



Universidad de Oviedo
Universidá d'Uviéu
University of Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO (FÍSICA)

DOBLE GRADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

**DESARROLLO DE MODELOS Y ALGORITMOS PARA
CARACTERIZAR MATERIALES MAGNÉTICOS
BIDIMENSIONALES**

AUTOR: JORGE CERRADA VELASCO

TUTORES: JAIME FERRER RODRÍGUEZ Y GABRIEL MARTÍNEZ
CARRACEDO

Oviedo, 24 de julio de 2023

“Un viaje incluirá dolor y fracaso. No son solo los pasos adelante los que debemos aceptar, sino también los traspies. Las dificultades. El conocimiento de que fracasaremos. De que haremos daño a quienes nos rodean.

Pero si nos detenemos, si aceptamos la persona que somos al caer, el viaje concluye. Ese fracaso pasa a ser nuestro destino.

Amar el viaje implica no aceptar ese final. He descubierto, por medio de dolorosas experiencias, que el paso más importante que puede dar alguien es siempre el siguiente.”

– Dalinar Kholin, Juramentada

Índice general

0. Introducción	1
I Comprendiendo el origen del magnetismo	4
1. El magnetismo en los átomos	5
1.1. El origen cuántico del magnetismo	7
1.2. Paramagnetismo y diamagnetismo	8
2. Magnetismo en la tabla periódica	10
3. Interacción de espines: el modelo de Heisenberg	12
3.1. Orden a largo alcance: configuraciones de espín	13
3.2. Términos adicionales del hamiltoniano de Heisenberg	14
3.3. Ondas de espín clásicas	16
4. La aproximación de campo medio	20
II Modelos modernos de magnetismo en materia	24
5. Descripciones modernas del magnetismo	25
5.1. El formalismo de la segunda cuantización	25
5.1.1. Sistemas de fermiones	28
5.1.2. Sistemas de bosones	29
5.2. Describiendo interacciones: el modelo de Hubbard	31
5.3. De Hubbard a Heisenberg	35
6. Bosonización en modelos de Heisenberg	38
6.1. El formalismo de Holstein-Primakoff	38
6.2. El formalismo de Schwinger	39
III Mis resultados del estudio de modelos de Heisenberg	43
7. Resultados del formalismo de Holstein-Primakoff	44
7.1. Ondas de espín en sistemas ferromagnéticos	44
7.2. Ondas de espín en sistemas antiferromagnéticos	49
8. Resultados del formalismo de Schwinger	52
8.1. Correlaciones de espín en sistemas ferromagnéticos	52
8.2. Correlaciones de espín en sistemas antiferromagnéticos	56
9. Comparación de ambos formalismos, conclusiones y próximos pasos	60
Referencias	64

0. Introducción

En los últimos años, se han producido grandes avances en la obtención de materiales bidimensionales diferentes al grafeno. La posibilidad de trabajar con sólidos formados por capas de un único átomo permite dar aplicación a sus propiedades magnéticas en campos como la espintrónica, pues dan lugar a efectos no presentes en el caso tridimensional. Algunos de estos fenómenos se observan en la figura 1, aunque también podríamos incluir texturas topológicas, como los skyrmiones. Por ejemplo, ya han sido estudiados materiales monocapa y de pocas capas resultado de exfoliar cristales de van der Waals [1, 2], como el $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ o el CrI_3 .

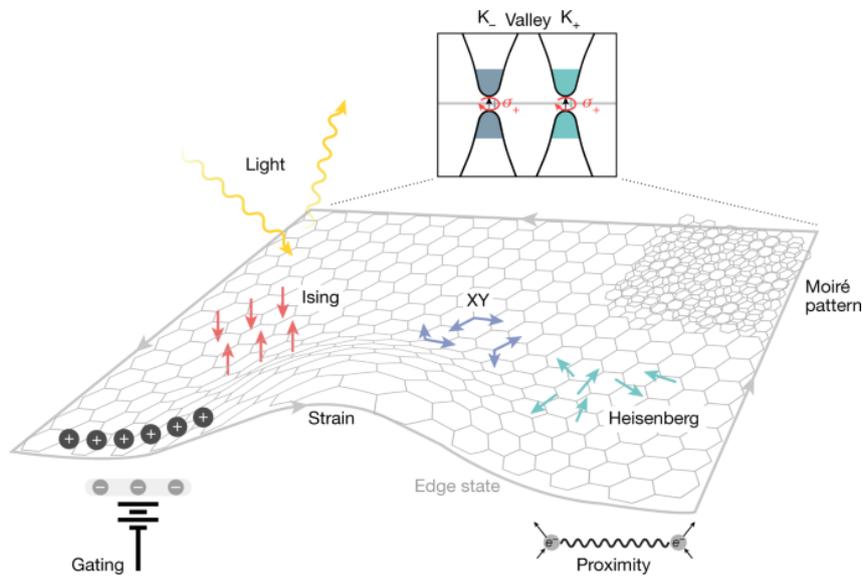


Figura 1: Esquema que recoge algunos de los múltiples fenómenos relacionados con el magnetismo en materiales bidimensionales. Aparecen además diagramas de los modelos XY, de Ising y de Heisenberg, que son diferentes maneras de explicar el origen del magnetismo a través de la interacción de espines. [3]

Aunque las propiedades magnéticas de la materia son conocidas y empleadas desde la Antigüedad, fue con el descubrimiento de la mecánica cuántica que se pudo dar una descripción adecuada de los mecanismos que dan lugar a este fenómeno. Pese a ello, la teoría de bandas, que tanto éxito cosechó en la explicación de las propiedades conductoras de los materiales, no es capaz de dar una respuesta adecuada a cuestiones relacionadas con el magnetismo.

A lo largo de este trabajo, estudiaremos algunos de los modelos que han descrito satisfactoriamente el magnetismo en sólidos. Comenzaremos con los primeros acercamientos mecano-cuánticos propuestos. A continuación, haremos una pequeña incursión en la teoría cuántica de campos, con el objetivo de armarnos con herramientas adecuadas que nos permitan formular modelos más complejos. Finalmente, llegaremos a estudiar algunos de estos modelos modernos, utilizados a día de hoy en la investigación de los nuevos materiales bidimensionales. Otro aspecto a tener en cuenta al trabajar con este tipo de materiales es la necesidad de introducir anisotropías que permitan el orden magnético a

temperaturas finitas [2], como consecuencia del teorema de Mermin-Wagner. Este hecho debe ser reflejado en el modelo que se utilice.

Una de las cuestiones que más nos interesará será comparar los resultados obtenidos a través de dos formalismos distintos: la **bosonización de Schwinger** y la **bosonización de Holstein-Primakoff**. Ambos plantean una manera de reescribir los operadores de espín en términos de operadores bosónicos en el contexto de las teorías de campos. Mientras que el **primero** de los formalismos utiliza variables que se interpretan como **correlaciones entre espines vecinos**, en el **segundo** se trata con **ondas de espín** dentro del material. En el campo del magnetismo, se ha usado típicamente el formalismo de Holstein-Primakoff, pues da lugar a predicciones satisfactorias y las variables son más sencillas de interpretar. Por su parte, el formalismo de Schwinger ha sido empleado en otras áreas, como la superconductividad, donde también cuenta con numerosos éxitos. Sin embargo, no hay demasiada bibliografía donde se emplee este tipo de variables en modelos de Heisenberg ferromagnéticos.

Por tanto, mi contribución será contrastar la validez del formalismo de Schwinger para describir el magnetismo de los sólidos. Para ello emplearé estimaciones de la temperatura crítica de algunos materiales. Ya que no se ha realizado una comparación directa entre ambas descripciones con anterioridad en este ámbito, trataré de dar unos primeros resultados que puedan servir de punto de partida. Varios de los cálculos y resultados que discutiremos son parte de dos proyectos que he realizado a lo largo del último año. La parte de Holstein-Primakoff fue realizada para el “Research Awards for Undergraduate Students 2022”, otorgado por la División de Física de la Materia Condensada de la Real Sociedad Española de Física. Partiendo de un modelo de Heisenberg con anisotropía y campo externo, desarrollé una teoría de ondas de espín en los casos ferromagnético y antiferromagnético con el objetivo de calcular de manera autoconsistente su espectro excitado. Por su parte, los resultados relativos al formalismo de Schwinger forman parte de un proyecto para la beca *JAE Intro*, de la que actualmente soy beneficiario. De nuevo, parto de un modelo de Heisenberg, en esta ocasión sin términos adicionales. A través de los bosones de Schwinger, obtengo una forma diagonal del hamiltoniano en términos de variables de correlación de espín. Terminé calculando la temperatura crítica a la que deja de observarse una fase ordenada de manera autoconsistente.

Parte I

Comprendiendo el origen del magnetismo

1. El magnetismo en los átomos

El magnetismo es un fenómeno que se conoce desde la Antigüedad, pero cuyas primeras explicaciones no llegaron hasta la teoría electromagnética de Maxwell.

La imanación es la magnitud clave que da cuenta del comportamiento magnético de los materiales. Es una magnitud extensiva, resultado de la suma de los momentos magnéticos de todos los átomos del material. Esta puede ser originada como consecuencia de la presencia de un campo magnético externo o estar presente en el sistema aún en ausencia de dichos campos. La segunda situación solo puede ser entendida desde una perspectiva cuántica.

Según cómo se comporte un material en presencia de un campo externo, se distinguen los paramagnéticos y los diamagnéticos.

El magnetismo ha sido objeto de estudio e investigación por parte de científicos de todo el mundo. Desde los primeros acercamientos a esta fenomenología hasta la formulación de las ecuaciones de Maxwell, el magnetismo ha desempeñado un papel crucial en nuestra comprensión de la naturaleza y en el desarrollo de la teoría electromagnética.

Los primeros indicios del magnetismo se remontan a tiempos antiguos, donde se observaron propiedades magnéticas en ciertos minerales, como la magnetita. Los chinos fueron pioneros en la fabricación de brújulas, utilizando las propiedades de alineación magnética de la aguja imantada para orientarse en la navegación marítima. Sin embargo, no fue hasta el siglo XVI cuando se realizaron avances significativos en el estudio científico del magnetismo.

Uno de los principales hitos en el desarrollo de la teoría del magnetismo fue la formulación de la ley de Ampère en el siglo XIX por parte del físico francés André-Marie Ampère. Esta ley establece que una corriente eléctrica genera un campo magnético a su alrededor. Ampère demostró que los efectos magnéticos podían ser explicados en términos de corrientes eléctricas, sentando las bases para la unificación del magnetismo y la electricidad en una sola teoría. Sin embargo, fue el físico escocés James Clerk Maxwell quien logró unificar completamente el magnetismo y la electricidad en su teoría electromagnética. Maxwell formuló un conjunto de ecuaciones que describen cómo los campos eléctricos y magnéticos se interrelacionan y se propagan a través del espacio. Estas ecuaciones, conocidas como las **ecuaciones de Maxwell**, son fundamentales para entender la naturaleza y el comportamiento de los campos electromagnéticos. En el vacío, toman la siguiente forma

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \left(\epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{J} \right). \end{array} \right. \quad (1.1)$$

Para poder aplicarlas al estudio de materiales, debemos definir nuevas magnitudes que den cuenta de los fenómenos microscópicos que tienen lugar en el interior del sistema. Se introduce el **desplazamiento eléctrico**, $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$, siendo ϵ la permitividad del material y \vec{E} el vector de campo eléctrico. Asimismo, el campo de inducción magnética, \vec{B} , se descompone en dos magnitudes diferentes: el **campo magnético** \vec{H} y la **imanación** del material \vec{M} , de manera que $\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$.

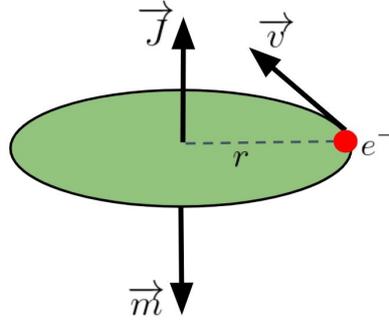


Figura 1.1: Esquema del momento magnético de un átomo, como consecuencia del movimiento de sus electrones. [4]

De esta manera, las ecuaciones de Maxwell en medios materiales toman la forma

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho, \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \end{cases} \quad (1.2)$$

El campo magnético \vec{H} es el mismo haya o no material presente, luego es un campo externo. Por tanto, la magnitud que describe el comportamiento magnético de un material es el vector imanación, \vec{M} . Será esta magnitud la que debemos comprender para encontrar el origen del magnetismo en los sólidos.

La segunda ecuación de Maxwell indica que no existen monopolos magnéticos. Es por ello que, de acuerdo con las ecuaciones de Maxwell, el origen del magnetismo se encuentra en dipolos magnéticos producidos por corrientes eléctricas. Además, encontramos que los átomos se comportan como pequeños dipolos. La imanación macroscópica es en realidad la suma de las pequeñas contribuciones de cada átomo del sistema. De esta manera, debemos detenernos a estudiar las propiedades de los átomos entendidos como dipolos magnéticos. Los electrones de valencia actúan como pequeñas corrientes eléctricas, que dotan a los átomos de momento magnético. La figura 1.1 muestra esta idea.

Por otro lado, en la naturaleza encontramos materiales que solo muestran imanación en presencia de campos magnéticos externos, pero también otros que siguen imanados aún en ausencia de dichos campos. Siempre que el campo magnético \vec{H} sea suficientemente débil, podemos escribir $\vec{M} = \chi \vec{H}$, siendo χ la **susceptibilidad magnética** del material. Entonces, la manera correcta de escribir el vector imanación es

$$\vec{M} = \vec{M}_0 + \chi \vec{H} . \quad (1.3)$$

1.1. El origen cuántico del magnetismo

En este punto, cobra importancia un resultado propio de la física estadística: el **teorema de Bohr-Van Leeuwen**. Este nos dice que cualquier modelo de la materia puramente clásico conduce a una imanación macroscópica nula. Nos permite entonces concluir que el magnetismo de los materiales en ausencia de campos externos tiene un origen exclusivamente cuántico.

Para probar este resultado, se supone un sistema de N electrones clásicos, con carga $-e$ y masa m . Si la posición de un electrón es \mathbf{r}_i y su velocidad es \mathbf{v}_i , este produce una corriente $\mathbf{j}_i = -e\mathbf{v}_i$ y un momento magnético

$$\mathbf{m}_i = \frac{-e}{2m} \mathbf{l}_i = \frac{-e}{2} \mathbf{r}_i \times \mathbf{v}_i . \quad (1.4)$$

El momento magnético total será $\mathbf{M} = \sum_{i=1}^M \mathbf{m}_i$. Además, las posiciones y velocidades de estos electrones seguirán la distribución de Maxwell-Boltzmann. La imanación total esperada del sistema en cada dirección viene dada por la media térmica de dicha magnitud. Se puede escribir como

$$\langle M \rangle = \frac{\int M dP}{\int dP} , \quad (1.5)$$

donde $dP \propto \exp[-H(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N; \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) / k_B T] d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{p}_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$ es la distribución de Maxwell-Boltzmann. El hamiltoniano de este sistema viene dado por el típico término de acople al campo electromagnético de la teoría clásica de campos

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{(\mathbf{p}_i + e \mathbf{A}_i)^2}{2m} - e \phi(\mathbf{r}) , \quad (1.6)$$

siendo \mathbf{A} el potencial magnético vector y $\phi(\mathbf{r})$ el potencial eléctrico. De las ecuaciones canónicas del sistema, deducimos que la velocidad de cada electrón es una función lineal del momento. Por tanto, también lo es el momento magnético. Finalmente, por ser una función lineal del momento lineal, el momento magnético de cada electrón es también una función impar. Al integrar el momento magnético de un electrón en todo el espacio de momentos, el resultado será 0. En conclusión, $\int M dP = 0$. Cualquier sistema de electrones clásico tiene imanación neta nula.

En resumen, no tenemos manera de explicar la imanación en ausencia de campos externos, \vec{M}_0 , desde un punto de vista clásico. Para solucionar esta situación, no nos queda más remedio que considerar la naturaleza cuántica de los electrones en los átomos.

En adelante, para agilizar la nomenclatura, llamaremos espín al momento angular total de cada átomo, resultado de la suma de los momentos angulares totales de sus electrones de valencia. Es claro que tanto el espín como el momento angular orbital contribuyen al momento angular total, pero nos referiremos al mismo de manera genérica como espín.

1.2. Paramagnetismo y diamagnetismo

Siguiendo la nomenclatura expuesta con anterioridad, sabemos que cada electrón tiene un momento angular total o **espín** característico. Como consecuencia, tiene asociado un momento magnético de espín dado por

$$\vec{m}_s = -\frac{e}{m} \vec{S} = -\mu_B \vec{\sigma}, \quad (1.7)$$

donde $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ es el magnetón de Bohr y $\vec{\sigma}$ es el vector de matrices de Pauli, relacionado con el propio espín por la ecuación $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$.

Tenemos entonces una visión de un material como un conjunto de muchos pequeños momentos magnéticos microscópicos, que en principio no siguen ningún orden. Vamos a considerar únicamente cómo se ve afectado cada espín por la presencia de un campo externo. El hamiltoniano de interacción de los electrones con un campo magnético externo viene dado por

$$\mathcal{H} = \frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r}) - \frac{g}{2} \vec{B} \cdot \vec{m}_s = \frac{(\vec{p} + e\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{g\mu_B}{2} \vec{B} \cdot \vec{\sigma}. \quad (1.8)$$

Notemos que aparecen de nuevo los términos del hamiltoniano clásico visto en el teorema de Bohr-Van Leeuwen, cuyo origen se encuentra en la teoría clásica de campos. Hemos añadido el término de acople del espín y el campo magnético, que es puramente cuántico. La constante g es propia de cada partícula, y en el caso del electrón vale aproximadamente 2.

Entonces, en presencia de un campo magnético externo, los pequeños momentos magnéticos tienden a alinearse con el mismo, para minimizar la energía. La dirección de este alineamiento dependerá del signo de χ . Si $\chi > 0$, esta alineación es a favor del campo magnético y el material se dice **paramagnético**. Si $\chi < 0$, la alineación se opone al campo externo y el material se dice **diamagnético**.

Una elección explícita del potencial vector permite explorar qué términos dan lugar al paramagnetismo y qué otros dan lugar al diamagnetismo. Desarrollando la función de partición a la que da lugar el hamiltoniano anterior, se puede calcular la imanación del material, y en última instancia su susceptibilidad $\chi = \frac{dM}{dH}$.

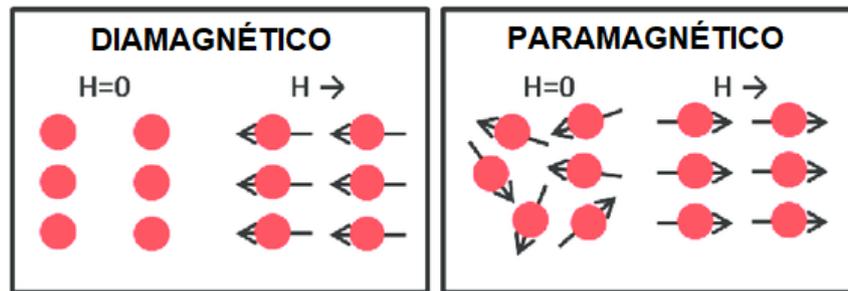


Figura 1.2: Esquema del posible los posibles comportamientos de los espines atómicos en presencia de un campo magnético externo. [5]

Como norma general, los términos paramagnéticos dominan sobre los diamagnéticos. Esto se refleja en que la mayor parte de materiales exhiben un comportamiento paramagnético. Al considerar únicamente los términos paramagnéticos, aplicando el colectivo canónico se puede formular el **paramagnetismo de Curie-Langevin**. Es la teoría más sencilla que explica el origen de este fenómeno. El término diamagnético cobra protagonismo en sistemas con espín nulo. En estos casos, los mismos cálculos de física estadística conducen al **diamagnetismo de Larmor**.

