

UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO



FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

“Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez”

Estudio con DMRG del modelo de Ising unidimensional en un campo magnético con modulación espacial

T E S I S

Para obtener el grado de
Licenciado en Ciencias Físico Matemáticas

Presenta:

César Iván León Pimentel

Asesores de Tesis:

Dr. Yesenia Arredondo León

Dr. Oracio Navarro Chávez

Morelia, Michoacán

Octubre 2012.

Índice general

Introducción	5
1. Líquido de Fermi	9
1.1. Excitaciones del gas de Fermi	9
1.2. Cuasipartículas	11
1.3. Energía de las cuasipartículas	12
1.4. Interacción entre cuasipartículas (Teoría de Landau del líquido de Fermi)	13
1.5. Segunda cuantización del líquido de Fermi	15
1.6. Distribución de momentos	18
2. Líquido de Tomonaga-Luttinger	21
2.1. El líquido de Fermi en 1D	21
2.2. Aproximación de dispersión lineal	23
2.3. Descripción bosónica	25
2.4. Procesos de interacción en el líquido de Luttinger	26
3. Método de Bosonización	31
3.1. Modelo de Luttinger sin interacción	31
3.2. Operador de densidad	34
3.3. Representación bosónica	35
3.3.1. Eigenestados bosónicos	37
3.3.2. Bosonización del operador de campo	41
3.4. Modelo de Luttinger con interacción	47
3.4.1. Caso sin espín	47
3.4.2. Caso con espín	50
4. Grupo de renormalización con matrices de densidad (DMRG)	55
4.1. Fundamentos del método DMRG	56
4.2. El método DMRG	57
4.2.1. Matriz de densidad	58
4.2.2. Algoritmo de sistema infinito	61
4.2.3. Algoritmo de sistema finito	63
4.2.4. Cálculo de observables	65
4.2.5. Transformación de la función de onda	66

5. Resultados	69
5.1. Modelo de Ising	69
5.2. Factor de estructura de espín	73
5.3. Sistemas con campo magnético modulado	74
5.3.1. Cadena aleatoria	75
5.3.2. Cadena de Fibonacci	75
5.3.3. Cadena de Thue-Morse	76
5.4. Energía del estado fundamental	78
5.5. Estructuras magnéticas - Ferromagneto	81
5.5.1. Secuencia aleatoria	81
5.5.2. Secuencia de Fibonacci	84
5.5.3. Secuencia de Thue-Morse	86
5.6. Estructuras magnéticas - Antiferromagneto	88
5.6.1. Secuencia aleatoria	88
5.6.2. Secuencia de Fibonacci	90
5.6.3. Secuencia de Thue-Morse	92
Conclusiones	95
Apéndices	97
A. Método de Lanczos	99
B. Modelo de Heisenberg, bosonización y DMRG	103
B.1. Bosonización del modelo de Heisenberg	103
B.2. Funciones de correlación para el modelo de Heisenberg	107
Índice de figuras	111
Lista de símbolos	117
Bibliografía	119

Introducción

La materia se compone del agrupamiento de una cantidad muy grande de partículas, que interactúan en un nivel cuántico. El tipo de interacciones entre las partículas y su entorno determinan las propiedades macroscópicas de la misma, siendo éstas el resultado de un comportamiento colectivo microscópico. La física de la materia condensada tiene como uno de sus objetivos explicar estas propiedades, de tal suerte, que su entendimiento nos conduzca a aplicaciones tecnológicas que mejoren nuestras vidas. Por lo anterior, contar con una descripción adecuada del sistema que nos permita caracterizarlo es fundamental. La descripción de esta clase de sistemas en donde se tiene una gran cantidad de grados de libertad es una tarea no trivial, identificar el Hamiltoniano correspondiente es sólo el primer paso. La segunda dificultad reside en resolver la ecuación de Schrödinger con dicho Hamiltoniano. En el caso en que las interacciones entre partículas sean débiles y los efectos de la temperatura sean predominantes, se puede considerar la interacción como una perturbación para eliminar algunos grados de libertad, a la vez que se utilizan métodos numéricos es quizá la mejor opción. Este tipo de modelos son tratados en la teoría del *gas de Fermi*, en donde electrones interactúan débilmente de manera similar a un gas rarificado [1]. En esta teoría no se toma en cuenta la interacción electrón-electrón. L. Landau formuló la teoría del *líquido de Fermi* [2], en la cual se consideran las interacciones electrón-electrón al modular dicha interacción de manera adiabática, lo que permite que un electrón perturbe de manera lenta a los electrones en su vecindad formando *cuasipartículas* alrededor de la superficie de Fermi [3], de modo que dicho sistema se puede tratar como un gas de cuasipartículas. Durante mucho tiempo el líquido de Fermi constituyó un pilar en el entendimiento de sistemas metálicos con interacciones.

Los sistemas unidimensionales tuvieron la categoría de modelos puramente teóricos hasta principios de los 70's, época en la que se empezó a realizar en los laboratorios polímeros y compuestos orgánicos con características unidimensionales dándole nueva vida a los fenómenos de interacción a bajas dimensiones. Actualmente los avances en la tecnología y la ciencia de materiales han permitido la creación de sistemas metálicos unidimensionales tales como: nanotubos de carbono, alambres cuánticos y materiales en bulto con estructuras unidimensionales en su interior. En estos sistemas los electrones se conducen en una dirección preferencial, porque son sistemas anisotrópicos. Esta clase de sistemas no son bien representados por la teoría del líquido de Fermi. La física en sistema $1D$ es drásticamente distinta de la física en $2D$ y $3D$ de partículas con interacciones. En sistemas $1D$, que intrínsecamente son fuertemente correlacionados, la superficie de Fermi consiste de tan sólo dos puntos, haciendo imposible la formación

de cuasipartículas y dando paso a excitaciones colectivas. La teoría que permite una adecuada representación de esta clase de sistemas metálicos de baja dimensionalidad es conocida como el modelo del *líquido de Tomonaga-Luttinger* (TLL)¹ [4]. Con esta teoría se encuentra que las funciones de correlación, las cuales nos hablan del orden o de la falta de este, decaen como una ley de potencias de la distancia entre partículas. La baja dimensionalidad hace posible simplificar el modelo de interacción permitiendo obtener resultados haciendo uso de métodos específicos, tal es el caso del *método de bosonización* [5], el cual permite hacer la descripción de electrones con interacción en $1D$, mostrando que en lugar de cuasipartículas se obtienen excitaciones colectivas en forma de ondas de densidad de carga y espín.

Más allá de la nueva física introducida por el modelo de TLL, la necesidad de resultados teóricos comparables a los obtenidos por la vía experimental es apremiante. Soluciones analíticas como las dadas por el *Ansatz de Bethe* [6] son poco comunes. Por otro lado, la dificultad de aplicar el método de bosonización aun en sistemas sencillos es considerable por lo que se recurre al uso de métodos numéricos.

En esta tesis investigamos las propiedades de sistemas metálicos unidimensionales en el intervalo de bajas energías. En particular, se investiga el modelo de Ising con campo longitudinal modulado espacialmente. La estructura de la tesis es la siguiente: en el capítulo 1 se presenta la teoría del líquido de Fermi, mostrando los resultados más importantes de esta teoría y la física que este modelo introduce, a la vez que se muestra cómo esta teoría es inadecuada para la descripción de sistemas de baja dimensionalidad. En el capítulo 2 se estudia el modelo de TLL el cual permite describir los fenómenos del comportamiento de las interacciones entre electrones en una dimensión en el intervalo de bajas energías. Con lo anterior es posible realizar una simplificación del Hamiltoniano del sistema al realizar una linealización de la relación de dispersión del sistema, obteniendo así un Hamiltoniano de muchos cuerpos simple. En el capítulo 3 se desarrolla con detalle el método de bosonización. Este método permite la obtención analítica de las propiedades de sistemas de fermiones, al transformar los operadores de fermiones en operadores de bosones, lo que tiene como resultado que el Hamiltoniano fermiónico se transforme en un Hamiltoniano bosónico el cual es cuadrático en los operadores de bosones y por tanto puede resolverse de forma simple mediante una *transformación de Bogoliubov* [7]. En el capítulo 4 se estudia el *grupo de renormalización con matrices de densidad* (DMRG)² [8], método numérico eficiente con el cual se puede realizar el cálculo de las propiedades de esta clase de sistemas. En el método se realiza una decimación de los grados de libertad que resulten irrelevantes, reduciendo así el espacio de Hilbert del sistema, lo que permite el cálculo de propiedades tales como las funciones de correlación, en sistemas cada vez más grandes. El método tiene sus orígenes en el *grupo de renormalización* [9] y el *grupo de renormalización numérica* [10], diferenciándose de este último en que la manera de decimar el sistema no se basa en retener los estados con menor energía,

¹Por sus siglas en inglés, *Tomonaga-Luttinger liquid*.

²Por sus siglas en inglés, *Density matrix renormalization group*.

sino aquellos más probables del sistema. En el capítulo 5 se lleva a cabo un estudio, utilizando DMRG, del modelo de Ising para cadenas de espín que interaccionan con un campo magnético longitudinal externo, dicho campo es modulado de acuerdo a las secuencias aperiódicas aleatoria y de Thue-Morse y la secuencia cuasiperiódica de Fibonacci [11]. Estos sistemas son estudiados con la finalidad de investigar los efectos que tiene el ordenamiento del campo externo en la formación de dominios magnéticos en el sistema, para lo cual se calcula la energía del estado fundamental del sistema y el factor de estructura de espín estático.

Capítulo 1

Líquido de Fermi

El modelo del *gas de Fermi* [1], el cual describe un gas de electrones libres, da origen al modelo del *líquido de Fermi* desarrollado por L. Landau¹, este último describe el comportamiento a bajas temperaturas de electrones que interactúan en metales, por ejemplo, describe el ³He. La idea fundamental detrás de esta teoría es que, bajo ciertas condiciones, se pueden obtener los estados excitados de baja energía de un sistema fermiónico con interacciones a partir de un sistema ideal fermiónico sin interacciones, esto se logra al tratar la interacción entre partículas como un parámetro ajustable que parte de cero y que se incrementará de manera adiabática. Esta interacción da lugar a que una partícula perturbe sus alrededores, lo que hace que el sistema ya no se describa en términos de partículas “desnudas” sino por partículas “vestidas”; es decir, partículas que se mueven acompañadas por el resultado de la perturbación. A las partículas vestidas se les llama *cuasipartículas*, y se mueven como entidades independientes en el sistema. Lo anterior hace posible una descripción de sistemas con interacciones en términos de un gas ideal de cuasipartículas. En este capítulo revisaremos la teoría del líquido de Fermi la cual explica por qué algunas de las propiedades de un sistema de fermiones que interactúan son muy similares a las de los gases de Fermi, explicando a su vez las diferencias entre estos sistemas [2, 3].

1.1. Excitaciones del gas de Fermi

Consideremos un sistema de N fermiones de masa m confinados en una región de volumen V , que inicialmente no interactúan entre sí. Cada partícula se puede caracterizar por su momento k y su espín $\sigma = \pm 1/2$. En dicho sistema los estados (propios) se describen por la función de Fermi-Dirac la cual es igual a 1 para $k \leq k_F$, con k_F el momento de Fermi, y es igual a cero para $k > k_F$, como se muestra en la figura 1.1. De este modo un estado Ψ está dado por los números de ocupación $n_{k_1, \sigma_1}, n_{k_2, \sigma_2}, \dots$ como sigue:

$$\Psi = |n_{k_1, \sigma_1}, n_{k_2, \sigma_2}, \dots\rangle. \quad (1.1)$$

¹Existen varios tipos de líquidos de Fermi, en este trabajo nos restringimos a los llamados líquidos de Fermi neutrales, en los que sus propiedades no cambian drásticamente por efecto de las interacciones, sin importar que tan intensas sean.

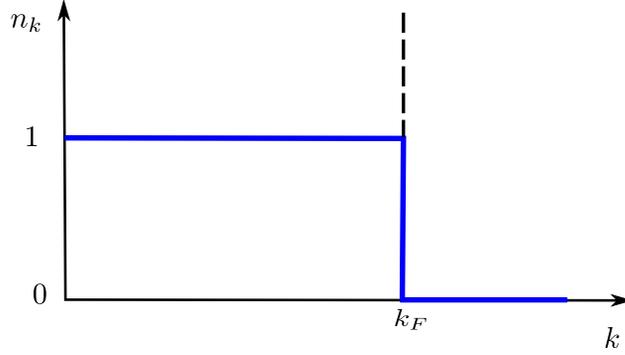


Figura 1.1: La función de distribución para el estado base de un sistema sin interacciones muestra una discontinuidad en el nivel de Fermi.

La energía cinética de una partícula es $\frac{k^2}{2m}$ por lo que la energía total del sistema es:

$$E = \sum_k n_k^0 \frac{k^2}{2m}, \quad (1.2)$$

donde n_k^0 es el número de ocupación del estado fundamental. En la ecuación (1.2) hemos descartado el índice de espín σ por simplicidad, pero puede ser recuperado en cualquier momento. La energía de un fermión en la superficie de Fermi (SF) es $\frac{k_F^2}{2m}$. Ahora bien, estamos interesados en los estados excitados de este sistema. Una excitación fundamental se refiere a tomar una partícula por debajo del nivel de Fermi y colocarla en un estado con $k' > k_F$, dejando al mismo tiempo un hueco con $k' < k_F$, por lo que a esta excitación se le conoce como “excitación de partícula-hueco”. Un estado excitado se puede caracterizar por la cantidad de partículas que abandonan el estado fundamental, es decir a partir de:

$$\delta n_k = n_k - n_k^0, \quad (1.3)$$

donde n_k es el número de ocupación del estado excitado. De este modo, para las partículas de momento $k' > k_F$ se tiene que $\delta n_k = \delta_{kk'}$, mientras que para los huecos de momento $k' < k_F$ tendremos que $\delta n_k = -\delta_{kk'}$. Finalmente, la energía de un sistema sin interacciones es:

$$E - E_0 = \sum_k \frac{k^2}{2m} \delta n_k. \quad (1.4)$$

Vamos a trabajar con el ensamble gran canónico (dejar que el sistema esté en contacto con un reservorio de partículas) y caracterizar al sistema por su potencial químico, que es igual a la energía de Fermi ϵ_F , y el número total de partículas N . La energía libre del sistema, F es

$$F = E - \epsilon_F N, \quad (1.5)$$

tomando en cuenta las excitaciones tendremos que:

$$F - F_0 = \sum_k \left(\frac{k^2}{2m} - \epsilon_F \right) \delta n_k \quad (1.6)$$

De acuerdo a la ecuación (1.6) la energía de una partícula de momento k para una excitación fuera de la SF es $\frac{k^2}{2m} - \epsilon_F$, mientras que para las excitaciones de hueco donde $\delta n_k = -1$ tenemos que la energía será $\epsilon_F - \frac{k^2}{2m}$. En general, la energía libre de una excitación elemental puede ser escrita como $|\frac{k^2}{2m} - \epsilon_F|$ resultado que es válido dentro y fuera de la SF.

1.2. Cuasipartículas

Hasta ahora hemos estudiado las excitaciones de un gas de Fermi ignorando las interacciones. Si consideramos las interacciones de un sistema de fermiones, la teoría del gas de Fermi deja de ser válida, ya que las interacciones entre partículas se vuelven significativas, originando (a temperaturas suficientemente bajas) una transición de fase de primer orden [12], dando como resultado una fase líquida². Consideremos el eigenestado de un sistema de fermiones sin interacción caracterizado por n_k^0 . La idea fundamental de la teoría del líquido de Fermi consiste en establecer una correspondencia uno a uno de los eigenestados del sistema ideal sin interacciones con los del sistema real con interacciones, lo cual se logra al hacer que la interacción entre partículas vaya aumentando de manera lenta, esperando que los eigenestados del sistema sin interacciones evolucionen hacia los eigenestados del sistema con interacciones. Si añadimos una partícula de momento k' a la distribución ideal n_k^0 , el momento total del sistema K se conserva mientras se incrementa la interacción entre partículas. La partícula adicional, de manera lenta, perturbará a las partículas en su vecindad. Si esto sucede de manera suficientemente lenta, el sistema entero de $N + 1$ partículas se mantendrá en equilibrio. Cuando la interacción haya alcanzado su intensidad final, encontraremos que la partícula se mueve junto con la distorsión causada por las interacciones entre la partícula y sus alrededores (véase figura 1.2). Se dice entonces que la partícula se “viste” de una nube de auto-energía. A esta excitación L. Landau la denominó “cuasipartícula”.

Una cuasipartícula es el resultado de la evolución adiabática del fermión sin interacciones en un entorno con interacciones, de manera que el estado excitado corresponde al estado fundamental de N partículas más una cuasipartícula. Para establecer la correspondencia entre los estados del sistema libre y los del sistema con interacciones debemos considerar cuidadosamente lo siguiente: primero, si el tiempo en el que la interacción es “encendida” es mayor que el tiempo de vida del estado que queremos generar, dicho proceso deja de ser reversible, debido a que el estado ha decaído mucho antes de que el valor físico de la interacción se haya alcanzado; segundo, si la interacción se enciende muy rápido, el proceso no será adiabático y no se generarán eigenestados del sistema con interacción. Como vemos, pueden surgir problemas debido a la incertidumbre asociada al tiempo de vida finito del estado bajo consideración.

²En general se observa una transición de fase del estado líquido al estado sólido al llegar a temperaturas muy bajas ($T \sim 0K$). Las únicas excepciones encontradas en la naturaleza son los isótopos de 3He y 4He [2], los cuales permanecen líquidos.

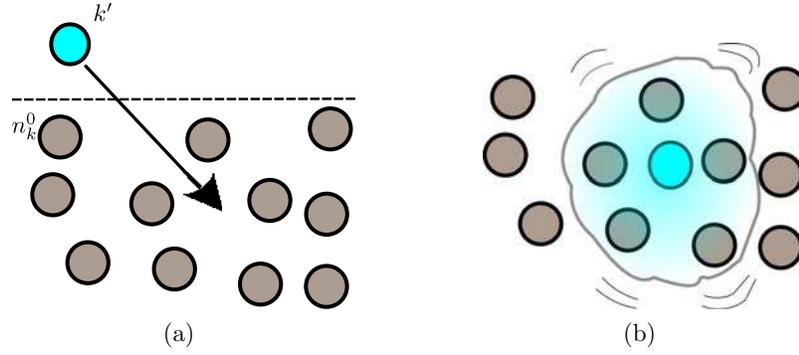


Figura 1.2: (a) Una partícula es añadida al sistema en su estado fundamental. (b) La partícula extra, de manera lenta, interacciona con las partículas en su vecindad formando una cuasipartícula.

1.3. Energía de las cuasipartículas

La energía del sistema con interacciones se puede expresar como un funcional $E[n_k]$. Dicho funcional tiene, en general, una forma bastante complicada que difícilmente se puede conocer de manera explícita (aun en el caso de conocerlo de modo explícito, debido a su complejidad, será difícil resolver el problema de forma analítica). Sin embargo podemos hacer una aproximación si nos restringimos a sistemas en los que n_k esté lo suficientemente cerca de n_k^0 . En este caso podemos hacer la siguiente expansión en una serie de Taylor:

$$E[n_k] = E_0 + \sum_k \epsilon_k \delta n_k + O(\delta n_k^2), \quad (1.7)$$

donde ϵ_k es la energía de una cuasipartícula aislada que corresponde a la derivada funcional de E evaluada en el estado fundamental:

$$\epsilon_k = \left(\frac{\delta E}{\delta n_k} \right)_{n_k = n_k^0}. \quad (1.8)$$

Entonces, si añadimos una cuasipartícula de momento k al sistema de N partículas, la energía del sistema con $N + 1$ partículas será:

$$E[n_k] = E_0 + \epsilon_k. \quad (1.9)$$

Como el estado fundamental para $N + 1$ partículas se obtiene al añadir una cuasipartícula en la SF, ϵ_F será simplemente el potencial químico:

$$\epsilon_F = \mu = \frac{\partial E_0}{\partial N}, \quad (1.10)$$

el gradiente de ϵ_k juega un papel de velocidad de grupo esto es

$$v_k = \nabla_k \epsilon_k. \quad (1.11)$$

Como ϵ_k depende solamente de $|k|$, entonces v_k es paralela a k , y podemos escribir

$$v_{kF} = \frac{k_F}{m^*}, \quad (1.12)$$

donde m^* es la llamada “masa efectiva” de la cuasipartícula. Este concepto resulta artificial para sistemas isotrópicos donde v_k varía en toda la SF. En estos sistemas es más conveniente introducir la *densidad de estados de cuasipartícula* teniendo energía $\epsilon_F + \epsilon$

$$\nu(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon_k - \epsilon_F - \epsilon). \quad (1.13)$$

A bajas temperaturas las propiedades físicas del sistema dependerán solamente de la densidad de estados en la SF, $\nu(0)$.

1.4. Interacción entre cuasipartículas (Teoría de Landau del líquido de Fermi)

En las secciones anteriores se ha mostrado la posibilidad de establecer una correspondencia entre un gas de Fermi de electrones libres y un líquido de Fermi con cuasipartículas. Más adelante veremos también que, en ambos casos, se tienen distribuciones semejantes de partículas (cuasipartículas) en el espacio de momentos. La principal diferencia, hasta ahora mostrada, está en el cambio en la energía y en la velocidad, diferencia que surge debido a la interacción de las cuasipartículas con el medio que las rodea. Además de estas características, las cuasipartículas presentan nuevas propiedades que no están presentes en su contraparte sin interacciones, las cuales discutiremos en lo que resta de este capítulo. Comencemos por analizar la energía libre de excitación a partir del estado fundamental, la cual esta dada por:

$$F - F_0 = E - E_0 - \epsilon_F(N - N_0), \quad (1.14)$$

donde N_0 es el número de partículas que se encuentran en el estado fundamental. En la expresión anterior no está presente la cantidad δn_k de manera explícita, pero se puede relacionar con el factor $(N - N_0)$ al notar que, el hecho de añadir una cuasipartícula al estado fundamental corresponde a añadir una partícula al sistema como un todo, entonces el estado fundamental más una cuasipartícula surge del estado ideal que contiene $N + 1$ partículas, por lo que podemos expresar $N - N_0$ de la forma

$$(N - N_0) = \sum_k \delta n_k. \quad (1.15)$$

Utilizando las expresiones (1.7) y (1.15) podemos reescribir (1.14) como

$$\begin{aligned} F - F_0 &= E - E_0 - \epsilon_F(N - N_0) \\ &= E - [E - \sum_k \epsilon_k \delta n_k - O(\delta n_k^2)] - \epsilon_F \sum_k \delta n_k \\ &= \sum_k (\epsilon_k - \epsilon_F) \delta n_k + O(\delta n_k^2). \end{aligned} \quad (1.16)$$

Las propiedades que estamos considerando involucran desplazamientos de la SF por una cantidad δ (véase figura 1.3). La diferencia $(\epsilon_k - \epsilon_F)$ es del orden de δ , entonces la ecuación (1.4) es del orden de δ^2 y puede ser tratada como una expansión a segundo orden en δ . Lo que nos permite escribir:

$$F - F_0 = \sum_k (\epsilon_k - \epsilon_F) \delta n_k + \frac{1}{2} \sum_{kk'} f_{kk'} \delta n_k \delta n_{k'} + O(\delta n_k^3). \quad (1.17)$$

La importancia de la expansión (1.17) está en el coeficiente $f_{kk'}$, ya que en él reside la fenomenología física de los líquidos de Fermi³. Dicho término es el resultado de las interacciones presentes entre cuasipartículas, las cuales modifican de manera sustancial las propiedades físicas del sistema. $f_{k,k'}$ corresponde a la segunda derivada funcional de la energía E

$$f_{k,k'} = \frac{\delta^2 E}{\delta n_k \delta n_{k'}}. \quad (1.18)$$

Cada factor de $f_{k,k'}$ debe de ser proporcional al inverso del volumen para mantener finita la energía en el límite termodinámico, lo cual está justificado físicamente ya que $f_{k,k'}$ es la energía de interacción de las cuasipartículas excitadas con momentos k y k' y cada una de estas se dispersa sobre todo el volumen V . De esta manera la probabilidad de que interactúen una con otra es del orden $\frac{a^3}{V}$, donde a es el intervalo de interacción. En lo que resta supondremos que $f_{kk'}$ es continua cuando k o k' atraviese la SF.

La ec. (1.17) es una forma de expresar los primeros términos de una expansión de $F - F_0$ en potencias del número relativo de cuasipartículas excitadas, lo cual podemos cuantificar a través de la cantidad α , que definiremos como:

$$\alpha \equiv \frac{\sum_k |\delta n_k|}{N}. \quad (1.19)$$

El coeficiente $f_{kk'}$ es invariante ante permutaciones de k y k' , además, en la ausencia de un campo magnético también será invariante bajo inversión temporal, esto es

$$f_{k\sigma,k'\sigma'} = f_{-k-\sigma,-k'-\sigma'}. \quad (1.20)$$

Si la SF es invariante bajo la reflexión $k \rightarrow -k$ entonces (1.20) se convierte en

$$f_{k\sigma,k'\sigma} = f_{k-\sigma,k'-\sigma'}. \quad (1.21)$$

De (1.20) y (1.21) se concluye que $f_{k\sigma,k'\sigma'}$ depende solamente de la orientación relativa entre espines, lo cual se restringe a los casos de espines paralelos o antiparalelos. Por lo tanto, podemos escribir:

$$f_{kk'}^{\uparrow\uparrow} = f_{kk'}^s + f_{kk'}^a, \quad (1.22)$$

$$f_{kk'}^{\uparrow\downarrow} = f_{kk'}^s - f_{kk'}^a. \quad (1.23)$$

³Este término es muchas veces referido como la *función de interacción de Landau*.

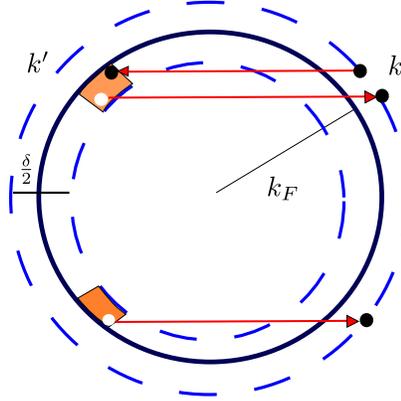


Figura 1.3: Posibles procesos de decaimiento de una partícula cerca de la SF. La cuasipartícula hace una transición de k a k' produciendo un par partícula-hueco. La conservación de energía y momento restringe los procesos a las áreas sombreadas.

En las ecuaciones (1.22) y (1.23) se incluyen la parte simétrica y asimétrica de la interacción. La importancia de estos parámetros reside en que la mayoría de las propiedades físicas del líquido de Fermi están dadas en términos de estos parámetros. Si el sistema es isotrópico, se tiene que para k y k' sobre la SF, $f_{kk'}^s$ y $f_{kk'}^a$ dependerán solamente del ángulo entre las direcciones de k y k' , por lo que se puede realizar la siguiente expansión en una serie de polinomios de Legendre:

$$f_{kk'}^{s(a)} = \sum_{l=0}^m f_l^{s(a)} P_l \cos \theta, \quad (1.24)$$

donde θ es el ángulo entre k y k' . A partir de lo anterior se pueden definir los coeficientes adimensionales

$$\nu(0) f_l^{s(a)} = \frac{V m^* k_F}{\pi^2 \hbar^3} f_l^{s(a)} \equiv F_l^{s(a)}, \quad (1.25)$$

que miden la intensidad de la interacción comparada con la energía cinética. A los coeficientes $F_l^{s(a)}$ se les conoce como parámetros de Landau. En la ecuación (1.25) V es el volumen, m^* es la masa efectiva de la cuasipartícula y k_F es el momento de Fermi.

