$\mathcal{S}_{bos}(V^{(1)}, \bar{V}^{(2)}, \bar{W}, W, \lambda) = \frac{1}{2} Tr \left[\ln \left(\mathcal{G}^{-1}(V^{(1)}, \bar{V}^{(2)}, \bar{W}, W, \lambda) \right) \right]. \quad (2.67)$$

Procediendo prácticamente de manera análoga que en la Sección 2.2.2, con la excepción de tomar los valores medios de los operadores de forma consistente con un orden magnético en el plano xy , $i\lambda = \lambda_{sp}$, $\langle A_{\mathbf{R}} \rangle = -\langle \bar{A}_{\mathbf{R}} \rangle = iA_{\mathbf{R}}$ y $\langle B_{\mathbf{R}} \rangle = \langle \bar{B}_{\mathbf{R}} \rangle = B_{\mathbf{R}}$, se llega a la matriz dinámica de los bosones en el SP

$$\mathcal{G}_{sp}^{-1}(k) = \begin{pmatrix} i\omega + \lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(F+B)} & -\gamma_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(A)} & \frac{\hbar}{2} & 0 \\ -\gamma_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(A)} & -i\omega + \lambda_{sp} + \gamma_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(F+B)} & 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 & i\omega + \lambda_{sp} + \gamma_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(F+B)} & -\gamma_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(A)} \\ 0 & \frac{\hbar}{2} & -\gamma_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(A)} & -i\omega + \lambda_{sp} + \gamma_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(F+B)} \end{pmatrix}$$

usando a los γ definidos como en (2.43). Esta matriz dinámica es estructuralmente idéntica a la que se obtiene al trabajar el modelo de Heisenberg, con la salvedad de que las funciones $\gamma_{\mathbf{k}}^{(F+B)}$ en dicho modelo tendrán un aporte cinético nulo (pues $F_{\mathbf{R}} = 0$) [26]. De esa forma, puede obtenerse la inversa de la matriz, cuyos elementos son las funciones de Green

$$\mathcal{G}_{sp}(k) = \frac{g_{\mathbf{k}}^{-+}}{i\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^+} + \frac{g_{\mathbf{k}}^{++}}{i\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}^+} + \frac{g_{\mathbf{k}}^{--}}{i\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}^-} + \frac{g_{\mathbf{k}}^{+-}}{i\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}^-} \quad (2.68)$$

donde los polos de dichas funciones son las excitaciones elementales en la aproximación de saddle point

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\pm} = \sqrt{\frac{1}{2} \left[\left(\alpha_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^2 + \alpha_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^2 + \frac{h^2}{2} \right) \pm \Delta_{\mathbf{k}}^2 \right]}$$

siendo

$$\alpha_{\mathbf{k}}^2 = \left(\lambda + \gamma_{\mathbf{k}}^{(F+B)} \right)^2 - \left(\gamma_{\mathbf{k}}^{(A)} \right)^2$$

y

$$\Delta_{\mathbf{k}}^2 = \sqrt{\left(\alpha_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^2 - \alpha_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^2 \right)^2 + \left[\left(\left(\lambda + \gamma_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(F+B)} \right) + \left(\lambda + \gamma_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(F+B)} \right) \right)^2 - \left(\gamma_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(A)} - \gamma_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(A)} \right)^2 \right] h^2}$$

Las matrices en las que se descompone a la inversa $g_{\mathbf{k}}^{\pm\sigma}$ consisten en

$$g_{\mathbf{k}}^{-\sigma} = - \begin{pmatrix} U_k^{\sigma} & Z_k^{\sigma} & -X_k^{\sigma} & -W_k^{\sigma} \\ Z_k^{\sigma} & V_k^{\sigma} & -W_{-k}^{\sigma} & -Y_{-k}^{\sigma} \\ -X_k^{\sigma} & -W_{-k}^{\sigma} & U_{-k}^{\sigma} & Z_{-k}^{\sigma} \\ -W_k^{\sigma} & -Y_k^{\sigma} & Z_{-k}^{\sigma} & V_{-k}^{\sigma} \end{pmatrix} \quad g_{\mathbf{k}}^{+\sigma} = \begin{pmatrix} V_k^{\sigma} & Z_k^{\sigma} & -Y_k^{\sigma} & -W_{-k}^{\sigma} \\ Z_k^{\sigma} & U_k^{\sigma} & -W_k^{\sigma} & -X_k^{\sigma} \\ -Y_k^{\sigma} & -W_k^{\sigma} & V_{-k}^{\sigma} & Z_{-k}^{\sigma} \\ -W_{-k}^{\sigma} & -X_k^{\sigma} & Z_{-k}^{\sigma} & U_{-k}^{\sigma} \end{pmatrix}$$

donde las entradas son

$$\begin{aligned} U_k^{\pm} &= u_k^{\pm 2} \frac{\Delta_{-k}^{\pm 2}}{\Delta_k^2} \pm v_{-k}^{\pm 2} \frac{h^2}{4\Delta_k^2} \\ V_k^{\pm} &= v_k^{\pm 2} \frac{\Delta_{-k}^{\pm 2}}{\Delta_k^2} \pm u_{-k}^{\pm 2} \frac{h^2}{4\Delta_k^2} \\ Z_k^{\pm} &= z_k^{\pm} \frac{\Delta_{-k}^{\pm 2}}{\Delta_k^2} \mp z_{-k}^{\pm} \frac{h^2}{4\Delta_k^2} \\ X_k^{\pm} &= \pm \varepsilon_k^{\pm} \left[u_k^{\pm 2} u_{-k}^{\pm 2} + z_k^{\pm} z_{-k}^{\pm} - \left(\frac{h}{4\varepsilon_k^{\pm}} \right)^2 \right] \frac{h}{\Delta_k^2} \\ Y_k^{\pm} &= \pm \varepsilon_k^{\pm} \left[v_k^{\pm 2} v_{-k}^{\pm 2} + z_k^{\pm} z_{-k}^{\pm} - \left(\frac{h}{4\varepsilon_k^{\pm}} \right)^2 \right] \frac{h}{\Delta_k^2} \\ W_k^{\pm} &= \pm \varepsilon_k^{\pm} \left[u_k^{\pm 2} z_{-k}^{\pm} + v_{-k}^{\pm} z_k^{\pm} \right] \frac{h}{2\Delta_k^2} \end{aligned}$$

con

$$u_{\mathbf{k}}^{\pm 2} = \frac{\lambda + \gamma_{\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(F+B)}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\pm}} - \frac{1}{2}, \quad v_{\mathbf{k}}^{\pm 2} = u_{\mathbf{k}}^{\pm 2} + 1, \quad z_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{\gamma_{\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}}^{(A)}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\pm}}, \quad \Delta_{\mathbf{k}}^{\pm 2} = \pm \left(\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\pm 2} - \alpha_{\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2}}^2 \right)$$

Finalmente, operando de la misma forma que se hizo en la sección 2.2.3, se arriba a las ecuaciones de autoconsistencia a temperatura cero,

$$\begin{aligned} S - \frac{\delta}{2} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[u_k^{+2} \frac{\Delta_{-k}^{+2}}{\Delta_k^2} + u_k^{-2} \frac{\Delta_{-k}^{-2}}{\Delta_k^2} + (v_{-k}^{+2} - v_{-k}^{-2}) \frac{h^2}{4\Delta_k^2} \right] \\ A_{\mathbf{R}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[z_k^+ \frac{\Delta_{-k}^{+2}}{\Delta_k^2} + z_k^- \frac{\Delta_{-k}^{-2}}{\Delta_k^2} - (z_{-k}^+ - z_{-k}^-) \frac{h^2}{4\Delta_k^2} \right] \sin \left[\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2} \right) \cdot \mathbf{R} \right] \\ B_{\mathbf{R}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[u_k^{+2} \frac{\Delta_{-k}^{+2}}{\Delta_k^2} + u_k^{-2} \frac{\Delta_{-k}^{-2}}{\Delta_k^2} + (v_{-k}^{+2} - v_{-k}^{-2}) \frac{h^2}{4\Delta_k^2} \right] \cos \left[\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{Q}}{2} \right) \cdot \mathbf{R} \right] \\ F_{\mathbf{R}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}). \end{aligned} \quad (2.69)$$

2.3.1. Susceptibilidad magnética dinámica

La susceptibilidad magnética dinámica en el espacio de momentos y frecuencias puede calcularse, introduciendo un campo tipo Zeeman $\mathbf{j} = (j^x, j^y, j^z)$ que interactúe con los espines, a través de la expresión [26]

$$\chi(\mathbf{k}, i\omega) = \lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}[j]}{\partial j_{\mathbf{k}, i\omega} \partial j_{-\mathbf{k}, -i\omega}} \Big|_{j=0} \quad (2.70)$$

donde $\mathcal{Z}[j]$ es la función de partición que contiene al campo de Zeeman

$$\mathcal{Z}[j] = \int \mathcal{D}[\bar{\phi}, \phi] e^{-S_{ef}(\bar{\phi}, \phi, j)}.$$

derivando puede verse que

$$\frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}[j]}{\partial j_{\mathbf{k}, i\omega} \partial j_{-\mathbf{k}, -i\omega}} = -\frac{1}{\mathcal{Z}^2[j]} \frac{\partial \mathcal{Z}[j]}{\partial j_{\mathbf{k}, i\omega}} \frac{\partial \mathcal{Z}[j]}{\partial j_{-\mathbf{k}, -i\omega}} + \frac{1}{\mathcal{Z}[j]} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}[j]}{\partial j_{\mathbf{k}, i\omega} \partial j_{-\mathbf{k}, -i\omega}}.$$

Las derivadas primeras poseen la forma

$$\frac{1}{\mathcal{Z}[j]} \frac{\partial \mathcal{Z}[j]}{\partial j_{\mathbf{k}', i\omega'}} = -\frac{1}{2\mathcal{Z}[j]} \int \mathcal{D}[\bar{\phi}, \phi] \text{Tr} \left[\mathcal{G} \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}}{\partial j_{\mathbf{k}', i\omega'}} \right] e^{-S_{ef}(\bar{\phi}, \phi, j)}$$

mientras que la derivada segunda⁵

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}[j]}{\partial j_{\mathbf{k}, i\omega} \partial j_{-\mathbf{k}, -i\omega}} &= \frac{1}{2} \int \mathcal{D}[\bar{\phi}, \phi] \text{Tr} \left[\mathcal{G} \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}}{\partial j_{\mathbf{k}, i\omega}} \mathcal{G} \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}}{\partial j_{-\mathbf{k}, -i\omega}} \right] e^{-S_{ef}(\bar{\phi}, \phi, j)} + \\ &+ \frac{1}{2} \int \mathcal{D}[\bar{\phi}, \phi] \text{Tr} \left[\mathcal{G} \frac{\partial^2 \mathcal{G}^{-1}}{\partial j_{\mathbf{k}, i\omega} \partial j_{-\mathbf{k}, -i\omega}} \right] e^{-S_{ef}(\bar{\phi}, \phi, j)} + \\ &- \frac{1}{4} \int \mathcal{D}[\bar{\phi}, \phi] \text{Tr} \left[\mathcal{G} \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}}{\partial j_{\mathbf{k}, i\omega}} \right] \text{Tr} \left[\mathcal{G} \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}}{\partial j_{-\mathbf{k}, -i\omega}} \right] e^{-S_{ef}(\bar{\phi}, \phi, j)}. \end{aligned} \quad (2.71)$$

⁵Se empleó la fórmula de derivada de una matriz inversa $\frac{\partial A^{-1}}{\partial \alpha} = -A^{-1} \frac{\partial A}{\partial \alpha} A^{-1}$.