Aunque funcionan en muchos contextos, no todas las situaciones observadas en presencia de campos externos puede ser descritas en términos de los modelos anteriores. El fallo de ambos es considerar a los materiales como sistemas de espines libres. El comportamiento real de un material suele ser más complejo, pues existe una interacción de intercambio entre los espines del medio que favorecen configuraciones ordenadas en determinados casos. Será esta misma interacción entre los espines la que nos permita entender el origen de la imanación en ausencia de campos externos.

2. Magnetismo en la tabla periódica

La interacción entre los espines que componen un material puede dar lugar a que este exhiba comportamiento magnético en ausencia de campos externos. Llamaremos a este fenómeno magnetismo espontáneo. No todos los elementos presentan fases ordenadas.

En la tabla periódica, son solo algunos metales de transición y los lantánidos en los que encontramos este tipo de comportamiento. En el caso de los primeros, se conoce como magnetismo itinerante. En los segundos, hablamos de magnetismo localizado.

Hasta ahora, nuestra descripción cuántica de los materiales nos ha permitido comprender el origen de la imanación como consecuencia de la presencia de campos externos. No obstante, ya hemos destacado que estos cálculos omiten las interacciones entre espines.

Llamaremos **magnetismo espontáneo** al fenómeno por el que un material satisface $\vec{M}_0 \neq 0$ aun cuando el campo externo es nulo. Como ya hemos visto, esto quiere decir que los espines de los materiales que presentan magnetismo espontáneo se encuentran alineados aún en ausencia de campos externos; es lo que se conoce como **orden a largo alcance**. Por otro lado, la temperatura del sistema juega un papel relevante en esta propiedad. En la mayor parte de los materiales, este orden a largo alcance se ve frustrado cuando su temperatura es suficientemente alta. Se conoce como **temperatura de Curie** o **temperatura crítica** al umbral de temperatura por encima del cual los espines del sistema se comportan como si estuvieran aislados y dejan de exhibir un comportamiento ordenado. La denotaremos T_C . Por encima de la temperatura de Curie aún se manifiesta el paramagnetismo o diamagnetismo, según corresponda.

En la tabla periódica, encontramos dos grandes grupos de elementos que exhiben fases ordenadas. Popularmente, es lo que conocemos como imanes. Por un lado, tenemos los metales de transición (principalmente, hierro, cobalto y níquel).

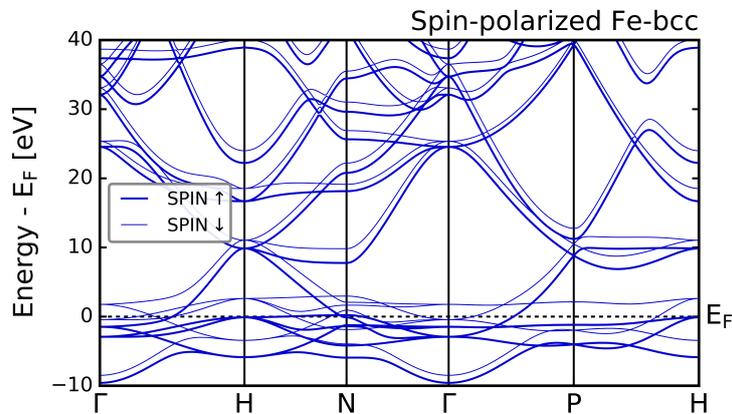


Figura 2.1: **Magnetismo itinerante**. Representación de las bandas electrónicas del hierro, que presentan polarización de espín. Como consecuencia del mecanismo de Stoner, en ciertos metales de transición con ordenamiento ferromagnético se produce una separación intrínseca de sus bandas electrónicas según el espín. [6]

En ellos, el mecanismo de interacción que conduce al orden a largo alcance se conoce como *criterio de Stoner*. El origen de este se encuentra en el **modelo de Hubbard**, que describiremos en secciones posteriores. En esencia, al considerar una interacción de intercambio entre los espines del sistema y permitiendo a los electrones moverse entre átomos, nos encontramos con que es energéticamente favorable que las bandas electrónicas se polaricen en función de los estados de espín. Esta separación intrínseca, que es la que da lugar a las fases ordenadas, se conoce como **magnetismo itinerante**. Por ejemplo, en la figura 2.1 vemos esta situación de separación en las bandas electrónicas para el caso del hierro.

El otro gran grupo de elementos que manifiesta magnetismo espontáneo son los lantánidos. En su estructura electrónica, presentan electrones de valencia en el orbital $6s$. También tienen electrones del core en orbitales f . Sus propiedades magnéticas dependen del llenado de este segundo tipo de orbital. Los electrones s son los activos eléctrica y químicamente, pues están deslocalizados. Se comportan como electrones libres. Por su parte, los orbitales correspondientes a electrones f no solapan entre sí por pertenecer al core. Las correspondientes bandas energéticas son planas y cada orbital f tiene un momento magnético similar al de un átomo aislado.

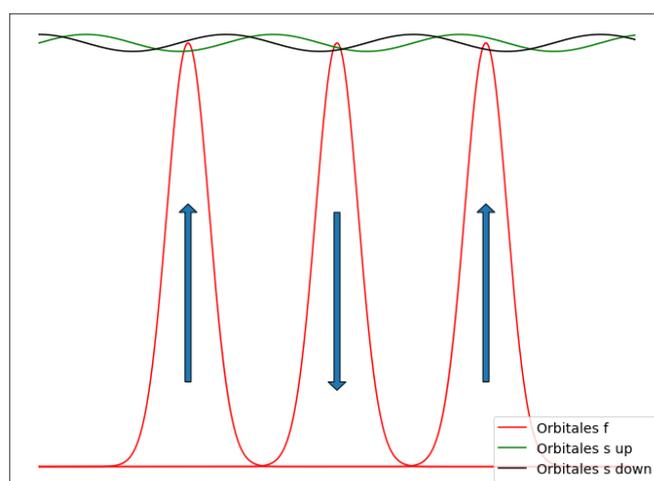


Figura 2.2: **Magnetismo localizado**. Representación de la densidad electrónica esperada como consecuencia de la interacción entre los orbitales s y los orbitales f . Por un lado, los orbitales s , normalmente planos, se desdoblan y exhiben ondas de espín. Por su parte, los orbitales de tipo f alinean sus momentos magnéticos para minimizar su interacción con estas ondas de espín.

El origen del magnetismo en estos materiales es debido a una interacción conocida como *interacción de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida*. Los orbitales f inducen pequeñas ondas de espín en los orbitales s , que se polarizan según los espines. Para minimizar esta interacción $s - f$, los momentos magnéticos de los orbitales f se orientan, como se observa en la figura 2.2. Este tipo de magnetismo se conoce como **magnetismo localizado**.

3. Interacción de espines: el modelo de Heisenberg

El modelo más básico de interacción de espines es el modelo de Heisenberg. Considera que existe una interacción de intercambio uniforme entre los espines primeros vecinos que conforman una red cristalina.

El hamiltoniano de Heisenberg es un buen punto de partida para descripciones más complejas. Se le pueden sumar términos de anisotropía o que tengan en cuenta otro tipo de interacciones.

Un material descrito por este modelo puede presentar fases con orden a largo alcance. En función de como sea el alineamiento de los espines, diferenciaremos materiales ferromagnéticos, antiferromagnéticos y ferrimagnéticos.

Además, el alineamiento no tiene por qué ser estático. Los espines pueden rotar de manera coordinada, dando lugar a lo que se conoce como ondas de espín. De manera similar a los fonones, estas pueden dar lugar a propiedades macroscópicas.

Nos hemos encontrado que para describir adecuadamente el comportamiento magnético de algunos materiales en ausencia de campos externos (al que hemos llamado magnetismo espontáneo) es necesario tener en cuenta la interacción entre los espines. Hemos discutido diferentes mecanismos que daban lugar al magnetismo de los metales de transición (magnetismo itinerante) y de los lantánidos (magnetismo localizado). Sin embargo, formular los modelos matemáticos que describen de manera precisa estos fenómenos es una tarea muy complicada. El primer modelo de interacción de espines que fue postulado es el **modelo de Heisenberg**, y como veremos aún hoy se sigue empleando por los excelentes resultados que proporciona.

La idea detrás del modelo es sencilla. Basta considerar que en un sistema de N átomos los electrones no se desplazan de uno a otro (en términos del modelo Tight-Binding, las integrales de salto son idénticamente nulas). En ese caso, escribimos el hamiltoniano

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j . \quad (3.1)$$

Podemos hacer ahora dos consideraciones. Por un lado, se observa experimentalmente que la intensidad de la interacción entre los espines decrece con la distancia a la que se encuentran. Por ello, es una buena aproximación considerar que las **constantes de intercambio** J_{ij} valen 0 si los índices no corresponden con primeros vecinos de la red. Lo reflejaremos sumando a los primeros vecinos, y lo representaremos con los índices $\langle i, j \rangle$. Asimismo, consideraremos que la interacción de espines es isótropa (uniforme y no depende de la dirección) y por tanto, la constante de intercambio pasa a ser la misma en todos los sitios de la red.. Encontramos la expresión del **hamiltoniano de Heisenberg**:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j . \quad (3.2)$$

Este modelo contempla la posibilidad de que se manifieste magnetismo espontáneo en el sistema. Además, podemos sumar al hamiltoniano de Heisenberg otros términos (por ejemplo términos bicuadráticos) que completen la descripción de las interacciones que intervienen en el proceso.

3.1. Orden a largo alcance: configuraciones de espín

En el capítulo 2, vimos que los elementos que se comportan como imanes en la tabla periódica manifiestan orden a largo alcance en ausencia de campos externos. Nuestro modelo de Heisenberg permite esta situación, y las características del ordenamiento vienen dadas por la constante de intercambio. El signo de la constante de intercambio es una característica de cada material. Determina el tipo de orden a largo alcance que puede tener lugar.

Si $J > 0$, la manera energéticamente más favorable de ordenarse que encuentran los espines consiste en apuntar todos en la misma dirección. El resultado es una imanación macroscópica en esta misma dirección. Este fenómeno es al que llamaremos **ferromagnetismo**.

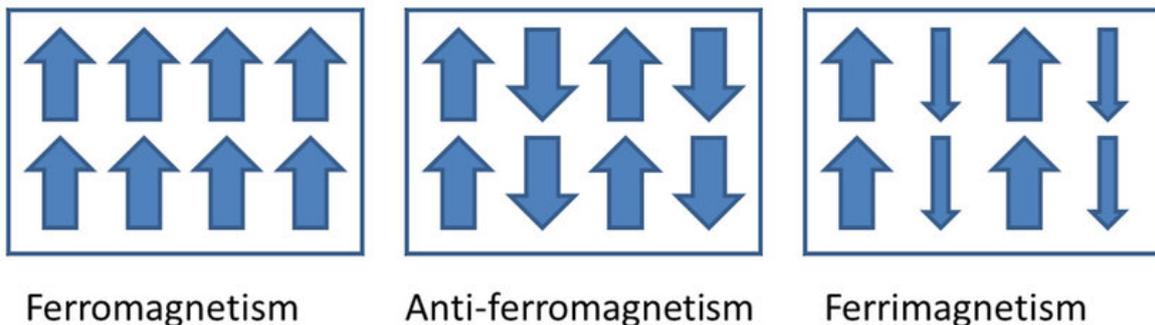


Figura 3.1: Esquema de los posibles ordenamientos a largo alcance de los espines que pueden presentarse en un material, de acuerdo con el modelo de Heisenberg. [7]

Por otra parte, si $J < 0$, la situación más energéticamente favorable es una disposición periódica de los espines en la que cada uno apunta en la dirección opuesta a todos sus vecinos. A este fenómeno lo llamaremos **antiferromagnetismo**. Podemos observar su contraste con el ferromagnetismo en la figura 3.1. Experimentalmente, es complicado lidiar con un material de este tipo. Esto es debido a que macroscópicamente presentan imanación nula. Sin embargo, siguen exhibiendo orden a largo alcance.

Desde un punto de vista mecano-cuántico, la imagen que hemos dibujado del ordenamiento antiferromagnético no es demasiado precisa. Los efectos cuánticos distorsionan la idea intuitiva, y la fase ordenada real puede discrepar con respecto a la figura 3.1. Estas diferencias son más notorias cuando los espines son pequeños.

Además, cuando $J < 0$ podemos encontrar **fases antiferromagnéticas frustradas**. Estas tienen lugar cuando, por la geometría de la red, los espines no pueden anti-alinearse perfectamente. El sistema encuentra en cambio otro tipo de ordenamientos, que

aunque no se corresponden con la idea expuesta de antiferromagnetismo, minimizan la energía. Un ejemplo típico es la red triangular antiferromagnética, como se observa en la figura 3.2.

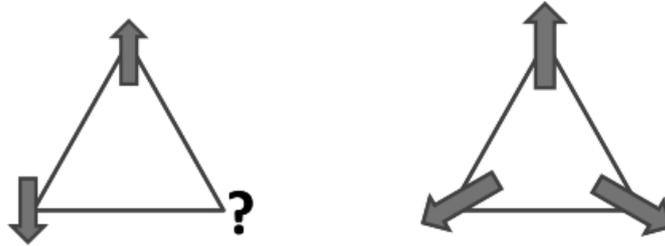


Figura 3.2: Ejemplo de antiferromagnetismo frustrado. La geometría triangular imposibilita el antialineamiento de los espines. El estado de menor energía del sistema se encuentra cuando forman ángulo de 120° entre sí. [8]

Por último, discutimos un caso muy frecuente en materiales reales: el **ferrimagnetismo**. Se da cuando en la celda unidad de un cierto sólido antiferromagnético conviven diferentes especies atómicas y el momento magnético de cada una de ellas es diferente. El ordenamiento de menor energía es el mismo que en el caso antiferromagnético, pero ahora se mide una imanación macroscópica no nula. Esto es debido a que una de las especies atómicas tendrá mayor momento por átomo que la otra. Como resultado, no se llegan a anular mutuamente. De nuevo, podemos contrastar este tipo de ordenamiento con los anteriores en la figura 3.1.

3.2. Términos adicionales del hamiltoniano de Heisenberg

El hamiltoniano de Heisenberg (3.2) es un buen punto de partida en muchos modelos actuales, pues describe de manera adecuada la interacción de intercambio. Podemos sofisticar el modelo considerando más vecinos o tratando a la constante de intercambio como un tensor de dos índices. Esto último, por ejemplo, es útil para estudiar algunos materiales magnéticos donde el acoplamiento espín-órbita es relevante.

Otra manera de completar el modelo consiste en incluir términos adicionales que den cuenta de otros efectos con relevancia en el comportamiento magnético del material. En este aspecto, quizás el término más popular es el conocido como **término de Zeeman** o de acople a un campo magnético externo. Como ya hemos discutido, el magnetismo espontáneo no sustituye al atómico. Los espines siguen siendo susceptibles a la presencia de campos externos. El término de Zeeman tiene la expresión

$$H^{\text{Zeeman}} = g\mu_B \sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i . \quad (3.3)$$

En general, siempre que tratemos con estados excitados del modelo de Heisenberg (ondas de espín, como las llamaremos en la siguiente sección), el término de Zeeman solo

produce un desplazamiento global del espectro. Es por ese motivo que en determinados contextos puede ser omitido sin demasiados inconvenientes.

Otra forma habitual de modificar el hamiltoniano consiste en introducir **términos de anisotropía**. Por un lado, hay ocasiones en que diferentes condiciones externas al material rompen la isotropía del modelo de Heisenberg, manifestándose una dirección favorecida de alineamiento de los espines. Alternativamente, se puede forzar a que exista tal dirección favorecida cuando se trabaja con materiales en dimensiones bajas. El motivo lo encontraremos en el teorema de Mermin-Wagner, que discutiremos más adelante. La manera más habitual de modelizar esta anisotropía es a través de la expresión:

$$H^{\text{Anisotr.}} = A \sum_i (S_i^z)^2. \quad (3.4)$$

El signo de la constante A es el que determina si se favorece el alineamiento en el eje z o en el plano xy . La magnitud de esta constante determina si se puede tratar como una perturbación o si cambia esencialmente el espectro de energías.

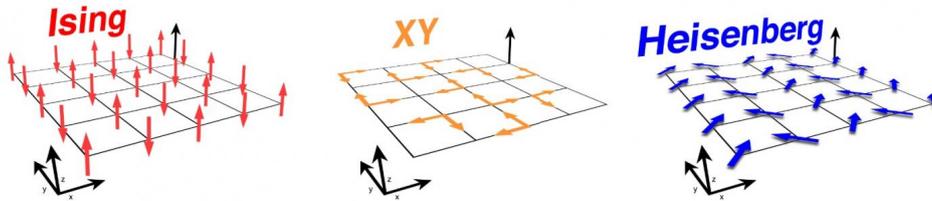


Figura 3.3: Comparación de los ordenamientos de espines que surgen en diferentes variaciones del modelo de Heisenberg. Tanto el modelo XY como en el modelo de Ising son consecuencia de términos de anisotropía. [9]

Por ejemplo, si $|A| \gg J$ y $A < 0$, los espines únicamente pueden apuntar en la dirección del eje z . Cualquier otra dirección deja de ser una posibilidad. En ese caso, podemos reescribir un hamiltoniano efectivo conocido como **modelo de Ising**, dado por

$$H^{\text{Ising}} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + g\mu_B B \sum_i S_i^z. \quad (3.5)$$

Se trata de un modelo especialmente interesante, porque es sencillo resolverlo analíticamente en dimensión 1 y también es posible hallar la solución analítica en dimensión 2. Sin embargo, no ha sido posible encontrar dicha solución en dimensión 3.

Otra posibilidad consiste en que $|A| \gg J$ y $A > 0$. En ese caso, deja de ser energéticamente posible que los espines se alineen según el eje z . Quedan confinados en el plano horizontal. Es lo que se conoce como **modelo XY**. Se puede escribir con el hamiltoniano efectivo

$$H^{\text{XY}} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + g\mu_B \vec{B} \cdot \sum_i \vec{S}_i. \quad (3.6)$$

En esta ocasión, el operador de espín \vec{S}_i solo tiene dos componentes, correspondientes al plano horizontal.

Esta adición de términos se utiliza también para modelizar otros tipos de comportamientos. Destacaremos la **interacción de Dzyaloshinskii–Moriya**. Se trata de un término de la forma

$$H^{\text{DM}} = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} (\vec{S}_i \times \vec{S}_j). \quad (3.7)$$

Se trata de un término que surge al operar con el tensor de las constantes de intercambio. Resulta útil para justificar ordenamientos ferromagnéticos localizados en materiales antiferromagnéticos. Su mayor uso se encuentra en la descripción de fenómenos topológicos en magnetismo, como son los vórtices presentados en la figura 3.4.

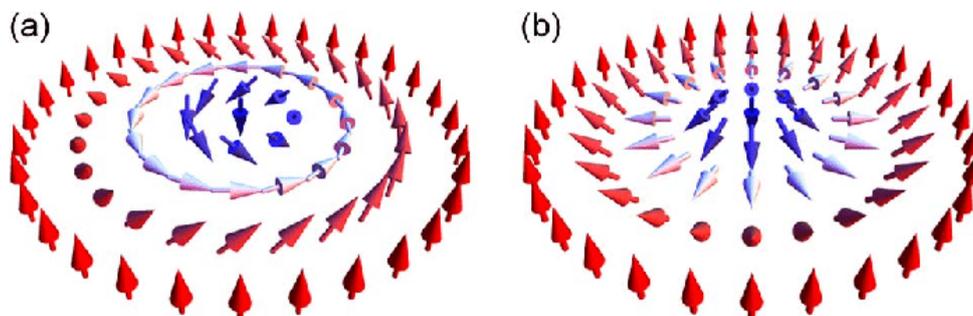


Figura 3.4: Ejemplo de defecto topológico que aparece en materiales magnéticos como consecuencia del término de Dzyaloshinskii–Moriya. Recibe el nombre de vórtice o skyrmion. [10]

3.3. Ondas de espín clásicas

Hasta el momento, nuestro estudio del orden a largo alcance se ha limitado al estado fundamental del hamiltoniano de Heisenberg. No obstante, el espectro excitado de este hamiltoniano permite la propagación de perturbaciones a lo largo de la fase ordenada. Es lo que se conoce como **onda de espín**. Como comprenderemos más adelante, son de suma importancia para llegar a entender el comportamiento magnético de un determinado material.