1.5. Segunda cuantización del líquido de Fermi

En las secciones anteriores se ha discutido el proceso adiabático mediante el cual se tiene que encender la interacción entre las partículas de manera que nos conduzca a eigenestados del sistema con interacción, pero poco se ha dicho acerca del operador que lleva a cabo dicho proceso y cuál es su efecto sobre el estado fundamental del sistema $|\Psi_0\rangle$. En esta sección discutiremos este operador y sus características principales, entre las cuales encontramos una manera de discernir cuándo y cómo un

sistema fermiónico deja de ser un líquido de Fermi y se vuelve necesaria una nueva descripción para el sistema. De acuerdo a lo discutido en secciones previas, el proceso de encendido adiabático de las interacciones puede ser entendido como si se tratase de una transformación unitaria U de los estados originales del sistema de fermiones sin interacción. De este modo el estado fundamental sin cuasipartículas $|\Psi_0\rangle$ y el estado con una cuasipartícula $|\phi\rangle$ están dados por

$$|\phi\rangle = U|\Psi_0\rangle, \quad (1.26)$$

aquí $|\Psi_0\rangle$ es el estado fundamental del sistema de fermiones sin interacción (mar de Fermi), dado por:

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{|k| < k_F} c_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (1.27)$$

donde $|0\rangle$ es el estado sin partículas y $c_{k,\sigma}^\dagger$ es el operador de creación de fermiones sin interacción. Podemos generar un estado $|k\sigma\rangle$ al crear una partícula con momento y espín $k\sigma$ a partir de $|\Psi_0\rangle$

$$|k\sigma\rangle = c_{k,\sigma}^\dagger |\Psi_0\rangle. \quad (1.28)$$

De este modo un sistema de momento y espín $|k\sigma\rangle$ se transforma en un estado $|\widetilde{k\sigma}\rangle$ bajo el efecto de U :

$$|\widetilde{k\sigma}\rangle = U|k\sigma\rangle. \quad (1.29)$$

Por tanto U puede ser escrito como un operador exponencial ordenado en el tiempo [3]:

$$U = T \left[\exp \left(-i \int_{-\infty}^0 V(t) dt \right) \right], \quad (1.30)$$

donde V es la interacción, por lo que el estado $|\widetilde{k\sigma}\rangle$ es:

$$\begin{aligned} |\widetilde{k\sigma}\rangle &= U c_{k\sigma}^\dagger |\Psi_0\rangle \\ |\widetilde{k\sigma}\rangle &= U c_{k\sigma}^\dagger U^\dagger |\phi\rangle. \end{aligned} \quad (1.31)$$

De esta manera que el operador de creación de cuasipartículas $a_{k\sigma}^\dagger$ estará dado por:

$$a_{k\sigma}^\dagger = U c_{k\sigma}^\dagger U^\dagger. \quad (1.32)$$

Vemos que este operador es el operador de creación de partículas unitariamente evolucionando en el tiempo. Una condición importante para la existencia del líquido de Fermi es que en el límite termodinámico, el estado resultante deberá tener un traslape con el estado que se forma a partir del estado base más una partícula, i.e

$$Z_{k\sigma} = |\langle \widetilde{k\sigma} | c_{k\sigma}^\dagger | \phi \rangle|^2 > 0, \quad (1.33)$$

este traslape es conocido como *renormalización de la función de onda* y nos da un criterio para la estabilidad del líquido de Fermi. Mientras que $Z_{k\sigma}$ permanezca finito

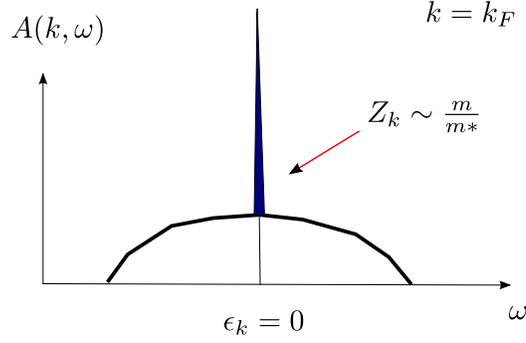


Figura 1.4: En un líquido de Fermi se forma un pico infinitamente puntiagudo en $k = k_F$, correspondiente a una cuasipartícula. El peso de este pico es $z_k \sim \frac{m}{m^*}$ donde m^* es la masa efectiva.

en la SF, nuestra descripción será correcta. Cerca del nivel de Fermi, el operador de creación $c_{k\sigma}^\dagger$ se puede expandir en una suma de estados que incluyen un número impar de estados de cuasipartículas y huecos de la siguiente forma [3]:

$$c_{k\sigma}^\dagger = \sqrt{Z_k} a_{k\sigma}^\dagger + \sum_{k_4+k_3=k_2+k} A(k_4\sigma_4, k_3\sigma_3, k_2\sigma_2, k\sigma) a_{k_4\sigma_4}^\dagger a_{k_3\sigma_3}^\dagger a_{k_2\sigma_2}^\dagger a_{k\sigma}^\dagger + \dots \quad (1.34)$$

Esta ecuación nos permite extraer resultados muy importantes que discutiremos más adelante.

Como consecuencia de la adición de una partícula al estado fundamental, se tiene que dicha partícula excita a un conjunto de estados $|\lambda\rangle$, con una distribución de energía dada por la función espectral [3]:

$$A(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G(k, \omega - i\delta) = |M_\lambda|^2 \delta(\omega - \epsilon_\lambda), \quad (1.35)$$

en donde

$$|M_\lambda|^2 = |\langle \lambda | c_{k\sigma}^\dagger | \phi \rangle|^2. \quad (1.36)$$

De acuerdo a la ec. (1.34), el líquido de Fermi muestra un polo en el nivel de Fermi. Dicho polo se debe a la cuasipartícula como se muestra en la figura 1.4.

La ecuación (1.35) puede separarse de la siguiente manera:

$$A(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G(k, \omega - i\delta) = Z_{k\sigma} \delta(\omega - \epsilon_k) + \sum_{\lambda \neq k\sigma} |M_\lambda|^2 \delta(\omega - \epsilon_\lambda), \quad (1.37)$$

en donde en el primer término de la derecha hemos separado la contribución debido al polo de la cuasipartícula de la contribución del entorno, la cual es una contribución suave.

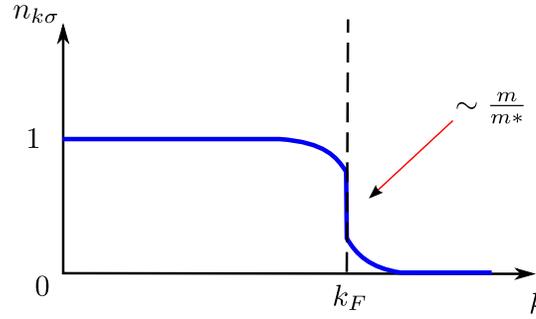


Figura 1.5: En el sistema de fermiones con interacciones se encuentra que la función de distribución sufre una discontinuidad en el nivel de Fermi, la cual está suavizada con respecto de su contraparte sin interacciones.

1.6. Distribución de momentos

Para el modelo sin interacción hemos visto el comportamiento de la función de distribución de momentos (véase figura 1.1) donde tenemos que $n_k = \theta(\epsilon_F - \epsilon_k)$. Ahora nos interesa ver cuánto de este comportamiento sobrevive a las interacciones, para lo cual escribimos la distribución de momentos para el modelo con interacción

$$\langle n_{k\sigma} \rangle = \langle \phi | c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} A(k, \omega) d\omega. \quad (1.38)$$

Si introducimos la ecuación (1.37) en (1.38) tenemos que:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^0 A(k, \omega) d\omega &= \int_{-\infty}^{\infty} Z_{k\sigma} \delta(\omega - \epsilon_k) d\omega + \dots \\ &= Z_{k\sigma}(-\epsilon_k) + \dots \end{aligned} \quad (1.39)$$

Vemos que $Z_{k\sigma}$ se desvanece si $\epsilon_k > 0$ y que da una contribución distinta de cero si $\epsilon_k < 0$, por lo que obtendremos para la función de distribución

$$\langle n_{k\sigma} \rangle = Z_{k\sigma}(-\epsilon_k) + \text{contribuciones de fondo}. \quad (1.40)$$

La ecuación (1.40) es un resultado muy importante de la teoría, ya que nos muestra que parte del salto en la función de distribución sobrevive a las interacciones, tal y como se muestra en la figura 1.5, dándonos una herramienta para distinguir entre sistemas fermiónicos con interacción y sin interacción.

El resultado (1.40) es el más importante del capítulo para nosotros, ya que lo que se quiere mostrar es el papel que juega la dimensionalidad en la descripción de sistemas fermiónicos. En sistemas de alta dimensionalidad ($D > 1$) las descripciones dadas tanto por el modelo del gas de Fermi como por el líquido de Fermi son adecuadas y continúan siendo un pilar en el entendimiento de metales con interacciones. Sin embargo, existen otros tipos de sistemas fermiónicos que no son descritos por estos modelos y que requieren de nuevos modelos para su descripción, tal es el caso del *líquido de Tomonaga-Luttinger* que estudiaremos en el siguiente capítulo. El problema

que surge en la teoría del líquido de Fermi para describir sistemas unidimensionales reside en los argumentos basados en la dimensión del espacio fase. En una dimensión las interacciones se vuelven mucho más significativas que en un gas ($2D$ o $3D$) de cuasipartículas. El mismo concepto de cuasipartícula del líquido de Fermi deja de ser válido porque las interacciones se vuelven colectivas, lo cual se refleja en el hecho de que la función de distribución es continua al atravesar el nivel de Fermi lo que se verá más adelante.

Capítulo 2

Líquido de Tomonaga-Luttinger

En el capítulo anterior se discutieron las propiedades fundamentales de los sistemas fermiónicos sin interacción así como el modelo para el estudio de estos sistemas, señalando la importancia del papel que juega la dimensionalidad en la descripción de dichos sistemas. En este capítulo abordaremos la tarea de describir sistemas de electrones restringidos a moverse en una dimensión. En este caso, el modelo del líquido de Fermi resulta ser una descripción insuficiente. En sistemas de baja dimensionalidad, las interacciones entre partículas no pueden enmascarse para crear cuasipartículas, como en el caso del líquido de Fermi. Cualquier electrón que intente propagarse en un sistema uni-dimensional interactuará invariablemente con sus vecinos. El movimiento individual de una partícula será imposible, lo cual dará origen a excitaciones colectivas e invalidará una descripción en términos del líquido de Fermi. El modelo del *líquido de Tomonaga-Luttinger*¹ describe el comportamiento de fermiones en una dimensión, lo cual se hace al traducir el problema de fermiones a un problema de bosones mediante el método de *bosonización*. Este método lo estudiaremos con detalle en el capítulo siguiente. En este capítulo veremos las generalidades de la teoría del líquido de Tomonaga-Luttinger, describiremos los posibles procesos de interacción que suceden en sistemas de fermiones en una dimensión y revisaremos los argumentos que hacen posible la descripción de sistemas de fermiones en términos de sistemas de bosones [14, 15, 4].

2.1. El líquido de Fermi en 1D

En forma cualitativa es relativamente sencillo entender que la dimensionalidad juega un papel en la física de los sistemas. En comparación con sistemas de dimensiones mayores a 1D, la falta de espacio (real y espacio fase) para los procesos de dispersión niegan la posibilidad de excitaciones de partícula casi libre [16]. Como se muestra en la figura 2.1, un electrón que trate de propagarse en 1D no tiene más opción que empujar a sus vecinos más cercanos, efecto que a su vez se extenderá a lo largo de toda la cadena, formando así excitaciones colectivas². Esta imagen es análoga

¹Duncan Haldane acuñó el término “líquido de Luttinger” aunque la teoría de fermiones en 1D se debe a J.M. Luttinger y a Sin-Itiro Tomonaga [13].

²Como se verá en el siguiente capítulo, estas excitaciones corresponden a ondas de densidad de carga y espín, las cuales se propagan con distintas velocidades.

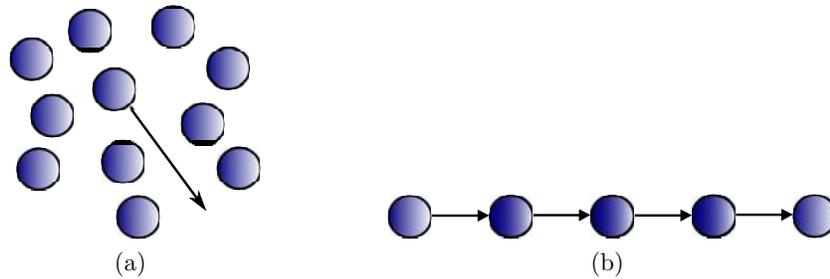


Figura 2.1: (a) En $D > 1$ una partícula es capaz de propagarse perturbando de manera leve a las partículas vecinas. (b) En $D = 1$ un electrón no puede propagarse sin influir en toda la cadena de electrones, es por esto que solo existen excitaciones colectivas.

a la de las excitaciones de baja energía de una red cristalina, es decir, a los fonones acústicos [17].

Para ser más rigurosos analicemos la función de renormalización dada por la ecuación (1.33). Imaginemos que colocamos un electrón extra en el estado fundamental de N electrones fuertemente correlacionados. La función de renormalización de onda cuantifica el traslape entre el estado del sistema inmediatamente después de la inyección del electrón adicional y del estado fundamental del sistema. Como el nuevo electrón no tiene las correlaciones apropiadas con los electrones que existían previamente, tendremos que el nuevo sistema de $N + 1$ partículas es básicamente ortogonal al sistema de N partículas, esto debido a que en el límite termodinámico Z se anula [14]. El desvanecimiento de Z_k en el nivel de Fermi tiene como consecuencia que la discontinuidad de la función de distribución desaparezca, dejando en su lugar una función suave al cruzar el nivel de Fermi (véase figura 2.2), lo cual es una de las características más importantes de un comportamiento fuera del régimen del líquido de Fermi.

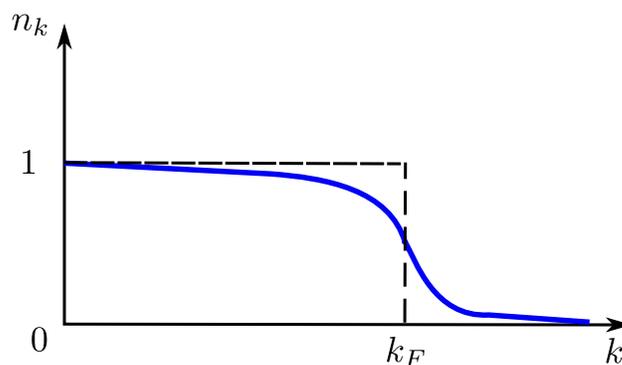


Figura 2.2: La falta de una discontinuidad en la función de distribución para el líquido de Tomonaga-Luttinger denota la falta de cuasipartículas en el nivel de Fermi invalidando la descripción dada por el líquido de Fermi. La línea punteada muestra la discontinuidad en el caso de un gas de Fermi.

2.2. Aproximación de dispersión lineal

Consideremos el Hamiltoniano de muchas partículas para un sistema de fermiones sin interacción en una dimensión. Dicho Hamiltoniano está dado por:

$$\begin{aligned} H &= \int dx \psi^\dagger(x) \left[\frac{-\hbar^2 \partial_x^2}{2m} \right] \psi(x) \\ &= \sum_{k,\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \end{aligned} \quad (2.1)$$

la segunda línea de la ecuación (2.1) está dada en el lenguaje de segunda cuantización, donde $c_{k,\sigma}^\dagger$ y $c_{k,\sigma}$ son los operadores de creación y aniquilación respectivamente de una partícula de momento k y espín σ . El factor $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ es la relación de dispersión, la cual es cuadrática en el número de onda k (véase figura 2.3). Como estamos confinados a una dimensión, el vector de onda k es solo un número que puede ser positivo o negativo. Por el momento consideraremos a las partículas como fermiones sin espín y retomaremos el caso con espín en la siguiente sección.

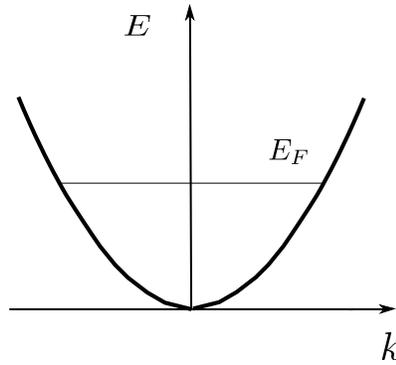


Figura 2.3: Relación de dispersión cuadrática para un sistema de electrones libres. En la figura se muestra el nivel de Fermi el cual separa el nivel más alto ocupado del nivel más bajo desocupado.

Si nos restringimos a las propiedades del sistema en el intervalo de bajas energías, donde las excitaciones ocurren únicamente en una vecindad muy cercana al nivel de Fermi, un vistazo a la figura 2.3 hace plausible la posibilidad de realizar una aproximación en el nivel de Fermi por dos líneas rectas tangentes a la parábola. Por otro lado, como se muestra en la figura 2.4, la relación de dispersión lineal describe aproximadamente los estados del sistema cerca de la SF. Sin embargo es necesario ser cuidadoso acerca de qué tan lejos podemos considerar esta aproximación lineal como válida ya que, en principio, incluye estados no físicos de energía negativa. De manera histórica, es importante mencionar que Tomonaga introdujo desde el principio un corte en las bandas del momento (véase figura 2.5a) para evitar los estados de energía negativa. Asimismo introdujo el concepto de “propagadores derechos” y “propagadores izquierdos” (“right” and “left” movers), los cuales hacen referencia a

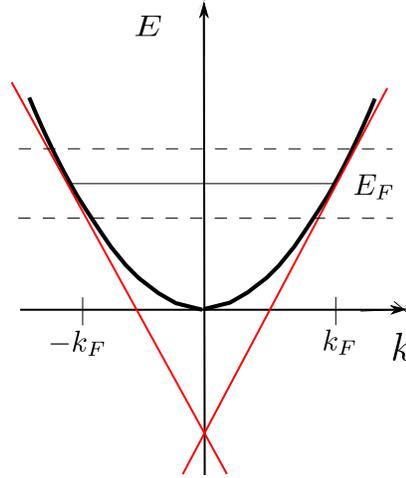


Figura 2.4: El modelo de Tomonaga-Luttinger se obtiene al linealizar la relación de dispersión en una región cercana al nivel de Fermi. Dicha región corresponde a las excitaciones de baja energía delimitada por las líneas punteadas.

la dirección de propagación de los electrones, introduciendo de este modo las “ramas” derecha e izquierda de movimiento. Luttinger después extendió la dispersión hasta $-\infty$ (véase figura 2.5b), lo cual, como ya se mencionó introduce una infinidad de estados extras que han de ser removidos en algún punto en los cálculos para evitar el conteo de cantidades infinitas. La manera de solucionar el problema de los estados de energía negativa arbitrariamente grande es haciendo uso de un artificio que fue usado por primera vez por Dirac, el cual consiste en imaginar que el “estado vacío” en realidad consiste de una cantidad infinita de fermiones que se encuentran por debajo del nivel de Fermi (mar de Fermi), lo cual no representa ningún problema ya que nos interesan las excitaciones del vacío y estas excitaciones solo involucran una cantidad finita de partículas. De acuerdo a esta descripción en términos de electrones en las ramas derecha e izquierda, y haciendo uso de los operadores de creación y aniquilación fermiónicos, se puede escribir el operador de fermiones propagándose a la derecha $c_{+,k}^\dagger$ y el de electrones propagándose a la izquierda $c_{-,k}^\dagger$ como sigue:

$$\begin{aligned} c_{+,k}^\dagger &= c_k^\dagger, & \text{si } k \geq 0, \\ c_{-,k}^\dagger &= c_k^\dagger, & \text{si } k < 0. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Si introducimos los operadores (2.2) en el Hamiltoniano de la dispersión lineal (2.1), obtendremos (como veremos con detalle en el siguiente capítulo)

$$H_0 = \sum_{r,k} v_F(rk - k_F) : c_{r,k}^\dagger c_{r,k} :, \quad (2.3)$$

en donde el subíndice $r = \pm$ indica a que rama pertenece el electrón: $+$ para la rama derecha y $-$ para la rama izquierda.

Nótese que se ha empleado el ordenamiento normal de operadores $:\cdots:$, el cual se define como

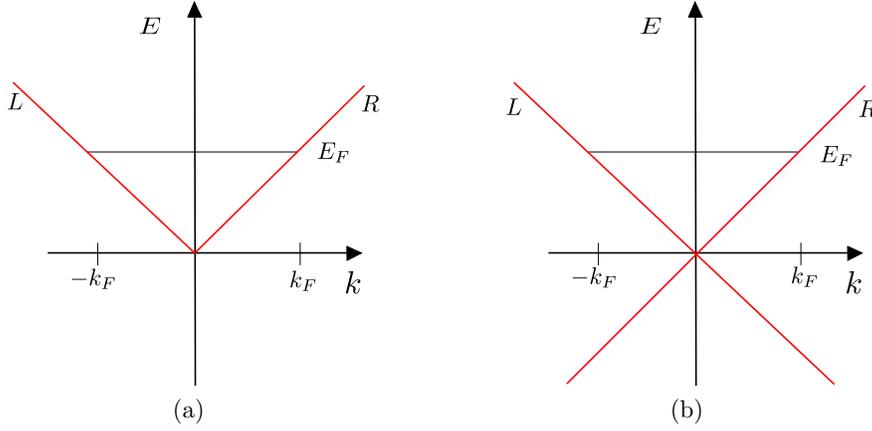


Figura 2.5: (a) En el modelo de Tomonaga se introduce un corte en en las bandas de momento. (b) En el modelo de Luttinger se extiende la relación de dispersión hasta $-\infty$ para facilitar los cálculos, los estados no físicos con energías negativas son removidos al hacer uso de operadores ordenados normalmente.

$$\begin{aligned}
 : c_{r,k}^\dagger c_{r,k} : &= c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \langle \psi_0 | c_{r,k}^\dagger c_{r,k} | \psi_0 \rangle \\
 &= c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk),
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

y que se introduce con el fin de extraer el promedio artificial generado por el vacío, al momento de tomar la dispersión lineal del modelo de Luttinger.

2.3. Descripción bosónica

En las bases de la teoría del líquido de Luttinger se encuentra el uso de operadores bosónicos para la solución de un problema físico de naturaleza fermiónica. Esta idea se fundamenta en la equivalencia entre los niveles de energía de un sistema fermiónico con los de un sistema bosónico a bajas energías, permitiendo que el Hamiltoniano fermiónico (2.3) pueda ser reescrito en términos de una base bosónica. Para formalizar esta idea empecemos por definir el operador de densidad en el sistema fermiónico para la rama r de la siguiente manera,

$$\hat{\rho}_r(x) \equiv: \hat{\psi}_r^\dagger(x) \hat{\psi}_r(x) :, \tag{2.5}$$

en donde se ha introducido el operador de campo

$$\hat{\psi}_r(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} c_{r,k}. \tag{2.6}$$

A partir de este momento, omitiremos el sombrero circunflejo en los operadores por simplicidad. Podemos tomar la transformada de Fourier para el operador de densidad

$$\begin{aligned} \rho_{r,q} &= \int dx e^{-iqx} \rho_r(x) \\ &= \begin{cases} \sum_k c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k} & \text{si } q \neq 0 \\ \sum_k (c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk)) & \text{si } q = 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (2.7)$$

para el cual se cumple que

$$[\rho_{r,q}, \rho_{r',-q'}] = -\delta_{r,r'} \delta_{q,q'} \frac{rLq}{2\pi}. \quad (2.8)$$

Del resultado anterior se observa que el operador de densidad obedece las reglas de conmutación de operadores bosónicos de creación (a_q^\dagger) y aniquilación (a_q), salvo por una constante, dado que los operadores bosónicos tienen el siguiente conmutador

$$[a_q, a_{q'}^\dagger] = \delta_{q,q'}. \quad (2.9)$$

El conmutador (2.8) es un indicio de la existencia de grados de libertad bosónicos, los cuales están relacionados con las fluctuaciones de densidad en el sistema. La equivalencia entre la descripción fermiónica y bosónica del sistema se puede observar al considerar los espectros de energías de sistemas bosónicos y fermiónicos. Dichos espectros son discretos con niveles energéticos equidistantes por una cantidad Δ . Definamos entonces $N_F(E)$ y $N_B(E)$ como el número de estados con energía E para los sistemas fermiónicos y bosónicos, respectivamente. De este modo, un estado con energía $\Delta = 1$ puede ser tratado como un fermión justo por encima de la SF o bien como un bosón en el nivel $\Delta = 1$; entonces para este caso tendremos que $N_F = N_B = 1$ (véase figura 2.6). Si consideramos los estados fermiónicos con energía $\Delta = 2$ tendremos dos posibles representaciones fermiónicas: ya sea un fermión con 2 niveles energéticos por encima de la SF, o un fermión que ha pasado de estar dos niveles por debajo de la SF a un nivel por encima de SF. Este mismo sistema se puede expresar como un bosón en $\Delta = 2$ o bien dos bosones en el nivel $\Delta = 1$. En cualquiera de estos casos se tiene que $N_F = N_B = 2$. Este análisis se puede extender para niveles energéticos de bajas energías. Esta equivalencia se muestra en la figura 2.6.

2.4. Procesos de interacción en el líquido de Luttinger

Como hemos mencionado antes, la baja dimensionalidad del sistema juega un papel crucial en las interacciones. En una dimensión, el espacio fase que se encuentra disponible para las interacciones está muy limitado y las posibles interacciones en 1D se pueden clasificar en base a su transferencia de momento. Esto lo haremos de acuerdo a la clasificación desarrollada por Emery, la cual se conoce como *g-ology*

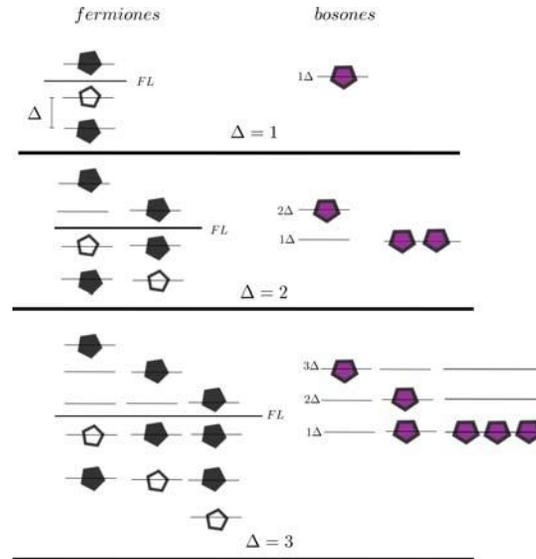


Figura 2.6: Esquema de la equivalencia energética entre sistemas de fermiones y de bosones. Los polígonos rellenos indican un estado ocupado mientras que los polígonos vacíos indican un estado desocupado.

[18] o “g-ología”, en donde se identifican un conjunto de cuatro constantes g_1, g_2, g_3 y g_4 correspondientes a las cuatro posibles formas de interacción que describimos a continuación³:

- Dispersión hacia adelante en diferentes ramas. Cuando una partícula de la rama izquierda se acopla a una de la rama derecha, pero manteniéndose en su rama de origen. En este proceso tiene una transferencia de momento $q \sim 0$ y se identifica con la constante g_2 (véase figura 2.7 (a)).
- Dispersión hacia adelante en la misma rama. Este ocurre cuando las dos partículas acopladas están en la misma rama. Este proceso tiene una constante de acoplamiento g_4 y una transferencia de momento de $q \sim 0$ (véase figura 2.7 (b)).
- Dispersión hacia atrás. Cuando los dos electrones cambian su dirección de movimiento es decir, cambian de ramas. Este proceso corresponde a la constante de acoplamiento g_1 e involucra una transferencia de momento de $q \sim 2k_F$ (véase figura 2.8 a)).
- Proceso de Umklapp. Cuando dos partículas en la misma rama cambian su dirección de movimiento. Corresponde a la constante g_3 con una transferencia de momento $q \sim 4k_F$ (véase figura 2.8 b)). Este proceso se da solamente en sistemas a medio llenado.

³Las constantes de acoplamiento se ordenan de acuerdo a la transferencia de momento involucrado.

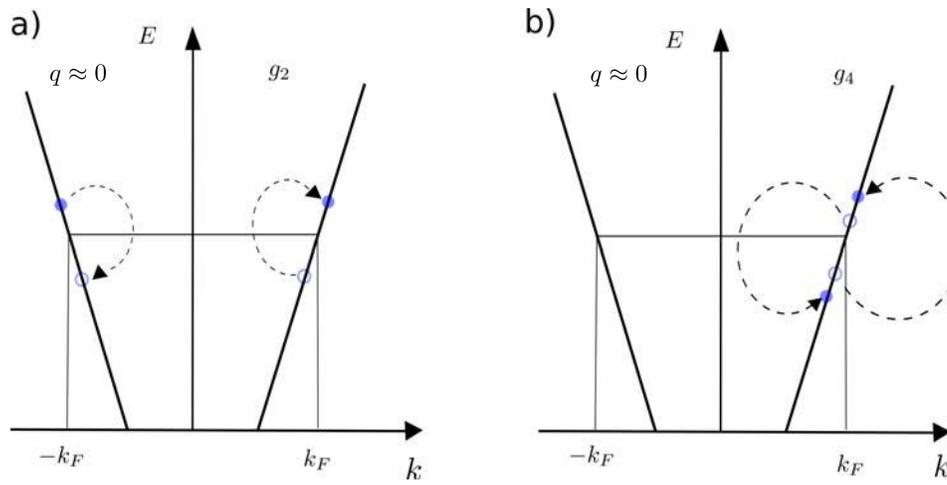


Figura 2.7: (a) Proceso de dispersión frontal en diferentes ramas. Este proceso se identifica con la constante de acoplamiento g_2 . (b) Dispersión hacia adelante en la misma rama con constante de acoplamiento g_4 .