El segundo término de (2.71) se anula, dado que los elementos de \mathcal{G}^{-1} dependen como máximo linealmente de j . Además, en el saddle point se encuentra que las trazas de $\mathcal{G}^{sp} \partial \mathcal{G}^{-1} / \partial j_{\mathbf{k}', i\omega'}$ también se anulan. Finalmente, se llega a la expresión para calcular el elemento $\mu\mu$ de la susceptibilidad magnética dinámica en saddle point

$$\chi_{\mu\mu}^{sp}(\mathbf{k}, i\omega) = \frac{1}{2} Tr \left[\mathcal{G}^{sp} \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}}{\partial j_{\mathbf{k}, i\omega}^{\mu}} \mathcal{G}^{sp} \frac{\partial \mathcal{G}^{-1}}{\partial j_{-\mathbf{k}, -i\omega}^{\mu}} \right]$$

que para la componente zz resulta

$$\chi_{zz}^{sp}(\mathbf{q}, i\omega) = \frac{-1}{8N} \sum_{\alpha\beta\gamma=\pm} \sum_{\mathbf{k}} \frac{Tr \left[g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\bar{\alpha}\beta} u^z g_{\mathbf{k}}^{\alpha\gamma} u^z \right]}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\beta} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\gamma} - \alpha i\omega} \quad (2.72)$$

y para las componentes xx e yy

$$\chi_{xx}^{sp}(\mathbf{q}, i\omega) = \chi_{yy}^{sp}(\mathbf{q}, i\omega) = \chi^{+}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega) + \chi^{-}(\mathbf{q} - \mathbf{Q}, i\omega) \quad (2.73)$$

con

$$\chi^{\sigma}(\mathbf{q} + \sigma \mathbf{Q}, i\omega) = \frac{-1}{8N} \sum_{\alpha\beta\gamma=\pm} \sum_{\mathbf{k}} \frac{Tr \left[g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\sigma\mathbf{Q}}^{\bar{\alpha}\beta} u^{\sigma} g_{\mathbf{k}}^{\alpha\gamma} u^{\sigma} \right]}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\sigma\mathbf{Q}}^{\beta} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\gamma} - \alpha i\omega} \quad (2.74)$$

donde

$$u^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad u^{+} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad u^{-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

La diferencia entre la expresión de la susceptibilidad para la componente zz y las componentes xx e yy se origina en la introducción del campo de ruptura de simetría en el plano xy .

Como ya se ha comentado en el capítulo 1, el factor de estructura dinámico es proporcional a la parte imaginaria de la susceptibilidad magnética dinámica. Los resultados para el factor de estructura dinámico en el modelo $t - J$ sobre la red triangular se presentarán en el capítulo 4.

Capítulo 3

Caracterización de las fases del modelo t - J en la red triangular

En este capítulo se busca determinar algunas de las propiedades del estado fundamental del modelo $t - J$ en la red triangular. Como se discutió en el capítulo 1, dependiendo de los valores que puedan asumir los parámetros del modelo pueden presentarse distintas fases de ordenamiento magnético en el sistema (Fig. 1.3). Dado un conjunto de parámetros en el modelo (t , J y δ), la estabilidad de una fase respecto de otra puede determinarse comparando las energías del estado fundamental para cada una de ellas. Esto se encuentra ampliamente estudiado en [21].

Aquí se analizará como evolucionan los valores medios de los operadores de link $A_{\mathbf{R}}$ y $B_{\mathbf{R}}$, y la magnetización m al dopar con huecos el sistema para distintos cocientes entre la integral de intercambio J y la integral de hopping t . También se estudiará el comportamiento del valor medio de $F_{\mathbf{R}}$ en un cierto intervalo de dopajes. Para esto se resolverán las ecuaciones de autoconsistencia presentadas en la sección 2.2.3 a temperatura cero, y a partir de esto se evaluará la magnetización local en función de los parámetros de interés.

Será de fundamental importancia distinguir el signo del hopping en el modelo con el que se esté trabajando, ya que las regiones en las que se podrá estudiar cada fase dependen fuertemente de este signo, y como ya se comentó, en el caso de $t < 0$ aparece una región de fases con ordenamiento tipo espiral.

Todos los cálculos de este capítulo fueron realizados trabajando con clusters de 4800 sitios en la red triangular.

3.1. Dopajes pequeños: fase de 120°

En esta primer sección se estudiarán los cambios que se producen al dopar con pocos huecos al antiferromagneto triangular. Se trabajará siempre en la fase de 120° .

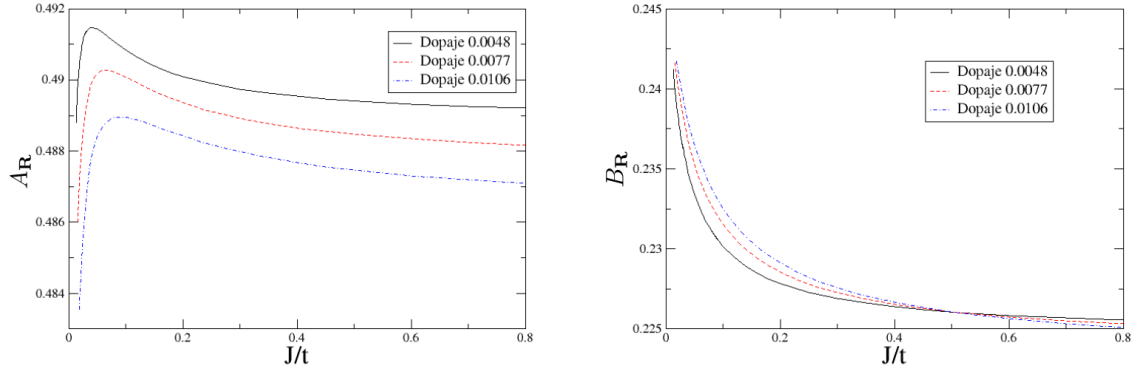


Figura 3.1: $A_{\mathbf{R}_3}$ y $B_{\mathbf{R}_3}$ en función de J/t para pequeños dopajes y $t > 0$. En este caso se tiene $A_{\mathbf{R}_1} = A_{\mathbf{R}_2} = -A_{\mathbf{R}_3}$ y $B_{\mathbf{R}_3} = B_{\mathbf{R}_2} = -B_{\mathbf{R}_1}$.

Para el caso de los operadores $A_{\mathbf{R}}$, cuando $t > 0$ vemos que al dopar disminuyen las correlaciones antiferromagnéticas en valor absoluto (Fig. 3.1). Además, si se analiza la evolución de $A_{\mathbf{R}_3}$ en un dopaje fijo notamos un comportamiento muy particular, ya que al disminuir J/t aumenta $A_{\mathbf{R}_3}$ hasta llegar a un máximo, y luego decrece. Se cree que aquí ocurre una competencia de fenómenos: mientras que la teoría de campo medio con fermiones esclavos predice un estado ferromagnético cuando $J = 0$ y el número de huecos es mayor a 1, mediante el método numérico DMRG se ha encontrado que en el orden de 120° es el estado fundamental de un modelo $t - J$ en la red triangular con 1 hueco, y se espera que esto también ocurra para dopajes más altos [22]. Este último es el fenómeno denominado antiferromagnetismo cinético, donde la energía del sistema se minimiza al maximizar el valor absoluto de la energía cinética, y se cree que el máximo originado en $A_{\mathbf{R}_3}$ al disminuir J/t se debe a que en una cierta región de parámetros domina dicho fenómeno, y por debajo de un dado J/t comienza a ganar importancia el resultado del campo medio, aunque se sabe que dicho método brinda resultados erróneos ya que no tiene en cuenta la ganancia de energía cinética debida a las fases de Berry inducidas por el orden magnético. Por otro lado, se observa que el valor medio de $B_{\mathbf{R}_3}$ crece monótonamente al disminuir J/t , siendo algo esperado debido a que esto implica acercarse a la fase ferromagnética. Sin embargo, dependiendo de si J/t es mayor o menor

que aproximadamente 0.5, puede incrementarse o disminuir, respectivamente, el valor de $B_{\mathbf{R}_3}$ al dopar. Esto puede deberse a que al incrementar J/t el sistema se acerca a los resultados que se obtendrían en un ordenamiento magnético de 120° de un modelo de Heisenberg, ya que empieza a perder importancia el valor del hopping t .

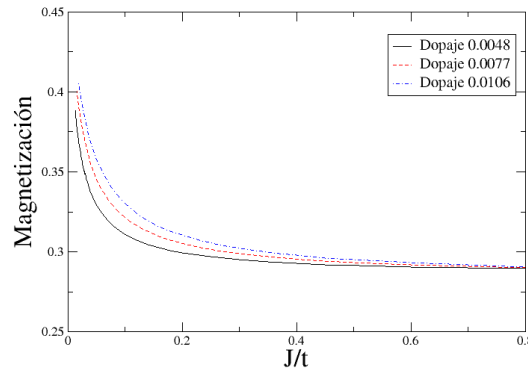


Figura 3.2: Magnetización staggered en función de J/t para pequeños dopajes y $t > 0$.

El incremento de la magnetización al dopar, cuando $t > 0$, parece sorprendente en una primera impresión, pero también puede atribuirse a la existencia del fenómeno de antiferromagnetismo cinético: tanto la aparición de huecos como las interacciones de intercambio favorecen el orden de 120° (Fig. 3.2), dando lugar a un aumento de la magnetización local.

Cuando t es negativo y los dopajes son pequeños ocurre otro fenómeno y las correlaciones antiferromagnéticas se comportan distinto. En la figura 3.3 puede notarse que, aunque al dopar disminuye el valor $A_{\mathbf{R}_3}$, no aparece el máximo como ocurría en el caso de t positivo al variar $J/|t|$. Aquí lo que ocurre es que al decrecer el cociente entre la interacción de intercambio y el hopping se llega a un valor crítico, dependiente del dopaje, en el cual se produce una transición de fase hacia una fase espiral. Esta transición de fase se produce a valores de $J/|t|$ cada vez mayores al incrementar el dopaje. La temprana transición hacia una fase incommensurada, donde las correlaciones ferromagnéticas pueden ganar más relevancia que las antiferromagnéticas, también puede observarse al ver el claro incremento de $B_{\mathbf{R}_3}$ al disminuir J/t .