La forma intuitiva de cómo se propagan las excitaciones por una fase ordenada viene reflejada en la figura 3.5. Para valores de espín altos, esta visión funciona considerablemente bien. En este régimen, nuestra interpretación de los espines como si fueran vectores clásicos es más próxima a la realidad. Esto es debido al conocido **principio de correspondencia**, que establece que todo operador cuántico sigue el comportamiento de la magnitud clásica que representa en el límite en que los números cuánticos son muy grandes. Así, en esta sección trataremos a los operadores de spin como vectores clásicos, pero sin olvidar su condición de operador.

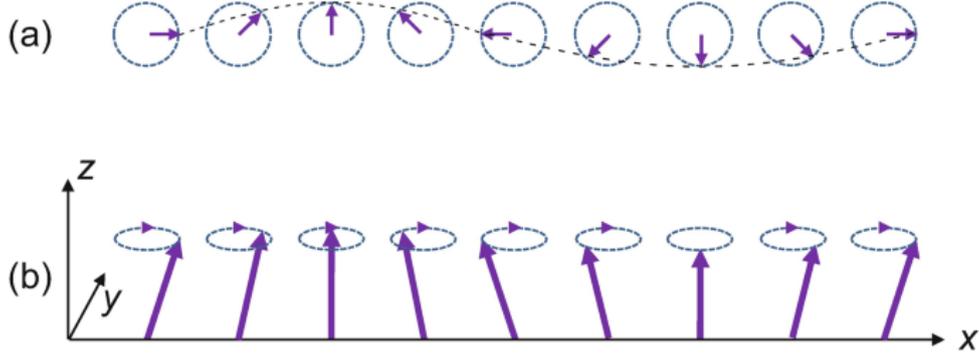


Figura 3.5: Representación de las ondas de espín desde una perspectiva clásica, en un material unidimensional con ordenamiento ferromagnético. **(a)** La oscilación lleva a los espines a adoptar un ordenamiento helicoidal. **(b)** La oscilación se producen en el plano perpendicular a la dirección del espín. [11]

En esta sección analizaremos el espectro excitado de un sistema ferromagnético de espín grande ($S \gg 1$) regido por un hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético ($J > 0$) con término de Zeeman (es decir, en presencia de un campo magnético externo). El hamiltoniano en cuestión es

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + g\mu_B \sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i. \quad (3.8)$$

Emplearemos las ecuaciones de Heisenberg para la evolución temporal de un operador con las componentes del operador de espín. Por ejemplo, para la componente x tenemos

$$i\hbar \frac{dS_i^x}{dt} = [S_i^x, H] = -\frac{J}{2} \sum_{\langle j,k \rangle} [S_i^x, (\vec{S}_j \cdot \vec{S}_k)] + \sum_j g\mu_B [S_i^x, (\vec{B} \cdot \vec{S}_j)]. \quad (3.9)$$

Desarrollar esta expresión solo requiere de las relaciones de conmutación de los operadores de espín ($[S_i^l, S_j^m] = i\hbar \delta_{ij} \epsilon^{lmn} S_i^n$, siguiendo el convenio de suma de Einstein), las expresiones en notación de índices del producto vectorial y algo de paciencia. Finalmente podemos llegar a reescribirla como

$$\hbar \frac{dS_i^x}{dt} = -g\mu_B (\vec{S}_i \times \vec{B})|_x + J \sum_j (\vec{S}_i \times \vec{S}_j)|_x. \quad (3.10)$$

Se puede repetir para las demás componentes, o se puede argumentar que el hamiltoniano del sistema tiene simetría de rotaciones. En cualquier caso, el resultado obtenido para la evolución de los operadores de espín es la **ecuación de Landau–Lifshitz–Gilbert**,

$$\hbar \frac{d\vec{S}_i}{dt} = \vec{S}_i \times \left[J \sum_j \vec{S}_j - g\mu_B \vec{B} \right]. \quad (3.11)$$

Como ya discutimos, al considerar el espín suficientemente grande podemos tratar los operadores de espín anteriores como vectores clásicos. Si fijamos el campo magnético

como $\vec{B} = -B\vec{e}_z$, podremos elegir que el estado fundamental ferromagnético apunte en la dirección positiva del mismo eje, de manera que $\vec{S}_i = S\vec{e}_z$.

Consideraremos entonces excitaciones como las representadas en el caso *b* de la figura 3.5. Estas se introducen en las ecuaciones como

$$\begin{cases} S_i^x = \delta S_i^x, \\ S_i^y = \delta S_i^y, \\ S_i^z = S - \mathcal{O}((\delta S)^2/S). \end{cases} \quad (3.12)$$

Notemos que δS_i^x y δS_i^y son pequeñas frente a S . Calculamos ahora la evolución temporal de los nuevos operadores perturbados, despreciando los términos de orden 2. Obtendremos la relación

$$\hbar \frac{d\delta\vec{S}_i}{dt} = JS\vec{e}_3 \times \sum_j \delta\vec{S}_j + \delta\vec{S}_i \times (JSz\vec{e}_3 + g\mu_B B\vec{e}_3), \quad (3.13)$$

donde z es el número de coordinación.

Para comprender mejor el significado de estas ecuaciones, vamos a particularizar nuestro estudio a una red cúbica simple. Introducimos un *ansatz* de tipo ondulatorio: $\delta S_i^x = A_x e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}_i)}$ y $\delta S_i^y = A_y e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}_i)}$. Encontramos la expresión

$$i\omega\hbar \begin{bmatrix} A_x \\ A_y \\ 0 \end{bmatrix} = \left((JSz + g\mu_B B) - e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}_i)} JS \sum_j e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}_j)} \right) \begin{bmatrix} A_y \\ -A_x \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.14)$$

Al tratarse de una red cúbica, el número de coordinación vale $z = 6$. Igualando las componentes, encontramos un sistema de dos ecuaciones, donde las amplitudes son las incógnitas. Definimos la función que, como probaremos, caracteriza la relación de dispersión de las ondas de espín:

$$F(\vec{k}) = g\mu_B B + 2JS(3 - [\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a]). \quad (3.15)$$

Con esta función, podemos reescribir nuestro sistema de ecuaciones como:

$$\begin{cases} i\hbar\omega A_x = F(\vec{k}) A_y, \\ i\hbar\omega A_y = -F(\vec{k}) A_x. \end{cases} \quad (3.16)$$

Deducimos finalmente que $A_x = \frac{F(\vec{k}) - i\hbar\omega}{F(\vec{k}) + i\hbar\omega} A_y$. Es decir, las amplitudes tienen un desfase de $\pi/2$. Hemos encontrado que si se comportan como espines clásicos, al excitar los espines dentro de un material ferromagnético, estos describen movimientos circulares en torno a la dirección de alineamiento del estado fundamental. Además, del mismo sistema de ecuaciones se deduce que la **relación de dispersión** que satisfacen estas ondas de espín es

$$|F(\vec{k})| = \hbar\omega . \quad (3.17)$$

Con esta relación de dispersión, se puede proceder de manera análoga a como se hace con los fonones. Las ondas de espín dentro de un material se comportan como bosones y pueden dar lugar a fenómenos macroscópicos. Por ejemplo, contribuyen de forma no trivial a la capacidad calorífica. Podemos hacer ese cálculo para nuestra red cúbica.

Consideremos que no existe campo magnético externo y tomemos el límite de k pequeño. Podemos linealizar los cosenos en la relación de dispersión, para encontrar que el espectro excitado viene dado por $E_{\vec{k}} = 3J S a^2 k^2$. La energía interna cuántica se calcula con la estadística de Bose-Einstein de la siguiente manera:

$$U = V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} E(\vec{k}) n_B(E(\vec{k})) = \frac{V(k_B T)^{5/2}}{4\pi^2(3J S a^2)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^x - 1} dx . \quad (3.18)$$

Por tanto, como la capacidad calorífica es la derivada de la energía interna con respecto a la temperatura, la contribución de las ondas de espín a la capacidad calorífica en una red cúbica simple ferromagnética es tal que $c_V^{SW} \propto T^{3/2}$.

4. La aproximación de campo medio

Uno de los objetivos de todo modelo de magnetismo en materia es obtener la curva de imanación como función de la temperatura del material.

Con el fin de abordar esta tarea, se emplean métodos aproximados conocidos como teorías de campo medio. Sustituyendo operadores por sus promedios bajo ciertas reglas e imponiendo que el modelo resultante sea autoconsistente se logra obtener buenas aproximaciones del comportamiento medido experimentalmente.

Hemos dedicado amplios esfuerzos a tratar de comprender y explicar los modelos que llevan a explicar el comportamiento magnético de los materiales, haya o no campos magnéticos externos. Para ello, hemos encontrado que el hamiltoniano de Heisenberg con los correspondientes términos de anisotropía, Zeeman o cualquiera que sea pertinente es una buena aproximación al comportamiento observado del magnetismo en materiales. Queda por tanto la tarea de, a partir de estos modelos, encontrar expresiones para la imanación en función de la temperatura, así como la temperatura crítica. Aquí radican la mayor parte de los problemas. Tan solo para modelos muy sencillos, como el de Ising, es posible encontrar estas expresiones de manera exacta.

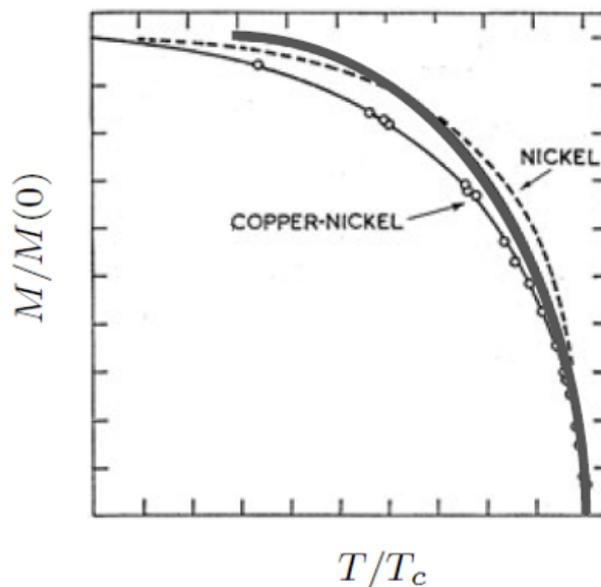


Figura 4.1: Comparación entre medidas experimentales de imanación como función de la temperatura en níquel y una aleación de cobre y níquel. El eje vertical representa la imanación en unidades de $M(0)$, que es la imanación a temperatura 0 K. El eje horizontal representa la temperatura en unidades de la temperatura crítica. También se muestra la correspondiente predicción de campo medio a partir de un modelo de Ising de espín 1/2. [8]

Entonces, siguiendo la estrategia habitual de la física, buscamos formas de simplificar el problema original. Es aquí donde entra en juego la **aproximación de campo medio**. No se trata de un procedimiento único, si no que llamamos teorías de campo medio a todos

aquellos métodos de aproximación que simplifican la descripción del sistema considerando el efecto promedio del campo generado por las partículas sobre el resto del sistema, en lugar de tener en cuenta todas las interacciones individuales entre las partículas. Esto se logra asumiendo que el campo generado por cada partícula es aproximadamente el mismo en todos los puntos del sistema.

En los modelos que hemos visto hasta el momento, una aproximación de campo medio habitual es la **teoría de Weiss de campo medio**. Esta se aplica, por ejemplo, al modelo de Ising de espín-1/2. Este desarrollo parte de considerar únicamente una celda unidad, que se toma como referencia. Toda operador que intervenga en el hamiltoniano y no haga referencia a dicha celda es sustituido por su promedio térmico. Tras desarrollar la expresión, imponemos la condición de autoconsistencia: el promedio en cada celda unidad debe ser idéntico.

Por ejemplo, en el citado modelo de Ising de espín-1/2 se termina encontrando la ecuación de autoconsistencia

$$\langle \hat{S}^z \rangle = -\frac{1}{2} \tanh \left(\frac{\beta (g\mu_B B - Jz \langle \hat{S}^z \rangle)}{2} \right). \quad (4.1)$$

Podemos utilizar las soluciones de la ecuación de autoconsistencia para calcular la curva de imanación macroscópica del material. En la figura 4.1 observamos la predicción del modelo de Ising junto con la aproximación de campo medio de la curva de imanación del níquel. Asimismo, estos cálculos permiten encontrar la temperatura crítica del material.

La aproximación de campo medio en modelos modernos

En el próximo capítulo veremos como los modelos más modernos de magnetismo en materiales requieren de un lenguaje algo más complejo que el formalismo habitual de operadores cuánticos. En los modelos que encontraremos, las teorías de campo medio tienen como objetivo linealizar el hamiltoniano suprimiendo las fluctuaciones cuadráticas.

Siempre que se tenga el producto de dos operadores (que pueden representar correlaciones de espín u ondas de espín) en el hamiltoniano, se define la fluctuación de un operador como

$$\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle. \quad (4.2)$$

Entonces, podremos escribir el producto de dos operadores como

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B} &= (\Delta \hat{A} + \langle \hat{A} \rangle) (\Delta \hat{B} + \langle \hat{B} \rangle) = \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \Delta \hat{B} + \langle \hat{B} \rangle \Delta \hat{A} + \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} = \\ &= \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \hat{B} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{B} \rangle \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \Delta \hat{A} \Delta \hat{B}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Suprimiremos las fluctuaciones cuadráticas, pues consideramos que el valor que toman nuestros operadores varía suficientemente poco. Para ello, hacemos la aproximación

$\Delta A \Delta B \approx 0$. Por tanto, en los modelos que estudiaremos, las aproximaciones de campo medio consistirán en sustituir los productos de operadores por expresiones del tipo

$$\hat{A}\hat{B} \approx \langle \hat{A} \rangle \hat{B} + \langle \hat{B} \rangle \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle . \quad (4.4)$$

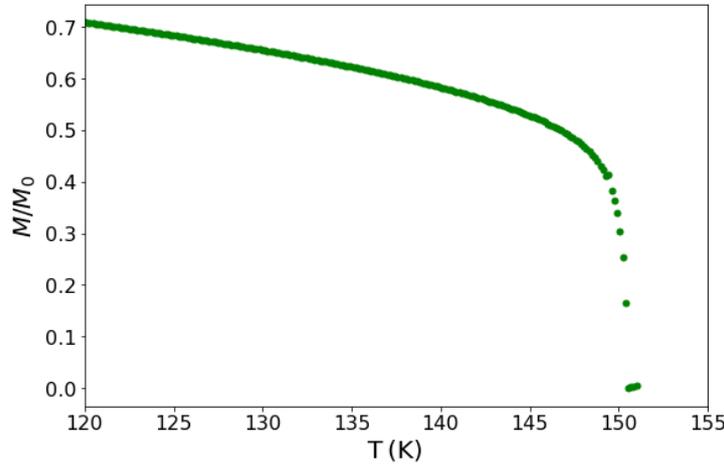


Figura 4.2: Simulación de la imanación como función de la temperatura a través de la aproximación de campo medio y el formalismo de Holstein-Primakoff, para una red cuadrada bidimensional de átomos con momento angular total $S = 2$. El eje vertical representa la imanación en unidades de M_0 , que es la imanación a temperatura 0 K. El eje horizontal representa la temperatura en unidades de la temperatura crítica. Se puede observar que la temperatura crítica en este caso es de $T_C = 150.5$ K. El modelo se desarrollará en el capítulo 7.

En la figura 4.2, observamos la curva de imanación resultante de una teoría de ondas de espín renormalizada autoconsistente. El desarrollo de esta teoría y de los cálculos involucrados se expondrá más adelante, pues emplearemos un formalismo conocido como *bosonización de Holstein-Primakoff* que requiere algo de bagaje previo. En cualquier caso, los resultados de la temperatura crítica se obtienen de la misma manera que en el caso del modelo de Ising de la figura 4.1.

Parte II

Modelos modernos de magnetismo en materia

5. Descripciones modernas del magnetismo

En este capítulo trataremos de entender cómo se formulan en la actualidad los modelos empleados para estudiar el magnetismo de los materiales. Para ello, tendremos que desarrollar el lenguaje de la segunda cuantización. Nos permitirá emplear operadores que se adecúan a las necesidades de los fenómenos colectivos que dan lugar al magnetismo. En la segunda sección del capítulo nos detendremos a estudiar el origen de uno de los modelos más generales y exitosos de la materia condensada: el modelo de Hubbard.

5.1. El formalismo de la segunda cuantización

El siguiente paso al modelo de Heisenberg pasa por considerar a los electrones como partículas móviles en el material. Nuestro formalismo cuántico actual dificulta la descripción de sistemas con un número variable de partículas.

Por ello, desarrollaremos una nueva base del espacio de Hilbert conocida como representación del número de ocupación. La idea fundamental de este formalismo consiste en responder a la pregunta “¿cuántas partículas se encuentran en cada estado?”, en vez de “¿en qué estado se encuentra cada partícula?”. A partir de esta idea, encontraremos una poderosa herramienta para seguir añadiendo complejidad a nuestros modelos.

La principal limitación que tenemos en este momento para seguir mejorando nuestros modelos es que, en la formulación de la mecánica cuántica que venimos utilizando, el número de partículas que interviene es fijo. En otras palabras, no podemos tratar con el colectivo gran canónico. Cuando se estudia la teoría cuántica de muchos cuerpos, resulta útil cambiar la manera en que se formulan los operadores cuánticos para dar mejor cuenta de los fenómenos descritos. Es lo que se conoce como **segunda cuantización**. En esta sección, trataremos de sentar las bases del formalismo, orientándolo hacia nuestros fines: de dónde surge, cómo se aplica y qué forma tomarán nuestros modelos en términos de estos nuevos operadores.

Recordemos el **teorema de la estadística del espín**: las partículas con espín entero son bosones (poseen funciones de onda simétricas y siguen la estadística de Bose-Einstein) mientras que las partículas de espín semientero son fermiones (poseen funciones de onda antisimétricas, satisfacen el principio de exclusión de Pauli y siguen la estadística de Fermi-Dirac).

Con independencia del tipo de partícula, el punto de partida es el mismo. Hasta el momento, los estados cuánticos que venimos utilizando para describir sistemas de N partículas indistinguibles proporcionan dos informaciones clave: la estadística de esas partículas y qué estados de una partícula están ocupados. No obstante, resaltemos que las partículas que integran el sistema son indistinguibles. Esto quiere decir que, al presentar

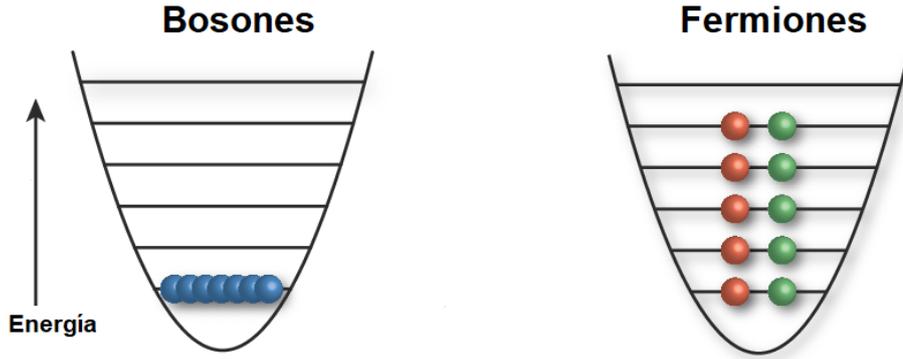


Figura 5.1: Esquema del comportamiento de bosones y fermiones al ocupar estados de mínima energía. Mientras que un mismo estado puede estar ocupado por tantos bosones como se quiera, los fermiones satisfacen el principio de exclusión de Pauli. [12]

una función de onda simetrizada (o antisimetrizada), se repite hasta N veces la misma información. La idea detrás de la segunda cuantización consiste en construir una nueva base del espacio de Hilbert. En ella, las autofunciones se componen con todos los estados de una partícula posibles, no solo los ocupados, y se indica la ocupación de cada uno de ellos. De esta manera, damos la información relevante del sistema una única vez.