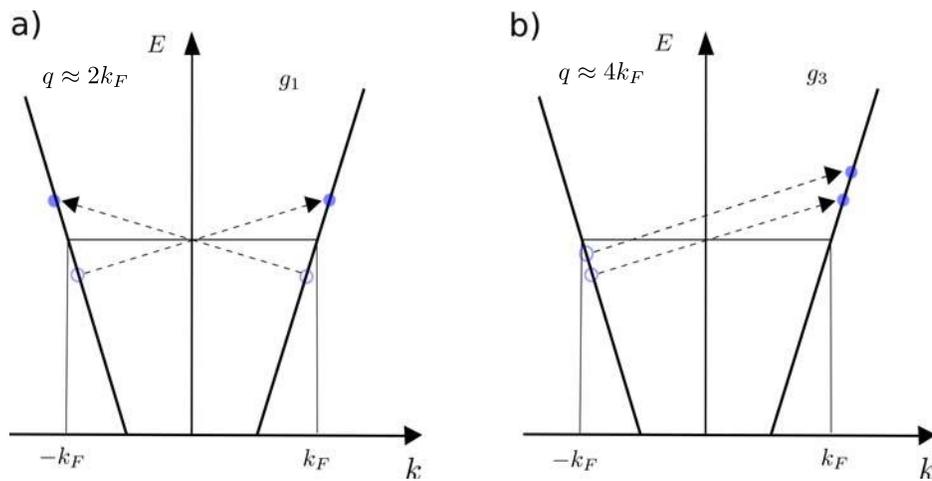


Figura 2.8: a) Dispersión hacia atrás con constante de acoplamiento g_1 . b) Proceso de Umklapp identificado con la constante de acoplamiento g_3 .

Hasta este punto no se ha tomado en cuenta el índice de espín, al introducirlo se tiene que las constantes de acoplamiento pueden adquirir dos valores que corresponden a espines paralelos y espines antiparalelos los cuales se denotan como $g_{i\parallel}$ y $g_{i\perp}$ respectivamente, con $i = 1, \dots, 4$. Para partículas sin espín tanto g_1 como g_2 son procesos equivalentes, una dispersión hacia adelante es en efecto idéntica a un proceso de dispersión hacia atrás de manera efectiva. En el caso con espín, si los espines son paralelos, se tendrá que $g_{1\parallel} = g_{2\parallel}$, equivalencia que no se cumple para el caso de espines antiparalelos $g_{1\perp} \neq g_{2\perp}$. Con lo anterior podemos definir para el caso de electrones con espín combinaciones de las constantes de acoplamiento que tomen en cuenta la carga y el espín.

$$\begin{aligned} g_{ic} &= \frac{1}{2}(g_{i\parallel} + g_{i\perp}), \\ g_{is} &= \frac{1}{2}(g_{i\parallel} - g_{i\perp}), \end{aligned} \quad (2.10)$$

donde la c denota la carga y la s el espín. En el modelo de Tomonaga-Luttinger estamos interesados solamente en los procesos de bajas energías, i.e., en eventos de una baja transferencia de momento por lo que el proceso con g_3 queda descartado tomando solamente en cuenta los procesos g_1 , g_2 y g_4 (con o sin espín). De este modo tendremos que la parte del Hamiltoniano del modelo con interacción y sin espín depende solamente de la posición:

$$H_{int} = \sum_r \int dx dx' \left[\rho_r(x) g_2(x-x') \rho_{-r}(x') + \rho_r(x) g_4(x-x') \rho_r(x') \right]. \quad (2.11)$$

En el primer término del Hamiltoniano (2.11) se toman en cuenta las interacciones entre ramas distintas, mientras que en el segundo término se consideran las interacciones en la misma rama. Ahora bien, podemos tomar la expansión de Fourier de las interacciones

$$g_{2,4}(x) = \frac{\pi}{L} \sum_q e^{iqx} g_{2,4}(q). \quad (2.12)$$

Suponiendo que $g_{2,4}(q) = g_{2,4}(-q)$, lo que es equivalente a que $g_{2,4}(x) = g_{2,4}(-x)$, y después de realizar la integración se obtiene el Hamiltoniano en el espacio de momentos:

$$H_{int} = \frac{\pi}{L} \sum_{r,q} \left[g_2(q) \rho_r(q) \rho_{-r}(-q) + g_4(q) \rho_r(q) \rho_r(-q) \right]. \quad (2.13)$$

El Hamiltoniano (2.13) tiene términos cuárticos de operadores fermiónicos. Nuestra tarea, en el siguiente capítulo, será llevar este Hamiltoniano a una representación bosónica, en donde este modelo es cuadrático en los operadores bosónicos, haciendo fácil su diagonalización por medio de una transformación de Bogoliubov [7].

Capítulo 3

Método de Bosonización

En el capítulo anterior se presentó el modelo de Tomonaga-Luttinger y se plantearon los primeros argumentos que permiten una representación del Hamiltoniano en un lenguaje bosónico cuando consideramos las propiedades del sistema en el intervalo de bajas energías. En este capítulo, nos dedicaremos a transformar los operadores involucrados en la solución del Hamiltoniano en términos de una nueva base bosónica, llevando a cabo de este modo la bosonización de los sistemas libre y con interacciones.

3.1. Modelo de Luttinger sin interacción

Recordemos que el Hamiltoniano para un sistema libre es:

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon(k) c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}. \quad (3.1)$$

Si nos concentramos en el intervalo de energías cercano a E_F , y aproximamos la relación de dispersión en esta región con una función lineal, podemos escribir los operadores fermiónicos para electrones que se propagan a la derecha y a la izquierda (ver ecuación 2.2) como

$$c_k = \sum_r \theta(rk) c_{r,k}, \quad (3.2)$$

en donde $r = \pm$ y $\theta(x)$ es la función escalón

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0. \end{cases} \quad (3.3)$$

Los operadores en la ecuación (3.1) satisfacen la relación de anticonmutación para fermiones,

$$\{c_{r,k}, c_{r',k'}^\dagger\} = \delta_{rr'} \delta_{kk'}. \quad (3.4)$$

El operador de campo de la ecuación (2.6) en términos de los nuevos operadores de partícula se transforma en:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{r,k} \theta(rk) e^{ikx} c_{r,k}. \quad (3.5)$$

Para un sistema de electrones libres en una dimensión, el Hamiltoniano consta únicamente de la parte cinética

$$H_0 = -\frac{1}{2m} \int dx \psi^\dagger(x) \partial_x^2 \psi(x), \quad (3.6)$$

en el cual sustituimos ahora la expresión de los operadores de campo $\psi(x)$ de la ecuación (3.5)

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2m} \int dx \left(\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{r,k} \theta(rk) e^{-ikx} c_{r,k}^\dagger \right) \left(\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{r,k} \theta(rk) k^2 e^{ikx} c_{r,k} \right) \\ &= \frac{1}{2m} \int dx \frac{1}{L} \sum_{r,k} \theta(rk) k^2 c_{r,k}^\dagger c_{r,k} \\ &= \frac{1}{2m} \sum_{r,k} \theta(rk) k^2 c_{r,k}^\dagger c_{r,k}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Si insertamos y sustraemos un factor de k_F en la ecuación anterior podemos reescribirla como

$$H_0 = \frac{1}{2m} \sum_{r,k} \theta(rk) (rk - k_F + k_F)^2 c_{r,k}^\dagger c_{r,k}, \quad (3.8)$$

en donde también se ha utilizado que $r^2 = 1$. Desarrollemos el término cuadrático en la ec (3.8)

$$\begin{aligned} (rk - k_F + k_F)^2 &= (rk - k_F)^2 + 2(rk - k_F)k_F + k_F^2 \\ &= k_F^2 \left(\frac{rk - k_F}{k_F} \right)^2 + 2k_F^2 \left(\frac{rk - k_F}{k_F} \right) + k_F^2 \\ &= k_F^2 \left[\left(\frac{rk - k_F}{k_F} \right)^2 + \left(2 \frac{rk - k_F}{k_F} + 1 \right) \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

sustituyendo (3.9) en (3.8) obtenemos

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2m} k_F^2 \left\{ \sum_{r,k} \theta(rk) \left(\frac{rk - k_F}{k_F} \right)^2 c_{r,k}^\dagger c_{r,k} \right. \\ &\quad + 2 \sum_{r,k} \theta(rk) \left(\frac{rk - k_F}{k_F} \right) c_{r,k}^\dagger c_{r,k} \\ &\quad \left. + \sum_{r,k} \theta(rk) c_{r,k}^\dagger c_{r,k} \right\}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Como estamos interesados en el comportamiento de este Hamiltoniano en el contexto de bajas energías, podemos hacer una aproximación de la ecuación (3.10). A bajas energías solamente se permiten excitaciones muy cercanas a la SF, entonces el término

$(rk - k_F/k_F)^2$ es un número pequeño que podemos despreciar, de modo que se obtiene la siguiente aproximación

$$\begin{aligned} H_0 &\approx \frac{k_F^2}{2m} \left\{ 2 \sum_{r,k} \theta(rk) \left(\frac{rk - k_F}{k_F} \right) c_{r,k}^\dagger c_{r,k} + \sum_{r,k} \theta(rk) c_{r,k}^\dagger c_{r,k} \right\} \\ &= v_F \sum_{r,k} \theta(rk) (rk - k_F) c_{r,k}^\dagger c_{r,k} + \frac{1}{2} v_F k_F \sum_{r,k} \theta(rk) c_{r,k}^\dagger c_{r,k}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

En la última línea de la ecuación (3.11) hemos usado que $k_F = v_F m$. Ahora queremos medir la energía con respecto al estado fundamental, el cual está conformado por las dos ramas, derecha e izquierda, ocupadas hasta el nivel de Fermi. Utilizaremos la dispersión lineal extendida hasta $\pm\infty$ debido a que esta no tiene efecto a bajas energías y porque será necesario cuando se construya la base bosónica. Si restamos la energía del estado fundamental, obtenemos

$$\begin{aligned} H_0 - E_0 &\approx v_F \sum_{r,k} \theta(rk) (rk - k_F) [c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk)] \\ &\quad + \frac{1}{2} v_F k_F \sum_{r,k} \theta(rk) [c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk)]. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Si tomamos en cuenta que únicamente los términos con $rk > 0$ van a dar una contribución distinta de cero, entonces podemos escribir la ecuación (3.12) como

$$\begin{aligned} H_0 - E_0 &\approx v_F \sum_{r,k} (rk - k_F) [c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk)] \\ &\quad + \frac{1}{2} v_F k_F \sum_{r,k} [c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk)]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Nos gustaría hacer la siguiente observación. En las ecuaciones (3.6) a (3.13) E_0 , se refiere al operador de energía del sistema con una relación de dispersión cuadrática, el cual se va a aproximar finalmente por E_0 de la ecuación (3.12) al introducir una relación de dispersión lineal. El último término al lado derecho de la ecuación (3.13) involucra la diferencia entre el número total de fermiones del estado vacío, que corresponde al nivel de Fermi. Si suponemos que este número es constante, el Hamiltoniano libre del modelo de Luttinger estará dado finalmente por la expresión:

$$\begin{aligned} H_0 &= v_F \sum_{r,k} (rk - k_F) [c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk)] \\ &= \sum_{r,k} v_F (rk - k_F) : c_{r,k}^\dagger c_{r,k} : . \end{aligned} \quad (3.14)$$

3.2. Operador de densidad

Vamos a probar la ecuación (2.8) para el conmutador del operador de densidad. Recordemos que

$$\rho_{r,q} = \rho_r(q) = \sum_k c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k}, \quad (3.15)$$

con el cual calcularemos el siguiente conmutador

$$[\rho_{r,q}, \rho_{r',-q'}] = \sum_{k,k'} (c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k} c_{r',k'-q'}^\dagger c_{r',k'} - c_{r',k'-q'}^\dagger c_{r',k'} c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k}). \quad (3.16)$$

Para reducir esta expresión hagamos uso de las relaciones de anticonmutación que obedecen los operadores fermiónicos de la ecuación (3.4)

$$\{c_{r,k}, c_{r',k'}^\dagger\} = \delta_{rr'} \delta_{kk'}, \quad (3.17)$$

por lo que podemos sustituir en la expresión (3.16) las siguientes igualdades

$$\begin{aligned} c_{r,k} c_{r',k'-q'}^\dagger &= \delta_{rr'} \delta_{kk'-q'} - c_{r',k'-q'}^\dagger c_{r,k}, \\ c_{r',k'} c_{r,k+q}^\dagger &= \delta_{rr'} \delta_{k'k+q} - c_{r,k+q}^\dagger c_{r',k'}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

con lo cual se obtiene que

$$\begin{aligned} [\rho_{r,q}, \rho_{r',-q'}] &= \sum_{kk'} (c_{r,k+q}^\dagger (\delta_{rr'} \delta_{kk'-q'} - c_{r',k'-q'}^\dagger c_{r,k}) c_{r',k'} \\ &\quad - c_{r',k'-q'}^\dagger (\delta_{rr'} \delta_{k',k+q} - c_{r,k+q}^\dagger c_{r',k'}) c_{r,k}) \\ &= \sum_{kk'} (c_{r,k+q}^\dagger \delta_{rr'} \delta_{kk'-q'} c_{r',k'} - c_{r',k'-q'}^\dagger \delta_{rr'} \delta_{k',k+q} c_{r,k}) + \\ &\quad \sum_{kk'} (c_{r',k'-q'}^\dagger c_{r,k+q}^\dagger c_{r',k'} c_{r,k} - c_{r,k+q}^\dagger c_{r',k'-q'}^\dagger c_{r,k} c_{r',k'}). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Como la segunda suma de la ecuación (3.19) se elimina, se tiene que

$$[\rho_{r,q}, \rho_{r',-q'}] = \sum_{kk'} (\delta_{rr'} \delta_{kk'-q'} c_{r,k+q}^\dagger c_{r',k'} - \delta_{rr'} \delta_{k',k+q} c_{r',k'-q'}^\dagger c_{r,k}). \quad (3.20)$$

Después de realizar la suma sobre el índice k' se llega a

$$[\rho_{r,q}, \rho_{r',-q'}] = \delta_{rr'} \sum_k (c_{r,k+q}^\dagger c_{r',k+q'} - c_{r',k+q-q'}^\dagger c_{r,k}). \quad (3.21)$$

Si hacemos el cambio en la ecuación (3.21) $k+q-q' \rightarrow k+q$, el conmutador se convierte en

$$[\rho_{r,q}, \rho_{r',-q'}] = \delta_{rr'} \delta_{qq'} \sum_k (c_{r,k+q}^\dagger c_{r',k+q'} - c_{r',k+q}^\dagger c_{r,k}). \quad (3.22)$$

Ahora bien, tenemos dos casos que analizar. Para el primer caso si $q \neq q'$, el conmutador es cero. En el segundo $q = q'$, primero se debe de llevar a cabo el ordenamiento normal de acuerdo a la definición: $c_{r,k}^\dagger c_{r,k} := c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk)$. Entonces expresamos el conmutador como

$$[\rho_{r,q}, \rho_{r',-q'}] = \sum_k \left(: c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k+q} : + \theta(k_F - r(k+q)) - : c_{r,k}^\dagger c_{r,k} : - \theta(k_F - rk) \right). \quad (3.23)$$

Si en la ecuación (3.23) hacemos el cambio de variable $k \rightarrow k + q$ los operadores ordenados normalmente se cancelan dejando únicamente

$$\begin{aligned} & \sum_k \left(\theta(k_F - r(k+q)) - \theta(k_F - rk) \right) \\ &= \begin{cases} \theta(k_F - (k+q)) - \theta(k_F - k) & \text{si } r = + \\ \theta(k_F + (k+q)) - \theta(k_F + k) & \text{si } r = -. \end{cases} \\ &= \begin{cases} -\frac{Lq}{2\pi} & \text{si } r = + \\ \frac{Lq}{2\pi} & \text{si } r = -. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.24)$$

La última línea se obtiene al evaluar la suma de las funciones escalón para los diferentes signos de r y q ¹. De este modo obtenemos finalmente.

$$[\rho_{r,q}, \rho_{r',-q'}] = -\delta_{rr'} \delta_{qq'} \frac{Lq}{2\pi}. \quad (3.25)$$

3.3. Representación bosónica

Como acabamos de ver en la sección anterior los operadores de densidad conmutan de manera muy similar a la manera en la que lo hacen los operadores bosónicos. Llevemos a cabo la construcción de operadores bosónicos construyendo sus eigenestados para llevar a cabo la bosonización de los operadores de campo. Para esto empecemos por definir nuevos operadores bosónicos cuando $q \neq 0$, de la siguiente manera

$$a_q^\dagger = \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} \sum_r \theta(rq) \rho_{r,q} \quad (3.26)$$

y

$$a_q = \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} \sum_r \theta(rq) \rho_{r,-q}. \quad (3.27)$$

¹Recordemos que estamos trabajando en la primera zona de Brillouin en donde los vectores recíprocos corresponden a $k = \frac{2\pi}{L}n$ para $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ [19].

Calculemos el conmutador de estos operadores

$$\begin{aligned}
[a_q, a_{q'}^\dagger] &= \frac{2\pi}{L\sqrt{qq'}} \left[\sum_{rr'} \theta(rq)\theta(r'q')\rho_{r,-q}\rho_{r',q'} - \sum_{rr'} \theta(rq)\theta(r'q')\rho_{r',q'}\rho_{r,-q} \right] \\
&= \frac{2\pi}{L\sqrt{qq'}} \left\{ \sum_{rr'} \theta(rq)\theta(r'q') [\rho_{r,-q}, \rho_{r',q'}] \right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{qq'}} \sum_r \theta(rq)\theta(rq')\delta_{qq'}rq', \tag{3.28}
\end{aligned}$$

donde hemos utilizado la relación (3.25). De aquí vemos como solamente tendremos contribuciones distintas de cero para $rq > 0$ de manera que al final la ecuación (3.28) es equivalente a

$$[a_q, a_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'}. \tag{3.29}$$

Ahora calculemos otra importante relación

$$\begin{aligned}
[a_q^\dagger, a_{q'}^\dagger] &= \frac{2\pi}{L\sqrt{qq'}} \left(\sum_{rr'} \theta(rq)\theta(r'q')\rho_{r,q}\rho_{r',q'} - \sum_{rr'} \theta(rq)\theta(r'q')\rho_{r',q'}\rho_{r,q} \right) \\
&= \frac{2\pi}{L\sqrt{qq'}} \sum_{rr'} \theta(rq)\theta(r'q') [\rho_{r,q}, \rho_{r',q'}] \\
&= -\frac{1}{\sqrt{qq'}} \sum_{rr'} \theta(rq)\theta(r'q')\delta_{rr'}\delta_{q,-q'}rq \\
&= -\frac{1}{\sqrt{qq'}} \sum_r rq\theta(rq)\theta(rq')\delta_{q,-q'} \\
&= -\frac{1}{\sqrt{qq'}} \left(q\theta(q)\theta(q') - \theta(-q)\theta(-q') \right) \delta_{q,-q'}. \tag{3.30}
\end{aligned}$$

En la ecuación notamos que no existe un caso para el que sea distinta de cero, de modo que

$$[a_q^\dagger, a_{q'}^\dagger] = 0. \tag{3.31}$$

Del mismo modo calculemos ahora

$$\begin{aligned}
[a_q, a_{q'}] &= \frac{2\pi}{L\sqrt{qq'}} \sum_{rr'} \theta(rq)\theta(r'q') [\rho_{r,-q}, \rho_{r',-q'}] \\
&= -\frac{1}{\sqrt{qq'}} \sum_r \theta(rq)\theta(rq')\delta_{-q,q'} = 0. \tag{3.32}
\end{aligned}$$

En resumen tenemos que

$$\begin{aligned}
[a_q, a_{q'}^\dagger] &= \delta_{qq'} \\
[a_q, a_{q'}] &= [a_q^\dagger, a_{q'}^\dagger] = 0. \tag{3.33}
\end{aligned}$$

Hasta este punto hemos mostrado que se pueden escribir operadores bosónicos a partir de los operadores de densidad. Ahora nos interesa escribir el operador de densidad en

términos de los operadores bosónicos. Para esto, procedamos a invertir las relaciones (3.26) y (3.27), aquí es conveniente reescribir los operadores a_q de la siguiente forma

$$\theta(rq)a_q^\dagger = \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}}\theta(rq)\rho_{r,q}, \quad (3.34)$$

$$\theta(-rq)a_q = \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}}\theta(-rq)\rho_{r,q}, \quad (3.35)$$

de modo que, para el caso de $q \neq 0$, el operador de densidad es:

$$\begin{aligned} \rho_{rq} &= (\theta(rq) + \theta(-rq))\rho_{r,q} \\ &= [\theta(rq)a_q^\dagger(a_q^\dagger)^{-1} + \theta(-rq)a_{-q}(a_{-q})^{-1}]\rho_{r,q}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Si sustituimos las siguientes expresiones

$$(a_q^\dagger)^{-1} = \sqrt{\frac{|q|L}{2\pi}}\rho_{r,q}^{-1} \quad (3.37)$$

$$(a_{-q})^{-1} = \sqrt{\frac{|q|L}{2\pi}}\rho_{r,-q}^{-1} \quad (3.38)$$

en (3.36), obtenemos finalmente

$$\rho_{r,q} = \sqrt{\frac{L|q|}{2\pi}}\left(\theta(rq)a_q^\dagger + \theta(-rq)a_q\right). \quad (3.39)$$

Si $q = 0$, el modo correspondiente es representado por el operador de número

$$N_r \equiv \sum_k n_{r,k} - \langle n_{r,k} \rangle_0, \quad (3.40)$$

el cual resulta del ordenamiento normal, de manera que

$$\rho_{r,q} = N_r\delta_{rq,0} + \sqrt{\frac{L|q|}{2\pi}}\left(\theta(rq)a_q^\dagger + \theta(-rq)a_q\right). \quad (3.41)$$

Con esto el operador de densidad ha sido reformulado en términos de variables bosónicas.

3.3.1. Eigenestados bosónicos

En esta sección construiremos un conjunto de estados bosónicos del sistema. Para esto analizaremos las propiedades de conmutación del Hamiltoniano (3.14) así como los efectos de éste al ser aplicado a estados de las ramas derecha e izquierda. Iniciemos

calculando el conmutador entre el Hamiltoniano H_0 y el operador de número de partícula N_r

$$\begin{aligned}
[H_0, N_r] &= v_F \sum_{r',k'} \sum_k \left[(c_{r',k'}^\dagger c_{r',k'} - \theta(k_F - r'k'))(r'k' - k_F)(c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk))(rk - k_F) \right. \\
&\quad \left. - (c_{r,k}^\dagger c_{r,k} - \theta(k_F - rk))(rk - k_F)(c_{r',k'}^\dagger c_{r',k'} - \theta(k_F - r'k'))(r'k' - k_F) \right] \\
&= v_F \sum_{r',k'} \sum_k [c_{r',k'}^\dagger c_{r',k'} c_{r,k}^\dagger c_{r,k} (r'k' - k_F)(rk - k_F) \\
&\quad - c_{r,k}^\dagger c_{r,k} c_{r',k'}^\dagger c_{r',k'} (r'k' - k_F)(rk - k_F)],
\end{aligned}$$

lo que resulta ser

$$\begin{aligned}
[H_0, N_r] &= v_F \sum_{r',k'} \sum_k (r'k' - k_F)(rk - k_F) [c_{r',k'}^\dagger c_{r',k'}, c_{r,k}^\dagger c_{r,k}] \\
&= v_F \sum_{r',k'} \sum_k (r'k' - k_F)(rk - k_F) (\delta_{kk'} \delta_{rr'} c_{r',k'}^\dagger c_{r,k} - \delta_{kk'} \delta_{rr'} c_{r,k}^\dagger c_{r',k'}), \quad (3.42)
\end{aligned}$$

finalmente después de realizar la suma sobre los índices $r'k'$ obtenemos

$$[H_0, N_r] = 0. \quad (3.43)$$

Hemos encontrado que el Hamiltoniano H_0 y el operador de número N_r tienen eigenestados comunes. Ahora nuestra tarea será identificar dichos eigenestados. Reflexionando un poco sobre el sistema en cuestión notamos que podemos construir estados a partir del estado base al añadir N_r fermiones por encima del nivel de Fermi y quitando N_{-r} fermiones por debajo del nivel de Fermi. Escribamos estos estados como el conjunto $\{|N_r N_{-r}\rangle\}$. Este conjunto corresponde a los eigenestados del operador N_r , teniendo un llenado de $\theta(k_F + N_r 2\pi/L - rq)$. El efecto de aplicar el Hamiltoniano (3.14) en estos estados nos dice que el conjunto $\{|N_r N_{-r}\rangle\}$ son eigenestados de H_0 con energías dadas por:

$$E_{N_r N_{-r}} = v_F \sum_{k=2\pi/L}^{2\pi N_r/L} k = \frac{2\pi}{L} \sum_{n=1}^{N_r} n = \frac{\pi}{L} N_r (N_r + 1), \quad (3.44)$$

resultado que al tomar el límite termodinámico se transforma en:

$$E_{N_r N_{-r}} = \frac{v_F \pi}{L} \sum_r N_r^2. \quad (3.45)$$

Calculemos el conmutador del Hamiltoniano con el operador de densidad

$$[H_0, \rho_{rq}] = \sum_{r',k'} \sum_k v_F (r'k' - k_F) (c_{r',k'}^\dagger c_{r',k'} c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k} - c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k} c_{r',k'}^\dagger c_{r',k'}), \quad (3.46)$$

haciendo uso de las relaciones (3.18) obtenemos

$$[H_0, \rho_{rq}] = \sum_{r',k'} \sum_k v_F (r'k' - k_F) (\delta_{r,r'} \delta_{k+k',k'} c_{r',k'}^\dagger c_{r,k} - \delta_{r,r'} \delta_{k,k'} c_{r,k+k'}^\dagger c_{r',k'}), \quad (3.47)$$

que después de realizar el cambio de variables $r' \rightarrow r$ y $k' \rightarrow k + q$ se obtiene

$$\begin{aligned} [H_0, \rho_{rq}] &= \sum_{r',k'} \sum_k v_F ((r(k+q) c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k}) - ((rk - k_F) c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k})) \\ &= \sum_{r',k'} v_F ((r(k+q) - k_F) \rho_{r,q} - (rk - k_F) \rho_{r,q}) \\ &= \sum_{r',k'} v_F r q \rho_{r,q}. \end{aligned} \quad (3.48)$$

En la última línea hemos usado la definición del operador de densidad (2.7). Con los resultados previos podemos calcular directamente el conmutador entre el Hamiltoniano H_0 y el operador de creación a_q^\dagger

$$\begin{aligned} [H_0, a_q^\dagger] &= \left[H_0, \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} \sum_r \theta(rq) \rho_{rq} \right] \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} \sum_r \theta(rq) [H_0, \rho_{r,q}]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Utilizando (3.48) obtenemos finalmente

$$[H_0, a_q^\dagger] = v_F |q| a_q^\dagger. \quad (3.50)$$

Por inducción podemos generalizar (3.50) para obtener que

$$[H_0, (a_q^\dagger)^{n_q}] = n_q v_F |q| (a_q^\dagger)^{n_q}, \quad (3.51)$$

así como su conjugado Hermítico

$$[H_0, a_q^{n_q}] = -n_q v_F |q| a_q^{n_q}. \quad (3.52)$$

De aquí podemos concluir que si tomamos un eigenestado del sistema digamos el estado $|E\rangle$ al cual le corresponde una energía E , entonces $(a_q^\dagger)^{n_q} |E\rangle$ también será un eigenestado de H_0 con energía $E + v_F n_q |q|$ y del mismo modo $a_q^{n_q} |E\rangle$ es un eigenestado con energía $E - v_F n_q |q|$. Por lo tanto todo conjunto de eigenestados de H_0 se pueden construir con a_q y a_q^\dagger actuando como operadores de escalera. Denotemos los estados que contiene n_q bosones en el modo de vector de onda q por:

$$|N_r, N_{-r}, \{n_q\}\rangle = \prod_{q \neq 0} \frac{(a_q^\dagger)^{n_q}}{\sqrt{n_q!}} |0\rangle, \quad (3.53)$$

donde $|0\rangle$ denota el estado fundamental del sistema (mar de Fermi). Haciendo uso de las ecuaciones (3.44) y (3.50), encontramos que los eigenvalores correspondientes a estos estados están dados por

$$E(N_r, N_{-r}, \{n_q\}) = \sum_{q \neq 0} v_F n_q |q| + \frac{v_F \pi}{L} \sum_r N_r^2. \quad (3.54)$$

Por lo cual el Hamiltoniano (3.12) puede ser reescrito utilizando los operadores bosónicos a_q y a_q^\dagger para obtener la siguiente expresión

$$H_0 = v_F \sum_{q \neq 0} |q| a_q^\dagger a_q + \frac{v_F \pi}{L} \sum_r N_r^2. \quad (3.55)$$

Todos los eigenvalores de H_0 están dados por la ecuación (3.53). El problema que surge en este punto se encuentra en probar que estos eigenvalores cuentan con la degeneración apropiada, de manera que el conjunto (3.53) sea equivalente a un estado completo de eigenestados de H_0 . La completez del conjunto (3.53) fue probada por F. D. M. Haldane [14], quién mostró que el espacio de Hilbert de N partículas, generado por todas las posibles excitaciones de partícula-hueco de $|0\rangle$, también puede ser generado por la aplicación repetida del operador a_q^\dagger en el estado $|0\rangle$. Más aún mostró que los estados bosónicos son estados ortonormales

$$\langle N'_r, N'_{-r}, \{n'_q\} | N_r, N_{-r}, \{n_q\} \rangle = \delta_{N_r, N'_r} \delta_{N_{-r}, N'_{-r}} \delta_{\{n_q\}, \{n'_q\}}. \quad (3.56)$$

La idea detrás de esta prueba es, sin incluir muchos detalles, calcular la función de partición en las bases tanto fermiónica como bosónica. En ambos casos se tiene que

$$Z = \sum_n D_n e^{-\beta E_n}, \quad (3.57)$$

donde la suma varía sobre todos los eigenestados de H_0 . E_n es la energía del n -ésimo estado y D_n es su degeneración. Como Z consta de una suma de términos positivos, cualquier diferencia entre las degeneraciones de los dos conjuntos base dará como resultado diferentes valores de Z . Como los resultados que se obtienen para ambas bases son idénticos, se concluye que los dos conjuntos tienen la misma degeneración.