Mientras tanto, para la magnetización cuando $t < 0$ y los dopajes son pequeños ocurre un fenómeno interesante (Fig. 3.4). Por encima de $J/t \approx 0.6$ la magnetización cae al dopar, mientras que por debajo de ese valor se incrementa. Esto podría deberse a la presencia de múltiples fases espirales en las proximidades del orden de 120° , y

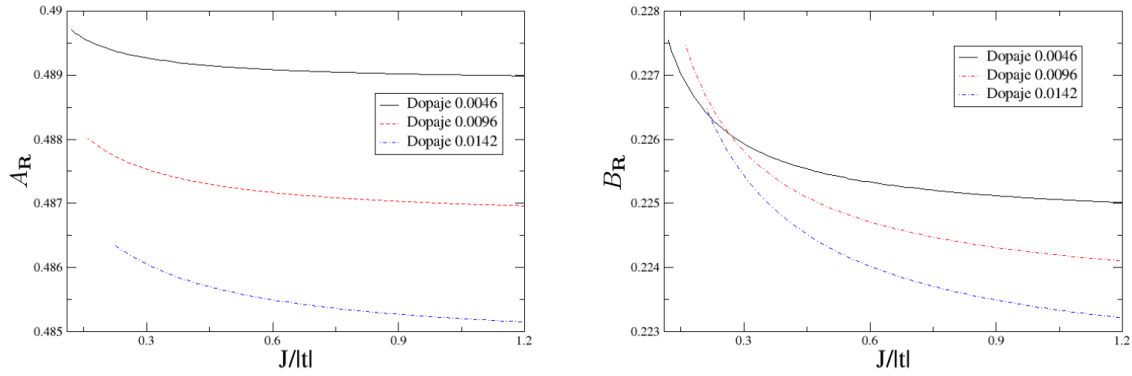


Figura 3.3: A_{R_3} y B_{R_3} en función de $J/|t|$ para pequeños dopajes y $t < 0$. En este caso se tiene $A_{R_1} = A_{R_2} = -A_{R_3}$ y $B_{R_3} = B_{R_2} = -B_{R_1}$.

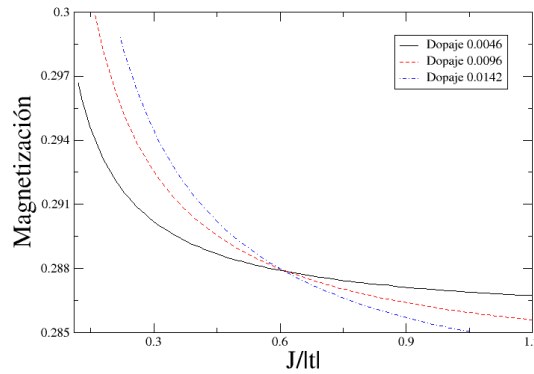


Figura 3.4: Magnetización staggered en función de $J/|t|$ para pequeños dopajes y $t < 0$.

algunas favorecerían más que otras a la magnetización local del antiferromagneto. El aumento de la magnetización al disminuir J/t se atribuye al acercamiento a una fase ferromagnética, donde la magnetización se encuentra saturada.

3.2. Dopajes intermedios: fase espiral y orden de 120°

Para dopajes intermedios la fase de ordenamiento magnético depende fuertemente del signo de t , como se comentó en el capítulo 1. Mientras que para $t > 0$ hay un claro predominio de la fase de Néel de 120° , para $t < 0$ esta fase reduce su estabilidad y aparecen fases tipo espiral o incommensuradas, debido a la competencia producida entre el término cinético, que favorece el ferromagnetismo, con el término de intercambio, que

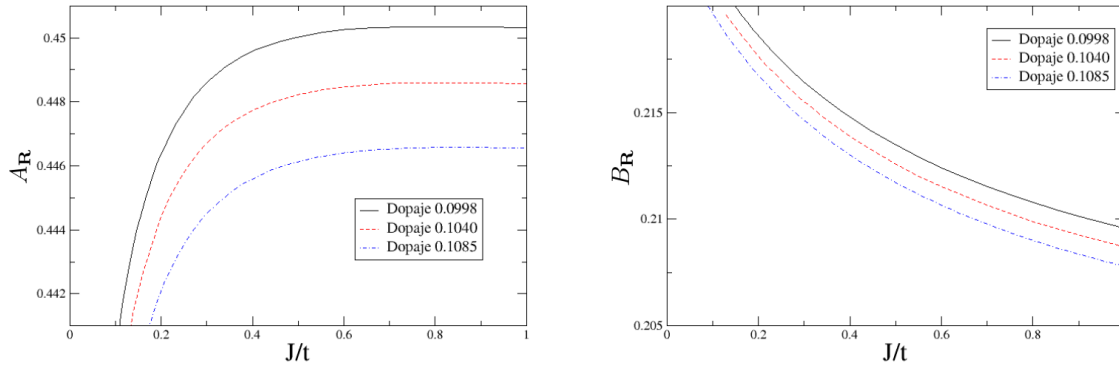


Figura 3.5: $A_{\mathbf{R}_3}$ y $B_{\mathbf{R}_3}$ en función de J/t para dopajes cercanos a 10% y $t > 0$. Aquí se verifica $A_{\mathbf{R}_1} = A_{\mathbf{R}_2} = -A_{\mathbf{R}_3}$ y $B_{\mathbf{R}_3} = B_{\mathbf{R}_2} = -B_{\mathbf{R}_1}$.

minimiza la energía en estados antiferromagnéticos.

Cuando $t > 0$, lo primero que debe notarse es que tanto al dopar como al disminuir J/t , las magnitudes $A_{\mathbf{R}}$ disminuyen en valor absoluto (Fig. 3.5). Nuevamente, con la caída de las correlaciones antiferromagnéticas se incrementa el carácter ferromagnético del sistema, determinado por el valor absoluto de las cantidades $B_{\mathbf{R}}$. Sin embargo este carácter ferromagnético también se ve afectado por el dopaje, que en ese sector de parámetros pareciera intentar eliminar el orden magnético del sistema. Por otro lado, se encuentra que si el sistema posee un número de huecos del orden del 10% de los sitios del sistema, leves modificaciones del dopaje no le producen cambios significativos a la magnetización (Fig. 3.6).

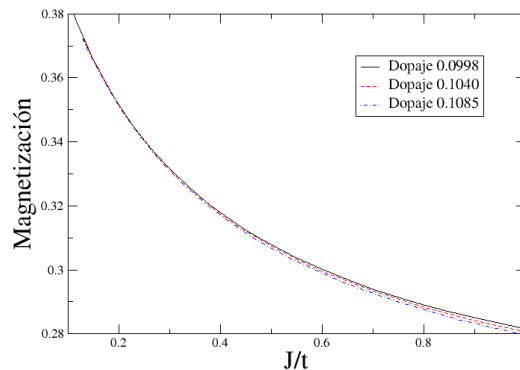


Figura 3.6: Magnetización staggered en función de J/t para dopajes cercanos a 10% y $t > 0$.

En las fases incommensuradas o espirales de la forma $\mathbf{Q} = (Q, 0)$ se tienen fenómenos más diversos. Estudiando la magnetización cuando el número de huecos es de alrededor

del 14 % de los sitios del sistema, se encuentra que no es muy sensible al dopaje, es decir, no cambia sustancialmente su valor con el dopaje, pero tampoco pareciera tener una estructura continua (Fig. 3.7). Esto se debe principalmente a la presencia de distintas

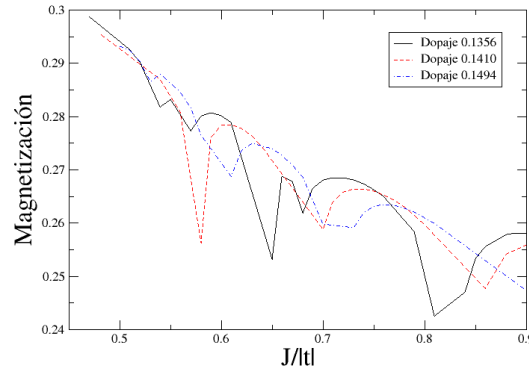


Figura 3.7: Magnetización staggered en función de $J/|t|$ para dopajes cercanos a 14 % y $t < 0$ (fase espiral).

estructuras magnéticas, ya que puede observarse claramente que en determinadas regiones hay comportamientos similares de la magnetización, y cada uno de ellos se asocia a una fase incommensurada. Por su parte, las discontinuidades con forma de “pícos” pueden atribuirse a efectos del tamaño finito de la red sobre la que se trabaja, pues al tomar un número finito de vectores de la 1ZB puede ocurrir que aparezca una fase distinta a la que se presentaría en el límite termodinámico. Con la información de la figura 3.7 no puede asegurarse que la magnetización caiga o se incremente al dopar, ya que esto también depende fuertemente de la fase y la región de parámetros donde uno se encuentre trabajando.

3.3. Dopajes altos: fase colineal de 180° y formación de cadenas ferromagnéticas

Recordando el predominio de la fase colineal que aparece cuando el porcentaje de huecos es muy alto, independientemente del signo del hopping t , aquí se analizan algunas cuestiones relacionadas con dicha fase.

En primer lugar, se encuentra que al dopar o disminuir $J/|t|$ hay una caída en valor absoluto de $A_{\mathbf{R}}$ y $B_{\mathbf{R}}$. Esto ocurre para tanto cuando el hopping es positivo como

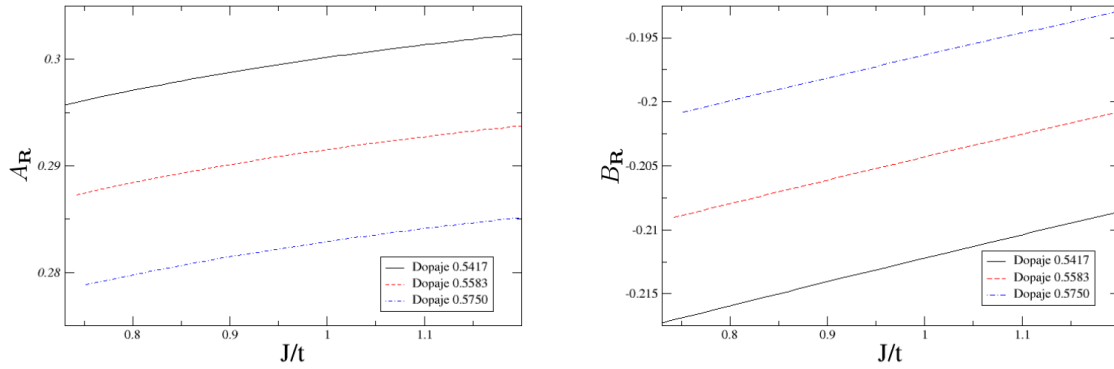


Figura 3.8: $A_{\mathbf{R}_3}$ y $B_{\mathbf{R}_1}$ en función de J/t para dopajes cercanos a 55% y $t > 0$. Aquí se tiene que $A_{\mathbf{R}_3} = -A_{\mathbf{R}_2}$, $A_{\mathbf{R}_1} = 0$ y $B_{\mathbf{R}_2} = B_{\mathbf{R}_3} = 0$.

cuando es negativo (Fig. 3.8 y 3.9), aunque para el caso de $t < 0$ la caída de tales valores absolutos es levemente mayor. Al disminuir el cociente $J/|t|$ cuando $t < 0$ no se