Para conocer la relación de los estados ordinarios con esta nueva base, escribiremos

$$|\psi_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}\rangle = C |n_1, \dots, n_L, \dots\rangle, \quad (5.1)$$

donde el número cuántico n_i representa que hay n_i partículas en el estado i -ésimo. Esta nueva base se conoce como **representación del número de ocupación**. Satisface la propiedad $\sum_{i=1}^L n_i = N$. La constante C se escoge de manera que

$$\langle n'_1, \dots, n'_L, \dots | n_1, \dots, n_L, \dots \rangle = \frac{1}{|C|^2} \delta_{n_1 n'_1} \dots \delta_{n_L n'_L} \dots \quad (5.2)$$

Inmediatamente, podemos escribir algunos estados relevantes en esta base.

- El **estado vacío**: $|0\rangle = |0_1, \dots, 0_L, \dots\rangle$.
- Los **estados de una partícula**: $|\Phi_{N=1}\rangle = |0_1, \dots, 1_i, \dots, 0_L, \dots\rangle$.

El aspecto más importante es que esta base permite definir el **espacio de Fock**. Se trata de la suma directa de los espacios de Hilbert correspondientes a todos los posibles números de partículas, con la simetría adecuada dependiendo de si se trata con bosones o fermiones:

$$\mathcal{E}^{\text{Fock}} = \mathcal{H}_{N=0} \oplus \mathcal{H}_{N=1} \oplus \mathcal{H}_{N=2}^{(\text{anti})\text{simétricos}} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{N=L}^{(\text{anti})\text{simétricos}} \oplus \dots \quad (5.3)$$

La importancia del espacio de Fock es que permite trabajar con estados correspondientes a diferentes números de partículas sin cambiar de espacio. Los operadores que permiten cambiar el número de partículas de un estado dado son los llamados **operadores de creación y destrucción**. Se definen a partir del estado vacío como

$$\hat{a}_\nu^\dagger |0\rangle = |\dots, 0_{\nu-1}, 1_\nu, 0_{\nu+1}, \dots\rangle , \quad (5.4)$$

$$\hat{a}_\nu |\dots, 0_{\nu-1}, 1_\nu, 0_{\nu+1}, \dots\rangle = |0\rangle . \quad (5.5)$$

La ecuación (5.4) define al operador de creación, mientras que la ecuación (5.5) define al de destrucción. El primero actúa sobre el estado vacío, creando una partícula en el estado ν . El segundo actúa sobre un estado de una única partícula, en el estado ν , destruyéndola y llevando al estado vacío. Además, el operador de destrucción debe satisfacer $\hat{a}_\nu |0\rangle = 0$. Por otra parte, podemos expresar cualquier estado mediante sucesivos operadores de creación aplicados al estado vacío:

$$|n_1, \dots, n_L, \dots\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_L^\dagger)^{n_L} \dots |0\rangle . \quad (5.6)$$

La notación elegida para ambos operadores no es casual. En el espacio de Fock, son operadores conjugados hermíticos. A partir de ellos, podemos definir el **operador número** $\hat{n}_\nu = \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu$. Jugará un papel clave en la formulación de nuestros modelos. Tiene la propiedad de ser diagonal en la base del número de ocupación:

$$\hat{n}_\nu |n_1, \dots, n_L, \dots\rangle = n_\nu |n_1, \dots, n_L, \dots\rangle . \quad (5.7)$$

Otras identidades útiles en el formalismo de la segunda cuantización son la relación de cierre y las expresiones de cambio de base. Por un lado, la **relación de cierre** es una manera de escribir el operador identidad en la base del número de ocupación:

$$I_N = \sum_{n_1} \dots \sum_{n_L} \dots (|n_1, \dots, n_L, \dots\rangle \langle n_1, \dots, n_L, \dots|) . \quad (5.8)$$

Por otro lado, supongamos que tenemos dos bases del espacio de Hilbert de una partícula $\mathcal{H}_{N=1}$, digamos $\{|\phi_l\rangle\}$ y $\{|\rho_\alpha\rangle\}$. Suponemos además que están relacionadas por una transformación unitaria, y llamamos $U_{l\alpha} = \langle \phi_l | \rho_\alpha \rangle$ a los coeficientes de la transformación. Esta se escribe como $|\rho_\alpha\rangle = \sum_l U_{l\alpha} |\phi_l\rangle$. Si \hat{c}_l^\dagger representa al operador de creación en la base $\{|\phi_l\rangle\}$ y \hat{d}_α^\dagger representa al operador de creación en la base $\{|\rho_\alpha\rangle\}$, los operadores de creación y destrucción en cada base están relacionados a través de las ecuaciones

$$\hat{d}_\alpha^\dagger = \sum_l \hat{c}_l^\dagger U_{l\alpha} , \quad (5.9)$$

$$\hat{d}_\alpha = \sum_l (U^\dagger)_{l\alpha} \hat{c}_l . \quad (5.10)$$

Haremos uso de estas relaciones cuando hablemos de los operadores de campo. Finalmente, podemos escribir las expresiones generales de los operadores que actúan sobre una y dos partículas en términos de operadores de creación y destrucción. Denotaremos con letras mayúsculas a los operadores en primera cuantización y con minúscula a su forma en segunda cuantización:

$$\hat{q}^{(1)} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \langle \alpha | \hat{Q}^{(1)} | \beta \rangle \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\beta} , \quad (5.11)$$

$$\hat{o}^{(2)} = \sum_{\alpha\beta} \sum_{\gamma\delta} \langle \alpha, \beta | \hat{O}^{(2)} | \gamma, \delta \rangle \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\beta}^{\dagger} \hat{c}_{\delta} \hat{c}_{\gamma} . \quad (5.12)$$

Quedan por discutir algunos aspectos importantes de esta formulación. Principalmente, las relaciones de conmutación entre los operadores de creación y destrucción, así como los posibles valores del operador número. Pero esto depende de la estadística. Debemos diferenciar a partir de aquí los sistemas de bosones de los de fermiones.

5.1.1. Sistemas de fermiones

Recordemos que un sistema de N fermiones indistinguibles viene dado por una función de onda antisimétrica, formada a partir de los estados de una partícula ocupados:

$$\psi_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{\alpha_1}(r_1) & \cdots & \phi_{\alpha_1}(r_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_{\alpha_N}(r_1) & \cdots & \phi_{\alpha_N}(r_N) \end{vmatrix} . \quad (5.13)$$

En primer lugar, por ser fermiones satisfacen el principio de exclusión de Pauli. Por ello, en la representación del número de ocupación, $n_i \in \{0, 1\}$.

Los operadores de creación y destrucción, que denotaremos \hat{c}_{ν}^{\dagger} y \hat{c}_{ν} respectivamente, actúan sobre los estados como:

$$\hat{c}_{\nu}^{\dagger} |n_1, \dots, n_{\nu}, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{\mu < \nu} n_{\mu}} \sqrt{1 - n_{\nu}} |n_1, \dots, 1_{\nu}, \dots\rangle , \quad (5.14)$$

$$\hat{c}_{\nu} |n_1, \dots, n_{\nu}, \dots\rangle = (-1)^{\sum_{\mu < \nu} n_{\mu}} \sqrt{n_{\nu}} |n_1, \dots, 0_{\nu}, \dots\rangle . \quad (5.15)$$

La estadística de Fermi-Dirac se ve reflejada en las relaciones de conmutación entre estos operadores. En este caso, su anticonmutador es la identidad:

$$\{\hat{c}_{\nu}^{\dagger}, \hat{c}_{\mu}\} = \hat{c}_{\nu}^{\dagger} \hat{c}_{\mu} + \hat{c}_{\mu} \hat{c}_{\nu}^{\dagger} = \delta_{\mu\nu} \mathcal{I} . \quad (5.16)$$

Hasta este momento, todas las expresiones se han dado en una base discreta del espacio de Hilbert de una partícula. Para nuestros fines, podemos pensar que esta base hace referencia a la representación de momentos de red. De esta manera, el índice de los operadores número corresponde a los diferentes k -estados del sistema.

A menudo, puede resultar conveniente pasar a una base continua del espacio de una partícula, al considerar la representación de posiciones. Se encuentran entonces los conocidos como **operadores de campo**. Suponen el punto de partida de la teoría cuántica de campos, descrita a través de la segunda cuantización.

Consideremos por ejemplo un sistema de fermiones de espín 1/2. La base discreta del espacio de una partícula será $\{|\vec{k}, \sigma\rangle\}$, siendo σ el estado de espín. Los operadores de campo de este sistema de partículas se encuentran al cambiar a la base continua del espacio de una partícula $\{|\vec{r}, \sigma\rangle\}$:

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}, \\ \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger, \\ \hat{c}_{\vec{k}\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}), \\ \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}).\end{aligned}\tag{5.17}$$

Por ejemplo, con estos operadores podemos escribir la energía cinética del sistema como

$$\hat{H}^{(0)} = \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}\sigma} = \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}).\tag{5.18}$$

También los operadores de espín tienen expresiones convenientes. Tomemos el caso de la componente x del espín total:

$$\hat{S}_x = \int d^3r \left(\hat{\Psi}_1^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_{-1}(\vec{r}) + \hat{\Psi}_{-1}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_1(\vec{r}) \right).\tag{5.19}$$

Finalmente, ya que emplearemos aproximaciones de campo medio con modelos de este tipo, destaquemos que el valor de expectación de los operadores de número viene dado por la distribución de Fermi-Dirac:

$$\langle \hat{n}_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu)} + 1}.\tag{5.20}$$

5.1.2. Sistemas de bosones

Los sistemas de N bosones indistinguibles vienen dados por funciones de onda simétricas, formadas a partir de los estados de una partícula ocupados:

$$\psi_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N! \prod_{\nu} n_{\nu}!}} \sum_{P \in S_N} P(\phi_{\alpha_1}(r_1), \dots, \phi_{\alpha_N}(r_N)).\tag{5.21}$$

Como se representa en la figura 5.1, los bosones no tienen limitaciones en la cantidad de partículas que pueden ocupar un mismo estado. Por tanto, $n_i \in \{0, \dots, N\}$.

Los operadores de creación y destrucción, que denotaremos \hat{b}_ν^\dagger y \hat{b}_ν respectivamente, actúan sobre los estados como

$$\hat{b}_\nu^\dagger |n_1, \dots, n_\nu, \dots\rangle = \sqrt{n_\nu + 1} |n_1, \dots, n_\nu + 1, \dots\rangle, \quad (5.22)$$

$$\hat{b}_\nu |n_1, \dots, n_\nu, \dots\rangle = \sqrt{n_\nu} |n_1, \dots, n_\nu - 1, \dots\rangle. \quad (5.23)$$

La estadística de Bose-Einstein se ve reflejada en las relaciones de conmutación entre estos operadores. En este caso, su conmutador es la identidad:

$$[\hat{b}_\nu, \hat{b}_\mu^\dagger] = \hat{b}_\nu \hat{b}_\mu^\dagger - \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu = \delta_{\mu\nu} \mathcal{I}. \quad (5.24)$$

Para explorar los operadores de campo bosónicos, consideramos un sistema de bosones de espín 0. La base discreta del espacio de una partícula será $\{|\vec{k}\rangle\}$. Los operadores de campo de este sistema de partículas se encuentran al cambiar a la base continua del espacio de una partícula $\{|\vec{r}\rangle\}$:

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{b}_{\vec{k}}, \\ \hat{\Phi}^\dagger(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger, \\ \hat{b}_{\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\Phi}(\vec{r}), \\ \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\Phi}^\dagger(\vec{r}). \end{aligned} \quad (5.25)$$

Por ejemplo, con estos operadores podemos escribir la energía cinética del sistema como

$$\hat{H}^{(0)} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}} = \int d^3r \hat{\Phi}^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \hat{\Phi}(\vec{r}). \quad (5.26)$$

Finalmente, ya que emplearemos aproximaciones de campo medio con modelos de este tipo, destaquemos que el valor de expectación de los operadores de número viene dado por la distribución de Bose-Einstein:

$$\langle \hat{n}_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu)} - 1}. \quad (5.27)$$

5.2. Describiendo interacciones: el modelo de Hubbard

Armados con las herramientas de la segunda cuantización, describiremos las interacciones coulombiana y de intercambio entre los electrones de un material. Partiendo del modelo *Tight-Binding*, es posible encontrar en la base de estados de Wannier un hamiltoniano con un término de salto y un término de intercambio fácilmente diagonalizable con los operadores número.

Justificamos una serie de aproximaciones en el hamiltoniano anterior, que conducen en última instancia al modelo de Hubbard. Se trata de uno de los modelos más célebres y estudiados en la actualidad. Aunque no es aplicable a materiales donde la interacción entre electrones es muy intensa (tierras raras), es suficientemente general como para admitir un gran número de límites que explican un amplio abanico de fenómenos.

En el capítulo 3 hemos encontrado que el modelo de Heisenberg, dado por la ecuación (3.2), es exitoso a la hora de describir el magnetismo espontáneo de un gran número de materiales. El principal problema de este modelo es que considera a los espines de manera aislada, de forma que no se pueden desplazar por el material. En realidad, sabemos que esto no es necesariamente así. Ya vimos en el capítulo 2 que en los metales de transición tiene lugar un desdoblamiento de las bandas electrónicas según el estado de espín. Esto en último término conduce a fases ferromagnéticas espontáneas. Al fenómeno lo hemos llamado magnetismo itinerante y no está contemplado por el modelo de Heisenberg.

La razón detrás del magnetismo itinerante es que también existe interacción entre los electrones, no solo entre los espines totales que integran la red. Con el objetivo de incluir este tipo de interacciones, se acude al modelo más exitoso del comportamiento electrónico en la materia: el modelo *Tight-Binding*. Empleando el lenguaje de la segunda cuantización, que como vimos en la sección 5.1 permite describir sistemas de muchas partículas indistinguibles, vamos a construir uno de los modelos más importantes de la física de la materia condensada: el **modelo de Hubbard**.

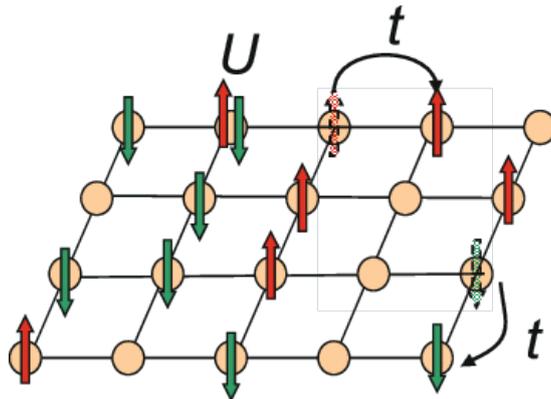


Figura 5.2: Esquema del modelo de Hubbard (5.39) en una red cuadrada bidimensional. Se consideran solo integrales de salto a primeros vecinos, además de isotropía en la propia red. [13]

Partamos del hamiltoniano *Tight-Binding*

$$\mathcal{H}^0 = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V^{\text{ion}}(\vec{r}_i) \right). \quad (5.28)$$

Incluimos ahora un término de interacción entre electrones:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^0 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v^{\text{el-el}}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) . \quad (5.29)$$

Este potencial de interacción rompe la separabilidad del hamiltoniano, complicando mucho tratar con el mismo. Al incluirse tanto la interacción coulombiana como la de intercambio entre electrones, es habitual separar el potencial en dos términos. Por un lado, tendremos $v^{\text{eff}}(\vec{r}_i, \rho)$, que hace referencia al **apantallamiento** y depende de las coordenadas del electrón y de la distribución de carga del estado fundamental ρ . Este término se incluirá en el hamiltoniano *Tight-Binding*, de manera que

$$\tilde{\mathcal{H}}^0 = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V^{\text{ion}}(\vec{r}_i) + v^{\text{eff}}(\vec{r}_i, \rho) \right) . \quad (5.30)$$

Por otro lado, tendremos \tilde{v}_{ij} , la **interacción residual**. Tiene la forma

$$\tilde{v}_{ij} = v^{\text{el-el}}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) - \frac{(v^{\text{eff}}(\vec{r}_i, \rho) + v^{\text{eff}}(\vec{r}_j, \rho))}{N_e} . \quad (5.31)$$

Es un término de crucial importancia en el contexto del magnetismo. Si esta interacción residual es débil, se trata de forma perturbativa como es el caso de iones ligeros, donde participan orbitales s y p . No obstante, hay fenómenos magnéticos que solo pueden ser explicados por una fuerte interacción entre electrones (fundamentalmente tierras raras, donde intervienen orbitales de tipo d y f). Ignoraremos esta segunda situación, pues involucra los términos de interacción espín-órbita.

Escribamos entonces el hamiltoniano *Tight-Binding* y la interacción residual en segunda cuantización. Emplearemos los operadores de campo fermiónicos (5.17). Tenemos que

$$\hat{H}^0 = \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ion}}(\vec{r}) + v^{\text{eff}}(\vec{r}, \rho) \right) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}) , \quad (5.32)$$

$$\hat{V}^{\text{el-el}} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3x \int d^3y \tilde{v}(\vec{x}, \vec{y}) \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{y}) \hat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{y}) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{x}) . \quad (5.33)$$

La resolución del hamiltoniano (5.32) conduce a las bandas electrónicas del modelo *Tight-Binding* y a los autoestados de Bloch, $\{\epsilon_{\alpha\vec{k}}, \phi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r})\}$. El índice α etiqueta las bandas, mientras que \vec{k} es el momento de la red. Por conveniencia, trabajaremos en la base de **estados de Wannier**. Se trata de una base ortonormal de estados localizados, dados por las expresiones

$$\varphi_{\alpha i}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \phi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r}) , \quad (5.34)$$

donde el índice i etiqueta los sitios de la red y \vec{R}_i es el vector cristalino asociado a cada sitio. Se trata de una transformación unitaria entre estados de una partícula.

Por tanto, se pueden construir operador de creación y destrucción que operen sobre la representación del número de ocupación de los estados de Wannier. Los denotamos $\hat{c}_{\alpha i \sigma}^\dagger$ y $\hat{c}_{\alpha i \sigma}$, respectivamente. Siguen satisfaciendo las relaciones canónicas de anticonmutación. Se relacionan con los operadores de campo fermiónicos de los electrones a través de la ecuación

$$\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\alpha i} \varphi_{\alpha i}^* \hat{c}_{\alpha i \sigma}^\dagger, \quad (5.35)$$

de acuerdo con lo establecido en (5.9). Definamos ahora los **elementos de la matriz de salto** como

$$t_{\alpha i j} = -\langle \varphi_{\alpha i} | \tilde{\mathcal{H}}^0 | \varphi_{\alpha j} \rangle = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i(\vec{R}_j - \vec{R}_i) \cdot \vec{k}} \epsilon_{\alpha \vec{k}}. \quad (5.36)$$

Asimismo, se definen los **parámetros de intercambio** como

$$U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3y \tilde{v}(\vec{x}, \vec{y}) \varphi_{\alpha i}^*(\vec{x}) \varphi_{\beta j}^*(\vec{y}) \varphi_{\gamma k}(\vec{y}) \varphi_{\delta l}(\vec{x}). \quad (5.37)$$

Finalmente, reescribimos el hamiltoniano de la siguiente manera

$$\hat{H} = -\sum t_{\alpha i j} \hat{c}_{\alpha i \sigma}^\dagger \hat{c}_{\alpha j \sigma} + \sum U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{c}_{\alpha i \sigma}^\dagger \hat{c}_{\beta j \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\gamma k \sigma'} \hat{c}_{\delta l \sigma}. \quad (5.38)$$

Para encontrar el modelo de Hubbard, queda truncar las interacciones incluidas en el hamiltoniano (5.38). Para empezar, podemos suponer que las bandas están suficientemente separadas como para que no se acoplen. De esta manera, podemos suprimir todos los índices que hagan referencia a la banda. Esto no es válido en las tierras raras, pues los parámetros de intercambio son mayores que la separación entre bandas. A continuación, suprimimos los *términos directos*. Se trata de aquellos dados por grupos de índices U_{ijji} . Estos acoplan fluctuaciones de la densidad electrónica en diferentes sitios. Aunque su magnitud puede ser similar a las integrales de salto, no son relevantes para describir los cambios de fase magnéticos. Finalmente, suprimimos los *términos de intercambio*, dados por grupos de índices $U_{ijij} := J_{ij}^F$. Aunque pueden contribuir a formar fases ferromagnéticas, se justifica su omisión al tomar el límite atómico del modelo (los estados de Wannier son aproximadamente superposiciones de orbitales atómicos). El límite atómico es consistente con otras dos simplificaciones que también tendremos en cuenta. Por un lado, el límite *Tight-Binding*, que limita las integrales de salto t_{ij} a los primeros M vecinos. Por otro lado, el límite de U grande, que favorece la localización a través de la interacción *on-site* ($U \gg t_{ij}$).