Para concluir en esta sección definamos los operadores N y J , los cuales corresponden al número total de partículas y a la corriente (dada por la diferencia entre las partículas en la rama derecha e izquierda) respectivamente, por

$$N = N_0 + \sum_r N_r \quad (3.58)$$

y

$$J = \sum_r r N_r. \quad (3.59)$$

Elevando al cuadrado y sumando las expresiones anteriores obtenemos que

$$2 \sum_r N_r^2 = (N - N_0)^2 + J^2 \quad (3.60)$$

y

$$2 \sum_r N_r N_{-r} = (N - N_0)^2 - J^2, \quad (3.61)$$

de modo que si reemplazamos (3.60) en el Hamiltoniano (3.55) obtendremos

$$H_0 = v_F \sum_{q \neq 0} |q| a_q^\dagger a_q + \frac{\pi}{2L} (v_F (N - N_0)^2 + v_F J^2). \quad (3.62)$$

La ecuación (3.62) es el Hamiltoniano sin interacción bosonizado. Hasta ahora hemos reescrito el operador de densidad y el Hamiltoniano en una base bosónica. En la siguiente sección llevaremos a cabo la bosonización de los operadores de campo.

3.3.2. Bosonización del operador de campo

En esta sección mostraremos la representación bosónica del operador de campo (2.6). Para esto empecemos por demostrar que para dos operadores b y b^\dagger que cumplan que $[b, b^\dagger] = 1$ entonces se tiene que

$$[b, e^{\lambda b^\dagger}] = \lambda e^{\lambda b^\dagger}. \quad (3.63)$$

Para demostrarlo primero definamos $b \equiv e^{-\lambda b^\dagger} b e^{\lambda b^\dagger}$. Si diferenciamos con respecto a λ obtenemos

$$\frac{db(\lambda)}{d\lambda} = -b^\dagger b + b b^\dagger = [b, b^\dagger] = 1, \quad (3.64)$$

lo que implica que $b(\lambda) = e^{-\lambda b^\dagger} b e^{\lambda b^\dagger} = b + \lambda$. Si multiplicamos esta expresión por la izquierda por un factor $e^{\lambda b^\dagger}$ obtenemos

$$b e^{\lambda b^\dagger} = e^{\lambda b^\dagger} b + \lambda e^{\lambda b^\dagger}, \quad (3.65)$$

reordenando llegamos a

$$b e^{\lambda b^\dagger} - e^{\lambda b^\dagger} b = [b, e^{\lambda b^\dagger}] = \lambda e^{\lambda b^\dagger}, \quad (3.66)$$

demostrando así la relación (3.63). Ahora definamos los siguientes términos

$$\begin{aligned} A &= \sum_{q \neq 0} \lambda_q a_q^\dagger \\ B &= \sum_{q \neq 0} \mu_q a_q. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Entonces haciendo uso de la ecuación (3.63) calculamos lo siguiente

$$\begin{aligned} [a_q, e^B e^A] &= e^B [a_q, e^A] + [a_q, e^B] e^A \\ &= e^B [a_q, A] e^A \\ &= \lambda_q e^B e^A \end{aligned} \quad (3.68)$$

y

$$\begin{aligned} [a_q, e^B e^A] &= e^B [a_q^\dagger, e^A] + [a_q^\dagger, e^B] e^A \\ &= [a_q^\dagger, B] e^B e^A \\ &= -\mu_q e^B e^A. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Ahora, dado un operador fermiónico S que satisfaga las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} [a_q, S] &= -\lambda_q S [a_q^\dagger, S] \\ &= \mu_q S, \end{aligned} \quad (3.70)$$

y haciendo uso de las reglas de conmutación anteriores, tendremos que

$$\begin{aligned} [a_q, S e^B e^A] &= [a_q, S] e^B e^A + S [a_q, e^B e^A] \\ &= -\lambda_q S e^B e^A - \lambda_q S e^B e^A \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.71)$$

además de

$$\begin{aligned} [a_q^\dagger, S e^B e^A] &= [a_q^\dagger, S] e^B e^A + S [a_q^\dagger, e^B e^A] \\ &= \mu_q S e^B e^A - \mu_q S e^B e^A \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.72)$$

De esto se puede ver que el operador $S e^B e^A$ conmuta tanto con a_q como con a_q^\dagger , más aún se tiene que $S \sim e^{-A} e^{-B}$, con lo cual se relaciona este operador fermiónico con exponenciales de campos bosónicos, de manera que si pudiéramos identificar $S \sim e^{-A} e^{-B}$ entonces tendríamos un operador de campo fermiónico en términos de variables bosónicas. Hagamos corresponder ψ_r^\dagger con S mediante una elección apropiada de valores para λ_q y μ_q . Con este fin calculemos los conmutadores $[a_q, \psi_r^\dagger(x)]$ y $[a_q^\dagger, \psi_r^\dagger(x)]$ de la siguiente forma

$$[a_q, \psi_r^\dagger(x)] = \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} \sum_r \theta(r'q) [\rho_{r',-q}, \psi_r^\dagger(x)]. \quad (3.73)$$

Ahora calculemos el conmutador de la derecha en la ecuación (3.73) haciendo uso de la definición del operador de campo dada por Haldane [4]:

$$\psi_r^\dagger = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} e^{-\epsilon |\frac{kL}{2\pi}|} c_{k,r}^\dagger. \quad (3.74)$$

Entonces usando (3.74) y (2.6) obtenemos

$$\begin{aligned}
[\rho_{r',-q}, \psi_r^\dagger(x)] &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k,k'} e^{ik'x} e^{-\epsilon|\frac{k'L}{2\pi}|} [c_{k+q,r}^\dagger c_{k,r}, c_{k',r'}^\dagger], \\
&= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k,k'} e^{ik'x} e^{-\epsilon|\frac{k'L}{2\pi}|} \delta_{k,k'} \delta_{r,r'} c_{k+q,r}^\dagger, \\
&= \delta_{r,r'} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} e^{-\epsilon|\frac{kL}{2\pi}|} c_{k+q,r}^\dagger, \\
&= \frac{1}{\sqrt{L}} \delta_{r,r'} e^{-iqx} e^{ikx} c_{k,r}^\dagger, \tag{3.75}
\end{aligned}$$

donde se ha hecho el cambio de variable $k+q \rightarrow k$ y se ha tomado el límite $\epsilon \rightarrow 0$. De la ecuación (3.75) se ve de inmediato que

$$[\rho_{r,q}, \psi_{r'}^\dagger(x)] = \delta_{r,r'} e^{-iqx} \psi_r^\dagger(x). \tag{3.76}$$

Con esto la ecuación (3.73) queda como

$$\begin{aligned}
[a_q, \psi_r^\dagger(x)] &= \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} \sum_{r'} \delta_{r,r'} e^{iqx} \psi_r^\dagger(x) \\
&= \theta(rq) \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} e^{iqx} \psi_r^\dagger(x) \tag{3.77}
\end{aligned}$$

y de manera análoga

$$[a_q^\dagger, \psi_r^\dagger(x)] = \theta(qr) \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} e^{-iqx} \psi_r^\dagger(x). \tag{3.78}$$

Entonces podemos elegir

$$\lambda_q = -\theta(rq) \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} e^{iqx} \tag{3.79}$$

y

$$\mu_q = -\theta(rq) \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} e^{-iqx}. \tag{3.80}$$

Construimos el siguiente operador

$$O_r(x) = \psi_r^\dagger e^{i\varphi(x)} e^{i\varphi^\dagger(x)}, \tag{3.81}$$

en donde

$$\varphi_r(x) = -i \sum_{q \neq 0} \theta(rq) \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} e^{-iqx} a_q. \tag{3.82}$$

El operador $O_r(x)$ conmuta con los operadores a_q y a_q^\dagger . Este operador está unívocamente representado y determinado en la base bosónica. Podemos invertir la ecuación (3.81) para encontrar una expresión del operador $\psi_r^\dagger(x)$ en términos de operadores bosónicos. Al invertir (3.81) obtenemos

$$\begin{aligned} \langle N'_r, N'_{-r} | \psi_r^\dagger(x) | N_r, N_{-r} \rangle &= \langle N'_r, N'_{-r} | O_r(x) e^{-i\varphi_r^\dagger(x)} e^{-i\varphi_r(x)} | N_r, N_{-r} \rangle \\ &= \langle N'_r, N'_{-r} | O_r(x) | N_r, N_{-r} \rangle. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Entonces usando (3.83) junto con la definición del operador de campo (2.6) obtenemos que

$$\langle N'_r, N'_{-r} | O_r(x) | N_r, N_{-r} \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} \langle N'_r, N'_{-r} | c_{r,k}^\dagger | N_r, N_{-r} \rangle. \quad (3.84)$$

Como ya se ha dicho, el conjunto de estados $|N_r, N_{-r}\rangle$ es ortonormal, por lo tanto, en la última ecuación el producto interno en la suma se anula, excepto para el caso en el que $|N'_r, N'_{-r}\rangle = |N_{r+1}, N_{-r}\rangle$ y con un momento correspondiente al más bajo disponible $k = k_F + 2\pi(N_r + 1)/L - \pi/L$, de modo que

$$O_r |N_r, N_{-r}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(irx \left(k_F - \frac{\pi}{L} + \frac{2\pi(N_r + 1)}{L} \right) \right) |N_{r+1}, N_{-r}\rangle. \quad (3.85)$$

De aquí podemos concluir cual es el efecto de $O_r(x)$ en un eigenestado bosónico

$$\begin{aligned} O_r(x) |N_r, N_{-r}, \{n_q\}\rangle &= \prod_{q \neq 0} \frac{(a_q^\dagger)^{n_q}}{\sqrt{n_q!}} O_r(x) |N_r, N_{-r}\rangle \\ &= \prod_{q \neq 0} \frac{(a_q^\dagger)^{n_q}}{\sqrt{n_q!}} L^{-\frac{1}{2}} e^{irx(k_F - \frac{\pi}{L})} e^{irx2\pi N_r/L} |N_{r+1}, N_{-r}\rangle \\ &= L^{-\frac{1}{2}} e^{irx(k_F - \frac{\pi}{L})} e^{irx2\pi N_r/L} |N_{r+1}, N_{-r}, \{n_q\}\rangle, \end{aligned} \quad (3.86)$$

en donde se han utilizado las relaciones de conmutación entre $O_r(x)$ y los operadores a_q y a_q^\dagger . Vamos a definir el operador U_r como

$$U_r \equiv L^{1/2} e^{irx(k_F - \pi/L)} e^{-irx2\pi N_r/L} O_r(x). \quad (3.87)$$

U_r es un operador de escalera que eleva el número de fermiones en la rama $r = R, L$ por uno de acuerdo a la ecuación

$$\begin{aligned} U_R |N_L, N_R, \{n_q\}\rangle &= (-1)^{+N_L/2} |N_L, N_{R+1}, \{n_q\}\rangle \\ U_L |N_L, N_R, \{n_q\}\rangle &= (-1)^{-N_R/2} |N_L, N_{R+1}, \{n_q\}\rangle, \end{aligned} \quad (3.88)$$

ya que, U_r es un operador unitario, es decir, $U_r U_r^\dagger = U_r^\dagger U_r = 1$.

De acuerdo con la definición de U_r y al invertir la ecuación (3.81) encontramos que

$$\begin{aligned} \psi_r^\dagger &= O_r(x) e^{-i\varphi_r^\dagger(x)} e^{-i\varphi_r(x)} \\ &= L^{-1/2} e^{irx(k_F - \pi/L)} e^{irx2\pi N_r/L} U_r e^{-i\varphi_r^\dagger(x)} e^{-i\varphi_r(x)}. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Si definimos lo siguiente

$$\begin{aligned}\phi_r(x) &= r(\pi x/L)N_r - \varphi_r(x) \\ &= r(\pi x/L)N_r + i \sum_{q \neq 0} \theta(rq) \sqrt{2\pi/L|q|} e^{-iqx} a_q,\end{aligned}\quad (3.90)$$

podemos escribir el operador de campo fermiónico ψ_r^\dagger como

$$\psi_r^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{irk_F x} e^{i\phi_r^\dagger(x)} U_r e^{i\phi_r(x)}.\quad (3.91)$$

Finalmente en la ecuación (3.91) hemos obtenido una expresión que relaciona los grados de libertad de nuestro sistema fermiónico con grados de libertad bosónicos, lo cual es un resultado importante. Siguiendo la línea de la ecuación (3.58) podemos definir de manera análoga los operadores de densidad y de campo²

$$\begin{aligned}\rho_N &= \frac{N_0}{L} + \sum_r \rho_r(x), \\ \rho_J &= \sum_r r \rho_r(x),\end{aligned}\quad (3.92)$$

donde $N_0 = \frac{k_F L}{\pi}$. De igual manera,

$$\begin{aligned}\phi_N(x) &= \sum_r \phi_r(x), \\ \phi_J(x) &= \frac{N_0 \pi}{L} + \sum_r r \phi_r(x).\end{aligned}\quad (3.93)$$

Si definimos los campos de fase local como

$$\begin{aligned}\theta_N(x) &= \phi_N(x) + \phi_N^\dagger(x), \\ \theta_J(x) &= \phi_J(x) + \phi_J^\dagger(x),\end{aligned}\quad (3.94)$$

podemos calcular las siguientes relaciones útiles

$$\begin{aligned}\partial_x \theta_N(x) &= \partial_x \left(\sum_r \frac{r\pi x}{L} N_r + i \sum_{q \neq 0} \theta(rq) \sqrt{2\pi/L|q|} e^{-iqx} a_q \right. \\ &\quad \left. + \frac{r\pi x}{L} N_r - i \sum_{q \neq 0} \theta(rq) \sqrt{2\pi/L|q|} e^{iqx} a_q^\dagger \right) \\ &= \partial_x \left(\sum_r \frac{2r\pi x}{L} N_r \right) \\ &= 2\pi \rho_J(x)\end{aligned}$$

² N se refiere a la carga y J a la corriente.

y

$$\begin{aligned}\partial_x \theta_J(x) &= \partial_x \left(\frac{\pi N_0 x}{L} + \sum_r r \phi_r(x) + \frac{\pi N_0 x}{L} + \sum_r r \phi_r^\dagger(x) \right) \\ &= \partial_x \left(\frac{N_0}{L} + \sum_r \frac{r N_r}{L} \right) \\ &= 2\pi \rho_N(x).\end{aligned}$$

En resumen ambas expresiones, son:

$$\partial_x \theta_N(x) = 2\pi \rho_J(x), \quad (3.95)$$

y

$$\partial_x \theta_J(x) = 2\pi \rho_N(x), \quad (3.96)$$

con

$$\begin{aligned}[\rho_N(x), \theta_N(x')] &= [\rho_J(x), \theta_J(x')] = i \sum_n \delta(x - x' + nL), \\ [\rho_N(x), \theta_J(x')] &= [\rho_J(x), \theta_N(x')] = 0.\end{aligned} \quad (3.97)$$

Si expresamos ρ_N y θ_N en términos de los operadores (3.26) y (3.27) obtenemos

$$\rho_N(x) = \frac{N}{L} + \sum_{q \neq 0} \sqrt{|q|/2\pi L} e^{iqx} (a_q^\dagger + a_{-q}), \quad (3.98)$$

$$\rho_J(x) = \frac{J}{L} + \sum_{q \neq 0} \sqrt{|q|/2\pi L} \operatorname{sgn}(q) e^{iqx} (a_q^\dagger + a_{-q}), \quad (3.99)$$

$$\phi_N(x) = \frac{N}{L} \pi x + i \sum_{q \neq 0} \sqrt{2\pi/L|q|} \operatorname{sgn}(q) e^{-iqx} a_q \quad (3.100)$$

y

$$\phi_J(x) = \frac{J}{L} \pi x + i \sum_{q \neq 0} \sqrt{2\pi/L|q|} \operatorname{sgn}(q) e^{-iqx} a_q. \quad (3.101)$$

De manera que el Hamiltoniano (3.58) se puede reescribir como

$$H_0 = \frac{v_F}{\pi} \int dx [\partial_x \theta_N(x)]^2 + [\partial_x \theta_J(x)]^2. \quad (3.102)$$

Así hemos completado la representación bosónica del sistema.

3.4. Modelo de Luttinger con interacción

Como ya habíamos mencionado en el capítulo anterior, las interacciones en 1D están clasificadas en base a su transferencia de momento de acuerdo a una *g-ología* [18] que identifica cada uno de los procesos de interacción. En esta sección tenemos la finalidad de escribir el Hamiltoniano completo con interacción para los casos con y sin espín, haciendo uso de las herramientas que hemos construido hasta este punto, con la finalidad de resolver el Hamiltoniano de Tomonaga-Luttinger.

3.4.1. Caso sin espín

De acuerdo con la ecuación (2.13) el Hamiltoniano de interacción sin espín está dado por

$$H_{int} = \frac{\pi}{L} \sum_{r,q} (g_2(q)\rho_r(q)\rho_{-r}(-q) + g_4(q)\rho_r(q)\rho_r(q)). \quad (3.103)$$

Haciendo uso de la ecuación (3.41) podemos expandir el Hamiltoniano H_{int} en términos de los operadores a_q y a_q^\dagger . El primer término se puede reescribir como:

$$\begin{aligned} \sum_{r,q} g_2(q)\rho_r(q)\rho_{-r}(-q) &= \sum_{r,q} g_2(q) \left[N_r \delta_{q,0} + \sqrt{\frac{L|q|}{2\pi}} (\theta(rq)a_q^\dagger + \theta(-rq)a_q) \right] \times \\ &\quad \left[N_{-r} \delta_{-q,0} + \sqrt{\frac{L|q|}{2\pi}} (\theta(rq)a_q^\dagger + \theta(-rq)a_q) \right]. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Realizando el producto y separando los casos para $q = 0$ y $q \neq 0$ obtenemos

$$\begin{aligned} &\sum_{r,q} g_2(q)\rho_r(q)\rho_{-r}(-q) = \\ &\sum_r g_{20} N_r N_{-r} + \sum_{q \neq 0} \frac{L|q|}{2\pi} \left[\theta(rq)\theta(rq)a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + \theta(rq)\theta(-rq)a_q^\dagger a_q + \right. \\ &\quad \left. \theta(-rq)\theta(rq)a_q a_q^\dagger + \theta(-rq)\theta(-rq)a_q a_q \right] \\ &= \sum_r g_{20} N_r N_{-r} + \frac{L}{2\pi} \sum_{q \neq 0} g_2(q)|q|(a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + a_q a_{-q}). \end{aligned} \quad (3.105)$$

De manera análoga obtenemos para el segundo término

$$\sum_{r,q} g_4(q)\rho_r(q)\rho_r(-q) = g_{40} \sum_r N_r^2 + \frac{L}{2\pi} \sum_{q \neq 0} g_4(q)|q|(a_q^\dagger a_q + a_q a_q^\dagger). \quad (3.106)$$

Con esto el Hamiltoniano completo adquiere la siguiente forma

$$\begin{aligned}
H &= H_0 + H_{int} \\
&= v_F \sum_{q \neq 0} |q| a_q^\dagger a_q + \frac{v_F \pi}{L} \sum_r N_r^2 + \frac{\pi}{L} \left[g_{20} \sum_r N_r N_{-r} + \right. \\
&\quad \frac{L}{2\pi} \sum_{q \neq 0} g_2(q) (a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + a_q a_{-q}) + \\
&\quad \left. g_{40} \sum_r N_r^2 + \frac{L}{2\pi} \sum_{q \neq 0} g_4(q) |q| (a_q^\dagger a_q + a_q a_q^\dagger) \right]. \tag{3.107}
\end{aligned}$$

Agrupando términos podemos simplificar un poco la ecuación (3.107) para obtener

$$\begin{aligned}
H &= v_F \sum_{q \neq 0} |q| a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} g_2(q) |q| (a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + a_q a_{-q}) + \\
&\quad \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} g_4(q) |q| (a_q^\dagger a_q + a_q a_q^\dagger) + \\
&\quad \frac{\pi}{L} g_{20} \sum_r N_r N_{-r} + \frac{\pi}{L} (g_{40} + v_F) \sum_r N_r^2, \tag{3.108}
\end{aligned}$$

usando las relaciones (3.58) y (3.60) podemos reescribir los dos últimos términos del Hamiltoniano como sigue

$$\frac{\pi}{L} g_{20} \sum_r N_r N_{-r} + \frac{\pi}{L} (g_{40} + v_F) \sum_r N_r^2 = \frac{\pi}{2L} (v_j J^2 + v_N (N - N_0)^2), \tag{3.109}$$

en donde también se han introducido las siguientes cantidades

$$\begin{aligned}
v_j &= v_F + g_{40} - g_{20}, \\
v_N &= v_F + g_{40} + g_{20}. \tag{3.110}
\end{aligned}$$

Por último, manipulemos el primer término del Hamiltoniano (3.68) obteniendo

$$\begin{aligned}
v_F \sum_{q \neq 0} |q| a_q^\dagger a_q &= v_F \sum_{q \neq 0} |q| \left(\frac{a_q^\dagger a_q}{2} + \frac{a_q^\dagger a_q}{2} \right) \\
&= \frac{v_F}{2} \sum_{q \neq 0} |q| (a_q^\dagger a_q + a_q a_q^\dagger) - \frac{v_F}{2} \sum_{q \neq 0} |q|, \tag{3.111}
\end{aligned}$$

En la última línea de (3.62) hemos hecho uso de las relaciones de conmutación (2.9). Al final de este proceso podemos escribir el Hamiltoniano total como

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} [g_2(q) (a_q a_{-q}^\dagger + a_q a_{-q}) + (v_F + g_4(q)) (a_q^\dagger a_q + a_q a_q^\dagger)] \\
&\quad + \frac{\pi}{2L} (v_j J^2 + v_N (N - N_0)^2) - \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} v_F |q|. \tag{3.112}
\end{aligned}$$

Una vez que hemos obtenido el Hamiltoniano (3.112) nos interesa diagonalizarlo, para esto observamos que, dicho Hamiltoniano tiene términos de la forma $a_q^\dagger a_q$, $a_q^\dagger a_{-q}^\dagger$ y $a_q a_{-q}$, lo cual nos indica que en principio debería ser posible resolver el Hamiltoniano mediante la introducción de una combinación lineal de los operadores bosónicos. Para este efecto vamos a definir el siguiente operador

$$b_q \equiv \alpha_q a_q - \beta_q a_{-q}^\dagger, \quad (3.113)$$

donde α y β son valores reales que sólo dependen del valor absoluto de q , del mismo modo que las constantes de acoplamiento $g_{2,4}$. El siguiente paso es verificar que en efecto el nuevo operador tenga las propiedades de conmutación bosónicas, es decir, que se cumpla que $[b_q, b_q^\dagger] = \delta_{q,q'}$. Calculemos dicho conmutador

$$\begin{aligned} [b_q, b_q^\dagger] &= [\alpha_q a_q - \beta_q a_{-q}^\dagger, \alpha_q a_q^\dagger] + [\alpha_q a_q - \beta_q a_{-q}^\dagger, -\beta_q a_{q'}] \\ &= [\alpha_q a_q, \alpha_q a_q^\dagger] + [-\beta_q a_{-q}^\dagger, \alpha_q a_{q'}^\dagger] + [\alpha_q a_q, -\beta_q a_{q'}] + [-\beta_q a_{-q}^\dagger, -\beta_q a_{-q'}] \\ &= \delta_{q,q'} (\alpha_q^2 - \beta_q^2). \end{aligned} \quad (3.114)$$

De la ecuación (3.114) se puede ver claramente que una condición para lograr las relaciones de conmutación deseadas es que $\alpha_q^2 - \beta_q^2 = 1$, por lo que expresaremos a α y β usando las funciones \sinh y \cosh , de manera que el operador b puede ser escrito como

$$b_q = \cosh \xi_q a_q - \sinh \xi_q a_{-q}^\dagger, \quad (3.115)$$

en donde se asume que ξ_q es real y que depende solamente de $|q|$. La expresión (3.115) es de hecho una transformación de Bogoliubov [7]. Podemos invertir la ecuación para b_q y escribir los operadores a_q y a_q^\dagger como

$$\begin{aligned} a_q^\dagger &= \cosh \xi_q b_q^\dagger + \sinh \xi_q b_{-q} \\ a_q &= \cosh \xi_q b_q + \sinh \xi_q b_{-q}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.116)$$

Ahora bien coloquemos esta expresión en el primer término de nuestro Hamiltoniano

$$\begin{aligned} g_2(q)(a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + a_q a_{-q}) + (v_F + g_4(q))(a_q^\dagger a_q + a_q a_q^\dagger) &= (\alpha_q \beta_q g_{2q} + \alpha_q^2 (g_{4q} + v_F))(b_q^\dagger b_q + b_q b_q^\dagger) \\ &+ (\alpha_q \beta_q g_{2q} + \beta_q^2 (g_{4q} + v_F))(b_{-q}^\dagger b_{-q} + b_{-q} b_{-q}^\dagger) \\ &+ ((\alpha^2 + \beta^2) g_{2q} + 2\alpha_q \beta_q (g_{4q} + v_F))(b_q^\dagger b_{-q}^\dagger + b_q b_{-q}), \end{aligned} \quad (3.117)$$

en donde se ha definido $\alpha \equiv \cosh \xi_q$ y $\beta \equiv \sinh \xi_q$. Luego entonces la última línea de (3.117) debería anularse, lo que da lugar a la siguiente condición

$$(\cosh \xi_q^2 + \sinh \xi_q^2) g_{2q} + \cosh \xi_q \sinh \xi_q (g_{4q} + v_F) = 0. \quad (3.118)$$

Mediante las propiedades de las funciones hiperbólicas podemos reducir la ecuación (3.118) a la forma

$$\tanh 2\xi_q = -\frac{g_{2q}}{v_F + g_{4q}}, \quad (3.119)$$

y con esto el primer término del Hamiltoniano (3.112) es

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} [g_2(q)(a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + a_q a_{-q}) + (v_F + g_4(q))(a_q^\dagger a_q + a_q a_q^\dagger)] = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} |q| [\alpha_q \beta_q g_{2q} + \\
& \alpha_q^2 (g_{4q} + v_F)(b_q^\dagger b_q + b_q b_q^\dagger) + (\alpha_q \beta_q g_{2q} + \beta_q^2 (g_{4q} + v_F))(b_{-q}^\dagger b_{-q} + b_{-q} b_{-q}^\dagger)] \\
& + \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} |q| (2\alpha_q \beta_q g_{2q} + (\alpha_q^2 + \beta_q^2)(v_F + g_{4q}))(b_q^\dagger b_q + b_q b_q^\dagger) \\
& = \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} |q| \sqrt{(v_F + g_{4q})^2 - (g_{2q})^2} (b_q^\dagger b_q + b_q b_q^\dagger). \tag{3.120}
\end{aligned}$$

Con este resultado escribimos la forma final del Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
H &= E_0 + \sum_{q \neq 0} \omega_q b_q^\dagger b_q + \frac{\pi}{2L} (v_J J^2 + v_N (N - N_0)^2), \\
E_0 &= \frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} (\omega_q - v_F |q|), \\
\omega_q &= |q| \sqrt{(v_F + g_{4q})^2 - (g_{2q})^2}. \tag{3.121}
\end{aligned}$$