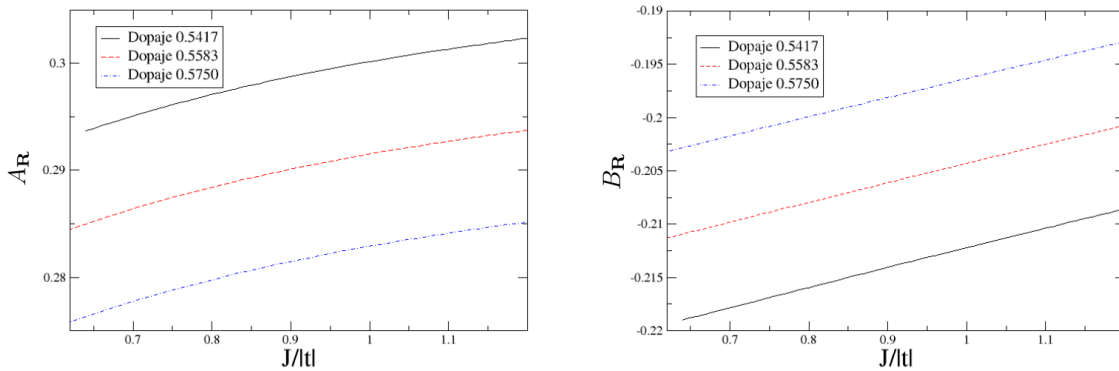


Figura 3.9: $A_{\mathbf{R}_3}$ y $B_{\mathbf{R}_1}$ en función de $J/|t|$ para dopajes cercanos a 55% y $t < 0$. Aquí se tiene que $A_{\mathbf{R}_3} = -A_{\mathbf{R}_2}$, $A_{\mathbf{R}_1} = 0$ y $B_{\mathbf{R}_2} = B_{\mathbf{R}_3} = 0$.

pasa directamente a una fase ferromagnética sino que se atraviesa una región de fases incommensuradas. Esto puede explicar las leves diferencias entre el caso de hopping negativo y el caso de hopping positivo. Para la magnetización ocurre algo similar: al dopar cae el valor de la magnetización, pero ésta parece ser algo mayor en el caso de $t < 0$. En ambos casos el comportamiento de la magnetización con $J/|t|$ aparenta ser idéntico.

El hecho de que las diferencias sean tan pequeñas se debe a que cuando el dopaje es cercano al 50%, se encuentra que $F_{\mathbf{R}_1} \neq 0$ mientras que $F_{\mathbf{R}_2} = F_{\mathbf{R}_3} = 0$. Un valor medio no nulo del operador $\hat{F}_{ij} = \hat{f}_i^\dagger \hat{f}_j$ da indicios del movimiento de huecos en esa di-

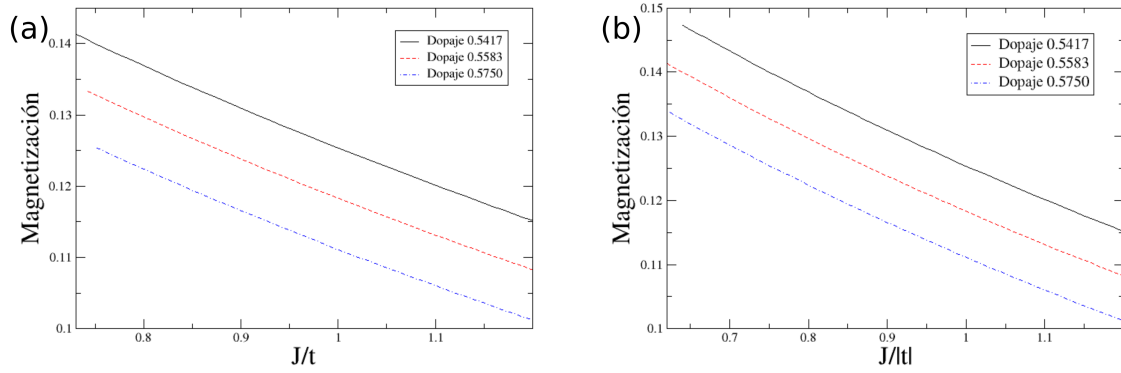


Figura 3.10: Magnetización staggered en función de $J/|t|$ para dopajes cercanos al 55 % cuando (a) $t > 0$ y (b) $t < 0$.

rección, mientras que un valor nulo en otra dirección prohíbe el movimiento en aquella dirección. A esto se le suma que $A_{\mathbf{R}_1} = 0$, $A_{\mathbf{R}_2} = A_{\mathbf{R}_3} \neq 0$, $B_{\mathbf{R}_1} \neq 0$ y $B_{\mathbf{R}_2} = B_{\mathbf{R}_3} = 0$, lo que permite identificar la formación de cadenas ferromagnéticas a lo largo de la dirección dada por \mathbf{R}_1 (o antiferromagnéticas a lo largo de las demás direcciones). Estas cadenas facilitan el movimiento de huecos y ganan energía de intercambio debido a que los espines tienen más vecinos con espín opuesto que vecinos con el mismo espín. En conclusión, puede pensarse que como consecuencia de la “unidimensionalización” del sistema, al formarse estas cadenas ferromagnéticas, el signo de t deja de ser relevante y se obtienen los mismos resultados para cualquier signo. Sin embargo las leves diferencias entre el caso de $t > 0$ y $t < 0$ persisten, ya que en los casos aquí estudiados la probabilidad de ocupación de un sitio por un hueco no es estrictamente del 50 %, por lo que el fenómeno antes descrito no ocurre perfectamente.

Conclusiones

Se presentaron los valores medios de los operadores $A_{\mathbf{R}}$, $B_{\mathbf{R}}$ y la magnetización en función de $J/|t|$ para distintos dopajes y en las distintas fases presentes en la teoría de campo medio de bosones de Schwinger y fermiones esclavos del modelo $t - J$ sobre la red triangular.

Se mostró que en la fase de 120° con $t > 0$ presenta un incremento de la correlación antiferromagnética cuando $J \rightarrow 0$, aunque pasa estrictamente a una fase ferromagnética cuando $J = 0$ debido a problemas del método, y que el dopaje tiende a incrementar la

magnetización cuando el número de huecos es pequeño con respecto al número de sitios de la red. Para $t < 0$, al disminuir $J/|t|$ se produce una temprana transición de fase hacia ordenamientos espirales, y la magnetización cae o se incrementa con el dopaje dependiendo de la región de valores en la que se encuentre $J/|t|$.

Cuando el número de huecos es cercano al 10 %, si el hopping es positivo la fase de 120° pierde estabilidad al disminuir J/t , y la magnetización presenta poca sensibilidad ante leves modificaciones del dopaje. Por su parte, para $t < 0$, la región del diagrama de fases en dopajes del orden del 15 % se encuentra dominada por las fases incommensuradas, que aunque revelan su estructura en la magnetización, brindan resultados poco confiables debido al tamaño finito de la red sobre la que se trabaja.

Para dopajes cercanos al 50 %, en una fase de Néel colineal, se observó la formación de cadenas ferromagnéticas a lo largo de una dirección particular, lo que puede traducirse en una unidimensionalización del sistema. Este fenómeno prácticamente independiza a los resultados del signo de t . En el siguiente capítulo se verá que esto tiene consecuencias directas en el espectro de excitaciones magnéticas en la fase de 180° .

Capítulo 4

Excitaciones magnéticas en el modelo t-J sobre la red triangular

A lo largo de este capítulo se presentarán los cálculos realizados para el factor de estructura dinámico en las distintas fases antiferromagnéticas presentes en un modelo $t - J$ triangular. Se estudiará cómo varía de el espectro de excitaciones magnéticas al modificar el dopaje, las escalas de energía del modelo y el signo del hopping t .

Los caminos de alta simetría recorridos en la 1ZB se encuentran representados en la figura 4.1, y generalmente se modificará el camino recorrido dependiendo de la fase en la que se esté trabajando. Esto se debe a que aunque todos los espectros presenten un modo de Goldstone en $\mathbf{k} = (0, 0)$, el modo restante \mathbf{Q} dependerá del ordenamiento magnético presente en el sistema.

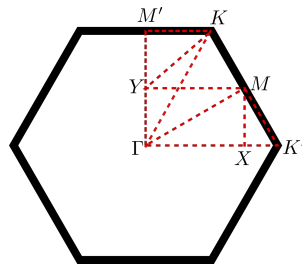


Figura 4.1: Vértices y caminos de alta simetría recorridos en la primera zona de Brillouin de la red triangular.

En primer lugar se estudiará el caso en el que $t > 0$. Luego de ver cómo se modifica la fase de 120° con el dopaje y el cociente J/t , y compararla con los resultados obtenidos en modelo de Heisenberg, se comparará un espectro de excitaciones magnéticas con la relación de dispersión obtenida mediante la teoría de ondas de espín lineal de la que

se habló en el capítulo 1. En particular se buscarán cambios en las velocidades de las ondas de espín en las cercanías de los modos de Goldstone. Luego se estudiarán cambios en el factor de estructura dinámico a lo largo del mismo camino pero en una fase de 180° , para finalmente cerrar la sección presentando los resultados de la fase de 180° en distintas regiones del diagrama de fases a lo largo de un camino que de cuenta del orden magnético.

Para $t < 0$ se hará un análisis similar. En primer lugar, se verán los cambios en la fase de 120° al dopar para un dado J/t respecto de un modelo de Heisenberg. Aquí los cambios serán menos sorprendentes que en el caso de $t > 0$, debido a la acotada región que ocupa la fase de 120° en el diagrama de fases cuando se trabaja con t negativo, y por esto se presentarán menos resultados para esta fase. A pesar de esto se estudiará, fijando un momento \mathbf{k} , como cambian los picos del factor de estructura dinámico en función de la energía al dopar. Luego se presentarán algunos resultados obtenidos cuando se trabaja en fases inconmensuradas y se analizará cuales son las principales diferencias que presentan con la fase de 120° . Finalmente se estudiarán las excitaciones magnéticas presentes en la fase de 180° .

En todos los resultados se presentará el factor de estructura dinámico $S(\mathbf{k}, \omega) = S^{xx}(\mathbf{k}, \omega) + S^{yy}(\mathbf{k}, \omega) + S^{zz}(\mathbf{k}, \omega)$, ya que la única diferencia que se observa en los distintos elementos es que en el caso zz la intensidad de dispersión es algo mayor que en los casos xx e yy , donde la intensidad es idéntica. Estos resultados se condicen con la inclusión de un campo de ruptura de simetría ubicado en el plano xy .

Los cálculos nuevamente se realizaron sobre clusters de 4800 sitios, pero los caminos recorridos en la 1ZB donde se graficó al factor de estructura dinámico se obtuvieron mediante parametrizaciones entre los vértices y no utilizando a los vectores de la red recíproca del cristal. El módulo del campo de ruptura de simetría tomado en todos los casos es inversamente proporcional al número de sitios.