En resumen, el modelo de Hubbard se obtiene al tomar el límite atómico en el hamiltoniano (5.38), con bandas desacopladas, parámetro de salto del modelo *Tight-Binding* e interacción on-site dada por $U = 2U_{iiii}$:

$$\hat{H}^{\text{Hubbard}} = -\sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i+} \hat{n}_{i-} \quad (5.39)$$

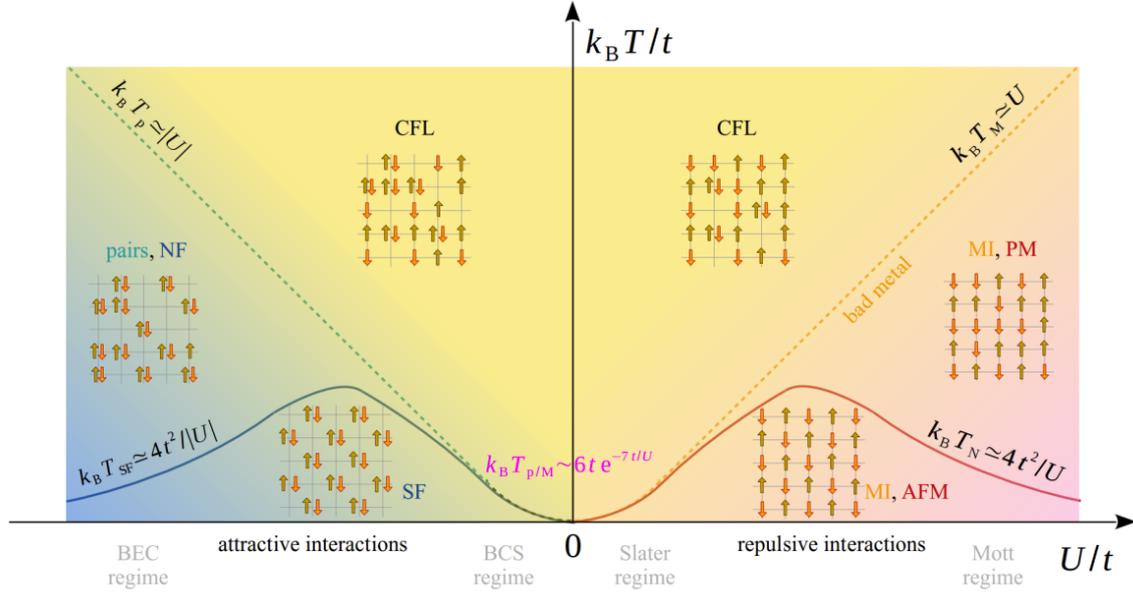


Figura 5.3: Diagrama de fases del modelo de Hubbard a medio llenado para una red cúbica como función del parámetro de intercambio U en unidades de la integral de salto t y a temperatura T . Los regímenes recogidos en el diagrama son: líquido de Fermi correlacionado (CFL), aislante de Mott (MI), régimen de pares (*pairs*), paramagnético desordenado (PM), antiferromagnético (AFM) y fases fluidas (NF, dadas por condensados de Bose-Einstein) y superfluidas (SF, dadas por superfluidos de Bardeen-Cooper-Schrieffer). [14]

donde $\hat{n}_{i\sigma}$ son los operadores número asociados a la base de estados de Wannier.

Notemos que el modelo de Hubbard penaliza al sistema con una ganancia energética U cuando dos electrones se encuentran en el mismo sitio. Por este motivo, dicho término actúa repulsivamente.

Recalquemos que el modelo de Hubbard no deja de ser un modelo efectivo, que omite interacciones que pueden ser relevantes en la práctica. Por ser un modelo efectivo, también presenta una ventaja: es posible tomar límites en el hamiltoniano para ceñirse a situaciones particulares. Así, de él se pueden obtener el modelo de Heisenberg, modelos de ondas de densidad de carga, modelos de superconductividad a altas temperaturas... En la figura 5.3 se muestra, en función del parámetro de intercambio y la temperatura, como el mismo modelo de Hubbard conduce a otros bien conocidos de la materia condensada.

5.3. De Hubbard a Heisenberg

En el límite en que las integrales de salto son pequeñas frente al parámetro de intercambio, es posible encontrar el modelo t-J. Uno de los términos de dicho hamiltoniano es justamente el modelo de Heisenberg antiferromagnético, probando así que está contenido en el modelo de Hubbard.

Una característica crucial del modelo de Heisenberg viene dada por el teorema de Mermin-Wagner: no puede haber fases ordenadas en dimensiones uno y dos a $T > 0$ K.

El modelo de Hubbard ha resultado ser un modelo efectivo capaz de describir el magnetismo teniendo en cuenta las interacciones entre los electrones, además del intercambio entre espines. Es razonable esperar que contenga al modelo de Heisenberg, y en esta sección veremos de qué manera.

Recordemos que el modelo de Heisenberg se caracteriza por considerar a los electrones de cada átomo de la red fijos. Por tanto, comencemos con dos asunciones. Por un lado, supondremos que el sistema es isótropo, de manera que las integrales de salto son todas iguales a un único parámetro que denotamos por t . Además, tomaremos el límite en que $U/t \gg 1$. Esto permitirá tratar al término de salto del hamiltoniano (5.39) como una perturbación. El hamiltoniano de orden cero es

$$\mathcal{U} = U \sum_i \hat{n}_{i+} \hat{n}_{i-} . \quad (5.40)$$

Por otro lado, tendremos la perturbación

$$\mathcal{T} = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} , \quad (5.41)$$

donde $\langle ij \rangle$ denota que consideramos solo primeros vecinos. Los autoestados de \mathcal{U} forman una base del espacio de Fock. Eligiendo la representación de Wannier, podemos separar el espacio de Fock en los dos subespacios

$$\begin{aligned} S &= [|n_{1+}, n_{1-}, n_{2+}, \dots\rangle \quad : \quad \text{para todo } i, n_{i+} + n_{i-} \leq 1] , \\ D &= [|n_{1+}, n_{1-}, n_{2+}, \dots\rangle \quad : \quad \text{existe } i \text{ con } n_{i+} + n_{i-} = 2] . \end{aligned} \quad (5.42)$$

Ya que en cada sitio de la red no puede haber más de dos electrones, el subespacio S representa configuraciones con cero o un electrones por sitio. En el subespacio D se incluyen todas las configuraciones con al menos un sitio con dos electrones. La perturbación \mathcal{T} conecta ambos subespacios. Por tanto, definiendo los operadores proyección en cada subespacio como P_S y P_D , el hamiltoniano de Hubbard tiene la forma

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} P_S(\mathcal{T} + \mathcal{U})P_S & P_S\mathcal{T}P_D \\ P_D\mathcal{T}P_S & P_D(\mathcal{T} + \mathcal{U})P_D \end{pmatrix} . \quad (5.43)$$

Siguiendo el desarrollo de Auerbach [15] en la sección 3.2, tomaríamos el operador resolvente, el cual depende paraméricamente de la energía del sistema, E . Este operador permite encontrar una expresión paramétrica del hamiltoniano con respecto a la energía

E . No obstante, es posible expandir a primer orden en E/U . De esta manera, hallamos el hamiltoniano efectivo

$$\hat{H}^{\text{eff}} = \hat{H}^{\text{t-J}}(1 + O(E/U) + O(t/U)) . \quad (5.44)$$

Es justamente el hamiltoniano $\hat{H}^{\text{t-J}}$, comúnmente llamado **modelo t-J**, el que nos permitirá hallar el modelo de Heisenberg. Tiene la expresión

$$\hat{H}^{\text{t-J}} = P_S \left[\mathcal{T} - \frac{1}{U} \sum_{ijk\sigma\sigma'} t^2 \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \hat{n}_{j+} \hat{n}_{j-} \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k\sigma'} \right] P_S \quad (5.45)$$

Podemos reordenar los operadores fermiónicos para ver claramente que el modelo t-J tiene la forma $\hat{H}^{\text{t-J}} = P_S(\mathcal{T} + \hat{H}^{\text{QHM}} + \mathcal{J}')P_S$. Si definimos $J = 4t^2/U$, cada uno de estos términos se escribe

$$\begin{aligned} \mathcal{T} &= - \sum_{ij\sigma} t \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} , \\ \hat{H}^{\text{QHM}} &= \frac{1}{2} \sum_{ij} J \left(\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_j}{4} \right) , \\ \mathcal{J}' &= - \frac{1}{2U} \sum_{ijk}^{i \neq k} t^2 \left[\sum_{\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} \hat{n}_j) - \hat{c}_i^\dagger \vec{\sigma} \hat{c}_k \cdot \hat{c}_j^\dagger \vec{\sigma} \hat{c}_j \right] . \end{aligned} \quad (5.46)$$

Y finalmente, el término \hat{H}^{QHM} es de nuevo el hamiltoniano de Heisenberg (observemos que *QHM* son las siglas de *Quantum Heisenberg Model*). Si nos encontramos en una fase donde $n_i = 1$ en todos los sitios de la red, los operadores de proyección cancelan los términos \mathcal{T} y \mathcal{J}' . Se trata de una fase conocida como *aislante de Mott*, caracterizada por un ordenamiento antiferromagnético.

Terminaremos esta sección con un resultado clave en el estudio restante del modelo de Heisenberg. Esperamos que en un sistema cuyo estado fundamental es una fase ordenada se reduzcan las correlaciones de espín al excitarlo térmicamente. De esta idea surge el concepto de temperatura crítica que ya hemos discutido. Ahora entendemos que la temperatura crítica es aquella a la que J y $k_B T$ son comparables, produciéndose el cambio de fase. Además, las fases completamente ordenadas rompen la simetría de rotaciones del modelo de Heisenberg al manifestarse. Al orientarse en alguna dirección espacial, se produce una rotura espontánea de simetría. En último término, esto conduce en baja dimensionalidad a que la temperatura crítica sea justamente $T_C = 0$.

De manera formal, esto se conoce como **teorema de Mermin y Wagner**. Establece que “en el modelo de Heisenberg dado por el hamiltoniano

$$\hat{H}^{\text{QHM}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J \left(\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_j}{4} \right) , \quad (5.47)$$

no puede haber roturas espontáneas de simetría a temperaturas finitas en una y dos dimensiones”. Es decir, en una y dos dimensiones el hamiltoniano de Heisenberg no presenta fases ordenadas a temperaturas finitas.

En el estudio de materiales bidimensionales, esto tiene una consecuencia que resultará ser clave. Debemos incluir necesariamente un término de anisotropía de la forma (3.4) para poder encontrar fases ordenadas. Físicamente, al trabajar con materiales bidimensionales se debe aplicar externamente una anisotropía para que manifieste su comportamiento magnético.

6. Bosonización en modelos de Heisenberg

En este capítulo, discutiremos la definición de los formalismos de Holstein-Primakoff y de Schwinger (ver el capítulo 7 de [15]), su forma matemática y su motivación física. Se trata de transformaciones de los operadores de espín en operadores bosónicos, que conservan su álgebra y nos permitirán desarrollar e interpretar el espectro de energía del hamiltoniano de Heisenberg en la parte III.

6.1. El formalismo de Holstein-Primakoff

De manera general, el formalismo de Holstein-Primakoff surge en el estudio de fases de simetría rota de sistemas magnéticos. En dados casos, ya que el espín es un operador vectorial, el valor esperado de alguna de sus componentes es no nulo.

Por este motivo, es habitual estudiar las fases ordenadas a través de pequeñas fluctuaciones de los espines alrededor de sus valores esperados: se trata de la teoría de ondas de espín o magnones. Holstein y Primakoff proponen describir estas fluctuaciones a través de un operador bosónico, $\hat{a}(\vec{R})$, donde \vec{R} representa la posición en la red cristalina [16]. Para aligerar la notación, omitiremos tanto el sombrero en los operadores como el símbolo de vector en el vector posición. Este operador bosónico nos permite reescribir los operadores de espín como

$$\begin{aligned} S^+(R) &= \sqrt{2S - n(R)} a(R), \\ S^-(R) &= a^\dagger(R) \sqrt{2S - n(R)}, \\ S_z(R) &= S - n(R), \end{aligned} \tag{6.1}$$

donde $n(R) = a^\dagger(R) a(R)$ es el operador número bosónico.

Es posible probar que las anteriores transformaciones satisfacen las relaciones de conmutación de los operadores de espín, como consecuencia de las propiedades de conmutación habituales de los operadores bosónicos dadas por (5.24). Por tanto, la transformación está bien definida. Fijémonos en el espacio de Fock de estos operadores. Es demasiado grande, pues los operadores de espín tienen asociada una cantidad finita de estados. Por ello, llamaremos **subespacio físico** a aquel generado por los estados

$$\{|n\rangle\}_S = \{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |2S\rangle\}. \tag{6.2}$$

El resto de estados de Fock, con $n > 2S$, se eliminan con un operador proyector P_S . Dentro del subespacio físico, se satisface la habitual relación $S^2 = S(S + 1)$. De hecho, los operadores de espín definidos como en las ecuaciones (6.1) no pueden conectar el subespacio físico con el resto del espacio de Fock.



Figura 6.1: Representación de la relación entre el espacio de espín y el subespacio físico de las ondas de espín, para el caso de un espín total de $1/2$.

Estas transformaciones son especialmente útiles para estudiar fases de simetría rota de modelos de Heisenberg cuánticos, como el descrito en el capítulo 5. Para ello, es habitual desarrollar las raíces presentes en las ecuaciones (6.1) en potencias de $1/S$, obteniendo

$$\begin{aligned}
 S^+(R) &\simeq \sqrt{2S} \left(1 - \frac{n(R)}{4S}\right) a(R), \\
 S^-(R) &\simeq \sqrt{2S} a^\dagger(R) \left(1 - \frac{n(R)}{4S}\right), \\
 S_z(R) &= S - n(R).
 \end{aligned} \tag{6.3}$$

Notemos que se trata de una expansión de las fluctuaciones de espín alrededor del eje z , como ya describimos de manera clásica en la sección 3.3. Son estas transformaciones, introducidas en el hamiltoniano de Heisenberg, las que nos permiten describir ondas de espín en dicho modelo. El orden lineal se refiere a los estados de energía de estas ondas de espín si estuvieran aisladas. Los términos cuadráticos introducen interacción entre las ondas de espín. El problema de esta aproximación es que liga el subespacio físico con los estados no físicos. No obstante, se ha encontrado que para valores pequeños de S los resultados describen con éxito fases ferromagnéticas y antiferromagnéticas del modelo de Heisenberg. De hecho, este es el formalismo más ampliamente utilizado en el área del magnetismo para describir materiales.

6.2. El formalismo de Schwinger

Así como el formalismo de Holstein-Primakoff explica de manera natural fases de simetría rota a través de fluctuaciones de estados ordenados, el formalismo de Schwinger se emplea para describir fases simétricas. Para hacer evidente la simetría de rotaciones, Schwinger [17] introduce dos bosones, \hat{b}_{i+} y \hat{b}_{i-} , que se relacionan con los operadores de espín a través de las ecuaciones

$$\begin{aligned}
 S_i^+ &= b_{i+}^\dagger b_{i-}, \\
 S_i^- &= b_{i-}^\dagger b_{i+}, \\
 S_i^z &= \frac{1}{2} \left(b_{i+}^\dagger b_{i+} - b_{i-}^\dagger b_{i-} \right) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}.
 \end{aligned} \tag{6.4}$$

Como viene siendo habitual, hemos omitido los gorros de los operadores para agilizar la notación. El índice σ toma los valores ± 1 y el índice i representa los sitios de la red cristalina. Las expresiones anteriores permiten expresar las componentes restantes del espín en términos de estos operadores de manera sencilla, siendo

$$\begin{aligned} S_i^x &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} b_{i\sigma}^{\dagger} b_{i\bar{\sigma}} , \\ S_i^y &= -\frac{i}{2} \sum_{\sigma} \sigma b_{i\sigma}^{\dagger} b_{i\bar{\sigma}} . \end{aligned} \quad (6.5)$$

Esto permite escribir una expresión que pone de manifiesto la simetría del sistema, al relacionar el operador de espín y los bosones de Schwinger a través de las matrices de Pauli:

$$\vec{S}_i = \begin{pmatrix} b_{i+} \\ b_{i-} \end{pmatrix}^{\dagger} \frac{\vec{\tau}}{2} \begin{pmatrix} b_{i+} \\ b_{i-} \end{pmatrix} , \quad (6.6)$$

siendo $\vec{\tau}$ el vector de matrices de Pauli. Es decir, que los bosones de Schwinger rotan como vectores de $SU(2)$. De manera evidente, se satisface el álgebra de espín. Al igual que en el caso de Holstein-Primakoff, el espacio de Fock de estos operadores bosónicos es demasiado grande. Se define el **subespacio físico** como

$$\{|n_+, n_-\}\}_S = \{|n_+, n_-\} : n_+ + n_- = 2S\}. \quad (6.7)$$

De hecho, cualquier estado de espín tiene asociado un único estado en la base de bosones de Schwinger, $|S, M_S\rangle = |n_+ = S + M_S, n_- = S - M_S\rangle$. El resto del espacio de Fock se suprime con un operador proyección. En la figura 6.2, observamos en cada diagonal el subespacio físico correspondiente a diferentes valores de espín.

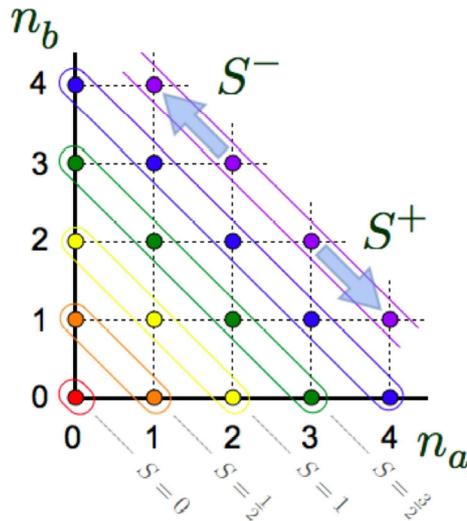


Figura 6.2: Representación de los subespacios físicos asociados a cada valor de espín total. Los ejes representan el número total de cada bosón de Schwinger, cambiando la notación n_+ y n_- por n_a y n_b , respectivamente. [18]

En general, el uso de bosones de Schwinger facilita el cálculo de elementos de matriz del operador de espín al no contener raíces cuadradas. Sin embargo, presenta dos inconvenientes que trabajaremos a la hora de utilizarlos. Por un lado, la restricción dada por el subespacio físico (6.7) introduce una correlación entre n_+ y n_- que debemos tener en cuenta. Por otro lado, su interpretación no es inmediata como en el caso de Holstein-Primakoff. Emplearemos variables de correlación de espín para solucionar el segundo problema. Se trata de variables definidas a partir de los bosones b_{i+} y b_{i-} que representan el orden local de los espines del sistema.

Terminaremos el capítulo resaltando la estrecha conexión entre los dos formalismos discutidos. Utilizando la restricción del subespacio físico (6.7), es posible suprimir uno de los bosones de Schwinger expresándolo en términos del otro. El bosón restante es, de hecho, el introducido en el formalismo de Holstein-Primakoff. Por tanto, trabajar con una u otra aproximación dependerá de las fases del sistema en las que estemos interesados.