3.4.2. Caso con espín

En esta sección veremos el efecto que tiene incluir el grado de libertad de espín dentro del modelo con interacción. Se podría pensar que el espín se puede incluir de manera directa al añadir simplemente un índice $\sigma = \uparrow, \downarrow$ a los operadores, lo que funciona muy bien para la interacción entre electrones de espines paralelos, pero resulta que esta inclusión tiene importantes repercusiones en los acoplamientos ya que estos ahora tendrán dos distintos valores que corresponden a electrones con espines paralelos g_{\parallel} y antiparalelos g_{\perp} . Consideremos el proceso de dispersión hacia atrás de un electrón con espín *up* que “salta” de la rama derecha a la rama izquierda, con un electrón de espín *down* que “salta” de la rama izquierda a la derecha. Este proceso se puede llevar a cabo para el caso de electrones con espines paralelos mediante una interacción de la forma $g_{2\parallel}(\rho_{+,\sigma}(q)\rho_{+,\sigma}(-q) + \rho_{-,\sigma}(q)\rho_{-,\sigma}(-q))$ lo que quiere decir que la dispersión hacia atrás se puede considerar de manera efectiva como una dispersión hacia adelante, i.e. $g_{1\parallel} = g_{2\parallel}$. Ahora bien para el caso en que los espines sean antiparalelos el proceso es de la forma $g_{1\perp}(c_{+,k+q,\downarrow}^\dagger c_{+,k,\uparrow}^\dagger c_{-,-k-q,\uparrow} c_{-,-k,\downarrow})$, nótese como este proceso no puede ser expresado usando los operadores de densidad ya que este introduce operadores de “giro de espín” $c_{+,k+q,\downarrow}^\dagger c_{+,k,\uparrow}$ lo que indica que el proceso de dispersión hacia atrás ya no puede ser considerado como una dispersión hacia adelante $g_{1\perp} \neq g_{2\perp}$. La aparición de procesos de “giro de espín” nos lleva a un Hamiltoniano mucho más complicado en el cual ahora hay que considerar las interacciones del tipo g_1 . Dicho esto, el Hamiltoniano con interacción adquiere la forma

$$H_{int} = H_1 + H_2 + H_4, \tag{3.122}$$

donde

$$H_1 = \frac{1}{L} \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} g_1 c_{+,k,\sigma}^\dagger c_{-,k',\sigma'}^\dagger c_{+,k'+2k_F+q,\sigma'} c_{-,k-2k_F-q,\sigma}, \quad (3.123)$$

$$H_2 = \int dx \sum_{\sigma} [g_{2\parallel} \rho_{+,\sigma}(x) \rho_{-,\sigma}(x) + g_{2\perp} \rho_{+,\sigma}(x) \rho_{-,\sigma}(x)] \quad (3.124)$$

y

$$H_4 = \int dx \sum_{r,\sigma} \left[\frac{g_{4\parallel}}{2} \rho_{r,\sigma}(x) \rho_{r,\sigma}(x) + \frac{g_{4\perp}}{2} \rho_{r,\sigma}(x) \rho_{r,-\sigma}(x) \right]. \quad (3.125)$$

Este Hamiltoniano no es diagonal en el índice de espín, debido a la interacción que acopla los espines *up* con los espines *down*. Para diagonalizarlo introducimos definiciones que incluyan el espín para los operadores y los campos. Para el caso del operador de densidad tendremos que

$$\rho_{r,\sigma} \equiv \psi_{r,\sigma}^\dagger \psi_{r,\sigma}. \quad (3.126)$$

De manera análoga a las ecuaciones (3.92) y (3.93) tendremos que en el espacio real las densidades de carga y espín serán

$$\begin{aligned} \rho_c(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\rho_{\uparrow}(x) + \rho_{\downarrow}(x)), \\ \rho_s(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\rho_{\uparrow}(x) - \rho_{\downarrow}(x)), \end{aligned} \quad (3.127)$$

y del mismo modo los campos bosónicos,

$$\begin{aligned} \phi_c(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{\uparrow}(x) + \phi_{\downarrow}(x)), \\ \phi_s(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{\uparrow}(x) - \phi_{\downarrow}(x)). \end{aligned} \quad (3.128)$$

También se tiene una relación análoga para los campos $\theta(x)$. Luego entonces con estas nuevas definiciones los términos H_2 y H_4 se vuelven

$$\begin{aligned} H_2 &= \frac{1}{4\pi} \int dx [g_{2\parallel} + g_{2\perp}] ((\partial_x \phi_c(x))^2 - (\partial_x \theta_c(x))^2) + \\ &\quad [g_{2\parallel} - g_{2\perp}] ((\partial_x \phi_c(x))^2 - (\partial_x \theta_s(x))^2), \end{aligned} \quad (3.129)$$

$$\begin{aligned} H_4 &= \frac{1}{4\pi} \int dx [g_{4\parallel} + g_{4\perp}] ((\partial_x \phi_c(x))^2 + (\partial_x \theta_c(x))^2) + \\ &\quad [g_{4\parallel} - g_{4\perp}] ((\partial_x \phi_c(x))^2 + (\partial_x \theta_s(x))^2) \end{aligned} \quad (3.130)$$

y

$$H_1 = \int dx \frac{g_{1\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \cos(2\sqrt{2}\phi_{\sigma}(x)). \quad (3.131)$$

Introduciendo las constantes

$$\begin{aligned} g_{2\lambda} &= (g_{2\parallel} \pm g_{2\perp}), \\ g_{4\lambda} &= (g_{4\parallel} \pm g_{4\perp}), \end{aligned} \quad (3.132)$$

con $\lambda = c, s$ denotando carga o espín, definimos las siguientes cantidades relacionadas con las constantes de acoplamiento y velocidad

$$u_\lambda \equiv v_F \sqrt{\left(1 + \frac{g_{4\lambda}}{2\pi v_F}\right)^2 - \left(\frac{g_{2\lambda}}{2\pi v_F}\right)}. \quad (3.133)$$

y

$$K_\lambda \equiv \sqrt{\frac{2\pi v_F + g_{4\lambda} - g_{2\lambda}}{2\pi v_F + g_{4\lambda} + g_{2\lambda}}} \quad (3.134)$$

Con estas definiciones podemos escribir el Hamiltoniano total como la suma $H = H_c + H_s$, con

$$\begin{aligned} H_s &= \frac{1}{4\pi} \int dx u_\sigma \left[K_s (\partial_x \theta_s)^2 + \frac{1}{K_s} (\partial_x \phi_s)^2 \right] + \frac{g_{1\perp} \pi}{\alpha^2} \cos(2\sqrt{2}\phi_s), \\ H_c &= \frac{1}{4\pi} \int dx u_c \left[K_c (\partial_x \theta_c)^2 + \frac{1}{K_c} (\partial_x \phi)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.135)$$

De este modo el Hamiltoniano fermiónico original, queda reescrito en términos de los campos bosónicos ϕ_λ y θ_λ que representan oscilaciones de densidad de carga y espín, que se propagan a diferentes velocidades. Esta es una característica fundamental de esta clase de modelos en una dimensión: la separación espín-carga.

Capítulo 4

Grupo de renormalización con matrices de densidad (DMRG)

En sistemas cuánticos de muchos cuerpos son pocas las soluciones analíticas conocidas, por ejemplo, como las soluciones obtenidas con el Ansatz de Bethe [6] para los modelos de Hubbard [20] y Heisenberg [21] y un enfoque numérico se vuelve fundamental en el estudio de esta clase de sistemas. El método de grupo de renormalización con matrices de densidad, DMRG¹, es una técnica numérica variacional que fue desarrollada para obtener las propiedades físicas de sistemas cuánticos en el intervalo de bajas energías en una dimensión². Este método ha demostrado ser una herramienta muy eficiente para el cálculo de propiedades en sistemas unidimensionales y cuasi-unidimensionales al dar resultados de gran precisión³. Este método sigue la línea de sus precursores: el grupo de renormalización RG [9] y el grupo de renormalización numérica NRG [24], la idea de este último es construir un sistema arbitrariamente grande a partir de bloques sencillos, es decir, se toman por ejemplo, un par de sitios vecinos y se establecen interacciones entre ellos, de modo que los sitios se unen y forman un nuevo bloque del doble de tamaño. Si consideramos que el espacio de Hilbert de un sólo sitio es de tamaño n , entonces al unir los dos bloques obtendremos un espacio de Hilbert de tamaño n^2 , por lo que dicho espacio se trunca manteniendo únicamente los estados que corresponden a las energías más bajas, i.e., los más cercanos al estado fundamental. NRG resulta óptimo para resolver sistemas tipo Kondo [10] en donde la interacción entre bloques es constante y no existe una separación en la escala energética, pero presentó grandes dificultades en sistemas con interacciones constantes, estos sistemas carecen de una separación en la escala de energías, y es en este sentido que surge DMRG como una modificación sustancial que permitió el estudio de esta clase de sistemas.

¹Por sus siglas en inglés, *Density matrix renormalization group*

²El método surge originalmente para resolver problemas en 1D, pero también es aplicable a sistemas cuyo espacio de configuración tenga una topología del tipo árbol [22].

³Por ejemplo, el estado fundamental de una cadena de Heisenberg de $S = 1$ puede ser calculada con una precisión del orden de 10^{-10} sin mucho trabajo computacional [23].

4.1. Fundamentos del método DMRG

El estudio de los materiales requiere de la comprensión y análisis de las estructuras que los componen; estructuras que resultan ser demasiado complejas a pesar de estar formadas por unidades que son relativamente sencillas (electrones, protones y neutrones). La interacción entre estas pequeñas unidades es el origen de todas las propiedades (ópticas, electrónicas, etc.) de los materiales. Describir estas propiedades en términos de las unidades que componen al material se convierte en un problema muy complejo esto debido a la enorme cantidad de grados de libertad que hay que tomar en cuenta. Una forma de lidiar con este problema es construir nuevas unidades constituidas de pequeños grupos de las unidades más elementales, que llamaremos bloques. Estos bloques se eligen de modo que hereden de manera aproximada las propiedades del conjunto de unidades que lo conforman, para que de este modo se tenga una descripción aproximada del sistema usando una cantidad menor de grados de libertad. La idea básica detrás del grupo de renormalización es aplicar una transformación al Hamiltoniano del sistema, la cual elimine grados de libertad irrelevantes para la descripción del sistema en un intervalo dado de energía, es decir, dado un Hamiltoniano H de un sistema con N variables (electrones, espines, etc.) y una transformación del grupo de renormalización denotada por R_a , se tendrá que R_a mapea el Hamiltoniano original H a otro Hamiltoniano H' ,

$$H' = R_a(H). \quad (4.1)$$

Lo importante aquí es que el nuevo Hamiltoniano ahora cuenta con N' variables, donde $N' = N/a$ y a es la constante de la red del sistema, de modo que $N' < N$, obteniendo así un sistema más manejable. En el trabajo de L. Kadanoff [9] se introduce el concepto de bloque, en el cual se propone un sistema de espines bidimensional (véase figura 4.1) que se secciona en bloques de tamaño λa con $\lambda > 1$, cada uno de los bloques representa una nueva variable de espín y el sistema se estudia bajo una transformación de escala:

$$\begin{aligned} a &\rightarrow \lambda a, \\ N_\lambda &= \lambda^{dim} \quad \text{el número de espines por bloque,} \\ \tilde{S}_k &= \chi \sum_{i_k=1}^{N_\lambda} S_{ik} \quad \text{nueva variable de espín,} \end{aligned}$$

donde k numera cada bloque e i_k numera cada espín en el k -ésimo bloque. Mediante esta transformación se conservan las propiedades a grandes escalas del sistema. L. Kadanoff concluyó que las transformaciones preservan la forma del modelo haciendo que el Hamiltoniano original se transforme en otro con una estructura idéntica. K. Wilson empleó el grupo de renormalización para resolver el problema de Kondo [24], al transformar el problema de un metal con una impureza magnética, al de una cadena lineal con la impureza en un extremo⁴. La manera en la que solucionó este problema

⁴El grupo de renormalización también debe sus orígenes a Widom [25] quien propuso en el ámbito de las transiciones de fase, que un sistema cerca de un punto crítico está dominado por fluctuaciones

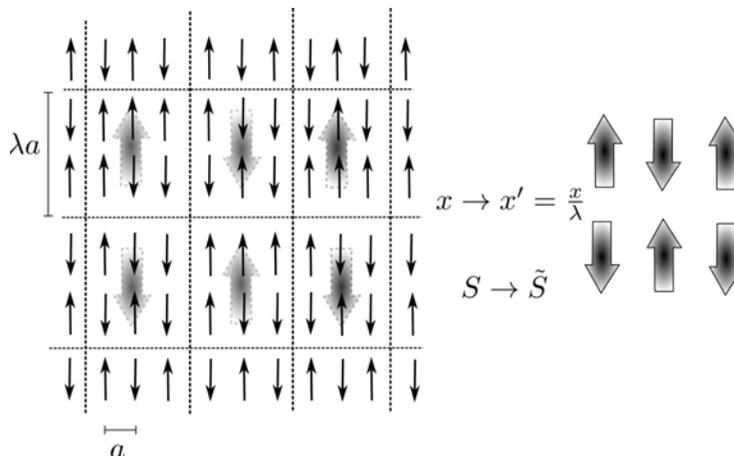


Figura 4.1: Transformación de una red de espines en bloques. La Transformación se lleva a cabo al remplazar al conjunto de espines dentro de un rectángulo delimitado por las líneas punteadas, por un solo espín que toma el valor promedio de estos.

es conocida como NRG. Este desarrollo hizo acreedor a K. Wilson del premio Nobel en 1983.

Aunque NRG da buenos resultados para sistemas tipo Kondo, el método falla en sistemas de interacciones constantes entre bloques generando grandes errores debidos al truncamiento del espacio de Hilbert que se realiza en cada transformación del sistema. Por esta razón S. White desarrolló el método DMRG, dicho método difiere de NRG en la selección de las condiciones de frontera y en la manera de truncar el espacio de Hilbert, en donde la transformación ahora se realiza en términos de los estados más probables, permitiendo realizar cálculos de propiedades del estado fundamental para sistemas fuertemente correlacionados.

4.2. El método DMRG

El grupo de renormalización con matrices de densidad fue desarrollado por Steven R. White en 1992 [26]. La filosofía de este método, que la distingue de sus precursores (RG y NRG), es que cuando un sistema es seccionado en bloques, éstos no deben de estar aislados. El bloque debe de estar relacionado con sus alrededores si se quiere escoger los estados que mejor lo representen. El método consiste de un par de algoritmos, los llamados algoritmos finito e infinito de DMRG. Ambos algoritmos comparten dentro de su metodología un tratamiento por bloques de una red de sitios, donde se considera al sistema conectado a un reservorio de partículas, quien también se trata como si fuese un segundo bloque. El conjunto de estos dos bloques es conocido como un superbloque (véase figura 4.2).

con un alcance espacial ξ , llamado longitud de correlación, por lo que detalles del sistema en escalas menores que ξ se pueden despreciar.

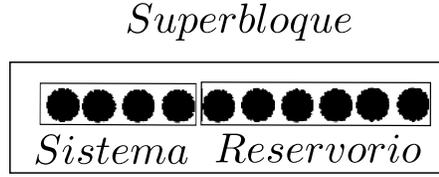


Figura 4.2: Superbloque compuesto de la unión de un sistema de 4 sitios con un reservorio de 6 sitios.

La idea es estudiar la dinámica de un bloque pequeño y encontrar su estado de más baja energía, y a partir de este estado obtener el “estado de bloque” que mejor se ajuste, lo cual se logra al introducir la matriz de densidad, que contiene la información requerida para realizar los cálculos de cualquier propiedad del sistema. Con esto, el estado del sistema puede ser representado de manera acertada por los m estados más probables de la matriz de densidad del sistema.

4.2.1. Matriz de densidad

Si etiquetamos las bases de los estados del sistema (el bloque izquierdo) con $|i\rangle$ y la base del reservorio (bloque derecho o alrededores) con $|j\rangle$, entonces la función de onda de un estado estará dada por

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |i\rangle \otimes |j\rangle. \quad (4.2)$$

Considerando el operador A de un observable que solamente actúa sobre los estados del sistema, podemos calcular su valor esperado como sigue:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle \\ &= \sum_{i,j,i',j'} \psi_{i,j}^* \psi_{i',j'} \langle j | \langle i | A | i' \rangle | j' \rangle. \end{aligned} \quad (4.3)$$

En la ecuación (4.3) tenemos una suma de estados del tipo $\langle j | j' \rangle$, los cuales cumplen que $\langle j | j' \rangle = \delta_{j,j'}$. Con esto podemos reescribir (4.3) como:

$$\sum_{i,j,i'} \psi_{i,j}^* \psi_{i',j} \langle i | A | i' \rangle = \sum_{i,i'} \langle i | A | i' \rangle \rho_{ii'}, \quad (4.4)$$

en donde

$$\rho_{ii'} = \langle i | \rho | i' \rangle = \sum_j \psi_{i,j}^* \psi_{i',j}, \quad (4.5)$$

ρ es el operador de densidad que únicamente actúa sobre el sistema. El valor esperado de una observable se puede escribir entonces como

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \psi \rangle &= \sum_i \langle i | A \sum_{i'} | i' \rangle \langle i' | \rho | i \rangle \\ &= \sum_i \langle i | A \rho | i \rangle = \text{Tr}(A\rho), \end{aligned} \quad (4.6)$$

en esta última línea se ha utilizado la completéz de los estados $|i\rangle$, i.e.,

$$\sum_{i'} |i'\rangle\langle i'| = 1. \quad (4.7)$$

De la definición del operador de densidad (4.5) notamos que $\rho_{i,i'} = \rho_{i,i'}^*$, de modo que el operador es Hermítico (la demostración se encuentra en la ref. [27]), con esto es posible diagonalizar el operador y asociarle un conjunto completo y ortonormal de eigenvectores que denotaremos por $|\alpha_i\rangle$, cada uno de ellos con su respectivo eigenvalor ω_i . En esta nueva base el operador de densidad se expresa como

$$\rho = \sum_i \omega_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|, \quad (4.8)$$

en donde

$$\omega_i \geq 0, \quad (4.9)$$

y

$$\sum_i \omega_i = 1. \quad (4.10)$$

La ecuación (4.8) es de crucial importancia para el método. Gracias a esta descomposición que se puede discriminar cuáles estados son más probables que otros a través de los valores de ω_i . Se mantienen solo aquellos estados que tengan un valor significativo de ω_i y se descarta el resto esperando obtener así una buena representación del sistema. La decisión de cuantos estados $|\alpha_i\rangle$ se deben mantener es un tanto arbitraria y se modifica de acuerdo a los resultados de convergencia (o la falta de ella) del estado fundamental del sistema. Se dice que el sistema se encuentra en un estado puro si solo uno de los eigenvalores ω_i es distinto de cero, de otra forma el sistema se encuentra en un estado mixto, que tiene contribuciones de otros $|\alpha_i\rangle$.

Es posible que los eigenestados más probables nos den una representación adecuada del sistema. Para esto supongamos que de alguna manera hemos diagonalizado el superbloque y obtenido el estado fundamental $|\Psi\rangle$, entonces nos interesa generar un conjunto de estados $|u^\alpha\rangle$ con $\alpha = 1, \dots, m$ (donde m es el número de estados más probables) de modo que

$$|u^\alpha\rangle = \sum_i u_i^\alpha |i\rangle, \quad (4.11)$$

sean óptimos para representar a $|\Psi\rangle$, además de que se cumpla con la condición $\langle u^\alpha | u^{\alpha'} \rangle = \delta_{\alpha,\alpha'}$. Con estos estados queremos construir una expansión para $|\Psi\rangle$ de la forma

$$|\Psi\rangle \simeq |\bar{\Psi}\rangle = \sum_{\alpha,j} a_{\alpha,j} |u^\alpha\rangle |j\rangle, \quad (4.12)$$

lo que nos lleva a buscar el estado $|\bar{\Psi}\rangle$ tal que minimice

$$||\Psi\rangle - |\bar{\Psi}\rangle|^2. \quad (4.13)$$

Sin pérdida de generalidad podemos escribir

$$|\bar{\Psi}\rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha} |u^{\alpha}\rangle |v^{\alpha}\rangle, \quad (4.14)$$

en donde $\langle j|v^{\alpha}\rangle = N_{\alpha} a_{\alpha,j}$. Aquí se elige N_{α} de modo que se normalice la proyección, es decir, $\sum_j |v_j^{\alpha}|^2 = 1$. El término en (4.13) que queremos minimizar se transforma entonces en

$$\sum_{i,j} \left(\psi_{i,j} - \sum_{\alpha=1}^m a_{\alpha} \langle i|u^{\alpha}\rangle \langle j|v^{\alpha}\rangle \right)^2. \quad (4.15)$$

La minimización la queremos realizar sobre todos los u^{α}, v^{α} y a_{α} dado un valor de m . Este problema se resuelve recurriendo al método del álgebra lineal conocido como descomposición de una matriz en valores singulares (SVD)⁵, para esto, habremos de descomponer a $|\Psi\rangle$ como sigue:

$$|\Psi\rangle = UDV^T, \quad (4.16)$$

en donde U es una matriz $n \times l$ formada por l vectores columna ortonormales y V es una matriz $l \times l$ formada por l vectores también ortonormales. El método nos dice que los u^{α} , v^{α} y a_{α} que minimizan están dados como sigue: los m elementos diagonales más grandes en magnitud de D son los a_{α} y las columnas de U y V son los u^{α} y v^{α} , respectivamente. Como ya habíamos mencionado, el operador de densidad para un estado puro del sistema es:

$$\begin{aligned} \rho &= |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= UDV^T(VDU^T) \\ &= UD^2U^T, \end{aligned} \quad (4.17)$$

de modo que U diagonaliza a ρ . Los eigenvalores de ρ son $\omega_i = a_{\alpha}^2$ y representan la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado $|u^{\alpha}\rangle$, los cuales son eigenestados de ρ . Si se consideran únicamente los primeros m valores de ρ , que representan los estados más probables, el error que se comete al descartar $n - m$ estados se puede cuantificar como

$$Err = 1 - \sum_{i=1}^m \omega_i. \quad (4.18)$$

De esta forma se puede hacer una selección de estados más representativos para un sistema. También podemos considerar que el superbloque se encuentra en un estado

⁵Por sus siglas en inglés *singular value decomposition*.

mixto, lo cual se espera de un sistema a temperatura finita. Construyamos el caso mixto al asumir que el superbloque tiene una probabilidad W_K de estar en el estado $|\Psi^k\rangle$. En este caso (4.15) queda como

$$\sum_k W_k \sum_{i,j} \left(\psi_{i,j}^k - \sum_{\alpha=1}^m a_\alpha^k \langle i|u^\alpha\rangle \langle j|v^{k,\alpha}\rangle \right)^2. \quad (4.19)$$

Nos interesa obtener un conjunto de estados u^α óptimos, mientras que se tiene la libertad de escoger diferentes v^α para cada estado k . Minimizando sobre u^α , $v^{k,\alpha}$ y a_α^k encontramos que

$$\rho|u^\alpha\rangle = \omega_\alpha|u^\alpha\rangle, \quad (4.20)$$

con

$$\rho_{i,i'} = \sum_k W_k \sum_j \psi_{i,j}^k \psi_{i',j}^k \quad (4.21)$$

y

$$\omega_\alpha = \sum_k W_k (a_\alpha^k)^2. \quad (4.22)$$

Concluimos que se obtiene el mismo resultado que en el caso del sistema puro. Los estados óptimos que es importante retener son los eigenvalores de la matriz de densidad más grandes.

4.2.2. Algoritmo de sistema infinito

El algoritmo infinito, está basado en el grupo de renormalización numérica de Wilson. Se inicia este procedimiento al considerar un sistema pequeño, de unos cuantos sitios, para que sea sencillo de resolver de manera exacta. Este sistema crecerá cuando le añadamos de manera iterativa sitios localizados entre el sistema y el reservorio (véase figura 4.3). Los operadores del sistema deben ser transformados a cada paso para expresarlos en la base dada por los estados más probables de la matriz de densidad. Este algoritmo corresponde a la fase inicial en la aproximación del estado fundamental del sistema e introduce varios de los pasos a seguir en el algoritmo finito descrito más adelante. El algoritmo infinito es el siguiente:

1. Se construye un superbloque pequeño $S + R$ de L sitios. El espacio de Hilbert será pequeño permitiéndonos resolver de forma exacta la ecuación de Schrödinger para obtener la función de onda $|\Psi\rangle$ del estado base.

2. Utilizar $|\Psi\rangle$ para construir la matriz de densidad reducida y diagonalizarla. Luego se ordenan los valores propios de esta matriz de manera descendente manteniendo únicamente los primeros m vectores propios correspondientes a los valores

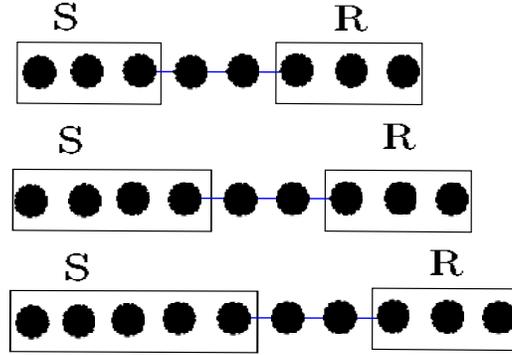


Figura 4.3: Esquema del algoritmo infinito. En cada iteración se añade un sitio al sistema y luego se conecta con el reservorio. El sistema se puede crecer hasta una longitud arbitrariamente grande.

propios más grandes. Obteniendo así la mejor representación del sistema.

3. Expresar los operadores A del sistema en la nueva base truncada, dada por la matriz de densidad reducida. La transformación se realiza de acuerdo con la proyección

$$\bar{A} = UAU^T, \quad (4.23)$$

en donde U es la matriz de transformación formada por los primeros m vectores columna de la matriz de densidad.

4. Añadir un solo sitio a S para obtener un sistema nuevo S' más grande, pero con un espacio de Hilbert de $m \times n < n^2$ estados.

5. Se conecta S' con un reservorio R , el cual usualmente es una reflexión de S' o bien consta de un bloque de unos pocos sitios que se puede resolver de forma exacta. De este modo se construye nuevamente el superbloque.

6. Se calcula el estado fundamental del nuevo superbloque $S' + R$, usando los algoritmos de Davidson o de Lanczos (véase apéndice A) para obtener la función de onda en el superbloque:

$$|\Psi\rangle = \sum_i^{m \times n} \sum_j^n \Psi_{i,j} |i\rangle |j\rangle. \quad (4.24)$$

7. Repetir empezando desde el paso 2, esta vez sustituyendo S por S' .

Antes de concluir esta sección debemos de hacer un par de consideraciones. Primero, en los procesos indicados en los pasos 4 y 5, los operadores deben de ser reconstruidos de acuerdo al nuevo superbloque. Un operador en el sistema con elementos de

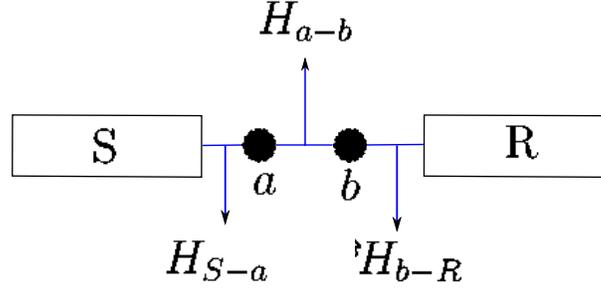


Figura 4.4: Conexión del sistema S con el reservorio R mediante los sitios a y b .

matriz $A_{i,i'}^S$ actúa solamente en los estados del sistema, del mismo modo un operador del reservorio $A_{j,j'}^R$ actúa únicamente en los estados del reservorio. Por lo que los operadores se pueden escribir en la base del superbloque como:

$$A_{i,j,i',j'} = A_{i,i'}^S \delta_{j,j'} + A_{j,j'}^R \delta_{i,i'}. \quad (4.25)$$

En segundo lugar, hay que considerar términos extra en el Hamiltoniano, los cuales surgen de las interacciones entre S y R (véase figura 4.4). El Hamiltoniano total está formado por:

$$H = H_S + H_a + H_b + H_{S-a} + H_{a-b} + H_{b-R} + H_R. \quad (4.26)$$

De esta forma es posible construir el Hamiltoniano completo por medio de bloques. Además, es conveniente explotar las simetrías, que en general dependen del modelo a estudiar, algunos ejemplos son:

$$[H, S^2] = [H, S^z] = [H, N] = 0, \quad (4.27)$$

en donde S es el operador total de espín y N es el operador de número. El algoritmo infinito no resulta del todo adecuado para la descripción de sistemas de longitud fija. Como en cada iteración se agrega una nueva partícula, mientras que la densidad se mantiene constante, no es posible observar efectos de termalización. En estos casos la aproximación haciendo uso del algoritmo finito que presentaremos en la siguiente sección resulta más apropiada.