4.1. Caso de hopping positivo ($t > 0$)

4.1.1. Fase de 120°

Cuando t es positivo, el diagrama de fases magnéticas encontrado con la teoría de fermiones esclavos del modelo $t - J$ en campo medio se encuentra dominado principalmente por la fase de 120° . El ordenamiento de Néel de 120° persiste incluso hasta

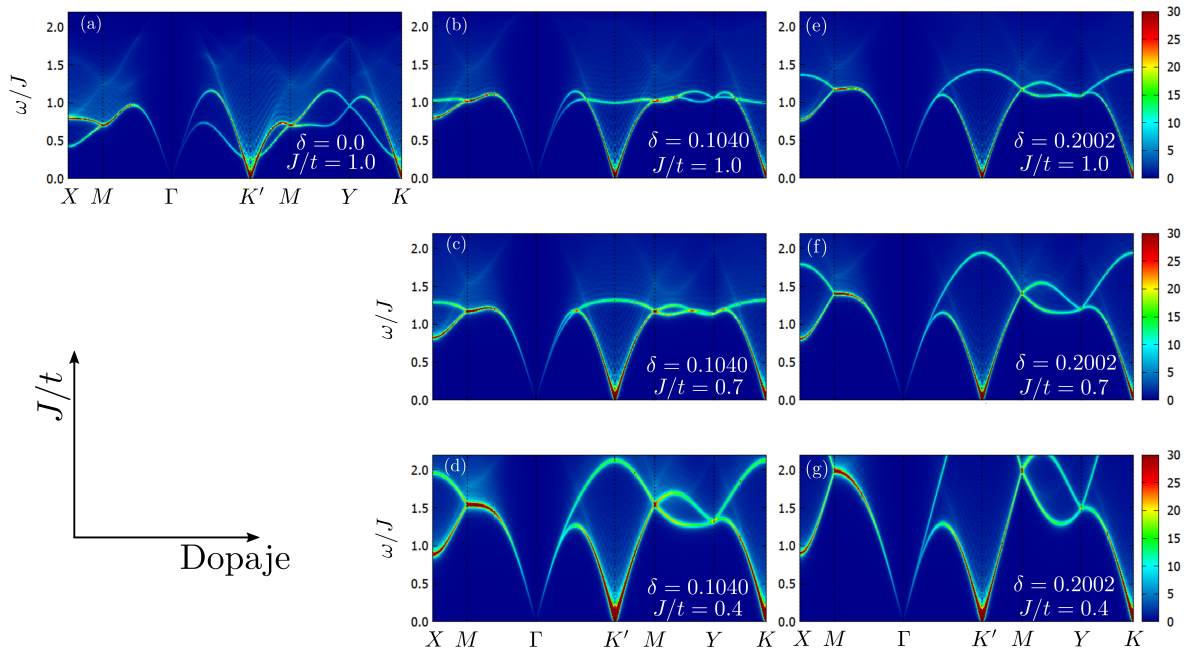


Figura 4.2: Factor de estructura dinámico obtenido en (a) el modelo de Heisenberg, (b) (c) (d) el modelo $t - J$ con un dopaje del 10.40% y (e) (f) (g) el modelo $t - J$ con un dopaje del 20.02% para $J/t = 1.0$, 0.7 y 0.4 respectivamente.

dopajes del orden del 30% cuando J/t es mayor a 0.2. Esto permite analizar una región amplia de parámetros, como puede verse en la figura 4.2. Allí, en comparación con un modelo de Heisenberg, se observan principalmente dos modos de gran intensidad a bajas energías, seguidas por otros menos intensos para energías más altas. A este espectro de altas energías es a lo que se conoce como *continuo de excitaciones* en el modelo de Heisenberg [26]. Al dopar o disminuir el cociente J/t se encuentra que las bandas se ensanchan, y uno de los modos presentes en la relación de dispersión resulta más susceptible a esos cambios. El efecto combinado del dopaje con un incremento del valor relativo de t respecto de J se traduce en un gran ensanchamiento de las bandas presentes en el espectro de excitaciones magnéticas. Este incremento puede estar asociándose a la existencia de una interacción de intercambio efectiva mayor que J , y que ocurra tanto dopar como al incrementar J/t se atribuye a la aparición de una nueva escala de energía $t\delta$ [37] [38].

En el vértice K' de la 1ZB, asociada al modo de Goldstone $\mathbf{Q} = (4\pi/3, 0)$, se encuentra una señal muy intensa en $\omega = 0$ que indica el orden magnético presente en el sistema, pero para una energía mayor se puede ver que aparece una nueva señal un tanto menos intensa, que se eleva rápidamente cuando se incrementa el producto $t\delta$.

En otras regiones del camino recorrido en la 1ZB este modo aparece para una energía menor que la señal más intensa, pero rápidamente sube y supera a esta señal en energía al introducir huecos en el sistema (Fig. 4.3). En el modelo de Heisenberg, a esta señal se la ha denominado *modo espurio* [39], ya que no tiene carácter físico: aparece como consecuencia de la violación de la restricción sobre el espacio de Fock que permite únicamente la presencia de un bosón de Schwinger por sitio cuando se trabaja en una aproximación de saddle point. Esto puede afirmarse tras computar la susceptibilidad de densidad de los bosones de Schwinger en el modelo de Heisenberg, donde se encuentra un pico coincidente con el modo de alta energía. Incluso se sabe que realizando una expansión de la acción efectiva hasta orden gaussiano en la integral funcional del modelo de Heisenberg tratado con bosones de Schwinger este modo espurio originado en campo medio se cancela con las correcciones de mayor orden dando lugar al modo magnónico correcto [26].

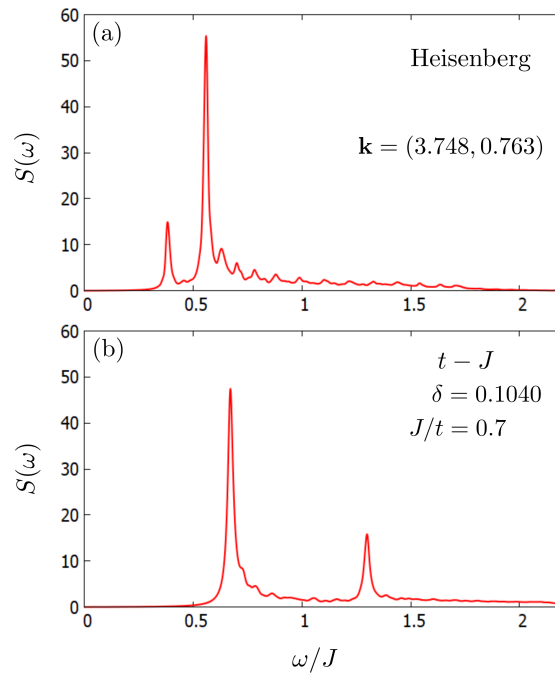


Figura 4.3: Factor de estructura dinámico $S(\mathbf{k}, \omega)$ evaluado en $\mathbf{k} = (3.748, 0.763)$, vector intermedio en el camino $K' \rightarrow M$, para (a) el modelo de Heisenberg y (b) el modelo $t - J$ con dopaje 10.40 % y $J/t = 0.7$.

En principio no se puede afirmar que el modo espurio en Heisenberg no tenga sentido físico en el modelo $t - J$ trabajando en saddle point, pero el hecho de que persista incluso a bajos dopajes parece ser un fuerte indicio de que ocurre el mismo fenómeno en ambos modelos, y que al realizar aproximaciones más allá del saddle point podría nuevamente

cancelarse y dar lugar a la relación de dispersión magnónica correcta.

Teoría de ondas de espín

La teoría de ondas de espín lineal, aunque describe de manera satisfactoria a la relación de dispersión en las cercanías de los modos de Goldstone, falla para las regiones de altas energías. La velocidad de las ondas de espín está determinada por la pendiente de la relación de dispersión en las proximidades de aquellos modos, y está descrita perfectamente por la teoría.

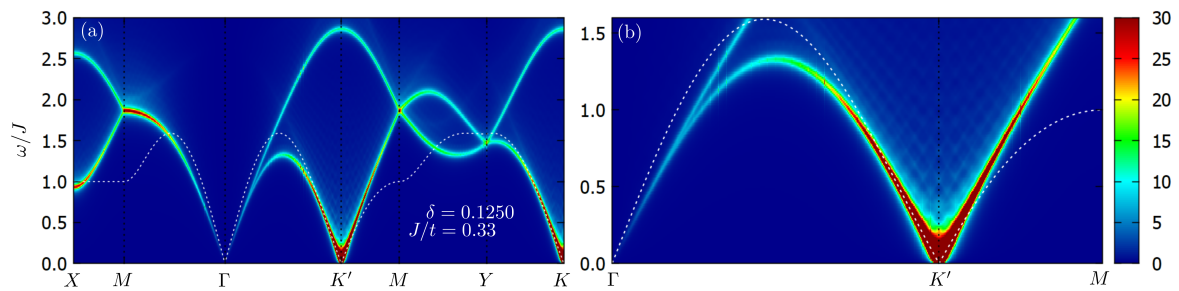


Figura 4.4: (a) Factor de estructura dinámico del modelo $t - J$ para un dopaje del 12.50 % con $J/t = 0.33$ (b) región acotada del gráfico anterior al camino $\Gamma \rightarrow K' \rightarrow M$. En línea de puntos blancos se indica la relación de dispersión según LSWT.

En un modelo $t - J$, la teoría de ondas de espín ya no sirve para describir la relación de dispersión debido a la presencia de dopaje en el sistema. Esto se puede apreciar tanto analizando las velocidades de ondas de espín y notando que en Γ la velocidad aumenta, lo que podría asociarse al fortalecimiento de la fase de 120° al dopar, como observando las grandes diferencias entre ambas teorías en las regiones de altas energías. Una de las mayores diferencias puede encontrarse en el vértice M , donde la presencia del dopaje prácticamente duplica la energía de las excitaciones respecto de la que tendría antiferromagneto sin dopar según LSWT. Estos fenómenos también ocurren para el caso de $t < 0$, pero en menor medida debido a que en tal caso la fase de 120° se encuentra restringida a un intervalo de dopajes mucho menores y por lo tanto es menos apreciable que en el caso aquí presentado.

4.1.2. Fase colineal de 180°

El espectro de excitaciones magnéticas en una fase antiferromagnética de 180° presenta nuevas características. El cambio más notorio es quizás la modificación de uno de

los modos de Goldstone. Mientras que en la fase de 120° la relación de dispersión se

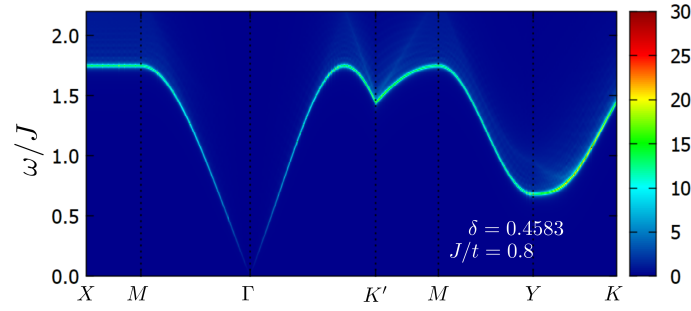


Figura 4.5: Factor de estructura dinámico del modelo $t - J$ obtenido con parámetros $\delta = 0.4583$ y $J/t = 0.8$, que son consistentes con un ordenamiento de Néel de 180° . El camino recorrido en la 1ZB puede encontrarse en la figura 4.1.