Parte III

Mis resultados del estudio de modelos de Heisenberg

7. Resultados del formalismo de Holstein-Primakoff

En este capítulo, aplicaremos el formalismo de Holstein-Primakoff a un hamiltoniano de Heisenberg con anisotropía y campo magnético externo ([1], [2]), con el fin de desarrollar una teoría cuadrática de ondas de spin. Recurriremos para ello a la aproximación de campo medio. Se distinguirán los casos ferromagnético y antiferromagnético. Terminaremos aplicando la teoría obtenida para hallar de manera autoconsistente la temperatura crítica de algunos materiales con estructura cristalina sencilla.

7.1. Ondas de espín en sistemas ferromagnéticos

Nuestro punto de partida será el hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético

$$H^{\text{FM}} = \frac{1}{2} \sum_{R,R'} J(R) \vec{S}(R') \cdot \vec{S}(R' + R) + \sum_{R'} (AS_z^2(R') + g\mu_B BS_z(R')) \quad (7.1)$$

donde hemos omitido tanto los gorros en los operadores como los signos de vector sobre los vectores de posición para aligerar la notación. El vector R' recorre todas las celdas unidad. Dentro de cada una, el vector R recorre todos los átomos de la supercelda (átomos vecinos que interaccionan con dicha celda unidad). Notemos que se incluye tanto el término de anisotropía en el eje z como el término de Zeeman. Debemos ahora reescribir el modelo aplicando las transformaciones de Holstein-Primakoff (6.3) hasta orden cuadrático. Para seguir mejor los cálculos, escribiremos $H^{\text{FM}} = H_J^{\text{FM}} + H_{NJ}^{\text{FM}}$, donde H_J^{FM} es el hamiltoniano de Heisenberg base y H_{NJ}^{FM} son los términos adicionales.

Recordemos los operadores escalera del momento angular, definidos como $J^+ = J^x + iJ^y$ y $J^- = J^x - iJ^y$. Empleando la identidad del producto de momentos angulares

$$\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2 = \frac{1}{2} (J_1^+ J_2^- + J_1^- J_2^+) + J_1^z J_2^z \quad (7.2)$$

podemos reescribir el producto de los operadores de spin del hamiltoniano de la forma

$$\begin{aligned} \vec{S}(R') \cdot \vec{S}(R' + R) &= (S^2 - S(n(R') + n(R' + R)) + n(R')n(R' + R)) + \\ &+ S \left[\left(1 - \frac{n(R')}{4S}\right) a(R') a^\dagger(R' + R) \left(1 - \frac{n(R' + R)}{4S}\right) + \right. \\ &\left. + a^\dagger(R') \left(1 - \frac{n(R')}{4S}\right) \left(1 - \frac{n(R' + R)}{4S}\right) a(R' + R) \right]. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Entonces, al omitir los términos con orden superior a cuadrático, el término H_J^{FM} toma la forma

$$\begin{aligned}
H_J^{\text{FM}} = & \frac{MS^2}{2} \sum_R J(R) + \frac{S}{2} \sum_{R,R'} J(R) (-n(R') - n(R' + R) + a(R')a^\dagger(R' + R) + \\
& + a^\dagger(R')a(R' + R)) + \frac{1}{8} \sum_{R,R'} J(R) (4n(R')n(R' + R) - n(R')a(R')a^\dagger(R' + R) - \\
& - a(R')a^\dagger(R' + R)n(R' + R) - a^\dagger(R')n(R')a(R' + R) - a^\dagger(R')n(R' + R)a(R' + R)) ,
\end{aligned} \tag{7.4}$$

donde M es el número total de átomos de la red cristalina. De manera similar, podemos reescribir el cuadrado de la componente z del espín en términos de los operadores bosónicos como

$$S_z^2(R') = S^2 - 2Sn(R') + n(R')^2 . \tag{7.5}$$

Entonces, el término H_{NJ}^{FM} toma la forma

$$H_{NJ}^{\text{FM}} = (MAS^2 + g\mu_B MBS) - \sum_{R'} (2AS + g\mu_B B)n(R') + \sum_{R'} An(R')^2 . \tag{7.6}$$

Los términos de orden 0 desplazan el origen de energías y los denotaremos por H_0^{FM} . Los términos lineales corresponden al espectro de los magnones si no interaccionasen entre sí y los denotaremos por H_1^{FM} . Los términos cuadráticos describen las contribuciones de la interacción entre magnones y los denotaremos por H_2^{FM} .

Teniendo en cuenta que $\sum_{R',R} J(R) n(R' + R) = \sum_{R',R} J(R) n(R')$ cuando $M \gg 1$ y definiendo

$$\varepsilon_0 = - \left(2AS + g\mu_B B + S \sum_R J(R) \right) , \tag{7.7}$$

podemos escribir cada uno de ellos como

$$H_0^{\text{FM}} = \frac{1}{2}MS^2 \sum_R J(R) + MS(AS + g\mu_B B) , \tag{7.8}$$

$$H_1^{\text{FM}} = \sum_{R'} \varepsilon_0 n(R') + \frac{1}{2}S \sum_{R',R} J(R) (a(R')a^\dagger(R' + R) + a^\dagger(R')a(R' + R)) , \tag{7.9}$$

$$\begin{aligned}
H_2^{\text{FM}} = & \sum_R An(R)^2 + \frac{1}{2} \sum_{R',R} J(R) \left[n(R')n(R' + R) - \frac{1}{4} (n(R')a(R')a^\dagger(R' + R) + \right. \\
& \left. + a(R')a^\dagger(R' + R)n(R' + R) + a^\dagger(R')n(R')a(R' + R) + a^\dagger(R')n(R' + R)a(R' + R)) \right] .
\end{aligned} \tag{7.10}$$

A continuación, cambiaremos a una representación de momentos de los operadores bosónicos. Omitiremos también tanto el símbolo de vector del momento cristalino como el punto del producto escalar, entendiéndose dos vectores yuxtapuestos como un producto escalar. Los nuevos operadores vienen dados por las relaciones

$$\begin{aligned}
a^\dagger(R) &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k e^{-ikR} b_k^\dagger, \\
a(R) &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k e^{ikR} b_k.
\end{aligned} \tag{7.11}$$

La igualdad más relevante a tener en cuenta al cambiar de representación es la ortonormalidad de las exponenciales complejas, dada por

$$\frac{1}{M} \sum_{R'} e^{i(k_2 - k_1)R'} = \delta_{k_1 k_2}. \tag{7.12}$$

Además, al tratar con los sumando de H_2^{FM} debemos tener en cuenta el **teorema de Wick**. Este resultado de la teoría cuántica de campos indica que, para que los cálculos den las soluciones deseadas, debemos **ordenar normalmente** los operadores. Esto quiere decir que todos los operadores de creación deben colocarse antes de los operadores de destrucción. Para ello se emplean las relaciones canónicas de conmutación (5.24). Por conveniencia, también definiremos $J^k = \sum_R J(R) e^{-ikR}$.

Los cálculos son tediosos a partir de este punto, así que omitiremos el reordenamiento de operadores y la reducción de las expresiones empleando (7.12). También obviamos los términos escalares, que contribuirían desplazando el origen de energías al igual que H_0^{FM} . Los demás términos tienen las siguientes expresiones:

$$H_1^{\text{FM}} = \sum_k \varepsilon_0 n(k) + \frac{1}{2} S \sum_{kR} 2J(R) \cos(kR) n(k), \tag{7.13}$$

$$\begin{aligned}
H_2^{\text{FM}} &= A \sum_k n(k) + \frac{1}{M} A \sum_{qkk'} b_{k'+q}^\dagger b_{k-q}^\dagger b_k b_{k'} + \\
&+ \frac{1}{2M} \sum_{qkk'} \left(J^q - \frac{1}{4} [J^{q+k'} + J^{-q-k'} J^{k'} + J^{-k'}] \right) b_{k'+q}^\dagger b_{k-q}^\dagger b_k b_{k'}
\end{aligned} \tag{7.14}$$

Notemos que H_1^{FM} ya está en forma diagonal. Por su parte, para diagonalizar H_2^{FM} aplicaremos la aproximación de campo medio. En este caso, como ya explicamos en la sección 4, suprimimos las fluctuaciones cuadráticas de los operadores bosónicos en la representación de momentos. De nuevo, los cálculos son extensos. Denotaremos

$$n_0 := \frac{1}{M} \sum_{k'} \langle n_{k'} \rangle \tag{7.15}$$

al número total de modos excitados. De esta manera, obtenemos finalmente la siguiente expresión diagonal para H_2^{FM} :

$$\begin{aligned}
H_2^{\text{FM}} &= A \sum_k n(k) + 4An_0 \sum_k n(k) - \frac{1}{2M} \left(\sum_{k'} (J^{k'} + J^{-k'}) \langle n_{k'} \rangle \right) \sum_k n(k) + \\
&+ J^0 n_0 \sum_k n(k) - \frac{1}{2} n_0 \sum_k (J^k + J^{-k}) n(k) + \frac{1}{M} \sum_{kk'} J^{k-k'} \langle n_{k'} \rangle n(k).
\end{aligned} \tag{7.16}$$

Juntando todo lo anterior, concluimos que el espectro de energías de la teoría ondas de espín de un modelo de Heisenberg ferromagnético con parámetro de anisotropía A , espín total S y constante de intercambio J , isótropa y a primeros vecinos es

$$\begin{aligned} \varepsilon'_k = & 2(n_0 - S) J \sum_R \sin^2 \left(\frac{kR}{2} \right) + 2A \left[\frac{1}{2} + 2n_0 - S \right] - \\ & - g\mu_B B - J \sum_{k'R} \cos(k'R) \frac{\langle n_{k'} \rangle}{M} + J \langle n_k \rangle . \end{aligned} \quad (7.17)$$

Podemos particularizar al caso concreto de una cadena lineal y de una red cuadrada. Resolveremos de manera autoconsistente la ecuación (7.17) junto con la expresión

$$n_0 = \frac{1}{M} \sum_{k'} \langle n_{k'} \rangle \simeq \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{1}{e^{\beta\varepsilon'_k} - 1} , \quad (7.18)$$

que da el número total de modos excitados.

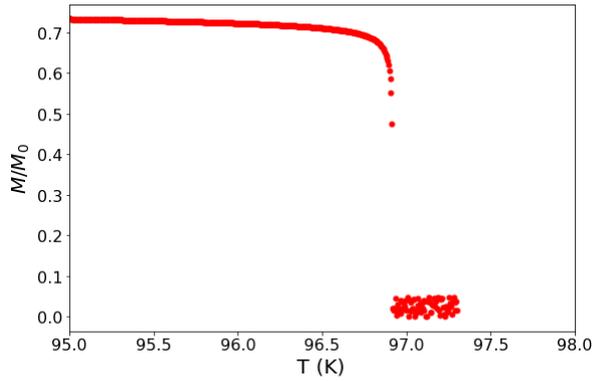


Figura 7.1: Simulación de la imanación como función de la temperatura a través de la aproximación de campo medio y el formalismo de Holstein-Primakoff, para una cadena lineal monoatómica de átomos con momento angular total $S = 2$, constante de intercambio $J = -2.21$ meV, campo magnético $B = 0$ T y parámetro de anisotropía $A = -0.05$ meV. El eje vertical representa la imanación en unidades de M_0 , que es la imanación a temperatura 0 K. El eje horizontal representa la temperatura. Se puede observar que la temperatura crítica en este caso es de $T_C = 96.9$ K.

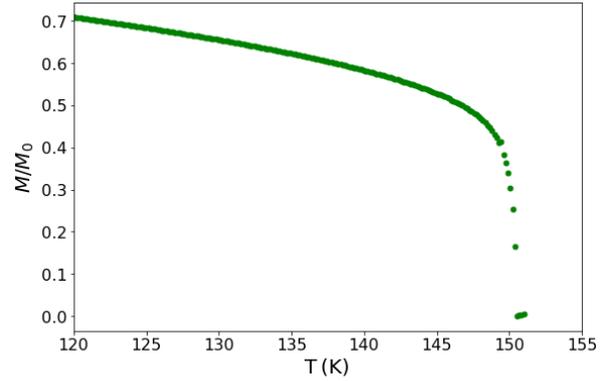


Figura 7.2: Simulación de la imanación como función de la temperatura a través de la aproximación de campo medio y el formalismo de Holstein-Primakoff, para una red cuadrada bidimensional de átomos con momento angular total $S = 2$, constante de intercambio $J = -2.21$ meV, campo magnético $B = 0$ T y parámetro de anisotropía $A = -0.05$ meV. El eje vertical representa la imanación en unidades de M_0 , que es la imanación a temperatura 0 K. El eje horizontal representa la temperatura. Se puede observar que la temperatura crítica en este caso es de $T_C = 150.5$ K.

Por tanto, la imanación en el material se calcula como

$$M = M(0) \left(1 - \frac{n_0}{S} \right) , \quad (7.19)$$

de manera que impondremos el criterio de convergencia del cálculo con esta magnitud. Iniciaremos con el valor $n_0 = 0$ y emplearemos (7.17) para calcular el primer espectro. Calcularemos el valor de n_0 para dicho espectro y la imanación correspondiente. Repetimos hasta que dos valores consecutivos de imanación difieran en menos de una cierta tolerancia. Haciendo este cálculo para diferentes temperaturas, obtenemos la curva de imanación de las figuras 7.1 en el caso unidimensional y 7.2 para una red cuadrada.

En las dos curvas de imanación se observa el comportamiento esperado. Al acercarnos a temperatura 0 K, encontramos una fase ordenada tanto en la cadena lineal como en la red cuadrada. Recordemos que al haber introducido un término de anisotropía, el teorema de Mermin y Wagner no entra en juego. Por otro lado, al aumentar la temperatura la imanación decae, hasta que el material experimenta un cambio de fase a la temperatura crítica.

El programa empleado para obtener las curvas de imanación considera solo constantes de intercambio isotropas y a primeros vecinos. Sin embargo, la ecuación (7.16) es general. No depende de la dimensión ni de la forma de las constantes de intercambio. Por tanto, cabe esperar que considerar geometrías más complicadas y realistas no supongan un problema sustancial para el programa.

Finalmente, en las figuras 7.3 y 7.4 se observa el comportamiento de la temperatura crítica al variar el parámetro de anisotropía y el campo magnético externo, respectivamente, en el caso de la cadena lineal. No se ha repetido para la red cuadrada porque el tiempo de ejecución es considerablemente mayor, pero el comportamiento cualitativo esperado es el mismo que en el caso unidimensional.

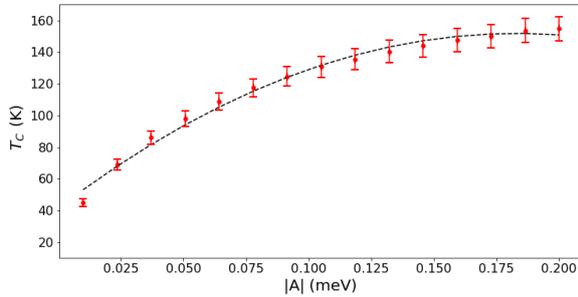


Figura 7.3: Comportamiento de la temperatura de Curie de una cadena lineal de átomos con momento angular total $S = 2$ y constante de intercambio $J = -2.21$ meV, **en función del valor absoluto del parámetro de anisotropía** y en ausencia de campo magnético.

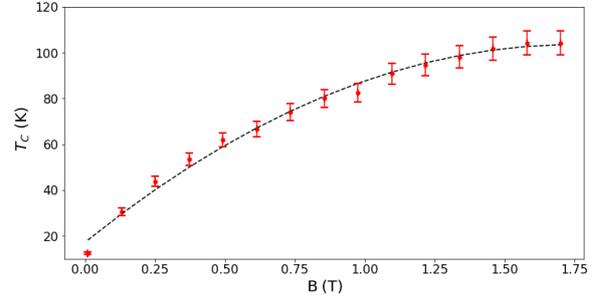


Figura 7.4: Comportamiento de la temperatura de Curie de una cadena lineal de átomos con momento angular total $S = 2$ y constante de intercambio $J = -2.21$ meV, **en función del campo magnético** y con parámetro de anisotropía $A = -0.05$ meV.

7.2. Ondas de espín en sistemas antiferromagnéticos

Al trabajar el caso antiferromagnético, se debe tener en cuenta que en el estado de mínima energía los espines se encuentran antialineados. Al considerar la transformación de Holstein-Primakoff, se tienen dos tipos de iones diferenciados en la red [19]. Las transformaciones correspondientes se encuentran rotadas entre sí, de manera que se escriben

$$\text{SUBRED A} \begin{cases} S^+(R) \simeq \sqrt{2S} \left(1 - \frac{n(R)}{4S}\right) a(R), \\ S^+(R) \simeq \sqrt{2S} a^\dagger(R) \left(1 - \frac{n(R)}{4S}\right), \\ S_z(R) = S - n(R). \end{cases} \quad (7.20)$$

$$\text{SUBRED B} \begin{cases} S^+(R) \simeq \sqrt{2S} b^\dagger(R) \left(1 - \frac{n'(R)}{4S}\right), \\ S^+(R) \simeq \sqrt{2S} \left(1 - \frac{n'(R)}{4S}\right) b(R), \\ S_z(R) = n'(R) - S. \end{cases} \quad (7.21)$$

Notemos que hemos denotado por $n(R)$ al operador número de la subred A , mientras que $n'(R)$ denota al operador número de la subred B . De nuevo, hemos omitido tanto los gorros en los operadores como el símbolo de vector en los vectores de posición. Partimos del hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{R,R'} J(R) \vec{S}_{\lambda}(R') \cdot \vec{S}_{\lambda}(R' + R) + \sum_{R',\lambda} (AS_{z,\lambda}^2(R') + g\mu_B B S_{z,\lambda}(R')). \quad (7.22)$$

El nuevo índice λ hace referencia a las dos subredes dadas por (7.20) y (7.21). Es evidente que este fraccionamiento del hamiltoniano dificulta el análisis. De hecho, si nos limitamos a los términos lineales en $n(k)$, tras operar y pasar al espacio de momentos se encuentra que el hamiltoniano no es diagonal. Es necesario realizar una **transformación de Bogoliubov** para encontrar el espectro de las ondas de spin del caso antiferromagnético [20].

Tras realizar la transformación de Holstein-Primakoff y operar como en el caso ferromagnético, los términos lineales resultantes en el espacio de posiciones vienen dados por

$$\begin{aligned} H_1^{\text{AFM}} = & S \sum_{R,R'} J(R) [n(R') + n'(R + R') + a(R')b(R + R') + \\ & + a^\dagger(R')b^\dagger(R + R')] - 2AS \sum_{R'} (n(R') + n'(R')) - \\ & - g\mu_B B \sum_{R'} (n'(R') - n(R')). \end{aligned} \quad (7.23)$$

Pasemos ahora al espacio de momentos. Si la red consta de M átomos, entonces en cada subred habrá $M/2$ átomos. Las transformaciones de los operadores vienen dadas por

$$\begin{aligned}
a^\dagger(R) &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{M}} \sum_k e^{-ikR} \mathbf{a}_k^\dagger, \\
a(R) &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{M}} \sum_k e^{ikR} \mathbf{a}_k, \\
b^\dagger(R) &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{M}} \sum_k e^{-ikR} \mathbf{b}_k^\dagger, \\
b(R) &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{M}} \sum_k e^{ikR} \mathbf{b}_k.
\end{aligned} \tag{7.24}$$

Las relaciones de ortonormalidad son idénticas a (7.12), pero debemos cambiar el número de átomos total por el de cada subred. En definitiva, se opera de manera análoga al caso ferromagnético para obtener la siguiente expresión de los términos lineales (omitiendo términos escalares):

$$\begin{aligned}
H_1^{\text{AFM}} &= JSz \sum_k \left[\mathbf{n}_k + \mathbf{n}'_k + \gamma_k \left(\mathbf{a}_k \mathbf{b}_{-k} + \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{-k}^\dagger \right) \right] - \\
&\quad - 2AS \sum_k (\mathbf{n}_k + \mathbf{n}'_k) - g\mu_B B \sum_k (\mathbf{n}'_k - \mathbf{n}_k).
\end{aligned} \tag{7.25}$$

Por simplicidad, consideremos en el resto de la sección J constante. z es el número de coordinación y hemos definido $\gamma_k = \frac{2}{z} \sum_R \cos kR$.