4.2.3. Algoritmo de sistema finito

En el algoritmo finito el reservorio se tiene que elegir de manera distinta, se elige de modo que la longitud L del superbloque se mantenga fija a cada pasó, es decir $L_S + L_R = L$. El algoritmo finito consiste de los siguientes pasos:

1. Se construye un superbloque con la longitud deseada L usando el algoritmo infinito, guardando en cada iteración todos los operadores representados en las bases truncadas. En la última iteración se asignan nuevas etiquetas. Ahora identificamos al

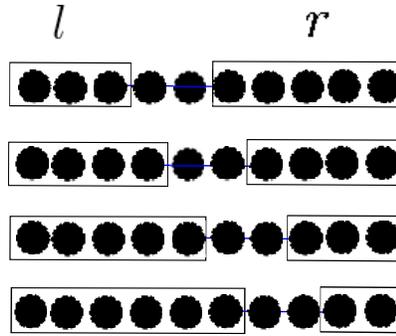


Figura 4.5: Esquema del algoritmo finito. El bloque derecho cede un sitio en cada iteración al bloque izquierdo, para mantener un sistema total de longitud finita.

sistema como bloque izquierdo y al reservorio como bloque derecho (véase figura 4.5), ambos con longitudes l y r , respectivamente.

2. Se añade un sitio al bloque derecho, por lo que $r' = r + 1$, asimismo se añade un solo sitio al bloque izquierdo de longitud $l = L - r' - 1$ y se construye un superbloque usando estos dos bloques.

3. Se diagonaliza el superbloque y se ejecutan los pasos 2 y 3 del algoritmo infinito.

4. Se etiqueta $r = r'$, se regresa al paso 2 y se repite hasta alcanzar el extremo izquierdo. Durante este proceso, el bloque derecho aumenta su longitud en la medida que el bloque izquierdo disminuye su tamaño. Este proceso se conoce como barrido de derecha a izquierda.

5. Se añade un sitio al bloque izquierdo tal que $l' = l + 1$. Después se añade un sitio al bloque derecho de tamaño $r = L - l' - 1$, para construir un superbloque con estos dos bloques.

6. Ejecutar el paso 3.

7. Etiquetar $l = l'$. Regresar al paso 5 ejecutándolo hasta que se haya alcanzado el extremo derecho. Este proceso se reconoce como barrido de izquierda a derecha.

8. Repetir los pasos del 2 al 7 hasta que se tenga la convergencia del estado fundamental.

Para sistemas dados de una cierta longitud L , este algoritmo arroja resultados que son sustancialmente más precisos que aquellos dados por el algoritmo infinito, ya que este emplea la información de bloques que están en contacto todo el tiempo con un universo del que se tiene mucha información, con lo que a cada barrido se encuentra una mejor convergencia de la energía del sistema.

4.2.4. Cálculo de observables

Los observables se calculan a partir de la función de onda del superbloque $|\Psi\rangle$. Para realizar estos cálculos hay que tener claro las bases que se han de utilizar dependiendo del operador, el cual puede actuar sobre los estados del bloque derecho o bien del izquierdo. Las funciones de correlación son un punto más sutil, debido a que se trata de productos de operadores que operan sobre distintos sitios (que pueden estar en diferentes bloques), los cuales no necesariamente actúan sobre el mismo conjunto de estados. Consideremos un operador A que actúa sobre el sitio i al cual corresponde una base completa de estados $|i\rangle$. Si se añade el sitio i a un bloque (pensemos en el bloque izquierdo) de longitud $l - 1$, al cual corresponde una base de estados $|m_{l-1}\rangle$, entonces los elementos de matriz de A en la nueva base $|m_l\rangle$, en donde ya se ha incluido el sitio i , son:

$$\langle m_l | A | m_l \rangle = \sum_{\substack{m_{l-1} \\ i, i'}} \langle m_l | m_{l-1} i \rangle \langle i | A | i' \rangle \langle m_{l-1} i' | m_l \rangle. \quad (4.28)$$

De este modo se actualiza la representación de los operadores en la base extendida $|m_{l-1}\rangle \otimes |i\rangle$, proceso necesario al agregar un nuevo sitio. Una vez que el sistema ha convergido, procedemos a calcular el valor esperado del operador A , el cual está dado por $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$. Para un superbloque, cuya base de estados es $|m_L n_a n_b m_R\rangle$, en donde $|m_L\rangle$ y $|m_R\rangle$ son las bases truncadas para el sistema y el reservorio respectivamente y $|n_a\rangle$ y $|n_b\rangle$ son las bases completas de los sitios a y b que sirven como conectores. El valor esperado de un operador que actúe únicamente en el bloque izquierdo es:

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \sum_{\substack{m_L, m'_L \\ n_a, n_b \\ m_R}} \langle \Psi | m_L n_a n_b m_R \rangle \langle m_L | A | m'_L \rangle \langle m'_L n_a n_b m_R | \Psi \rangle, \quad (4.29)$$

donde $\langle m_L | A | m'_L \rangle$ es la representación del operador A en la base truncada del bloque. Ahora calculemos los valores esperados de productos de dos operadores A y B . Como ya habíamos mencionado, pueden presentarse dos situaciones: ambos operadores actúan sobre el mismo bloque u operan en distintos bloques. Analicemos el caso en que los dos operadores actúan en distintos bloques. La representación de cada operador en su base correspondiente está dada por $\langle m_L | A | m'_L \rangle$ y $\langle m_R | B | m'_R \rangle$, de modo que la función de correlación es:

$$\langle \Psi | AB | \Psi \rangle = \sum_{\substack{m_L, m'_L \\ n_a, n_b \\ m_R, m'_R}} \langle \Psi | m_L n_a n_b m_R \rangle \langle m_L | A | m'_L \rangle \langle m_R | B | m'_R \rangle \langle m'_L n_a n_b m'_R | \Psi \rangle. \quad (4.30)$$

Para funciones de correlación en donde los operadores actúan en el mismo bloque se construye el operador AB cuando se encuentran en distintos bloques, por ejemplo, tomemos A actuando en el bloque de longitud $l - 1$ y a B actuando en el sitio i que será unido al bloque, entonces las expresiones correctas para los elementos de matriz

de estos operadores son $\langle m_{l-1}|A|m'_{l-1}\rangle$ y $\langle i|B|i'\rangle$, por lo que en la nueva base reducida del bloque de longitud l , los elementos de matriz de AB serán

$$\langle m_l|AB|m_l\rangle = \sum_{\substack{m_{l-1}, m'_{l-1} \\ i, i'}} \langle m_l|m_{l-1}i\rangle \langle m_{l-1}|A|m'_{l-1}\rangle \langle i|B|i'\rangle \langle m_{l-1}i|m'_l\rangle. \quad (4.31)$$

4.2.5. Transformación de la función de onda

Recordemos que en el algoritmo de DMRG es necesario diagonalizar el Hamiltoniano del superbloque a cada paso, lo que representa un tiempo de computo significativo. Esta diagonalización se lleva a cabo empleando el algoritmo de Lanczos (véase el apéndice A) o el de Davidson, en ambos algoritmos se utiliza como punto de partida un vector arbitrario, que en este caso se trata de una función de onda arbitraria. A partir de dicha función de onda se llevan a cabo iteraciones y se detiene el algoritmo una vez que se ha alcanzado la convergencia, lo que nos dará la función de onda del estado fundamental. Es por este motivo que se vuelve crucial la implementación de una función de onda, como vector de partida del algoritmo, que sea lo más similar posible a la función buscada, ya que con esto se reduce considerablemente el número de iteraciones necesarias para la convergencia y con ello se minimiza el tiempo de cómputo. Un buen candidato para ser nuestro vector arbitrario inicial, para el caso del algoritmo finito de DMRG, es la función de onda que resulta del paso previo en el algoritmo. Esta función de onda proviene de un superbloque que tiene menos sitios que el actual sistema y no es del todo apropiada; sin embargo, la función de onda se puede transformar y expresar en términos de la base que corresponde a la configuración del superbloque actual. Si contamos con la función de onda del superbloque previo $|\Psi\rangle_l$, de longitud l y queremos realizar el producto $H_{l+1}|\Psi\rangle_l$, primero debemos de llevar a cabo la transformación $|\Psi\rangle_l \rightarrow |\Psi\rangle_{l+1}$. Para esto, siguiendo la notación de la Ref. [23], en el paso l un estado en la base del superbloque está dado por

$$|\alpha_l s_{l+1} s_{l+2} \beta_{l+3}\rangle = |\alpha_l\rangle \otimes |s_{l+1}\rangle \otimes |s_{l+2}\rangle \otimes |\beta_{l+3}\rangle, \quad (4.32)$$

en donde $|\alpha_l\rangle$ es la base del sistema (bloque izquierdo) de l sitios, $|s_{l+1}\rangle$ y $|s_{l+2}\rangle$ son las bases de los sitios que conectan al sistema y al reservorio y $|\beta_{l+3}\rangle$ es la base del reservorio (bloque derecho) que consiste de los sitios $l+3, l+4, \dots, L-1, L$. Aquí, el sistema se ha construido de izquierda a derecha, entonces debemos de transformar estos estados a la base del superbloque de longitud $l+1$

$$|\alpha_l s_{l+1} s_{l+2} \beta_{l+3}\rangle \rightarrow |\alpha_{l+1} s_{l+2} s_{l+3} \beta_{l+4}\rangle. \quad (4.33)$$

La base del nuevo sistema esta dada por:

$$|\alpha_{l+1}\rangle = \sum_{s_{l+1}, \alpha_l} L^{l+1}[s_{l+1}]_{\alpha_{l+1}, \alpha_l} |\alpha_l\rangle \otimes |s_{l+1}\rangle, \quad (4.34)$$

en donde la matriz de transformación $L^{l+1}[s_{l+1}]_{\alpha_{l+1}, \alpha_l}$ está formada por los eigenvalores de la matriz de densidad $u_{s_{l+1}\alpha_l}^{\alpha_{l+1}}$ con los valores propios más representativos para

el sistema. Del mismo modo, la base para la parte derecha del superbloque esta dada por:

$$|\beta_{l+3}\rangle = \sum_{s_{l+3}, \beta_{l+4}} R^{l+3}[s_{l+3}]_{\beta_{l+3}, \beta_{l+4}} |s_{l+3}\rangle \otimes |\beta_{l+4}\rangle. \quad (4.35)$$

Una función de onda se escribe en la iteración l como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_l, s_{l+1}, s_{l+2}, \beta_{l+3}} \psi(\alpha_l s_{l+1} s_{l+2} \beta_{l+3}) |\alpha_l s_{l+1} s_{l+2} \beta_{l+3}\rangle. \quad (4.36)$$

Ahora bien, necesitamos escribir esta función en la base de la iteración $l+1$, $|\alpha_{l+1} s_{l+2} s_{l+3} \beta_{l+4}\rangle$. Esta transformación no puede ser exacta debido al proceso de truncamiento que se hace al pasar de $|\alpha_l s_{l+1}\rangle$ a $|\alpha_{l+1}\rangle$. Sin embargo, se puede considerar como exacta cometiendo un error muy pequeño de modo que

$$\sum_{\alpha_{l+1}} |\alpha_{l+1}\rangle \langle \alpha_{l+1}| \simeq 1. \quad (4.37)$$

Con esto se pueden escribir los coeficientes de la función de onda en la nueva base como

$$\psi(\alpha_{l+1} s_{l+2} s_{l+3} \beta_{l+4}) \simeq \sum_{\alpha_l s_{l+1} \beta_{l+3}} L^{l+1}[s_{l+1}]_{\alpha_{l+1}, \alpha_l} \psi(\alpha_l s_{l+1} s_{l+2} \beta_{l+3}) R^{l+3}[s_{l+3}]_{\beta_{l+3}, \beta_{l+4}}. \quad (4.38)$$

La transformación (4.38) requiere menor tiempo de cómputo en relación con otros procesos del algoritmo DMRG. Esta transformación se lleva a cabo cada vez que se añade un sitio al bloque izquierdo y se realiza un proceso análogo cuando se añade un sitio al bloque derecho. De esta forma se mejora la eficiencia de DMRG. En la implementación de DMRG existen varios métodos que permiten hacerlo más óptimo [8].

Capítulo 5

Resultados

En este capítulo investigamos el efecto de campos magnéticos modulados espacialmente aplicados a un sistema lineal de espines. Consideraremos el modelo de Ising en una dimensión con espines $S = 1/2$ bajo la influencia de un campo externo $h(r)$, donde $h(r)$ toma la forma de funciones aleatoria, aperiódicas y periódicas. El estudio de estos sistemas es interesante debido a que el orden afecta las propiedades electrónicas del sistema, con lo cual se puede favorecer, por ejemplo, el apareamiento electrónico, entre otras propiedades [28]. En esta clase de sistemas se observa la formación de dominios magnéticos que resultan de la interacción con el campo externo. En este capítulo presentamos resultados, obtenidos con el método de DMRG, de propiedades del estado fundamental de los sistemas, como por ejemplo, mediciones del factor de estructura de espín, a través del cual se pueden distinguir distintos tipos de estructuras magnéticas.

5.1. Modelo de Ising

El modelo de Ising, aunque es simple, es representativo para investigar las características esenciales de fenómenos colectivos. Dichos fenómenos dependen de los mecanismos de interacción entre partículas. El modelo fue presentado por primera vez por E. Ising en 1925 ¹, quien quería representar sistemas físico-químicos mediante una red de moléculas, las cuales interactúan con las partículas en su vecindad inmediata. El modelo se enfoca a tratar la interacción entre los momentos magnéticos intrínsecos de cada partícula es decir, la interacción entre los espines (véase figura 5.1), esto con la finalidad de modelar sistemas magnéticos reales.

El caso más sencillo en este modelo es el caso isotrópico en 1D donde no existe una dirección preferencial en ausencia de un campo magnético externo, cuyo Hamiltoniano es

$$H = -J \sum_i^N S_i^z S_{i+1}^z. \quad (5.1)$$

¹Una revisión histórica del modelo es dada por S. G. Brush [29]

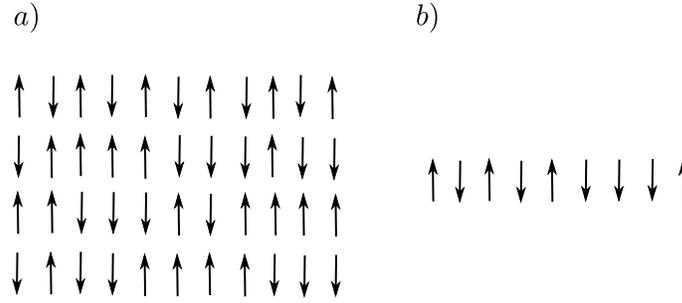


Figura 5.1: (a) Red de espines en $2D$. (b) Cadena de espines.

Aquí las matrices de espín S^z para un sólo sitio están dadas por:

$$S^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

Este modelo se restringe a considerar únicamente la proyección en el eje z del operador total de espín S . En la ecuación (5.1) se han considerado condiciones de frontera periódicas, esto es $S_{N+1}^z = S_1^z$, de modo que la topología del sistema corresponde a la de un anillo. En la ecuación (5.1) el factor J es conocido como la constante de acoplamiento, la cual modula la interacción entre partículas. Se pueden distinguir dos casos que dependen del valor de esta constante: para $J < 0$, la energía de interacción es más pequeña cuando los momentos magnéticos son antiparalelos, por lo que el estado de mínima energía corresponde a una fase antiferromagnética, de modo que los espines de la cadena se alinean antiparalelamente como en los siguientes estados:

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\dots\rangle \quad \text{o} \quad |\Psi\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle,$$

con un valor esperado de espín igual a:

$$\langle S^z \rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } N \text{ es par} \\ \pm\frac{1}{2} & \text{si } N \text{ es impar,} \end{cases}$$

siendo N el número de espines del sistema. Para el caso en el que $J > 0$, el sistema se encontrará en un estado ferromagnético, en donde todos los espines estarán alineados paralelamente en uno de los siguientes estados degenerados

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\dots\rangle \quad \text{o} \quad |\Psi\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\dots\rangle,$$

y el valor esperado de $\langle S^z \rangle$ para sistemas de longitud par o impar será:

$$\langle S^z \rangle = \pm\frac{N}{2}.$$

Con el método DMRG expuesto en el capítulo anterior calculamos la energía del estado fundamental, E_0 , para distintos valores de J y una cadena de $N = 256$ espines. Las energías obtenidas se muestran en la figura 5.2. Consideremos ahora

un caso más general para el modelo de Ising en donde se incluye la interacción con campos magnéticos externos, los cuales pueden ser longitudinales y/o transversales, a este modelo corresponde el Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_i^N S_i^z S_{i+1}^z - \sum_i^N h^x(i) S_i^x - \sum_i^N h^z(i) S_i^z, \quad (5.3)$$

donde

$$S^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

Aun en el caso en que los campos externos sean homogéneos, es decir, si $h^z(i) = h^z$ y $h^x(i) = h^x$, no se cuenta con una solución analítica [30], sin embargo, un análisis cualitativo puede ser hecho, por ejemplo en el caso en el que h^z sea muy grande en relación con los otros parámetros, los espines se alinearán en la dirección de h^z formando una fase ferromagnética. Si, por otra parte, el campo transversal h^x es más intenso que los demás parámetros del sistema (J y h^z), los espines se alinearán de forma antiparalela formando un sistema antiferromagnético. Por último si los campos transversales y longitudinales son muy débiles en comparación con la constante de acoplamiento se recupera el modelo (5.1). En este trabajo nos interesa estudiar el modelo de Ising con un campo magnético longitudinal externo, $h(i)^z$, el cual puede variar en cada sitio de la cadena. El Hamiltoniano correspondiente es:

$$H = -J \sum_i^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z - \sum_i^N h^z(i) S_i^z. \quad (5.5)$$

Pese a la simplicidad del Hamiltoniano (5.5), éste no puede resolverse de manera exacta para campos inhomogéneos, por lo que debemos hacer uso de métodos numéricos, en particular nos enfocaremos al estudio numérico de este modelo con DMRG, en donde modularemos el campo magnético externo haciendo uso de distintas secuencias espaciales. Debido a que los resultados con DMRG convergen más rápidamente en sistemas bajo condiciones abiertas de frontera, la interacción en el Hamiltoniano (5.5) se aplica a los sitios $i = 1, \dots, N - 1$. Usamos además, un número máximo de $m = 256$ estados de la matriz de densidad y se realizaron hasta 6 barridas del algoritmo finito, con lo que se encontró que la energía del estado fundamental converge con 8 cifras y el peso de los estados de la matriz de densidad descartados es del orden de 10^{-6} . Para finalizar esta sección mostramos en las figuras 5.2 y 5.3 los cálculos que realizamos para el caso más sencillo de este modelo, en donde el campo magnético es homogéneo, es decir, $h(i)^z = h_z$. En la figura 5.2 se grafica la energía por sitio en función de la constante de acoplamiento J para los casos ferromagnético y antiferromagnético. En la figura 5.3 se muestra la energía por sitio en función del campo magnético externo igualmente para los casos ferromagnético y antiferromagnético. En todos los casos se utilizó un sistema de 256 sitios.

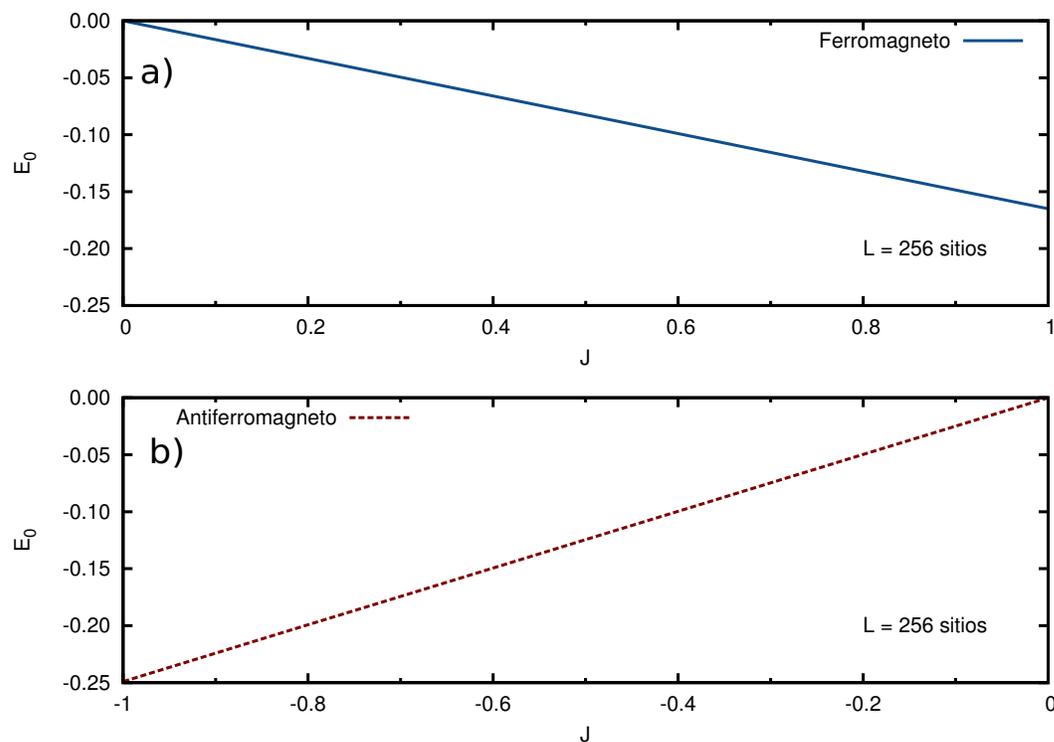


Figura 5.2: Energía por sitio del estado fundamental como función de la constante de acoplamiento. a) $J > 0$, caso ferromagnético. b) $J < 0$, caso antiferromagnético

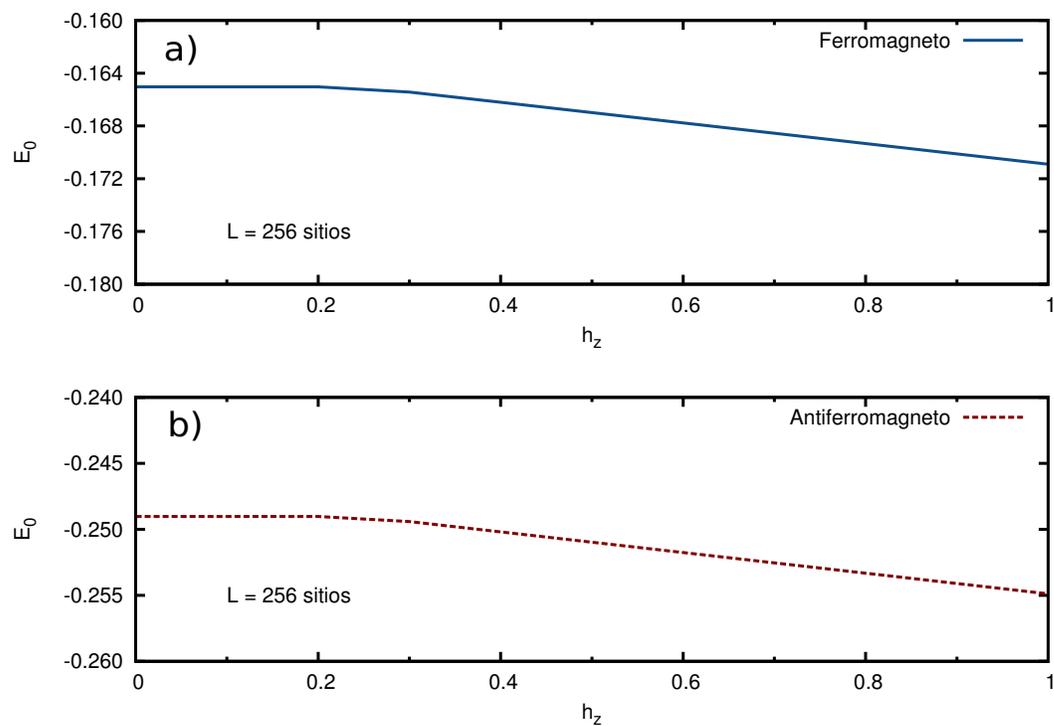


Figura 5.3: Energía por sitio del estado fundamental en función del campo magnético externo. a) Sistemas ferromagnéticos ($J = 1$). b) Sistemas antiferromagnéticos ($J = -1$).

5.2. Factor de estructura de espín

Para discutir los aspectos relacionados con el magnetismo en nuestros sistemas, investigamos el factor de estructura de espín como función del tamaño del sistema y de la constante de acoplamiento J . Consideremos la función de correlación entre dos espines en los sitios i y j denotada por:

$$S_{ij}^z = \langle S_i^z S_j^z \rangle. \quad (5.6)$$

Se define como el factor de estructura de espín a la transformada de Fourier de esta cantidad

$$S^{zz}(q) = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-iq(i-j)} S_{ij}^z = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-iq(i-j)} \langle S_i^z S_j^z \rangle. \quad (5.7)$$

Calculamos el factor de estructura para una cadena de espines ferromagnética ($J = 1$) de 256 sitios sin campo externo h_z . Los resultados se muestran en la figura 5.4, en donde se observa el patrón típico en el factor de estructura para un sistema ferromagnético, el cual consiste de picos que aparecen en momentos de 0 y 2π . Del mismo modo calculamos el factor de estructura en el caso antiferromagnético ($J = -1$), véase figura 5.5, en este caso se observa la formación de un pico centrado en π .

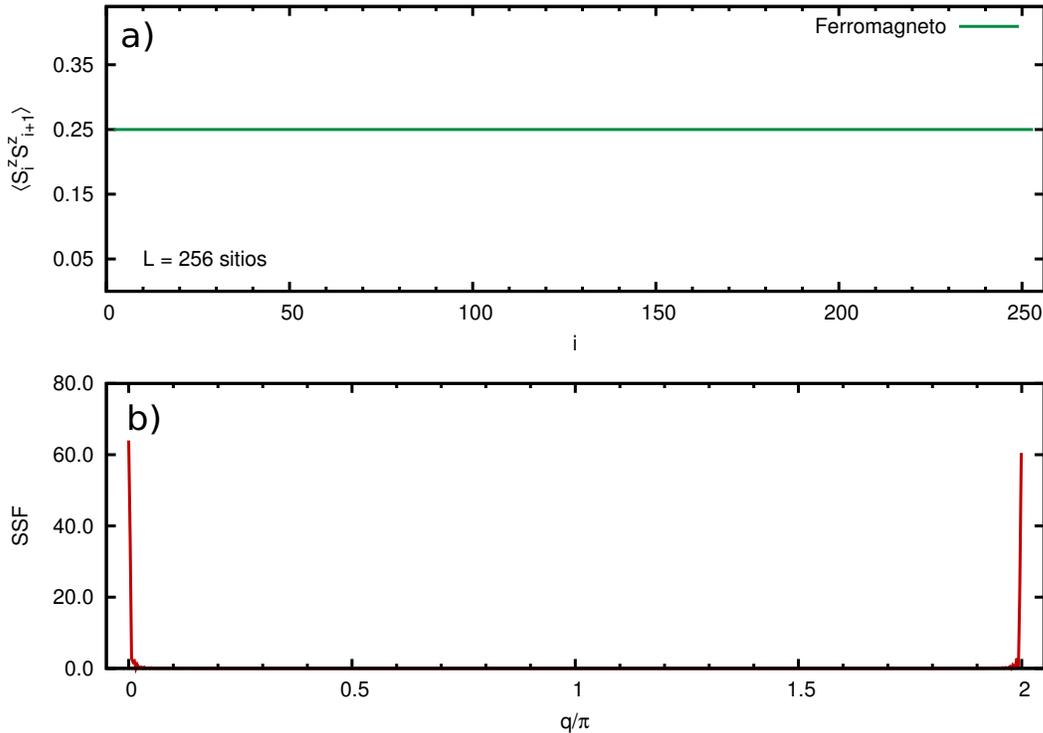


Figura 5.4: a) Función de correlación de espín. b) Factor de estructura de espín para un sistema ferromagnético ($J = 1$) en ausencia de campo externo.

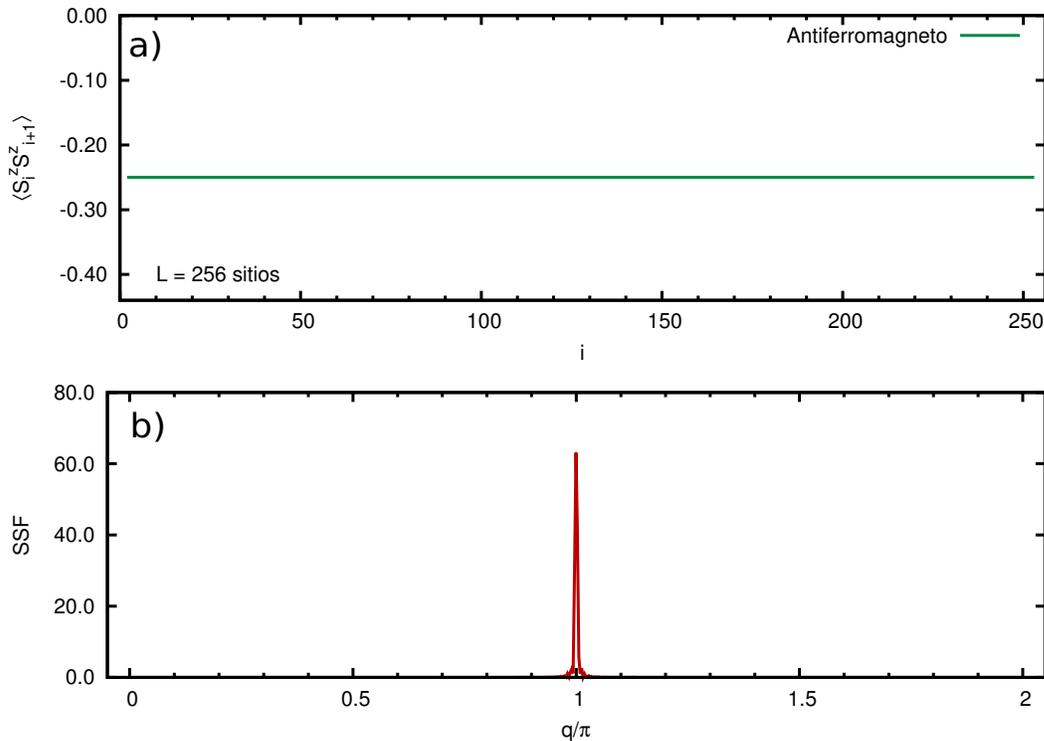


Figura 5.5: a) Función de correlación de espín. b) Factor de estructura de espín para un sistema antiferromagnético ($J = -1$) en ausencia de campo externo.