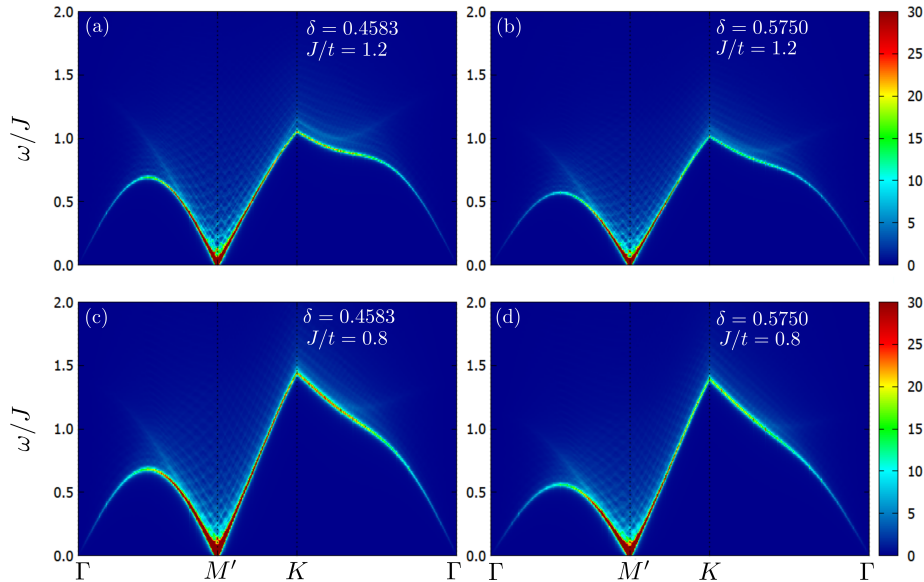


Figura 4.6: Factor de estructura dinámico del modelo $t - J$ obtenido con parámetros (a) $\delta = 0.4583$, $J/t = 1.2$, (b) $\delta = 0.5750$, $J/t = 1.2$, (c) $\delta = 0.4583$, $J/t = 0.8$ y (d) $\delta = 0.5750$, $J/t = 0.8$. En todos los casos se trata de una fase con orden de Néel de 180° . El camino recorrido en la 1ZB puede encontrarse en la figura 4.1.

anula en el vértice K' dado por el momento $\mathbf{Q} = (4\pi/3, 0)$, en la fase de 180° se anula en el vector $\mathbf{Q} = (2\pi, 0)$, y cae en el vértice M' de la zona de Brillouin (Fig. 4.5 y 4.6).

Graficando al factor de estructura dinámico en el camino $\Gamma \rightarrow M' \rightarrow K \rightarrow \Gamma$ para distintos dopajes y valores de J/t puede estudiarse la evolución del mismo con dichos parámetros. Una modificación significativa que puede apreciarse en la figura 4.6 es el achatamiento de la banda a lo largo del camino $M' \rightarrow K \rightarrow \Gamma$ cuando se lo computa con un J/t más grande. Esto puede atribuirse a que al incrementar dicho cociente, el sistema

se acerca cada vez más a una fase de 120° , caracterizada por un modo de Goldstone en K . Un cambio menos significativo se observa en el camino $\Gamma \rightarrow M'$, donde la banda parece descender con el dopaje independientemente del valor de J/t , y podría deberse a que al incrementar el dopaje se tiende hacia una fase ferromagnética, donde la relación de dispersión es cuadrática para bajas energías.

Cabe mencionar que la fase de Néel colineal aparenta tener un continuo de excitaciones magnéticas mucho más acotado respecto del que se presenta en la fase de 120° . Esta ausencia de un continuo de excitaciones apreciable ocurre también para un antiferromagneto cuadrado sin dopaje en presencia de un orden de Néel de 180° [40], lo que podría indicar que los espectros de excitaciones magnéticas dependen principalmente del estado de ordenamiento magnético del sistema, y no del modelo utilizado.

4.2. Caso de hopping negativo ($t < 0$)

4.2.1. Fase de 120°

Cuando el hopping t es negativo, la fase de 120° se encuentra restringida a una región mucho más pequeña del diagrama de fases que en el caso de t positivo (Fig. 1.3). Esto limita el análisis que se puede realizar al dopar. En general, los resultados que se observan al dopar y disminuir el cociente $J/|t|$ son similares a los del caso de t positivo: ensanchamiento de las bandas y elevación del modo espurio (Fig. 4.7), pero estos efectos son mucho menos apreciables debido a la poca libertad que existe en los parámetros manteniendo la fase de 120° antes de pasar a una fase incommensurada. El

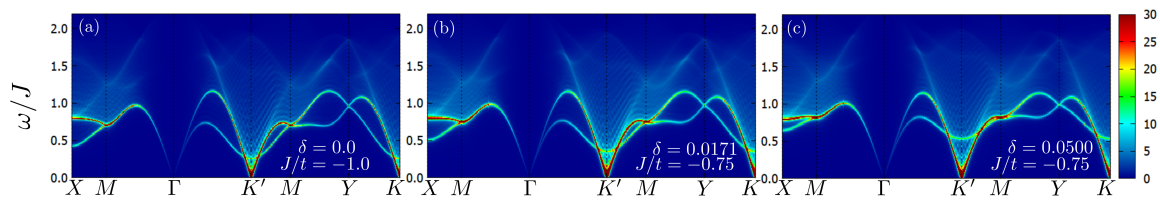


Figura 4.7: Factor de estructura dinámico obtenido en (a) el modelo de Heisenberg, (b) el modelo $t - J$ con un dopaje del 1.71 % y $J/t = -0.75$ (c) el modelo $t - J$ con un dopaje del 5 % y $J/t = -0.75$.

reducido efecto del dopaje permite apreciar con mayor claridad el continuo de excitaciones magnéticas de altas energías. En la figura 4.8 se compara el factor de estructura

dinámico para un dado \mathbf{k} ubicado en el camino $\Gamma \rightarrow K'$ entre un modelo de Heisenberg y un modelo $t - J$ con $t < 0$. Mientras que la señal más intensa permanece prácticamente invariante, al introducir un 5% de huecos con $J/|t| = 0.75$, la excitación de alta energía adquiere mayor coherencia y se resuelve mejor debido a que aumenta su intensidad y se corre hacia energías más altas, alejándose del ruido originado por problemas numéricos que existe en las cercanías del pico mayor. Estas excitaciones de altas energías presentes

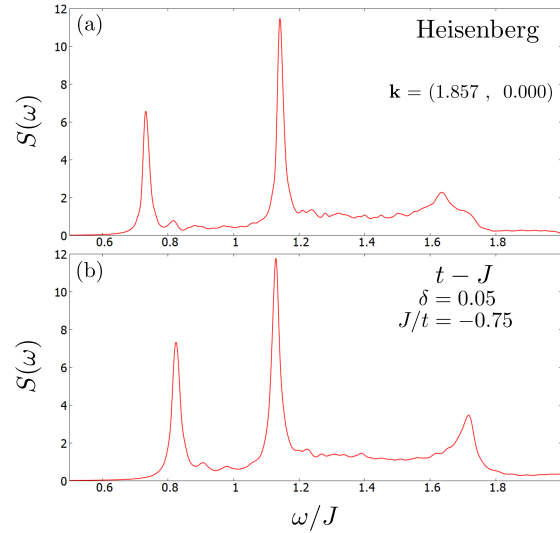


Figura 4.8: Comparación del factor de estructura dinámico para $\mathbf{k} = (1.857, 0.000)$, un vector intermedio del camino $\Gamma \rightarrow K'$, en función de ω en el modelo de Heisenberg (a) y el modelo $t - J$ (b) cuando el dopaje es del 5% y $J/t = -0.75$.

en el modelo $t - J$ pueden llegar a ser esenciales para entender los experimentos de dispersión inelástica de neutrones en antiferromagnetos dopados, puesto que muestran un continuo de excitaciones con energías que exceden ampliamente a las energías máximas que se obtienen en la relación de dispersión según la teoría de ondas de espín.

4.2.2. Fases espirales

Para dopajes intermedios, cuando $t < 0$, los ordenamientos que acaparan la mayor porción del diagrama de fases son del tipo incommensurado o espiral. Como ya se ha comentado, estas fases se caracterizan por la presencia de modos de Goldstone en $\mathbf{k} = (0, 0)$ y en $\mathbf{k} = (Q, 0)$, donde Q varía prácticamente de manera continua¹ desde los estados de Néel o la fase ferromagnética. En la figura 4.9 se encuentra graficado el factor

¹Esta continuidad no puede afirmarse con seguridad debido a la restricción numérica de trabajar con un número finito de sitios.

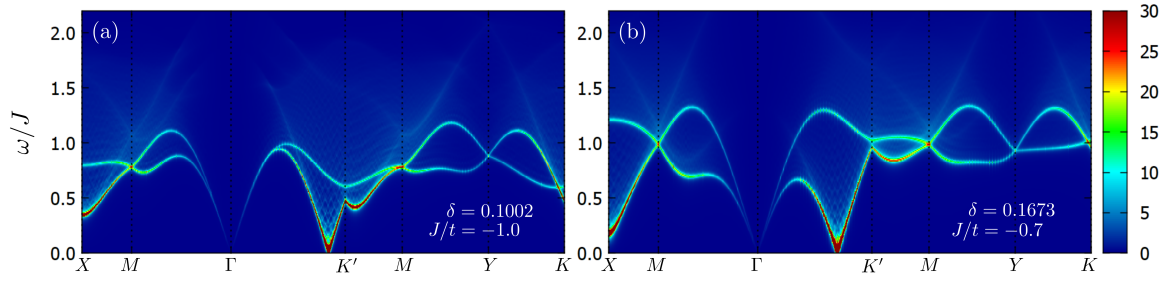


Figura 4.9: Factor de estructura dinámico del modelo t-J en (a) una fase con $\mathbf{Q} = (\frac{17}{15}\pi, 0)$ y (b) una fase con $\mathbf{Q} = (\frac{14}{15}\pi, 0)$.

de estructura dinámico para dos fases espirales distintas. Allí el cambio más significativo respecto de un orden de 120° es el corrimiento del modo de Goldstone desde el vértice K' hacia momentos intermedios ubicados en el camino $\Gamma \rightarrow K'$. Otro cambio notable es un achatamiento de las bandas a lo largo de $K' \rightarrow M \rightarrow Y \rightarrow K$, lo que se correspondería con un estado mayormente localizado de las excitaciones magnéticas. Nuevamente se observa que la teoría captura un interesante continuo de excitaciones de altas energías en este tipo de fases. Esto último es un buen indicio para la teoría, debido a que en el trabajo experimental del que se habló en el capítulo 1 (Fig. 1.7) [11], el orden magnético es incommensurado y hay un importante continuo de excitaciones que no es reproducido por la teoría convencional.