Observemos que los términos problemáticos son los productos $\mathbf{a}_k \mathbf{b}_{-k}$ y $\mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{-k}^\dagger$. Para diagonalizarlos emplearemos una transformación de Bogoliubov, como ya hemos anticipamos. Se trata de un tipo de transformación unitaria de los operadores bosónicos. Buscaremos un nuevo par de operadores que satisfaga las ecuaciones

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= u_k \mathbf{a}_k - v_k \mathbf{b}_{-k}^\dagger, \\
\beta_k &= u_k \mathbf{b}_k - v_k \mathbf{a}_{-k}^\dagger.
\end{aligned} \tag{7.26}$$

Estos operadores α_k y β_k deben cumplir el álgebra de los bosones, dado por la ecuación (5.24). Eso lleva a la condición $u_k^2 - v_k^2 = 1$. Además, como los operadores deben conmutar entre ellos por operar sobre subredes distintas, también se encuentra la condición $u_k v_{-k} = u_{-k} v_k$. Finalmente, introduciendo la transformación (7.26) en el hamiltoniano (7.25), imponemos que los términos no diagonales en los nuevos operadores se cancelen. Esto conduce a una tercera condición,

$$2 \left\{ \left(1 - \frac{2A}{Jz} \right) v_k^2 + \gamma_k u_k v_k \right\} + \left\{ \gamma_k (u_k^2 + v_k^2) + 2 \left(1 - \frac{2A}{Jz} \right) u_k v_k \right\}. \tag{7.27}$$

Es posible satisfacer las tres condiciones de forma simultánea eligiendo $u_k = \cosh \theta_k$ y $v_k = \sinh \theta_k$, de manera $\gamma_k = - \left(1 - \frac{2A}{Jz} \right) \tanh 2\theta_k$ y consecuentemente, $\theta_k = \theta_{-k}$.

Finalmente, encontramos una forma diagonal del hamiltoniano (7.25) en términos de los operadores bosónicos α_k y β_k . Omittiendo los términos escalares, tiene la expresión

$$H_1^{\text{AFM}} = \sum_k \varepsilon_k^- \alpha_k^\dagger \alpha_k + \sum_k \varepsilon_k^+ \beta_k^\dagger \beta_k + \sum_k (\varepsilon_k^+ + g\mu_B B) . \quad (7.28)$$

Se han definido las cantidades

$$\varepsilon_k^\pm = \mp g\mu_B B + JSz \sqrt{\left(1 - \frac{2A}{Jz}\right)^2 - \gamma_k^2} . \quad (7.29)$$

Este cálculo pone de manifiesto las limitaciones del formalismo de Holstein-Primakoff. Introducir términos cuadráticos complica el estudio enormemente, por lo que nos hemos conformado con el espectro de magnones libres para el hamiltoniano antiferromagnético de Heisenberg.

Ya que el objetivo es llegar a estudiar materiales bidimensionales, el término de anisotropía ha resultado necesario como consecuencia del teorema de Mermin-Wagner. Sin embargo, consideremos brevemente que $A = 0$ meV y que $B = 0$ T en una cadena lineal monoatómica. Supongamos tanto el caso ferromagnético como el antiferromagnético y limitémonos al espectro de magnones libres (términos lineales H_1^{FM} y H_1^{AFM}). Podemos observar la relación de dispersión de ambos hamiltonianos en la figura 7.5.

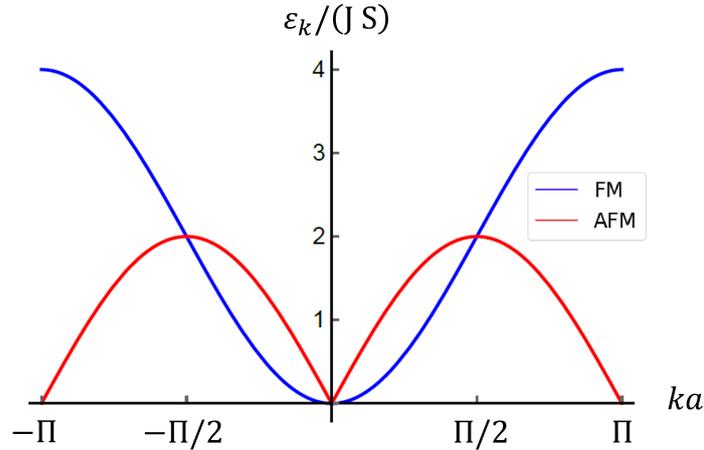


Figura 7.5: Relaciones de dispersión de los magnones aislados para el modelo de Heisenberg ferromagnético y antiferromagnético de una cadena lineal sin anisotropía ni campo externo.

Encontramos que tanto en el modelo de Heisenberg ferromagnético como en el antiferromagnético, las excitaciones de las ondas de espín tienen una energía ε_k que tiende a cero a medida que k tiende a 0. Esto implica que no hay un coste mínimo de energía para crear una excitación. Es lo que se conoce como un **modo de Golstone**.

8. Resultados del formalismo de Schwinger

En este capítulo, aplicaremos el formalismo de Schwinger al hamiltoniano de Heisenberg. La motivación detrás de esto es que el formalismo de Holstein-Primakoff ha resultado no ser conveniente en el estudio del caso antiferromagnético. Definiremos variables de correlación de espín y diagonalizaremos el hamiltoniano mediante la aproximación de campo medio. Encontraremos, para los casos ferromagnético y antiferromagnético, sistemas autoconsistentes de ecuaciones para el cálculo de la temperatura crítica.

8.1. Correlaciones de espín en sistemas ferromagnéticos

En esta ocasión, comenzamos con el modelo de Heisenberg sin términos adicionales,

$$H^{\text{Heisenberg}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j . \quad (8.1)$$

Al igual que en el capítulo anterior, omitiremos los gorros de los operadores para agilizar la notación. Una característica del modelo de Heisenberg es que siempre podemos rotar el sistema de referencia para obtener otro donde el ordenamiento sea ferromagnético. Esta transformación es especialmente útil para describir ordenamientos helicoidales. Dicha rotación se ve reflejada en los operadores de espín, dando lugar al hamiltoniano

$$\begin{aligned} (H^{\text{Heisenberg}})' = & \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left(\gamma_{ij}^+ \vec{S}'_i \cdot \vec{S}'_j + \gamma_{ij}^- (2\vec{S}'_i \cdot \hat{n} \vec{S}'_j \cdot \vec{n} - \vec{S}'_i \cdot \vec{S}'_j) - \right. \\ & \left. - \sin(QR_{ij}) \hat{n} \cdot (\vec{S}'_i \times \vec{S}'_j) \right) , \end{aligned} \quad (8.2)$$

donde Q es el ángulo que hemos rotado el sistema de referencia, los operadores \vec{S}'_i son los operadores de espín rotados, \hat{n} es el vector unitario de la dirección de alineamiento ferromagnético y $\gamma_{ij}^{\pm} = (1 \pm \cos(QR_{ij}))/2$. Notemos que en el caso ferromagnético, $Q = 0$, y en el antiferromagnético, $Q = \pi$.

Consideremos entonces el caso ferromagnético e introduzcamos la transformación de Schwinger (6.4). Debemos añadir explícitamente la ligadura del subespacio físico dada por (6.7) a través de un operador de potencial químico λ_i . Obtenemos la expresión

$$\begin{aligned} H^{\text{FM}} = & \sum_{i\sigma} \lambda_i (S - b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) + \frac{1}{8} \sum_{ij\sigma} J_{ij} \left[2b_{i\sigma}^\dagger b_{i\bar{\sigma}} b_{j\bar{\sigma}}^\dagger b_{j\sigma} + \right. \\ & \left. + b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} b_{j\sigma}^\dagger b_{j\sigma} - b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} b_{j\bar{\sigma}}^\dagger b_{j\bar{\sigma}} \right] . \end{aligned} \quad (8.3)$$

Este hamiltoniano es simétrico bajo intercambios de índices i, j . Por ello, proponemos la **variable de enlace**

$$P_{ij}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} . \quad (8.4)$$

Se trata de una elección habitual en el caso ferromagnético [15]. Para reescribir la expresión (8.3) en términos de la variable de enlace elegida tengamos en cuenta varias identidades. Por un lado, podemos comprobar que

$$P_{ij}^\dagger P_{ij} = \frac{1}{4} \sum_{\sigma} \left(b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} b_{j\sigma}^\dagger b_{i\sigma} + b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} b_{j\bar{\sigma}}^\dagger b_{i\bar{\sigma}} \right) . \quad (8.5)$$

Además, se verifica que $b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} b_{j\sigma}^\dagger b_{i\sigma} = n_{i\sigma} n_{j\sigma} + n_{i\sigma}$ y tenemos la restricción $n_{i+} + n_{i-} = 2S$. Tomando todo esto en cuenta, encontramos la expresión

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = 2P_{ij}^\dagger P_{ij} - S(S+1) . \quad (8.6)$$

Finalmente, el hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético escrito en las variables de enlace (8.4) tiene la forma

$$H^{\text{FM}} = \sum_{i\sigma} \lambda_i (S - b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) + \sum_{ij} J_{ij} \left(P_{ij}^\dagger P_{ij} - \frac{1}{2} S(S+1) \right) \quad (8.7)$$

Notemos que el producto de variables de enlace es en realidad un producto de cuatro operadores bosónicos. Por ello, vamos a incluir la aproximación de campo medio para suprimir las fluctuaciones cuadráticas de estos operadores. Pasaremos de un operador de potencial químico en cada sitio de la red, λ_i (recordemos que estamos omitiendo los gorros), a un potencial químico escalar y constante que denotaremos por μ . De igual manera, al valor esperado de las variables de enlace lo llamaremos

$$p_{ij}^* = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \langle b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} \rangle , \quad (8.8)$$

donde el asterisco representa el complejo conjugado. Aplicando la ecuación (4.4) al producto de variables de enlace, se obtiene el hamiltoniano

$$H^{\text{FM}} = \sum_{i\sigma} \mu (S - b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) + \sum_{ij} J_{ij} \left(p_{ij}^* P_{ij} + P_{ij}^\dagger p_{ij} - p_{ij}^* p_{ij} - \frac{1}{2} S(S+1) \right) . \quad (8.9)$$

Definimos

$$t_{ij} = J_{ij} p_{ij} , \quad (8.10)$$

que satisface $t_{ij}^* = t_{ji}$. Entonces, podemos reescribir el hamiltoniano como

$$H^{\text{FM}} = E_C^{\text{FM}} - \mu \sum_{i\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ij\sigma} \left(t_{ij} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + t_{ji} b_{i\sigma} b_{j\sigma}^\dagger \right) , \quad (8.11)$$

donde hemos englobado los términos escalares en una constante a la que llamamos

$$E_C^{\text{FM}} = 2M\mu S - \frac{1}{2} S(S+1) \sum_{ij} J_{ij} - \sum_{ij} \frac{|t_{ij}|^2}{J_{ij}} . \quad (8.12)$$

Pasamos al espacio recíproco mediante las ecuaciones

$$\begin{aligned} b_{i\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k e^{-ikR_i} \mathbf{b}_{k\sigma}^\dagger , \\ b_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k e^{ikR_i} \mathbf{b}_{k\sigma} . \end{aligned} \quad (8.13)$$

La relación de ortonormalidad es la misma que en el caso de Holstein-Primakoff, (7.12). Además, es equivalente sumar sobre todas las celdas unidad dos veces (índices R_i, R_j) a sumar sobre todas las celdas unidad y dentro de cada una, sobre todos los átomos que interaccionan con la misma (índices $R_i, R_{ij} = R_j - R_i$). Definimos las cantidades

$$\varepsilon_k = \sum_{R_{ij}} t_{ij} e^{ikR_{ij}} , \quad (8.14)$$

$$J_{ij} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k J_k e^{ikR_{ij}} , \quad (8.15)$$

$$p_{ij} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k p_k e^{ikR_{ij}} . \quad (8.16)$$

Finalmente, teniendo en cuenta que $\mathbf{b}_{k\sigma} \mathbf{b}_{k\sigma}^\dagger = \mathbf{b}_{k\sigma}^\dagger \mathbf{b}_{k\sigma} + \mathcal{I}$, encontramos la expresión diagonal para el hamiltoniano

$$H^{\text{FM}} = E_C^{\text{FM}} + M\mu + \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) \left(\mathbf{b}_{k\sigma}^\dagger \mathbf{b}_{k\sigma} + \frac{1}{2} \right) . \quad (8.17)$$

Para encontrar las ecuaciones autoconsistentes que nos lleven a la temperatura crítica, debemos operar con el potencial químico. Por un lado, recordando la definición de t_{ij} dada por (8.10), podemos introducir las ecuaciones (8.15) y (8.16) en las autoenergías (8.14) para encontrar la relación

$$\varepsilon_k = \sum_q J_{k+q} p_q . \quad (8.18)$$

Podemos definir en el sistema una función de partición gran canónica, cuya expresión viene dada por

$$\mathcal{Z}^{\text{FM}} = \text{Tr} \left(e^{-\beta H^{\text{FM}}} \right) = \exp \left[-\beta (E_C^{\text{FM}} + M\mu) - \sum_{k\sigma} \log \left(2 \sinh \frac{\beta(\varepsilon_k - \mu)}{2} \right) \right], \quad (8.19)$$

siendo $\beta = k_B T$ el factor de Boltzmann. A partir de la función de partición, encontramos el potencial de Landau

$$\Omega^{\text{FM}}(T, V, \mu) = (E_C^{\text{FM}} + M\mu) + k_B T \sum_{k\sigma} \log \left(2 \sinh \frac{\beta(\varepsilon_k - \mu)}{2} \right) \quad (8.20)$$

Las derivadas con respecto a la energía y con respecto al potencial químico del potencial de Landau deben anularse. De esta manera encontramos por un lado que

$$M(2S + 1) = \sum_k \coth \left(\frac{\beta(\varepsilon_k - \mu)}{2} \right), \quad (8.21)$$

y por otro lado la relación

$$p_k = \frac{1}{2} \coth \left(\frac{\beta(\varepsilon_k - \mu)}{2} \right). \quad (8.22)$$

Finalmente, introducimos un parámetro de orden a largo alcance, S^* . En las fases con este tipo de orden, los pares de correlaciones de espín experimentan la condensación de Bose-Einstein. Podemos reflejar este hecho escribiendo

$$p_k = S^* \delta_{k0} + p'_k. \quad (8.23)$$

Si todos los espines forman parte del condensado, nos encontraremos en una fase completamente ordenada. En ella, $p_k = p_0 = S^* \delta_{k0}$. Por último, elegimos el potencial químico de manera que se satisfaga el teorema de Goldstone: $\varepsilon_0 - \mu = 0$. En el caso ferromagnético, $\mu = S^* J_0$.

En definitiva, el conjunto autoconsistente de ecuaciones para el modelo de Heisenberg ferromagnético en términos de bosones de Schwinger viene dado por

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= J_k S^* + \frac{1}{2M} \sum_{q \neq 0} J_{k+q} \coth \left(\frac{\beta(\varepsilon_k - S^* J_0)}{2} \right), \\ S + \frac{1}{2} &= S^* + \frac{1}{2M} \sum_{k \neq 0} \coth \left(\frac{\beta(\varepsilon_k - S^* J_0)}{2} \right). \end{aligned} \quad (8.24)$$

En estas ecuaciones, el parámetro autoconsistente es S^* . A la temperatura crítica, no existe orden a largo alcance y se debe cumplir $S^* = 0$. Iteramos partiendo del espectro a temperatura 0 K, dado por $\varepsilon_k(T = 0 \text{ K}) = S J_k$. Fijando $S^* = 0$, buscamos la temperatura a la que converge el método, que será la temperatura crítica.

8.2. Correlaciones de espín en sistemas antiferromagnéticos

En el caso antiferromagnético, debemos volver a la expresión del hamiltoniano rotado (8.2) y elegir un ángulo de rotación $Q = \pi$. Introducimos la transformación de Schwinger (6.4) y elegimos como dirección del ordenamiento ferromagnético el eje z , $\hat{n} = (001)$. Por último, imponemos de manera explícita la ligadura del subespacio físico (6.7) mediante un operador de potencial químico λ_i . Así, encontramos la expresión

$$H^{\text{AFM}} = \sum_{i\sigma} \lambda_i (S - b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) + \frac{1}{8} \sum_{ij\sigma} J_{ij} \left[b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} b_{j\sigma}^\dagger b_{j\sigma} - b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} b_{j\bar{\sigma}}^\dagger b_{j\bar{\sigma}} - 2b_{i\sigma}^\dagger b_{i\bar{\sigma}} b_{j\bar{\sigma}}^\dagger b_{j\sigma} \right]. \quad (8.25)$$

En esta ocasión, tenemos antisimetría bajo intercambios de índices i, j . Siguiendo la elección de Auerbach y Arovas [18], tomamos las variables de enlace

$$\vec{C}_{ij}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \begin{pmatrix} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma}^\dagger \\ -i\sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma}^\dagger \\ \sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{j\bar{\sigma}}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (8.26)$$

Como estamos trabajando con $\hat{n} = (001)$, elegimos únicamente la tercera componente y la denotamos por $C_{ij}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{j\bar{\sigma}}^\dagger$. Entonces, es posible comprobar que

$$C_{ij}^\dagger C_{ij} = \frac{1}{4} \sum_{\sigma} \left(b_{i\sigma}^\dagger b_{j\bar{\sigma}}^\dagger b_{j\bar{\sigma}} b_{i\sigma} + b_{i\sigma}^\dagger b_{j\bar{\sigma}}^\dagger b_{j\sigma} b_{i\bar{\sigma}} \right). \quad (8.27)$$

Además, tenemos la restricción $n_{i+} + n_{i-} = 2S$. Encontramos así la expresión para el hamiltoniano en términos de la variable de enlace C_{ij}

$$H^{\text{AFM}} = \sum_{i\sigma} \lambda_i (S - b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left(S^2 - 2C_{ij}^\dagger C_{ij} \right). \quad (8.28)$$

De manera análoga al caso ferromagnético, el producto de variables de enlace es un producto de cuatro operadores bosónicos. De nuevo, vamos a incluir la aproximación de campo medio para suprimir las fluctuaciones cuadráticas de estos operadores. Pasaremos de un operador de potencial químico en cada sitio de la red, λ_i , a un potencial químico escalar y constante que denotaremos por μ . De igual manera, al valor esperado de las variables de enlace lo llamaremos

$$c_{ij}^* = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma \langle b_{i\sigma}^\dagger b_{j\bar{\sigma}}^\dagger \rangle, \quad (8.29)$$

donde el asterisco representa el complejo conjugado. Aplicando la ecuación (4.4) al producto de variables de enlace, se obtiene el hamiltoniano

$$H^{\text{AFM}} = \sum_{i\sigma} \mu (S - b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left(S^2 - 2c_{ij}^* C_{ij} - 2C_{ij}^\dagger c_{ij} + 2c_{ij}^* c_{ij} \right). \quad (8.30)$$

Definimos

$$\Delta_{ij} = J_{ij} c_{ij} , \quad (8.31)$$

de manera que el hamiltoniano se puede reescribir como

$$H^{\text{AFM}} = E_C^{\text{AFM}} - \sum_{ij\sigma} \sigma \left[\Delta_{ij}^* b_{j\sigma} b_{i\sigma} + \Delta_{ij} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma}^\dagger \right] - \mu \sum_{i\sigma} b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} , \quad (8.32)$$

donde hemos englobado los términos escalares en una constante a la que llamamos

$$E_C^{\text{AFM}} = 2M\mu S + \frac{1}{2} S^2 \sum_{ij} J_{ij} + \sum_{ij} \frac{|\Delta_{ij}|^2}{J_{ij}} . \quad (8.33)$$

Pasamos al espacio recíproco mediante las ecuaciones

$$\begin{aligned} b_{i\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k e^{-ikR_i} \mathbf{b}_{k\sigma}^\dagger , \\ b_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k e^{ikR_i} \mathbf{b}_{k\sigma} . \end{aligned} \quad (8.34)$$