5.3. Sistemas con campo magnético modulado

En esta sección presentamos los métodos de generación de las secuencias con las que modulamos el campo magnético $h^z(i)$ del modelo (5.5), las características principales de éstas, y finalmente estudiaremos cómo afectan la estabilidad y el orden magnético de los sistemas. Las secuencias espaciales usadas se basan en un sistema binario de valores $\{A, B\}$, cada uno de los cuales estará asociado a un sitio i del sistema siguiendo las reglas de las distintas secuencias descritas en esta sección. Las estructuras aperiódicas y cuasiperiódicas son en principio de una naturaleza matemática, pero resultan ser de gran interés en la física de materia condensada. Contrario a la impresión que se tiene respecto a que los arreglos aperiódicos en una dimensión son sistemas no reales, el desarrollo de nuevos materiales y tecnologías han permitido la creación de arreglos unidimensionales de átomos o sistemas cuyo comportamiento es muy similar. Un ejemplo contundente de la creación de estos sistemas en el laboratorio es la cadena de Fibonacci de R. Merlin [31]. Es así que los sistemas aperiódicos han dejado de ser formas abstractas y se materializan en el laboratorio.

5.3.1. Cadena aleatoria

Empecemos describiendo la secuencia de un campo magnético externo aleatorio en el modelo (5.5). Para estudiar numéricamente este sistema hemos modelado el campo magnético $h^z(i)$ haciendo uso de la función *random* del lenguaje computacional *c++*. Con dicha función se genera una cadena de N números reales aleatorios, el mismo número de sitios de nuestro sistema. Los valores del campo externo h^z se asocian entonces de acuerdo a lo siguiente:

$$h^z(i) = \begin{cases} A & \text{si el número aleatorio del sitio } i \text{ es negativo} \\ B & \text{si el número aleatorio del sitio } i \text{ es positivo,} \end{cases}$$

todos los resultados se obtuvieron usando una sola secuencia aleatoria.

5.3.2. Cadena de Fibonacci

Un método general para la construcción de cadenas (secuencias) consiste en representar los elementos o bloques de construcción usando las letras A y B . La suma de dos letras $A + B$ (o cadenas de letras) equivale a su concatenación AB . De este modo una cadena se forma al operar repetidamente una matriz S , de 2×2 , conocida como matriz de sustitución, la cual tiene entradas reales, enteras y opera sobre un vector $x = (A, B)$. Es así que la secuencia de Fibonacci se genera al aplicar la siguiente regla de sustitución

$$\begin{aligned} A &\rightarrow AB \\ B &\rightarrow A \end{aligned} \tag{5.8}$$

a los elementos $\{A, B\}$. Lo cual es equivalente a emplear la matriz de sustitución S

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AB \\ A \end{pmatrix}. \tag{5.9}$$

La forma más conocida de la formación de la secuencia de Fibonacci es la concatenación recursiva, la cual sigue la regla de que la generación n -ésima de la secuencia, F_n está dada por el producto de las dos generaciones anteriores, es decir

$$F_n = F_{n-1}F_{n-2}, \tag{5.10}$$

con $F_0 = A$ y $F_1 = B$. En la figura 5.6 se muestran las cadenas obtenidas para las primeras 6 generaciones.

No. de generación	$F_n = F_{n-1} F_{n-2}$	Frecuencia de A	Frecuencia de B
0	A	1	0
1	AB	1	1
2	ABA	2	1
3	$ABAA\bar{B}$	3	2
4	$ABAABABA$	5	3
5	$ABAA\bar{B}ABA\bar{B}AA\bar{B}$	8	5
6	$ABAABABA\bar{B}ABA\bar{B}ABA\bar{B}ABA$	13	8
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.

Figura 5.6: Primeras 6 generaciones de la secuencia de Fibonacci.

La ecuación (5.9) puede ser vista como un problema de eigenvalores. Las propiedades de escalamiento de la secuencia se pueden derivar de los eigenvalores correspondientes a la matriz de sustitución S . Una característica de los sistemas cuasiperiódicos es que estos escalan con factores irracionales. Si calculamos los eigenvalores de la ecuación (5.7) obtenemos la siguiente ecuación de eigenvalores:

$$\lambda^2 - \lambda - 1 = 0, \quad (5.11)$$

cuyas soluciones están dadas por:

$$\sigma_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}, \quad (5.12)$$

el valor de $\sigma_+ = 1,618\dots$ es conocido como la *razón dorada*.

5.3.3. Cadena de Thue-Morse

La cadena de Thue-Morse nace de la idea de Prouhet de crear un lenguaje haciendo uso únicamente de dos letras, bajo la condición de que ninguna palabra contenga la misma letra más de tres veces, esta idea fue usada mas tarde por A. Thue [32] y M. Morse [33], quienes la usaron en el ámbito de problemas de secuencias no periódicas y problemas de topología dinámica, respectivamente. La secuencia de Thue-Morse surge de la aplicación de la siguiente regla de sustitución:

$$\begin{aligned} A &\rightarrow AB \\ B &\rightarrow BA \end{aligned}$$

a los elementos $\{A, B\}$. Esta regla de sustitución se puede escribir como

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AB \\ BA \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

en donde la matriz con entradas iguales a 1 se conoce como la matriz S de sustitución. De modo que después de n aplicaciones de la regla se tiene una cadena de 2^n sitios, con una misma cantidad de elementos A y B . De manera análoga a la secuencia de Fibonacci, Thue-Morse se puede generar por concatenación:

$$F_n = F_{n-1} \overline{F_{n-1}} \quad (5.14)$$

con $F_0 = A$ y $\overline{F_0} = B$ (véase la figura 5.7). Es así que si hacemos corresponder a los elementos A y B con los valores h^z y $-h^z$ podemos estudiar numéricamente el modelo (5.5) para un campo $h^z(i)$ que siga la secuencia de Thue-Morse.

No. de generación	$F_n = F_{n-1} \overline{F_{n-1}}$
0	A
1	AB
2	$ABBA$
3	$ABBABAAB$
4	$ABBABAABBAABABBA$
5	$ABBABAABBAABABBABAABABBAABBABAAB$
·	·
·	·
·	·

Figura 5.7: Primeras cinco generaciones de la secuencia de Thue-Morse.

5.4. Energía del estado fundamental

En esta sección presentamos los resultados de la energía del estado fundamental E_0 , para los sistemas descritos en la sección anterior. Se consideran distintos tamaños del sistema, al igual que distintos valores del campo magnético h^z , para sistemas ferromagnéticos ($J = -1$) y para sistemas antiferromagnéticos ($J = 1$). Los resultados se comparan con los de dos sistemas periódicos, el primero con $h^z(i) = h^z = 0$, y el segundo con

$$\langle h^z \rangle = \begin{cases} A & \text{si } i \text{ es par,} \\ B & \text{si } i \text{ es impar.} \end{cases}$$

Recuérdese que los valores de h^z están dados por los valores del conjunto $\{A, B\}$. En las figuras 5.8 y 5.9 presentamos los resultados para el ferromagneto con $h^z \in \{-0,2, 0,2\}$ y $h^z \in \{-0,4, 0,4\}$, respectivamente. Los primeros resultados, es decir para $h^z = |0,2|$, muestran que E_0 para todos los sistemas se concentra en un intervalo entre $-1,5$ y $-2,5$ conforme el tamaño del sistema aumenta. Por el contrario, los resultados con $h^z = |0,4|$ se separan en dos grupos: los resultados para los sistemas periódicos, es decir, para $h^z = 0$ y para el arreglo binario; y los resultados para los sistemas no periódicos, es decir, para las secuencias aleatoria, de Fibonacci y de Thue-Morse. Este último comportamiento se observa también en el caso del antiferromagneto, figuras 5.9 y 5.10, en el cual, las energías de los sistemas no periódicos se distribuyen en un intervalo bien definido. Las diferencias se deben precisamente a las características de cada secuencia y al hecho de que, en cada una de ellas existe un número de valores A distinto del número de valores B para h^z . En el caso del antiferromagneto nos gustaría llamar la atención a los resultados para las cadenas binaria y de Thue-Morse. Ambas cadenas tienen el mismo número de valores A que de valores B , sin embargo, las energías correspondientes son muy distintas. El origen de esto se atribuye al arreglo de dichos valores.

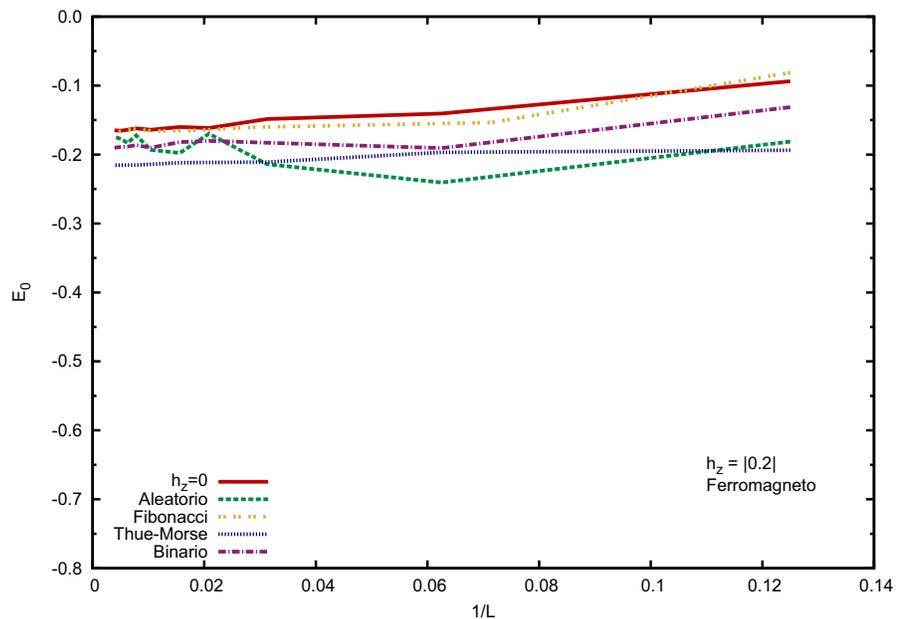


Figura 5.8: Energía del estado fundamental como función del tamaño del sistema para $h^z = |0,2|$. Sistema ferromagnético.

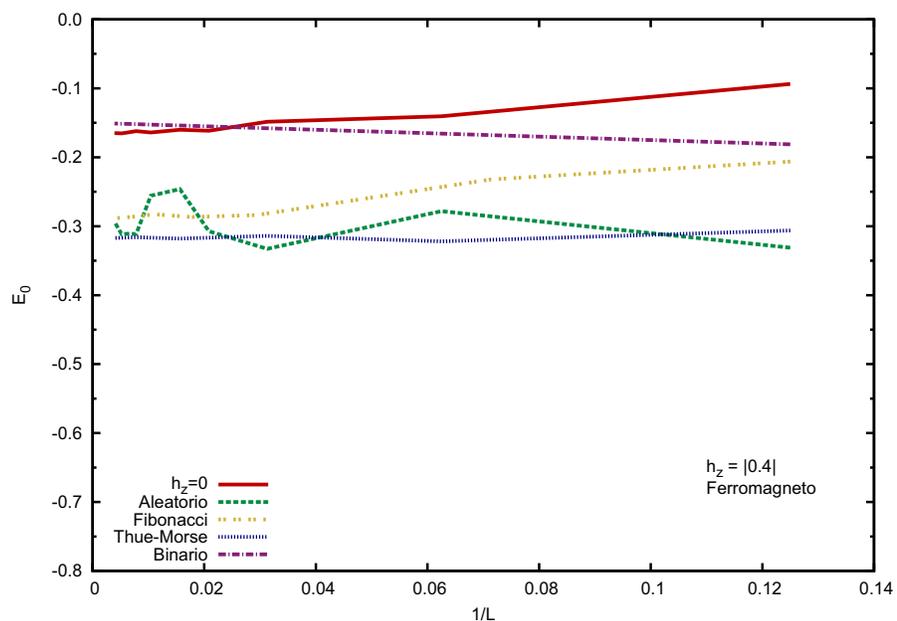


Figura 5.9: Energía del estado fundamental como función del tamaño del sistema para $h^z = |0,4|$. Sistema ferromagnético.

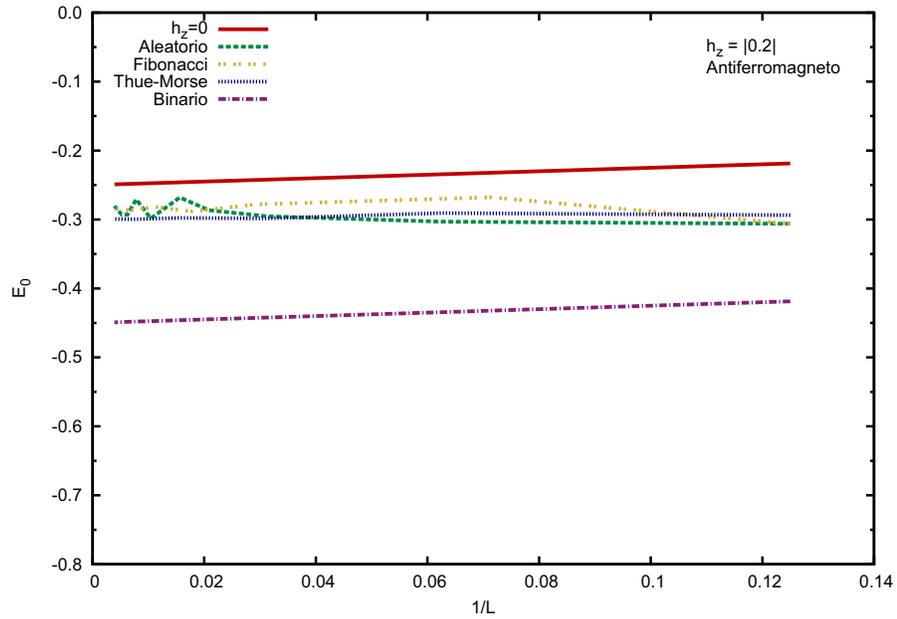


Figura 5.10: Energía del estado fundamental como función del tamaño del sistema para $h^z = |0,2|$. Sistema antiferromagnético

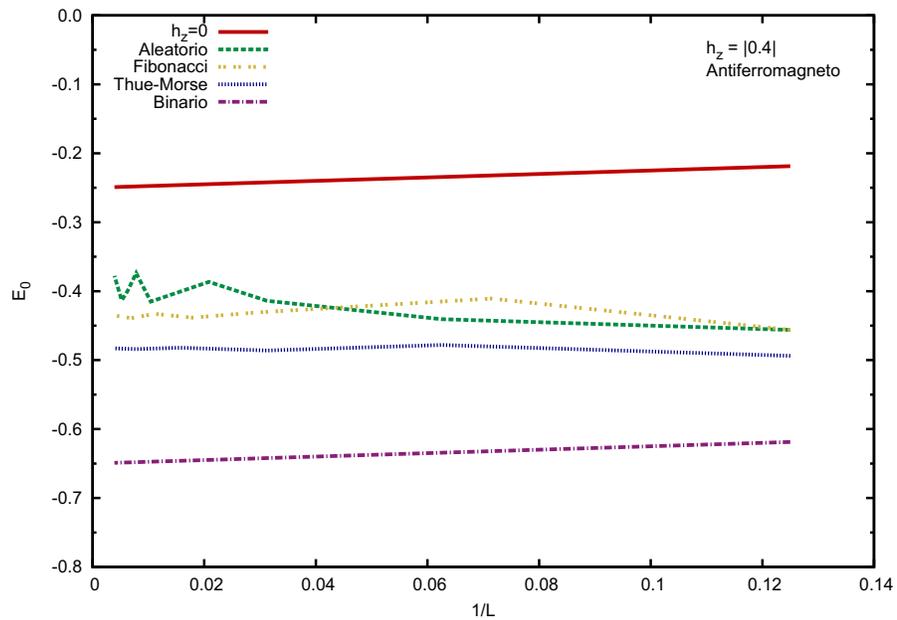


Figura 5.11: Energía del estado fundamenta como función del tamaño del sistema para $h^z = |0,4|$. Sistema antiferromagnético

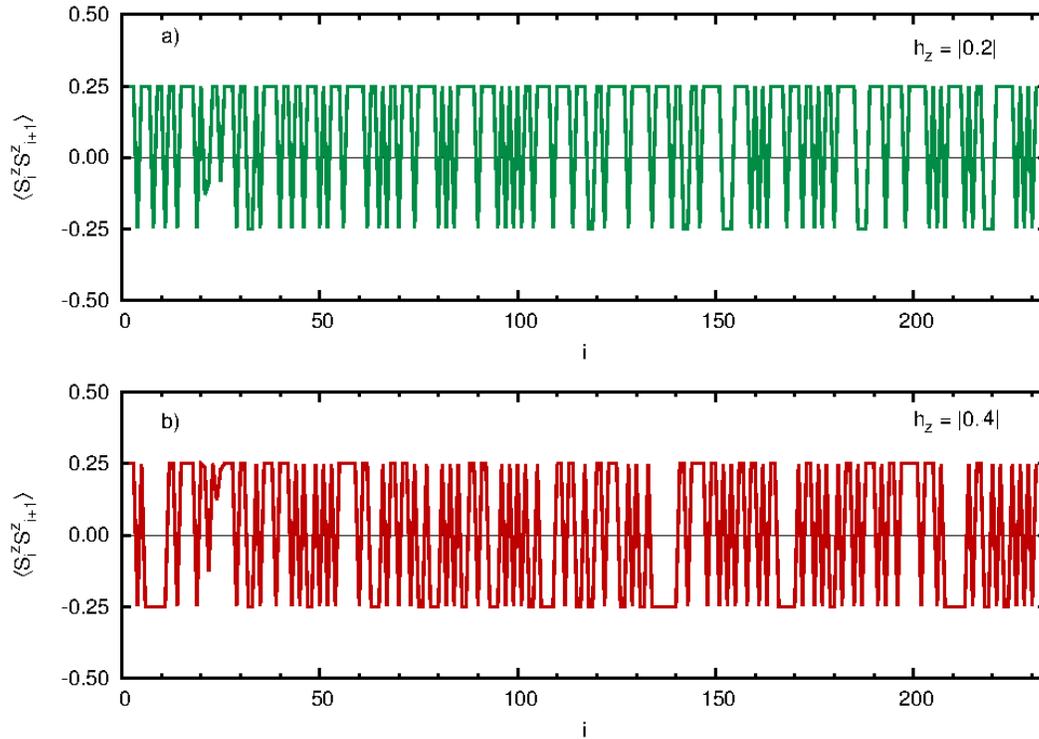


Figura 5.12: Función de correlación de espín para sistemas ferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético aleatorio de intensidad a) $h^z = |0,2|$ y b) $h^z = |0,4|$

5.5. Estructuras magnéticas - Ferromagneto

Para estudiar los efectos que tiene un campo magnético externo ordenado de acuerdo a las secuencias presentadas en la sección 5.3 en el modelo 5.5, hemos calculado el factor de estructura de espín estático (SSF) para cadenas de espines ferromagnéticas ($J = -1$).

5.5.1. Secuencia aleatoria

En la figura 5.12 se presentan los resultados de la función de correlación de espín para un sistema ferromagnético de $L = 234$ sitios con una secuencia aleatoria del campo magnético aplicado.

De acuerdo a los resultados de la sección 5.2, el ferromagneto presenta dos picos característicos en el factor de estructura de espín en $q/\pi = 0$ y $q/\pi = 2$. Nosotros encontramos que este comportamiento se mantiene para $h_z \in \{-0,1, 0,1\}$. Para $h_z \in \{-0,2, 0,2\}$ y $L = 34$ tales picos pierden altura respecto a los casos anteriores y se mueven de los extremos hacia adentro, colocándose cerca de $q/\pi = 0,25$ y $q/\pi = 1,75$. Surgen además señales poco intensas alrededor de $q/\pi = 1$ y en $q/\pi \approx 0,375, 0,5, 1,5$

y 1,625, ver figura 5.13 a). Al incrementar el número de sitios en el sistema, los picos descritos anteriormente se dividen, ver por ejemplo las figuras 5.13 b) y c), o logran una mejor definición, ver por ejemplo los picos alrededor de $q/\pi = 1$ de la figura 5.13 d). La forma del factor de estructura de espín en la figura 5.13 d) indica la formación de distintas zonas magnéticas cuyo efecto total se anula, especialmente al aumentar la intensidad de campo magnético, como se muestra en la secuencia de imágenes 5.14 a), b), c), y d).

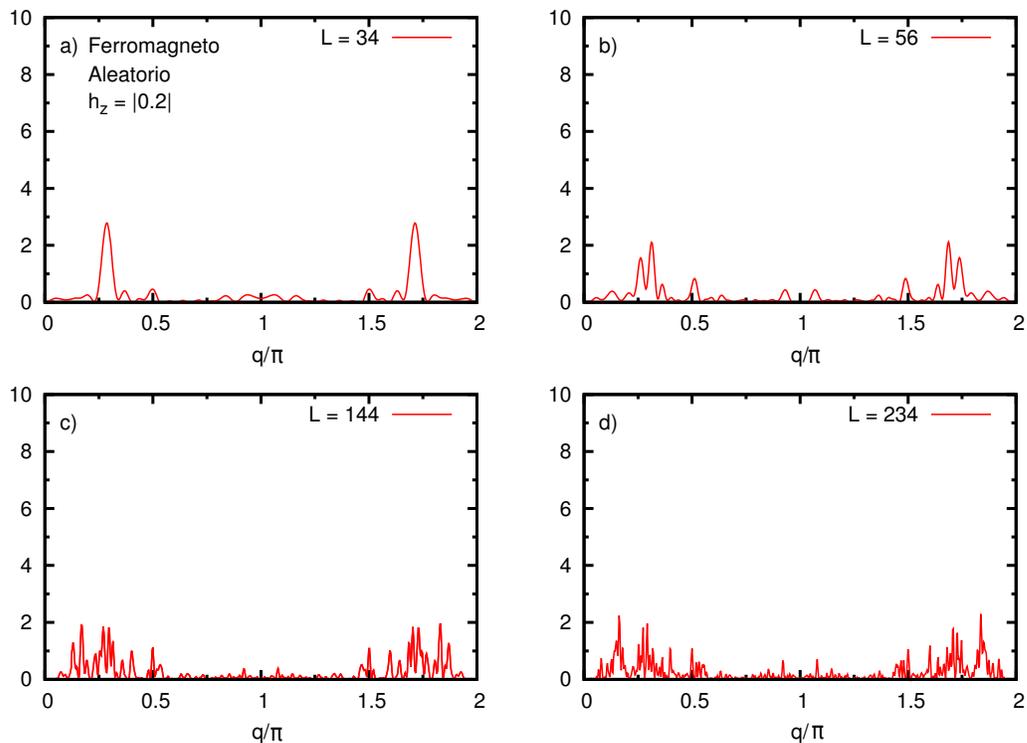


Figura 5.13: SSF para un sistema ferromagnético en un campo aleatorio de intensidad $h^z = |0,2|$.

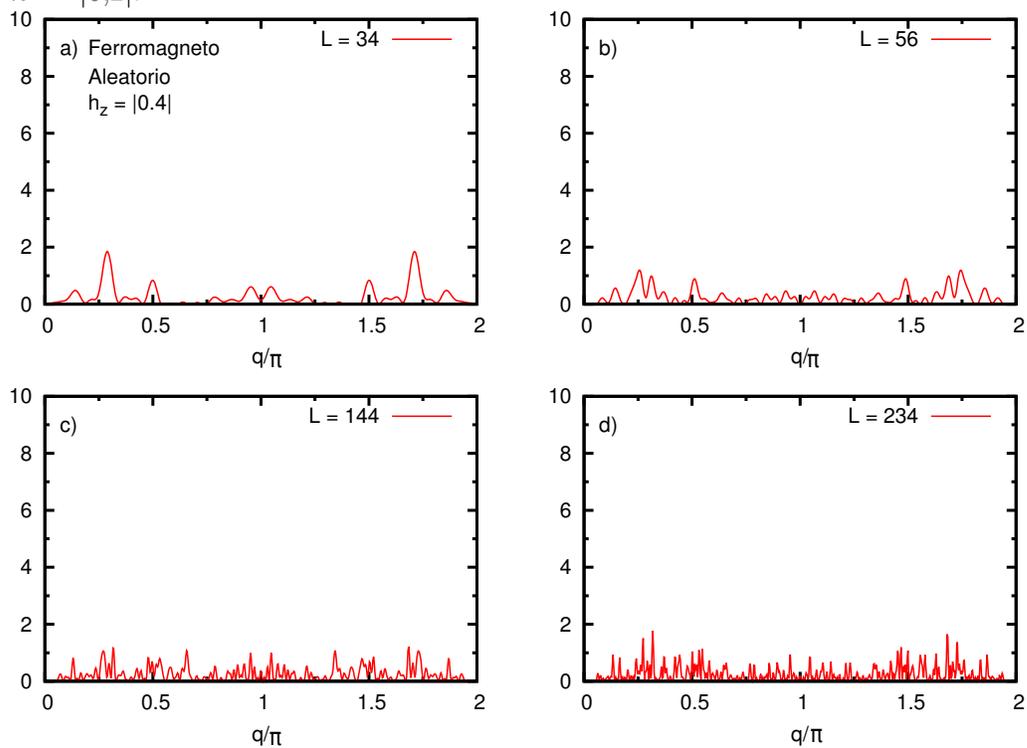


Figura 5.14: SSF para un sistema ferromagnético en un campo aleatorio de intensidad $|h^z = 0,4|$.

5.5.2. Secuencia de Fibonacci

En la figura 5.15 se presentan los resultados de la función de correlación de espín para un sistema ferromagnético de $L = 234$ sitios y un campo magnético siguiendo la secuencia de Fibonacci.

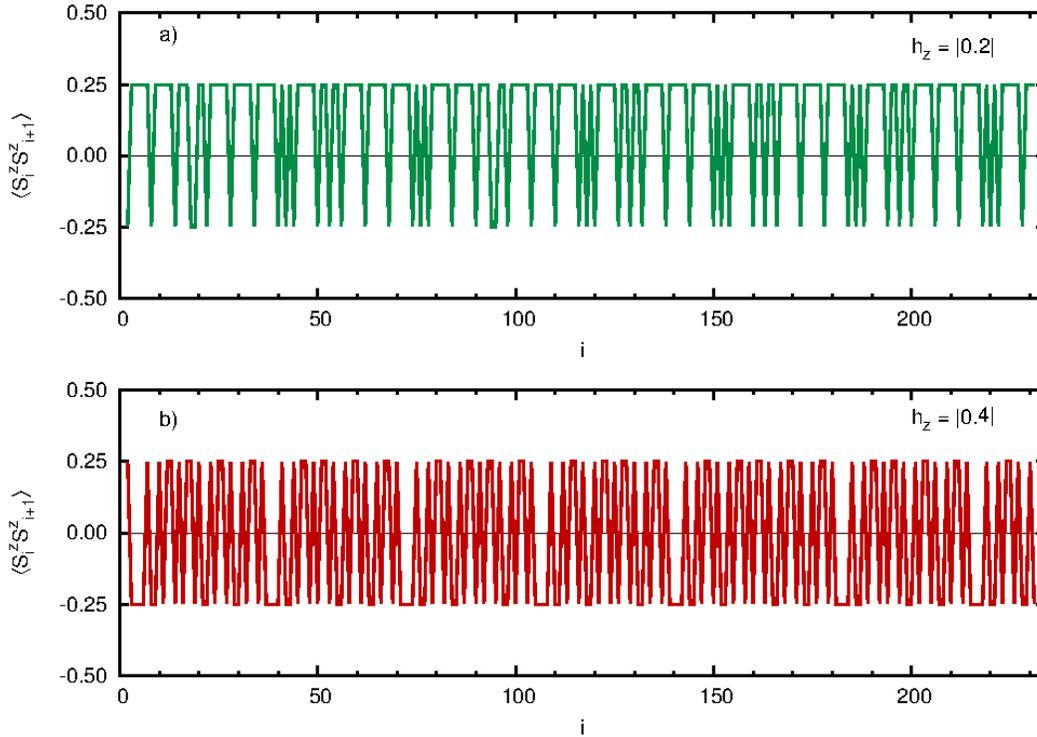


Figura 5.15: Función de correlación de espín para sistemas ferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo una secuencia de Fibonacci de intensidad a) $h^z = |0,2|$ y b) $h^z = |0,4|$

La introducción del campo magnético siguiendo la secuencia de Fibonacci con $h_z \in \{-0,2, 0,2\}$ genera 4 picos en valores inconmensurables del momento q , por ejemplo, en la figura 5.16 a) se observan 4 picos en $q/\pi = 0,156$ y $q/\pi = 1,844$, y para $q/\pi = 0,44$ y $q/\pi = 1,56$. Al incrementarse el tamaño del sistema, estos picos se van a dividir generando zonas de estructuras magnéticas en los intervalos entre $q/\pi = 0$ y $q/\pi \approx 0,5$, y entre $q/\pi \approx 1,5$ y $q/\pi = 2$, dejando un gran intervalo alrededor de $q/\pi = 1$ sin orden magnético. Es interesante observar que, para $h_z \in \{-0,4, 0,4\}$, aun cuando hay picos en valores inconmensurables del momento, varios de los picos que se generan están muy cercanos a valores conmensurables de q , los cuales se definen mejor al aumentar el tamaño del sistema, ver figura 5.17. Estos picos no se dividen, como en el caso anterior, y los encontramos ubicados en $q/\pi = 0,29$ y $1,71$; en $q/\pi = 0,47$ y $q/\pi = 1,53$; y en $q/\pi = 0,765$ y $q/\pi = 1,235$.