4.2.3. Fase de 180°

Cuando t es negativo, en la fase de 180° aparecen resultados prácticamente análogos al caso de t positivo, esto es, un reducido continuo de excitaciones, achatamiento de las bandas en un camino al disminuir J/t y en otro camino al aumentar el dopaje (Fig. 4.10). Este es un resultado interesante que va de la mano con el fenómeno observado en el capítulo 3: la formación de cadenas ferromagnéticas “unidimensionaliza” al sistema, volviendo a las características del mismo independientes del signo del hopping.

Conclusiones

A lo largo de este capítulo se computó el factor de estructura dinámico del modelo $t - J$ en función de distintos parámetros y comparándolo reiteradamente con el modelo de Heisenberg.

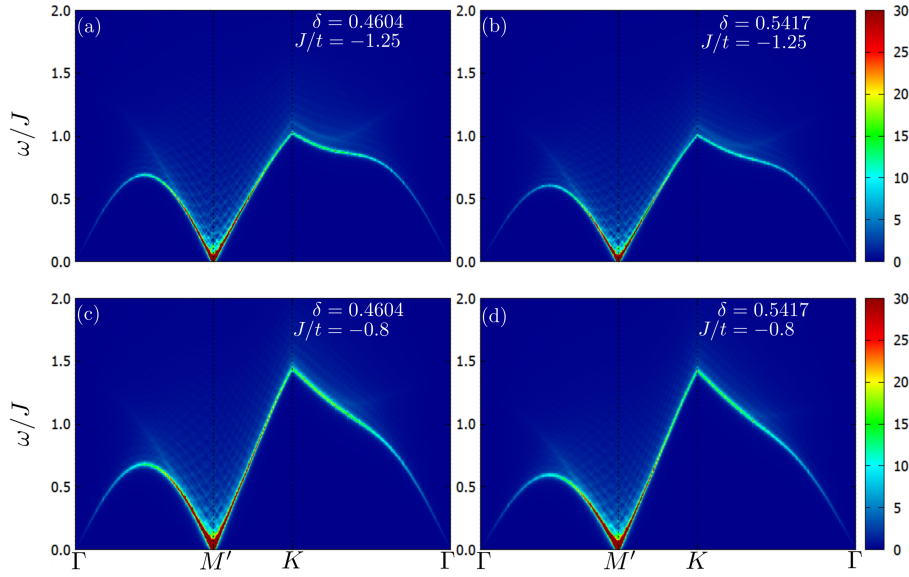


Figura 4.10: Factor de estructura dinámico del modelo $t - J$ obtenido con parámetros (a) $\delta = 0.4604$, $J/t = -1.25$, (b) $\delta = 0.5417$, $J/t = -1.25$, (c) $\delta = 0.4604$, $J/t = -0.8$ y (d) $\delta = 0.5417$, $J/t = -0.8$. En todos los casos se trata de una fase con orden de Néel de 180° .

Se encontró, en el caso de $t > 0$, que la aparición de una nueva escala de energía $t\delta$ explicaría por qué en la fase de 120° las excitaciones suben en energía tanto al dopar como al aumentar el valor de t respecto de J . A esto se le sumó una discusión sobre el posible carácter espurio de uno de los modos presentes en los espectros obtenidos. Además se compararon los resultados con la teoría de ondas de espín, examinando las velocidades de ondas de espín y apreciando las diferencias en las relaciones de dispersión a altas energías. En la fase de 180° se encontró el resultado esperado del corrimiento del modo de Goldstone a un momento $\mathbf{Q} = (2\pi, 0)$, y se logró explicar la evolución del espectro de excitaciones con el dopaje o el cociente J/t a partir de acercamientos o alejamientos a las distintas fases que se presentan en el sistema para distintos valores de los parámetros antes nombrados.

Cuando $t < 0$, la fase de 120° pierde la predominancia que tiene respecto del caso de signo positivo del hopping, ya que se vuelve mucho menos estable al dopar. Sin embargo se encuentra que conserva un continuo de excitaciones interesantes y que este continuo pareciera ser más coherente al dopar que en el modelo de Heisenberg. Para dopajes más altos, que se corresponden a fases incommensuradas, también fueron estudiados los espectros de excitaciones magnéticas. Se observó un corrimiento del modo de Goldstone del vértice K' hacia puntos intermedios del camino $\Gamma \rightarrow K'$ en los ejemplos que se presentaron, asociado al orden magnético espiral que presenta cada una de las fases.

Finalmente, cuando se dopó con aproximadamente un 50 % de huecos, se encontraron resultados prácticamente idénticos que en el caso de $t > 0$, algo esperado debido a la formación de cadenas ferromagnéticas que se comentó en el capítulo anterior.

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas

Con una motivación asociada al reciente interés despertado alrededor de las propiedades de los antiferromagnetos frustrados dopados, esta tesina consistió en dar un primer paso para generalizar la teoría de bosones de Schwinger con correcciones gaussianas en antiferromagnetos frustrados hacia sistemas con dopaje. Para ello, en el capítulo 2 además de introducir la representación de bosones de Schwinger para describir a los grados de libertad de espín, fue necesario incluir fermiones esclavos que permitan representar los grados de libertad de carga del modelo $t - J$. Una vez expresado el hamiltoniano en función de estas nuevas partículas, se planteó a la función de partición del sistema como una integral funcional sobre autovalores de los estados coherentes de dichas partículas. Mediante este formalismo se desacoplaron las interacciones entre bosones y fermiones con bosones a través de la introducción de los campos de Hubbard-Stratonovich, lo que permitió construir una acción efectiva sobre la cual se empleó la aproximación de punto de ensilladura para obtener los valores medios de los operadores de link presentes en el hamiltoniano. Esto permitió computar magnitudes como la energía del estado fundamental o la magnetización local del antiferromagneto. Luego se introdujo un término al hamiltoniano que contempla un campo magnético externo con el ordenamiento de la fase que se deseaba seleccionar en el sistema, de modo de imitar el fenómeno de ruptura espontánea de simetría, debido a que esto tiene implicancias importantes si se desea extender la aproximación más allá del saddle point. De esta forma se obtuvieron expresiones para computar los distintos elementos de la susceptibilidad magnética dinámica, que está íntimamente relacionada con el factor de estructura dinámico.

Tras caracterizar las distintas fases del modelo $t - J$ estudiando los efectos del do-

paje y la presencia de las distintas escalas de energía en el capítulo 3, se computó el factor de estructura dinámico en el capítulo 4. Allí se estudió el comportamiento del factor de estructura dinámico al modificar el dopaje o los valores de la integral de hopping respecto de la integral de intercambio. Se observó que en la fase de 120° dopar o incrementar el valor relativo de t tiene el mismo efecto: elevar las bandas de excitaciones magnéticas. Además, en esa fase la teoría capturó un interesante continuo de excitaciones, tanto para t positivo como para t negativo, algo que no ocurrió en la fase de 180° . Se notó que, independientemente del signo del hopping, en la fase de 180° los resultados para el factor de estructura dinámico eran muy similares, y esto se atribuyó a la formación de cadenas ferromagnéticas que ocurren en esa fase cuando el dopaje es cercano al 50%. También se estudiaron espectros de excitaciones magnéticas cuando la fase era incommensurada, donde nuevamente se encontró un interesante continuo de excitaciones, sumado al corrimiento del modo de Goldstone que indica el ordenamiento magnético del sistema y un notable achatamiento de las bandas en algunos caminos.

Como perspectivas para un trabajo futuro, resta responder el interrogante sobre el origen del segundo modo de gran intensidad y altamente susceptible al dopaje que aparece en el modelo $t - J$, que es de carácter espurio en el modelo de Heisenberg. Para ello, en primer lugar, se podría computar la función de correlación del operador número de partículas de un sitio (tanto fermiones esclavos como bosones de Schwinger) consigo mismo, de modo que, de aparecer picos para los momentos y frecuencias en los que aparecen estos segundos modos, podría decirse que el origen de dichos modos se debe a la violación de la restricción que existe sobre el número de partículas en un sitio. Esto terminaría de aclararse con el cómputo de la susceptibilidad magnética dinámica del modelo $t - J$ con correcciones gaussianas, sabiendo que en el modelo de Heisenberg la inclusión de estas correcciones resuelve el problema de la aparición de una susceptibilidad de densidad no nula, que surge debido a que la restricción del número de partículas se relaja desde una condición local hacia una condición global en la aproximación de punto de ensilladura.

Por último, se espera que la introducción de las correcciones de orden gaussiano en la acción efectiva permita analizar y comparar los espectros de excitaciones magnéticas que se obtengan mediante la teoría con los resultados experimentales que han comenzado a aparecer en la bibliografía [11].

Apéndice A

Equivalencia entre la aproximación de campo medio y la aproximación de punto de ensilladura

Consideremos la función de partición escrita como integral de camino

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[x] e^{-S_0(x) + \frac{\alpha}{2} \mathcal{O}(x) \mathcal{O}(x)} \quad (\text{A.1})$$

donde S_0 es el valor estacionario de la acción y se le agrega una perturbación que depende cuadráticamente de un campo $\mathcal{O}(x)$ y de un parámetro α . La aproximación de campo medio consiste en expresar al operador como

$$\mathcal{O}(x) = M + (\mathcal{O}(x) - M) \quad (\text{A.2})$$

y esperar que $\mathcal{O}(x) - M$ sea pequeño, de modo que al elevarlo al cuadrado se pueda aproximar por¹

$$\mathcal{O}(x) \mathcal{O}(x) \approx 2M \mathcal{O}(x) - M^2. \quad (\text{A.3})$$

Reemplazando esto en la función de partición (A.1) se tiene una nueva función de partición de campo medio

$$\mathcal{Z}_{mf}[M] = e^{-\frac{\alpha M^2}{2}} \int \mathcal{D}[x] e^{-S_0(x) + 2M \mathcal{O}(x)} \quad (\text{A.4})$$

y a partir de esto se puede llegar a la ecuación de autoconsistencia para el valor medio del campo

$$\langle \mathcal{O}(x) \rangle_{mf} = M = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial M} \ln(e^{\frac{\alpha M^2}{2}} \mathcal{Z}_{mf}[M]). \quad (\text{A.5})$$

¹Esto es lo que se conoce como despreciar los términos que son cuadráticos en las fluctuaciones.

Por otro lado, aplicando una transformación de Hubbard-Stratonovich puede desacoplarse la parte cuadrática en el campo \mathcal{O}

$$e^{\frac{\alpha}{2}\mathcal{O}(x)\mathcal{O}(x)} = \int \mathcal{D}[\mathcal{M}] e^{-\frac{\alpha\mathcal{M}^2}{2} + \alpha\mathcal{M}\mathcal{O}(x)} \quad (\text{A.6})$$

de modo que la función de partición resulte

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\mathcal{M}] e^{-S_{ef}(\mathcal{M})} \quad (\text{A.7})$$

con la acción efectiva

$$S_{ef} = \frac{\alpha\mathcal{M}^2}{2} - \ln\left(\int \mathcal{D}[x] e^{S_0(x) + \alpha\mathcal{M}\mathcal{O}(x)}\right). \quad (\text{A.8})$$

La aproximación de punto de ensilladura consiste en solo considerar la contribución del punto que verifica $(\frac{\partial S_{ef}}{\partial \mathcal{M}})|_{\mathcal{M}_0} = 0$ en la integración, obteniendo

$$\mathcal{Z}_{sp} = e^{-S_{ef}(\mathcal{M}_0)} = \mathcal{Z}_{mf}(\mathcal{M}_0) \quad (\text{A.9})$$

que resulta equivalente a (A.5) si $\mathcal{M}_0 = M$.