La relación de ortonormalidad es la misma que en el caso de Holstein-Primakoff, (7.12). Además, es equivalente sumar sobre todas las celdas unidad dos veces (índices R_i, R_j) a sumar sobre todas las celdas unidad y dentro de cada una, sobre todos los átomos que interaccionan con la misma (índices $R_i, R_{ij} = R_j - R_i$). Definimos las cantidades

$$\Delta_k = \sum_{R_{ij}} \Delta_{ij} e^{-ikR_{ij}} , \quad (8.35)$$

$$J_{ij} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k J_k e^{ikR_{ij}} , \quad (8.36)$$

$$c_{ij} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k c_k e^{ikR_{ij}} . \quad (8.37)$$

Finalmente, podemos organizar matricialmente los términos del hamiltoniano (8.32) y escribir

$$H^{\text{AFM}} = E_C^{\text{AFM}} + M\mu + \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} \left(\mathbf{b}_{k\sigma}^\dagger \ \mathbf{b}_{-k\bar{\sigma}} \right) \begin{pmatrix} -\mu & \Delta_k \\ \Delta_k^* & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{k\sigma} \\ \mathbf{b}_{-k\bar{\sigma}}^\dagger \end{pmatrix} . \quad (8.38)$$

A diferencia del caso ferromagnético, el paso al espacio de momentos no lleva a una expresión diagonal. De manera análoga al caso de Hosltein-Primakoff, queda realizar una transformación de Bogoliubov para encontrar una transformación unitaria de los operadores \mathbf{b}_{k+} y \mathbf{b}_{k-} que nos lleve a la forma diagonal. Matricialmente, consiste en resolver

$$\left(\begin{array}{cc} \gamma_{k\sigma}^\dagger & \gamma_{\bar{k}\bar{\sigma}} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc} \mathbf{b}_{k\sigma}^\dagger & \mathbf{b}_{\bar{k}\bar{\sigma}} \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} u_{k\sigma} & v_{\bar{k}\bar{\sigma}}^* \\ v_{\bar{k}\bar{\sigma}} & u_{k\sigma}^* \end{array} \right); \quad (8.39)$$

Los nuevos operadores $\gamma_{k\sigma}$ deben satisfacer las relaciones de conmutación de los bosones (5.24). Por tanto, $|u_{k\sigma}|^2 - |v_{\bar{k}\bar{\sigma}}|^2 = 1$. Además, como deben conmutar entre ellos debe cumplirse $u_{k\sigma} = u_{\bar{k}\bar{\sigma}}$ y $v_{k\sigma} = v_{\bar{k}\bar{\sigma}}$. Por último, para que se cancelen los términos no diagonales encontramos la condición

$$u_{k\sigma}^2 + 2\frac{\mu}{\Delta_k}v_{k\sigma}u_{k\sigma} + \frac{\Delta_k^*}{\Delta_k}v_{k\sigma}^2 = 0. \quad (8.40)$$

Si asumimos que los parámetros son reales, concluimos que los coeficientes deben tomar los valores

$$\begin{aligned} u_{k\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{-\frac{\mu}{E_k} - 1}, \\ v_{k\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sgn}\left(\frac{-\mu}{\Delta_k}\right)\sqrt{-\frac{\mu}{E_k} + 1}, \end{aligned} \quad (8.41)$$

donde se han definido las autoenergías del hamiltoniano como

$$E_k = \sqrt{\mu^2 - \Delta_k^2}. \quad (8.42)$$

De esta manera, el hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético en términos de bosones de Schwinger toma la forma diagonal

$$H^{\text{AFM}} = E_C^{\text{AFM}} + M\mu + \sum_{k\sigma} E_k \left(\frac{1}{2} + \gamma_{k\sigma}^\dagger \gamma_{k\sigma} \right). \quad (8.43)$$

Para encontrar las ecuaciones autoconsistentes que nos lleven a la temperatura crítica, debemos operar con el potencial químico. Por un lado, recordando la definición de Δ_{ij} dada por (8.31), podemos introducir las ecuaciones (8.36) y (8.37) en la ecuación (8.35) para encontrar la relación

$$\Delta_k = \sum_q \frac{1}{2} \left(J_{k+q} - \frac{1}{2}(J_{k+q+\pi} + J_{k+q-\pi}) \right) c_q. \quad (8.44)$$

Podemos definir en el sistema una función de partición gran canónica, cuya expresión viene dada por

$$\mathcal{Z}^{\text{AFM}} = \operatorname{Tr} \left(e^{-\beta H^{\text{AFM}}} \right) = \exp \left[-\beta(E_C^{\text{AFM}} + M\mu) - \sum_{k\sigma} \log \left(2 \sinh \frac{\beta E_k}{2} \right) \right], \quad (8.45)$$

siendo $\beta = k_B T$ el factor de Boltzmann. A partir de la función de partición, encontramos el potencial de Landau

$$\Omega^{\text{AFM}}(T, V, \mu) = (E_C^{\text{AFM}} + M\mu) + k_B T \sum_{k\sigma} \log \left(2 \sinh \frac{\beta E_k}{2} \right) \quad (8.46)$$

Las derivadas con respecto a la energía y con respecto al potencial químico del potencial de Landau deben anularse. De esta manera encontramos por un lado que

$$M(2S + 1) = \sum_k \coth \left(\frac{\beta E_k}{2} \right), \quad (8.47)$$

y por otro lado la relación

$$c_k = \frac{\Delta_k}{2E_k} \coth \left(\frac{\beta E_k}{2} \right). \quad (8.48)$$

Finalmente, introducimos un parámetro de orden a largo alcance, S^* . En las fases con este tipo de orden, los pares de correlaciones de espín experimentan la condensación de Bose-Einstein. Reflejamos este hecho escribiendo

$$c_k = S^* \delta_{k0} + c'_k. \quad (8.49)$$

Si todos los espines forman parte del condensado, nos encontraremos en una fase completamente ordenada. En ella, $c_k = c_0 = S^* \delta_{k0}$. Por último, elegimos el potencial químico de manera que se satisfaga el teorema de Goldstone: $\Delta_0 + \mu = 0$. En el caso antiferromagnético, $\mu = S^*(J_0 + J_{2\pi})/2$.

En definitiva, el conjunto autoconsistente de ecuaciones para el modelo de Heisenberg antiferromagnético en términos de bosones de Schwinger viene dado por

$$\begin{aligned} \Delta_k = & \frac{1}{2} \left(J_k - \frac{1}{2} (J_{k+\pi} + J_{k-\pi}) \right) S^* + \\ & + \frac{1}{2M} \sum_{q \neq 0} \frac{\Delta_k}{2E_k} \left(J_{k+q} - \frac{1}{2} (J_{k+q+\pi} + J_{k+q-\pi}) \right) \coth \left(\frac{\beta E_k}{2} \right), \end{aligned} \quad (8.50)$$

$$S + \frac{1}{2} = S^* + \frac{1}{2M} \sum_{k \neq 0} \coth \left(\frac{\beta E_k}{2} \right), \quad (8.51)$$

siendo $E_k = \sqrt{(S^*(J_0 + J_{2\pi})/2)^2 - \Delta_k^2}$.

En estas ecuaciones, el parámetro autoconsistente es S^* . A la temperatura crítica, no existe orden a largo alcance y se debe cumplir $S^* = 0$. La idea es iterar partiendo del espectro a temperatura 0 K, dado por $\Delta_k(T = 0 \text{ K}) = \frac{S}{2} \left(J_k - \frac{1}{2} (J_{k+\pi} + J_{k-\pi}) \right)$. Fijando $S^* = 0$, buscamos la temperatura a la que converge el método, que será la temperatura crítica.

9. Comparación de ambos formalismos, conclusiones y próximos pasos

Este último capítulo recoge algunas reflexiones sobre las ventajas y desventajas de cada uno de los formalismos desarrollados. Haremos un resumen de los modelos obtenidos y discutiremos de qué manera se puede contrastar su utilidad.

Hemos comenzado este trabajo con un recorrido del magnetismo cuántico. Desde su origen en los espines de los átomos y electrones, hemos ido modelizando los diferentes comportamientos observados experimentalmente y desarrollando nuevos hamiltonianos capaces de explicar lo que los anteriores no podían. También hemos sentado las bases de la segunda cuantización, que nos ha permitido reescribir el hamiltoniano de Heisenberg en términos de operadores bosónicos.

En esta tercera parte, he expuesto el trabajo realizado a lo largo de los últimos meses sobre hamiltonianos de Heisenberg en materiales con ordenamiento ferromagnético y antiferromagnético. Originalmente, tan solo pretendíamos desarrollar los modelos en el **formalismo de Holstein-Primakoff** como proyecto para los “Research Awards for Undergraduate Students 2022”. Siguiendo los pasos de los artículos de Li, Cao y Louie [1] y de Mkhitarian y Ke [2], encontramos el siguiente sistema autoconsistente de ecuaciones para materiales ferromagnéticos en el formalismo de Holstein-Primakoff:

$$\begin{aligned} \varepsilon'_k = & 2(n_0 - S) J \sum_R \sin^2 \left(\frac{kR}{2} \right) + 2A \left[\frac{1}{2} + 2n_0 - S \right] - \\ & - g\mu_B B - J \sum_{k'R} \cos(k'R) \frac{\langle n_{k'} \rangle}{M} + J \langle n_k \rangle , \end{aligned} \quad (9.1)$$

$$n_0 = \frac{1}{M} \sum_{k'} \langle n_{k'} \rangle \simeq \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{1}{e^{\beta\varepsilon'_k} - 1} , \quad (9.2)$$

$$M = M(0) \left(1 - \frac{n_0}{S} \right) . \quad (9.3)$$

Se trata de una teoría de ondas de espín ferromagnéticas renormalizada y auto-consistente, que considera interacciones entre las ondas de espín (términos cuadráticos), anisotropía y campo magnético externo. De este modelo nace un primer programa, capaz de determinar la temperatura crítica para materiales en una y dos dimensiones con geometrías sencillas y ordenamiento ferromagnético. Las figuras 7.1 y 7.2 muestran las curvas de imanación obtenidas con este programa en algunos casos concretos.

Ya que en el caso ferromagnético el programa funcionaba relativamente bien, decidimos continuar con el caso antiferromagnético. Aquí es donde aparecen los problemas, pues el formalismo de Holstein-Primakoff se complica al tratar con este tipo de ordenamientos por la necesidad de introducir dos operadores bosónicos diferentes. Tanto es así que no hemos llegado a realizar el cálculo de los términos cuadráticos, que son los que portan la información de la interacción entre magnones y los que resultan realmente interesantes. Encontramos el modelo:

$$H_1^{\text{AFM}} = \sum_k \varepsilon_k^- \alpha_k^\dagger \alpha_k + \sum_k \varepsilon_k^+ \beta_k^\dagger \beta_k + \sum_k (\varepsilon_k^+ + g\mu_B B) , \quad (9.4)$$

$$\varepsilon_k^\pm = \mp g\mu_B B + JSz \sqrt{\left(1 - \frac{2A}{Jz}\right)^2 - \gamma_k^2} . \quad (9.5)$$

Se trata de la relación de dispersión exacta para ondas de espín que no interactúan entre sí en sistemas antiferromagnéticos, con campo magnético externo y anisotropía. El cálculo con los términos cuadráticos puede encontrarse en la tesis de Flöss [19]. Para abordar los problemas con el cálculo de los términos cuadráticos en el caso antiferromagnético, surge la idea de desarrollar la misma teoría desde la perspectiva de Schwinger. La beca *JAE Intro* supuso un buen punto de partida para desarrollar esta idea.

Los **bosones de Schwinger** han cosechado un gran éxito en campos como la superconductividad, donde se ha publicado extensamente en relación a los mismos. Sin embargo, hay menos literatura relativa a modelos de Heisenberg tratados con este formalismo. Arovas y Auerbach discuten el caso antiferromagnético [18] en el grupo de simetrías $SU(N)$, mientras que a nosotros nos interesa el caso $N = 2$. El principal inconveniente que nos encontramos es que reescribir el término de anisotropía (3.4) en la representación de bosones de Schwinger complica enormemente el modelo. Recordemos que el formalismo de Schwinger destaca en la descripción de fases simétricas. Decidimos por ello desprendernos tanto del término de anisotropía como del término de Zeeman. Como consecuencia, no podremos describir fases ordenadas en una ni dos dimensiones (nos lo prohíbe el teorema de Mermin-Wagner). Para el caso ferromagnético, encontramos el conjunto autoconsistente de ecuaciones

$$\varepsilon_k = J_k S^* + \frac{1}{2M} \sum_{q \neq 0} J_{k+q} \coth \left(\frac{\beta(\varepsilon_k - S^* J_0)}{2} \right) , \quad (9.6)$$

$$S + \frac{1}{2} = S^* + \frac{1}{2M} \sum_{k \neq 0} \coth \left(\frac{\beta(\varepsilon_k - S^* J_0)}{2} \right) . \quad (9.7)$$

Se trata de un espectro de correlaciones de espín ferromagnéticas. En una y dos dimensiones, la integral de la cotangente hiperbólica diverge, de acuerdo con las predicciones teóricas. Por tanto, para valorar la validez de este modelo se plantea obtener la curva del parámetro de orden S^* como función de la temperatura para materiales tridimensionales sencillos. De esta gráfica sería posible deducir la temperatura crítica. Sin embargo, actualmente el programa desarrollado para este modelo solo es capaz de trabajar en el límite de la temperatura crítica y encontrarla de manera autoconsistente.

La principal ventaja del formalismo de Schwinger radica en que no es sustancialmente más complicado trabajar con el modelo antiferromagnético que con el ferromagnético, a diferencia de lo que nos ocurría en Holstein-Primakoff. Hemos desarrollado el siguiente conjunto autoconsistente de ecuaciones para el caso antiferromagnético:

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \left(J_k - \frac{1}{2}(J_{k+\pi} + J_{k-\pi}) \right) S^* + \frac{1}{2M} \sum_{q \neq 0} \frac{\Delta_k}{2E_k} \left(J_{k+q} - \frac{1}{2}(J_{k+q+\pi} + J_{k+q-\pi}) \right) \coth \left(\frac{\beta E_k}{2} \right), \quad (9.8)$$

$$S + \frac{1}{2} = S^* + \frac{1}{2M} \sum_{k \neq 0} \coth \left(\frac{\beta E_k}{2} \right), \quad (9.9)$$

$$E_k = \sqrt{\left(\frac{S^*(J_0 + J_{2\pi})}{2} \right)^2 - \Delta_k^2}. \quad (9.10)$$

Se trata de un espectro de correlaciones de espín antiferromagnéticas. En este caso, tan solo hemos desarrollado la teoría del modelo. El siguiente paso consiste, al igual que en el caso ferromagnético, en encontrar la curva del parámetro de orden como función de la temperatura.

Terminemos resumiendo el contenido de esta última parte en sus puntos más importantes.

- El modelo de Holstein-Primakoff destaca al describir fases de simetría rota. Por ello, es más adecuado en el contexto del magnetismo de materiales de baja dimensionalidad, pues facilita trabajar con el término de anisotropía. Este último es necesario como consecuencia del teorema de Mermin-Wagner. Hemos desarrollado una teoría de ondas de espín ferromagnéticas que permite calcular de manera autoconsistente la temperatura crítica. Asimismo, he realizado un programa que obtiene las curvas de imanación para materiales de una y dos dimensiones descritos por el modelo anterior.
- Pese a lo expuesto en el punto anterior, el formalismo de Holstein-Primakoff comienza a presentar serias dificultades al trabajar con ordenamientos antiferromagnéticos del modelo de Heisenberg. Decidimos pasar al marco de los bosones de Schwinger. Estos destacan en la explicación de fases simétricas, por lo que no resultan adecuados para tratar con términos de anisotropía. Hemos desarrollado sendos modelos de correlaciones de espín para los casos ferro y antiferro, sin incluir anisotropías ni campos externos. Asimismo, he comenzado un programa que idealmente calculará de manera autoconsistente la temperatura crítica de materiales tridimensionales descritos por estos modelos.
- El programa de los modelos de correlaciones de espines se encuentra aún en fases tempranas. El objetivo de cara a la finalización de la beca *JAE Intro* es lograr calcular las curvas del parámetro de orden como función de la temperatura en redes cúbicas. Será un punto de partida de cara a complicar el ordenamiento descrito por los bosones de Schwinger. El hamiltoniano rotado (8.2) es completamente general y puede llegar a describir fases helicoidales o constantes de intercambio tensoriales.

Referencias

1. Li, Z., Cao, T. y Louie, S. G. Two-dimensional ferromagnetism in few-layer van der Waals crystals: Renormalized spin-wave theory and calculations. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **463**, 28 (2018).
2. Mkhitarian, V. V. y Ke, L. Self-consistently renormalized spin-wave theory of layered ferromagnets on the honeycomb lattice. *Phys. Rev. B* **104**, 064435 (2021).
3. Burch, K. S., Mandrus, D. y Park, J.-G. Magnetism in two-dimensional van der Waals materials. *Nature* **563**, 47 (2018).
4. *Magnetic dipole moment of a revolving electron* <https://www.physicsvidyapith.com/2022/08/magnetic-dipole-moment-of-revolving-electron.html>. Visitado: 28-06-2023.
5. Iacovacci, V., Lucarini, G., Ricotti, L. y Menciassi, A. *Magnetic Field-Based Technologies for Lab-on-a-Chip Applications* (IntechOpen, Rijeka, 2016).
6. Nabok, D., Gulans, A., Pavone, P. y Maurer, B. *Spin-Polarized Calculations for bcc Fe* <http://exciting.wikidot.com/fluorine-spin-polarized-calculations>. Visitado: 20-04-2023.
7. Chen, Z., Datta, T. y Yao, D.-X. Spin transport in the Neel and collinear antiferromagnetic phase of the two dimensional spatial and spin anisotropic Heisenberg model on a square lattice. *The European Physical Journal B* **86** (2012).
8. Simon, S. H. *The Oxford solid state basics* (Oxford Univ. Press, Oxford, UK, 2013).
9. For Basic Science, I. *2-D magnetism reaches a new milestone* <https://phys.org/news/2019-01-d-magnetism-milestone.html>. Visitado: 28-06-2023.
10. Kang, W., Huang, Y., Zhang, X., Zhou, Y. y ZHAO, W. Skyrmion-Electronics: An Overview and Outlook. *Proceedings of the IEEE* **104**, 1 (ago. de 2016).
11. Rezende, S. M. en *Fundamentals of Magnonics* 31 (Springer International Publishing, Cham, 2020).
12. Will, S. A. *Interacting bosons and fermions in three-dimensional optical lattice potentials : from atom optics to quantum simulation* en (2011).
13. Yamada, S., Imamura, T. y Machida, M. en, 243-256 (2018).
14. Tarruell, L. y Sanchez-Palencia, L. Quantum simulation of the Hubbard model with ultracold fermions in optical lattices. *Comptes Rendus Physique* **19**, 365 (2018).
15. Auerbach, A. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag, 1994).
16. Holstein, T. y Primakoff, H. Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet. *Phys. Rev.* **58**, 1098 (1940).
17. Schwinger, J. *Quantum theory of angular momentum*, editado por Biedenharn, L y Van Dam, H (Academic, New York, 1965).
18. Auerbach, A. y Arovas, D. P. en *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory* (eds. Lacroix, C., Mendels, P. y Mila, F.) 365 (Springer Berlin Heidelberg, 2011).
19. Flöss, T. *Quantum fluctuations and magnon-magnon interactions in antiferromagnets* (Universiteit Utrecht, 2016).
20. Fetter, A. y Walecka, J. *Quantum Theory of Many-particle Systems* (Dover Publications, 2003).

21. Mila, F., Poilblanc, D. y Bruder, C. Spin dynamics in a frustrated magnet with short-range order. *Phys. Rev. B* **43**, 7891 (1991).
22. Samajdar, R., Chatterjee, S., Sachdev, S. y Scheurer, M. S. Thermal Hall effect in square-lattice spin liquids: A Schwinger boson mean-field study. *Phys. Rev. B* **99**, 165126 (2019).
23. Nakata, K., Simon, P. y Loss, D. Spin Currents and Magnon Dynamics in Insulating Magnets. *Journal of Physics D: Applied Physics* **50** (2016).