La justificación del uso de la aproximación de punto de ensilladura en lugar de la teoría de campo medio consiste en que, mientras que la última no permite ir más allá del resultado obtenido, en la primera se pueden seguir incluyendo términos en la acción efectiva además de la contribución del punto de ensilladura. Por ello trabajar con integrales de camino y aproximar la acción efectiva es una metodología empleada con mayor frecuencia.

Bibliografía

- [1] B. Barbara, “Louis Néel: His multifaceted seminal work in magnetism”, C. R. Physique (2019), [doi:10.1016/j.crhy.2019.07.003](https://doi.org/10.1016/j.crhy.2019.07.003).
- [2] J. Friedel, “Louis Néel”, Physics Today 54, 10-88 (2001), [doi:10.1063/1.1420568](https://doi.org/10.1063/1.1420568).
- [3] H. Bethe, “Zur Theorie der Metalle”, Zeitschrift Für Physik, 71, 205 (1931), [doi:10.1007/BF01341708](https://doi.org/10.1007/BF01341708).
- [4] C. Shull & J. Smart, “Detection of Antiferromagnetism by Neutron Diffraction”, Physical Review, 76, 1256 (1949), [doi:10.1103/PhysRev.76.1256.2](https://doi.org/10.1103/PhysRev.76.1256.2).
- [5] P. W. Anderson, “An Approximate Quantum Theory of the Antiferromagnetic Ground State”, Phys. Rev., 86, 694 (1952) [doi:10.1103/PhysRev.86.694](https://doi.org/10.1103/PhysRev.86.694).
- [6] J. G. Bednorz & K. A. Müller, “Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system”, Z. Physik B - Condensed Matter, 64, 189 (1986) [doi:10.1007/BF01303701](https://doi.org/10.1007/BF01303701).
- [7] P. W. Anderson, “The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity”, Science, 235, 1196 (1987), [doi:10.1126/science.235.4793.1196](https://doi.org/10.1126/science.235.4793.1196).
- [8] P. W. Anderson, “Resonating valence bonds: A new kind of insulator?”, Materials Research Bulletin 8, 2 (1973) [doi:10.1016/0025-5408\(73\)90167-0](https://doi.org/10.1016/0025-5408(73)90167-0).
- [9] J. Ma, Y. Kamiya, T. Hong, H. B. Cao, G. Ehlers, W. Tian, C. D. Batista, Z. L. Dun, H. D. Zhou & M. Matsuda, “Static and Dynamical Properties of the Spin-1/2 Equilateral Triangular-Lattice Antiferromagnet $Ba_3CoSb_2O_9$ ”, Phys. Rev. Lett., 116, 087201 (2016), [doi:10.1103/PhysRevLett.116.087201](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.087201).
- [10] N. P. Ong & R. J. Cava, “Electronic Frustration on a Triangular Lattice”, Science, 305, 52 (2004), [doi:10.1126/science.1099387](https://doi.org/10.1126/science.1099387).

-
- [11] Pyeongjae Park, Kisoo Park, Taehun Kim, Yusuke Kousaka, Ki Hoon Lee, T. G. Perring, Jaehong Jeong, Uwe Stuhr, Jun Akimitsu, Michel Kenzelmann & Je Geun Park, “Momentum Dependent Magnon Lifetime in the Metallic Noncollinear Triangular Antiferromagnet CrB_2 ” *Phys. Rev. Lett.*, 125, 027202 (2020), [doi:10.1103/PhysRevLett.125.027202](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.027202).
- [12] S. Blundell, “Magnetism in Condensed Matter”, Oxford University Press (2001).
- [13] J. Hubbard, “Electron Correlations in Narrow Energy Bands”, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 276, 238 (1963), [doi:10.1098/rspa.1963.0204](https://doi.org/10.1098/rspa.1963.0204).
- [14] P. Fazekas & P. W. Anderson, “On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet”, *The Philosophical Magazine*, 30:2, 423, (1973), [doi:10.1080/14786439808206568](https://doi.org/10.1080/14786439808206568).
- [15] B. Bernu, C. Lhuillier, & L. Pierre, “Signature of Néel order in exact spectra of quantum antiferromagnets on finite lattices”, *Phys. Rev. Lett.*, 69, 2590 (1992), [doi:10.1103/PhysRevLett.69.2590](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.69.2590).
- [16] L. Capriotti, A. E. Trumper & S. Sorella, “Long-Range Néel Order in the Triangular Heisenberg Model”, *Phys. Rev. Lett.*, 82, 3899 (1999), [doi:10.1103/PhysRevLett.82.3899](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.3899).
- [17] P. Fazekas, “Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism”, World Scientific, Singapour (1999), [doi:10.1142/2945](https://doi.org/10.1142/2945).
- [18] N. D. Mermin & H. Wagner, “Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models”, *Phys. Rev. Lett.* 17, 1133 (1966), [doi:10.1103/PhysRevLett.17.1133](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.17.1133).
- [19] Qian Li, Hong Li, Jize Zhao, Hong-Gang Luo, Z. Y. Xie, “Magnetization of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice”, preprint (2020), arxiv.org/abs/2009.03765.
- [20] Hong-Chen Jiang, “Superconductivity in the doped quantum spin liquid on the triangular lattice”, preprint (2019), arxiv.org/abs/1912.06624.

-
- [21] C. N. Sposetti, “Propiedades magnéticas en sistemas itinerantes fuertemente correlacionados”, Tesis Doctoral, IFIR - UNR (2014).
- [22] C. N. Sposetti, B. Bravo, A. E. Trumper, C. J. Gazza, & L. O. Manuel, “Classical Antiferromagnetism in Kinetically Frustrated Electronic Models”, *Phys. Rev. Lett.*, 112, 187204 (2014), [doi:10.1103/PhysRevLett.112.187204](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.187204).
- [23] John M. Tranquada, “Spins, Stripes, and Superconductivity in Hole-Doped Cuprates”, *AIP Conference Proceedings* 1550, 114 (2013) [doi:10.1063/1.4818402](https://doi.org/10.1063/1.4818402).
- [24] H. Kuzmany, “Solid-State Spectroscopy, an introduction”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2009), [doi:10.1007/978-3-642-01479-6](https://doi.org/10.1007/978-3-642-01479-6).
- [25] P. Coleman, “Introduction to Many Body Physics”, Cambridge University Press (1952), [doi:10.1017/CBO9781139020916](https://doi.org/10.1017/CBO9781139020916).
- [26] E. A. Ghioldi, M. G. Gonzalez, Shang-Shun Zhang, Yoshitomo Kamiya, L. O. Manuel, A. E. Trumper & C. D. Batista, “Dynamical structure factor of the triangular antiferromagnet: Schwinger boson theory beyond mean field”, *Phys. Rev. B*, 98, 184403 (2018) [doi:10.1103/PhysRevB.98.184403](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.184403).
- [27] D. P. Arovas & A. Auerbach, “Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models”, *Phys. Rev. B*, 38, 316 (1988) [doi:10.1103/PhysRevB.38.316](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.316).
- [28] P. Coleman, “Many Body Physics: Unfinished Revolution”, *Ann. Henri Poincaré*, 4, 22 (2003), [doi:10.1007/978-3-0348-7907-1_43](https://doi.org/10.1007/978-3-0348-7907-1_43).
- [29] Sanjoy Sarker, C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy & Michael Ma, “Bosonic mean-field theory of quantum Heisenberg spin systems: Bose condensation and magnetic order”, *Phys. Rev. B*, 40, 5028 (1989), [doi:10.1103/PhysRevB.40.5028](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.5028).
- [30] C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy & Sanjoy Sarker, “Mean-field theory for the t-J model”, *Phys. Rev. B*, 40, 2610(R) (1989), [doi:10.1103/PhysRevB.40.2610](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.2610).
- [31] C. L. Kane, P. A. Lee, T. K. Ng, B. Chakraborty, & N. Read, “Mean-field theory of the spiral phases of a doped antiferromagnet”, *Phys. Rev. B*, 41, 2653(R) (1990), [doi:10.1103/PhysRevB.41.2653](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.2653).

- [32] L. O. Manuel, “Frustración magnética en sistemas electrónicos fuertemente correlacionados”, Tesis Doctoral, IFIR - UNR (1998).
- [33] E. A. Ghioldi, A. Mezio, L. O. Manuel, R. R. P. Singh, J. Oitmaa, & A. E. Trumper, “Magnons and excitation continuum in XXZ triangular antiferromagnetic model: Application to $Ba_3CoSb_2O_9$ ”, *Phys. Rev. B*, 91, 134423 (2015) [doi:10.1103/PhysRevB.91.134423](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.134423).
- [34] H. A. Ceccatto, C. J. Gazza & A. E. Trumper, “Nonclassical disordered phase in the strong quantum limit of frustrated antiferromagnets”, *Physical Review B*, 47, 12329 (1993) [doi:10.1103/PhysRevB.47.12329](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.12329).
- [35] R. Flint & P. Coleman, “Symplectic N and time reversal in frustrated magnetism”, *Physical Review B*, 79, 014424 (2009) [doi:10.1103/PhysRevB.79.014424](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.014424).
- [36] J. W. Negele & H. Orland, “Quantum Many-Particle Systems”, *Advanced Book Classics*, Adison-Wesley, New York (1988).
- [37] P. W. Anderson, P. A. Lee, M. Randeria, T. M. Rice, N. Trivedi & F. C. Zhang, “The physics behind high-temperature superconducting cuprates: the ‘plain vanilla’ version of RVB”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 16, 24 (2004), iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/16/24/R02.
- [38] Jan O. Haerter, Michael R. Peterson & B. Sriram Shastry, “Finite-temperature properties of the triangular lattice t-J model and applications to Na_xCoO_2 ”, *Phys. Rev. B* 74, 245118 (2006), doi.org/10.1103/PhysRevB.74.245118.
- [39] A. Mezio, C. N. Sposetti, L. O. Manuel & A. E. Trumper, “A test of the bosonic spinon theory for the triangular antiferromagnet spectrum”, *Europhysics Letters*, 94, 4 (2011) iopscience.iop.org/article/10.1209/0295-5075/94/47001.
- [40] R. Coldea, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, C. D. Frost, T. E. Mason, S.-W. Cheong & Z. Fisk, “Spin Waves and Electronic Interactions in La_2CuO_4 ”, *Phys. Rev. Lett.* 86, 5377 (2001), [doi.org:10.1103/PhysRevLett.86.5377](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.5377).