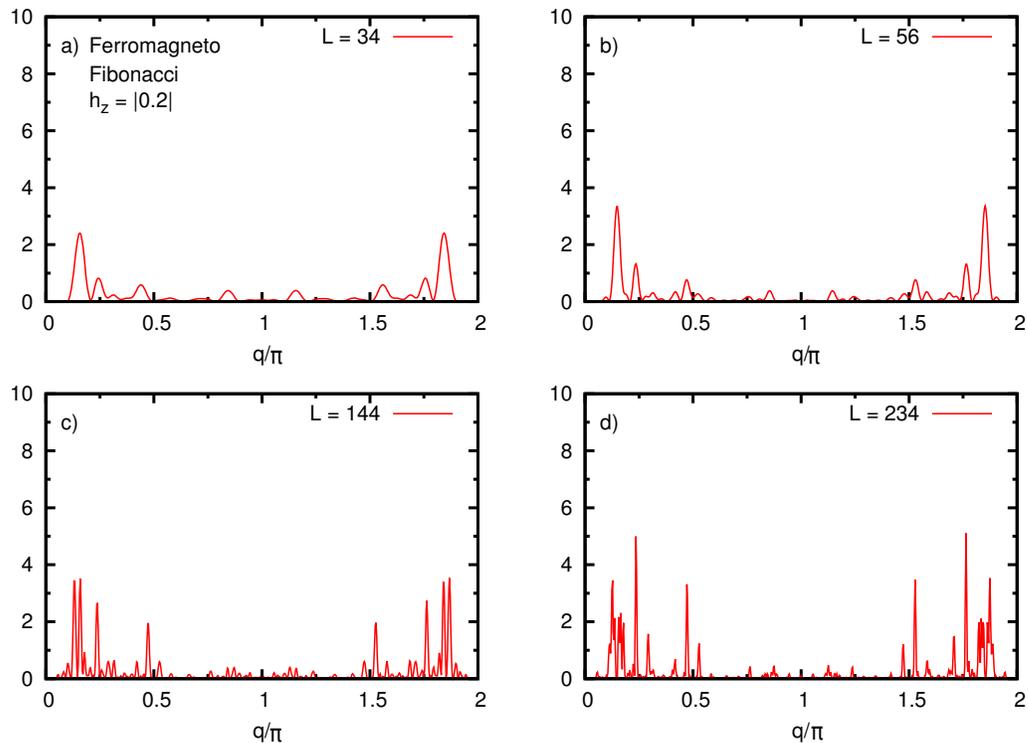


Figura 5.16: SSF para sistemas ferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = |0,2|$ siguiendo la secuencia de Fibonacci

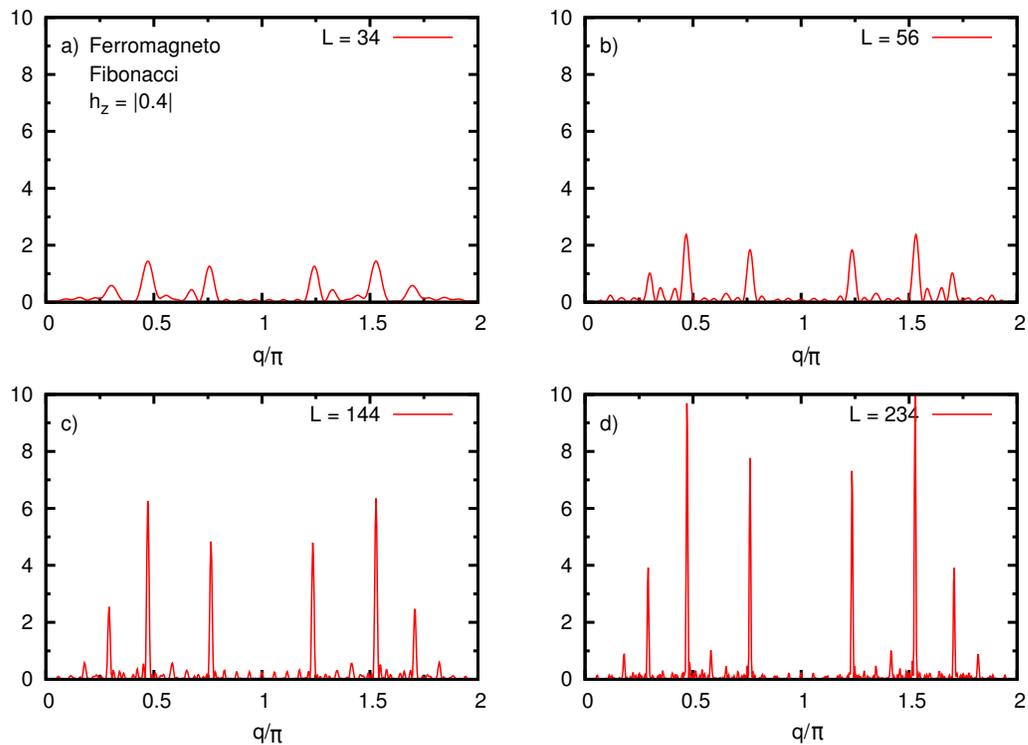


Figura 5.17: SSF para sistemas ferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = |0,4|$ siguiendo la secuencia de Fibonacci

5.5.3. Secuencia de Thue-Morse

En la figura 5.18 se presentan los resultados de la función de correlación de espín para un sistema ferromagnético de $L = 256$ sitios y un campo magnético siguiendo una secuencia de Thue-Morse.

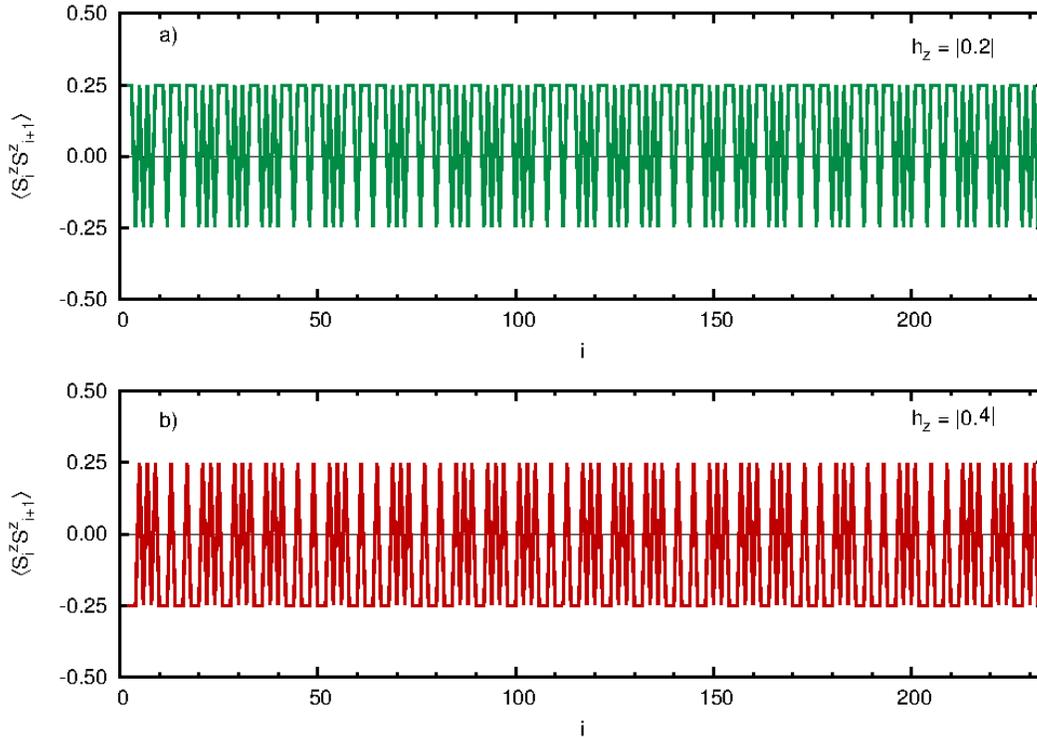


Figura 5.18: Función de correlación de espín para sistemas ferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo la secuencia de Thue-Morse de intensidad a) $h^z = |0,2|$ y b) $h^z = |0,4|$

La secuencia de Thue-Morse permite un análisis más directo respecto a los resultados de la subsección anterior. En este caso se observa que, los picos que se forman en sistemas pequeños, se desdoblán exactamente en dos nuevos picos al duplicar el tamaño del sistema. Al mismo tiempo, los primeros picos originados en el sistema más pequeño, son los que sobresalen también para el sistema más grande, al igual que en el caso de la secuencia de Fibonacci. En la secuencia de las figuras 5.19, algunos de los picos de mayor amplitud se encuentran en $q/\pi = 0,165$ y $q/\pi = 1,835$; en $q/\pi = 0,334$ y $q/\pi = 1,665$ (picos de máxima amplitud); en $q/\pi = 0,417$ y $q/\pi = 1,583$; y en $q/\pi = 0,665$ y $q/\pi = 1,335$, todos valores inconmensurables del momento. Al incrementar la intensidad del campo externo, ver secuencia de figuras 5.20, se observa un comportamiento análogo al anterior, sólo que en este caso los picos de máxima amplitud corresponden a $q/\pi = 0,665$ y $q/\pi = 1,335$; es decir, se localizan en posiciones del momento que corresponden aproximadamente al doble de los valores para $h_z \in \{-0,2, 0,2\}$.

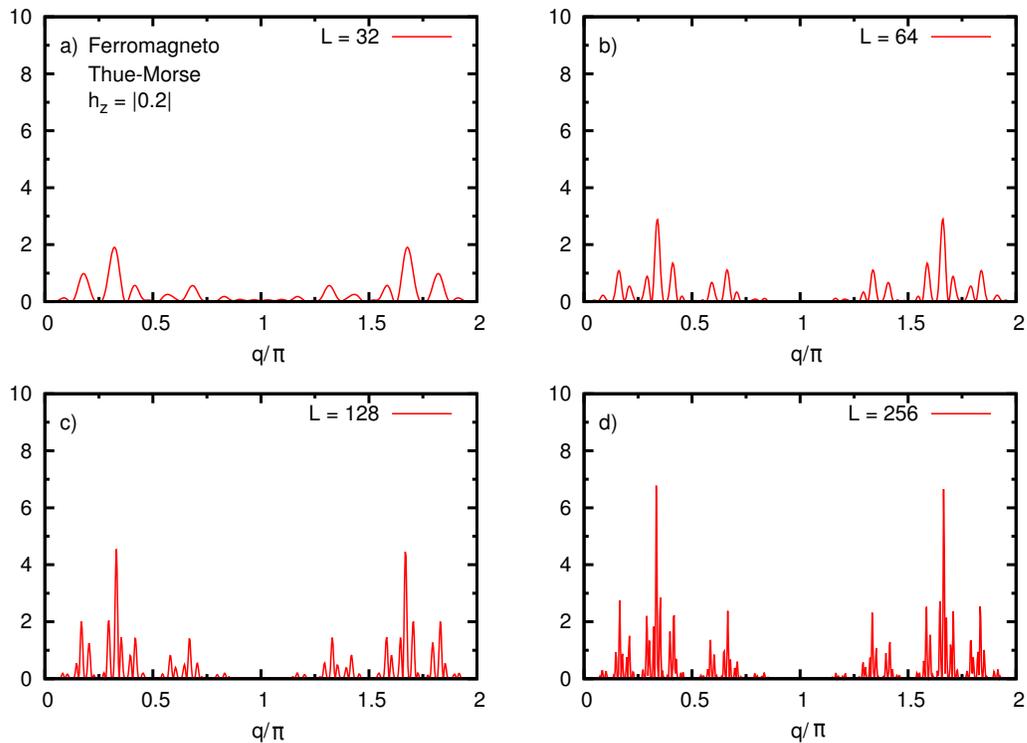


Figura 5.19: SSF para sistemas ferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = |0,2|$ siguiendo la secuencia de Thue-Morse.

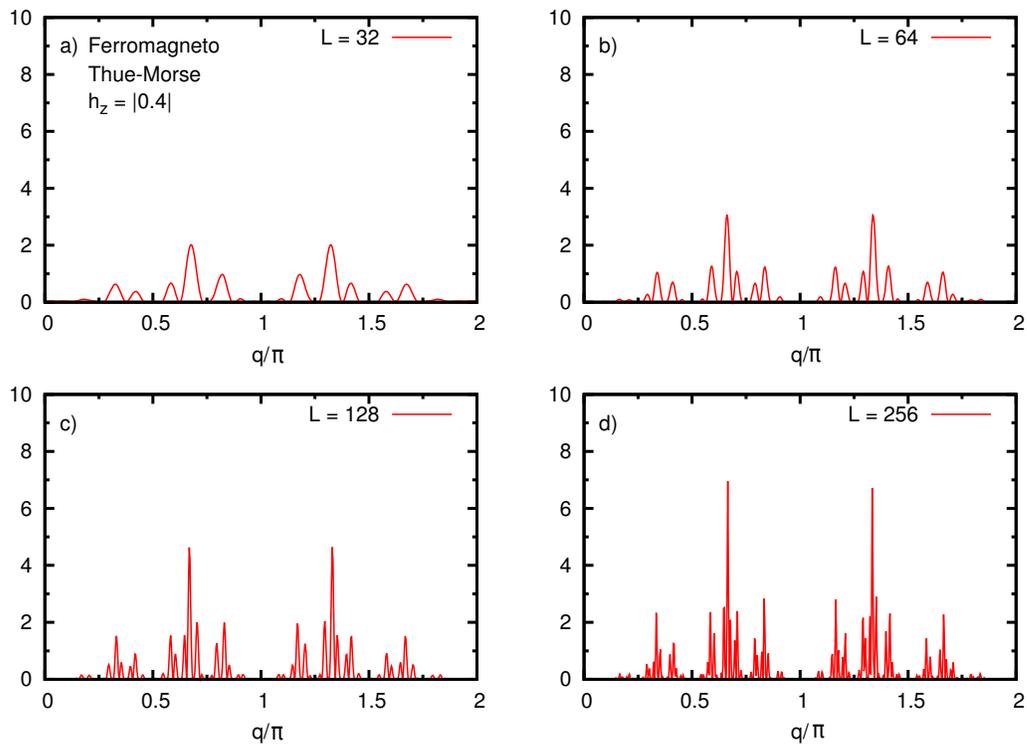


Figura 5.20: SSF para sistemas ferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = |0,4|$ siguiendo la secuencia de Thue-Morse.

5.6. Estructuras magnéticas - Antiferromagneto

En esta sección presentamos los resultados obtenidos al modular el campo externo del mismo modo que se hizo en la sección previa, con la diferencia de que se consideran cadenas antiferromagnéticas ($J = 1$).

5.6.1. Secuencia aleatoria

En la figura 5.21 se presentan los resultados de la función de correlación de espín para un sistema antiferromagnético de $L = 234$ sitios con un campo magnético aplicado siguiendo una secuencia aleatoria.

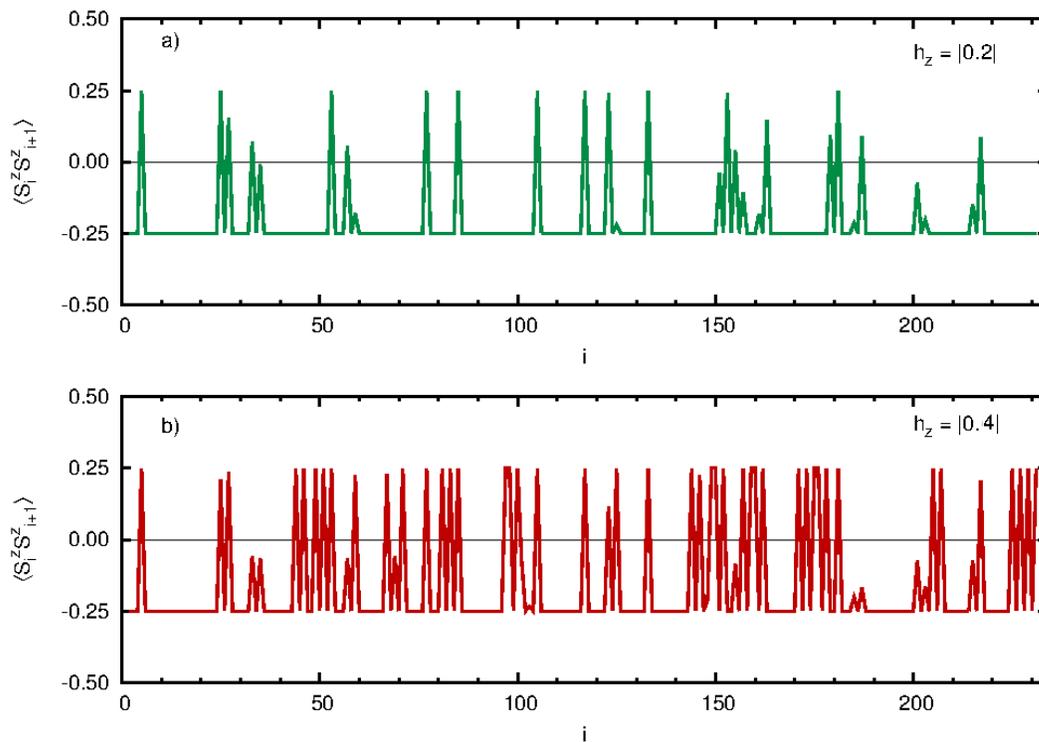


Figura 5.21: Función de correlación de espín para sistemas antiferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo una secuencia de aleatoria de intensidad a) $h^z = |0,2|$ y b) $h^z = |0,4|$

En la sección 5.2 se describió que, para un antiferromagneto, el factor de estructura de espín tiene un pico característico en $q/\pi = 1$, que se pierde al introducir un campo magnético aleatorio en sistemas de $L = 34$ sitios. Se generan además otros picos de menor intensidad alrededor de $q/\pi = 1$, de entre los cuales sobresalen aquellos ubicados en $q/\pi = 0,923$ y $q/\pi = 1,077$. Al aumentar el tamaño del sistema, se recupera el pico en $q/\pi = 1$, pero pierde amplitud al aumentar la intensidad del campo magnético. Ver figuras 5.22 y 5.23.

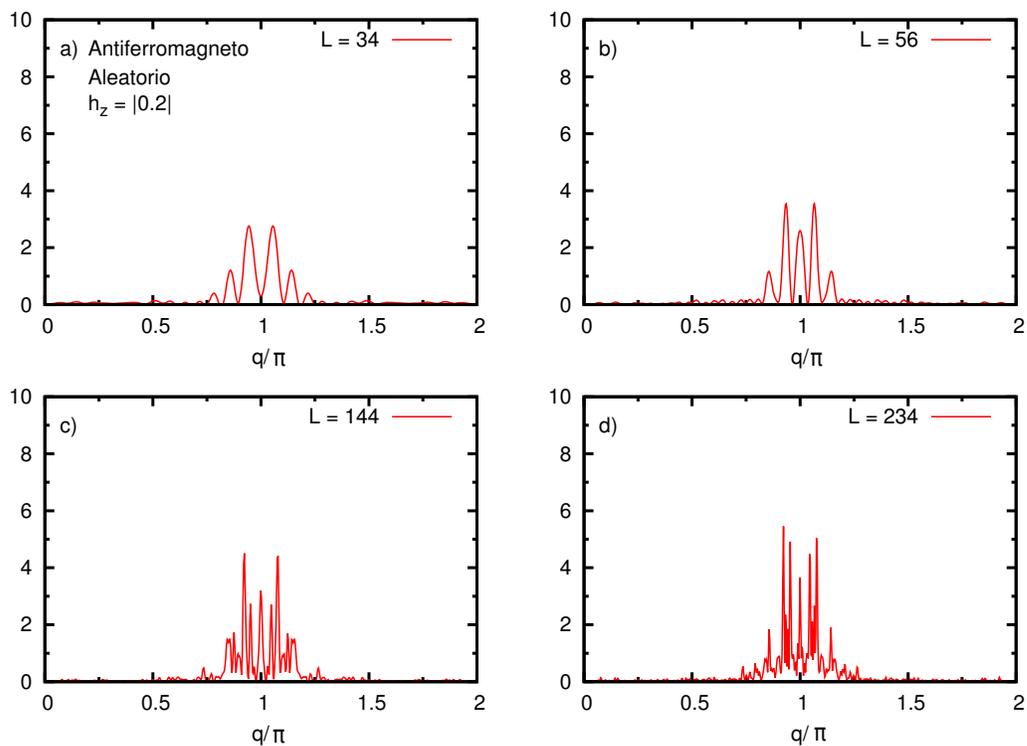


Figura 5.22: SSF para un sistema antiferromagnético en un campo aleatorio de intensidad $h^z = |0,2|$.

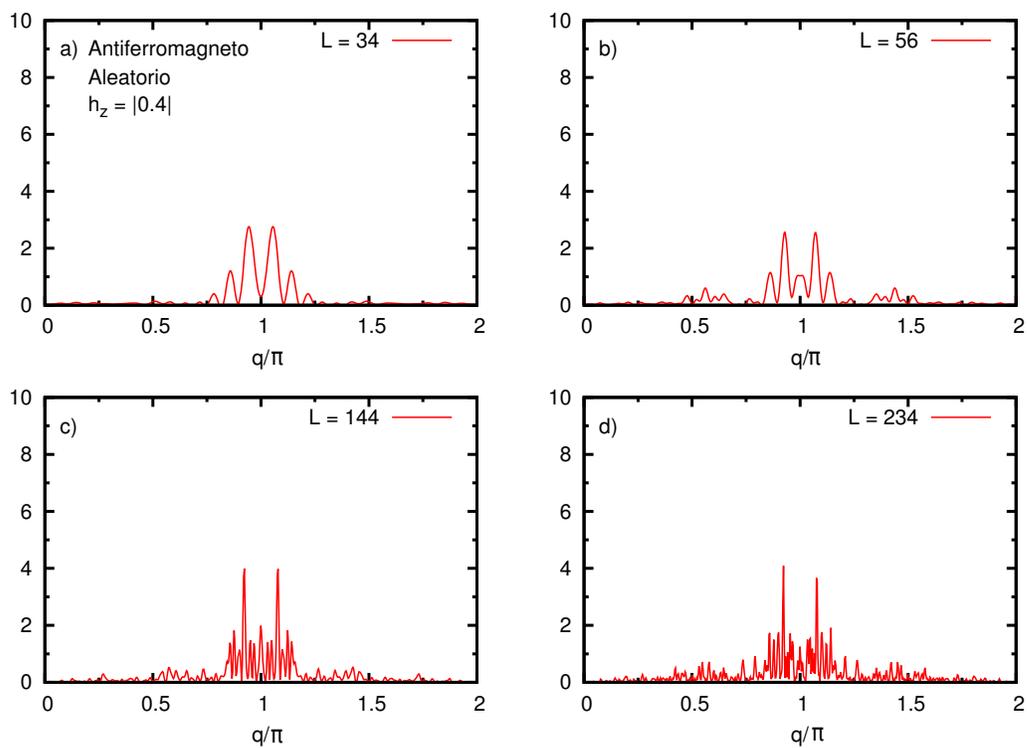


Figura 5.23: SSF para un sistema antiferromagnético en un campo aleatorio de intensidad $h^z = |0,4|$.

5.6.2. Secuencia de Fibonacci

En la figura 5.24 se presentan los resultados de la función de correlación de espín para un sistema antiferromagnético de $L=234$ sitios con un campo magnético aplicado siguiendo una secuencia de Fibonacci.

Para sistemas pequeños, con $h_z \in \{-0,2, 0,2\}$ y $h_z \in \{-0,4, 0,4\}$, se forman estructuras magnéticas para valores conmensurados del momento, es decir, para $q/\pi = 0,25$ y $1,75$; para $q/\pi = 0,5$ y $1,5$; y para $q/\pi = 0,75$ y $1,25$, además de otras estructuras inconmensurables. Al crecer el sistema, dichos picos se alejan sólo ligeramente de estos valores ubicándose, para $L = 234$ en $q/\pi = 0,235$ y $1,765$; para $q/\pi = 0,764$ y $1,235$; y para $q/\pi = 0,943$ y $1,057$. Además se observan estructuras débilmente polarizadas alrededor de $q/\pi = 0,5$ y $1,5$. Ver figuras 5.25 y 5.26. Nótese que para el antiferromagneto, y para sistemas grandes, la forma del factor de estructura de espín no se modifica significativamente al aumentar la intensidad de campo, en contraste al caso del ferromagneto.

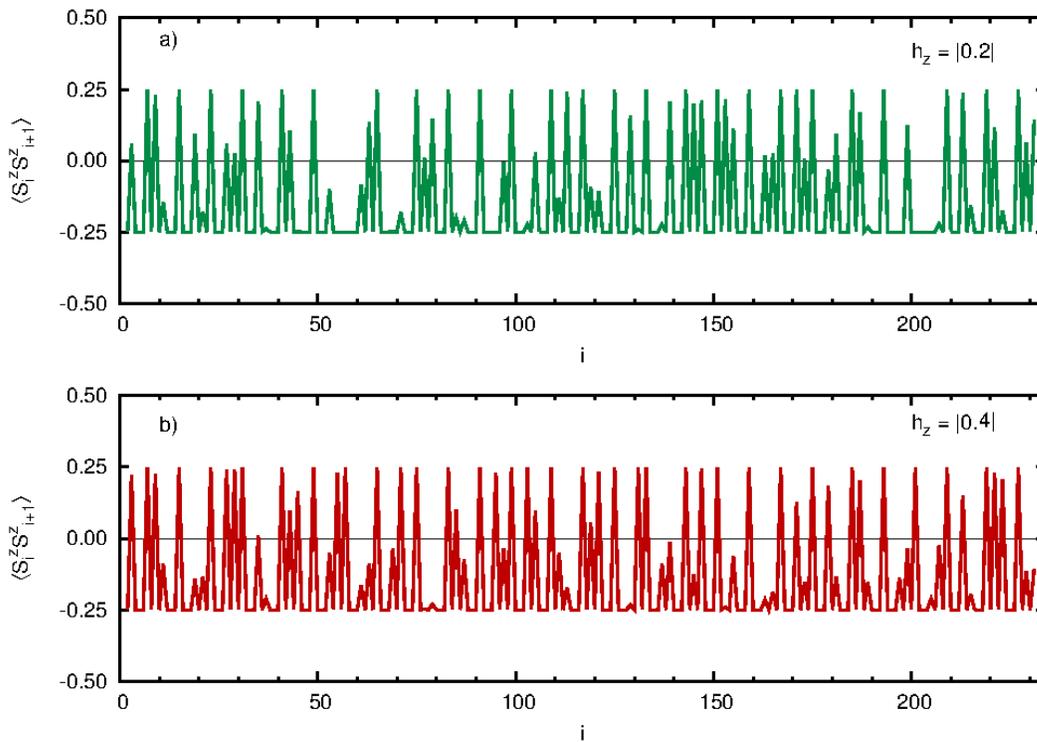


Figura 5.24: Función de correlación de espín para sistemas antiferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo una secuencia de Fibonacci de a) $h^z = |0,2|$ y b) $h^z = |0,4|$.

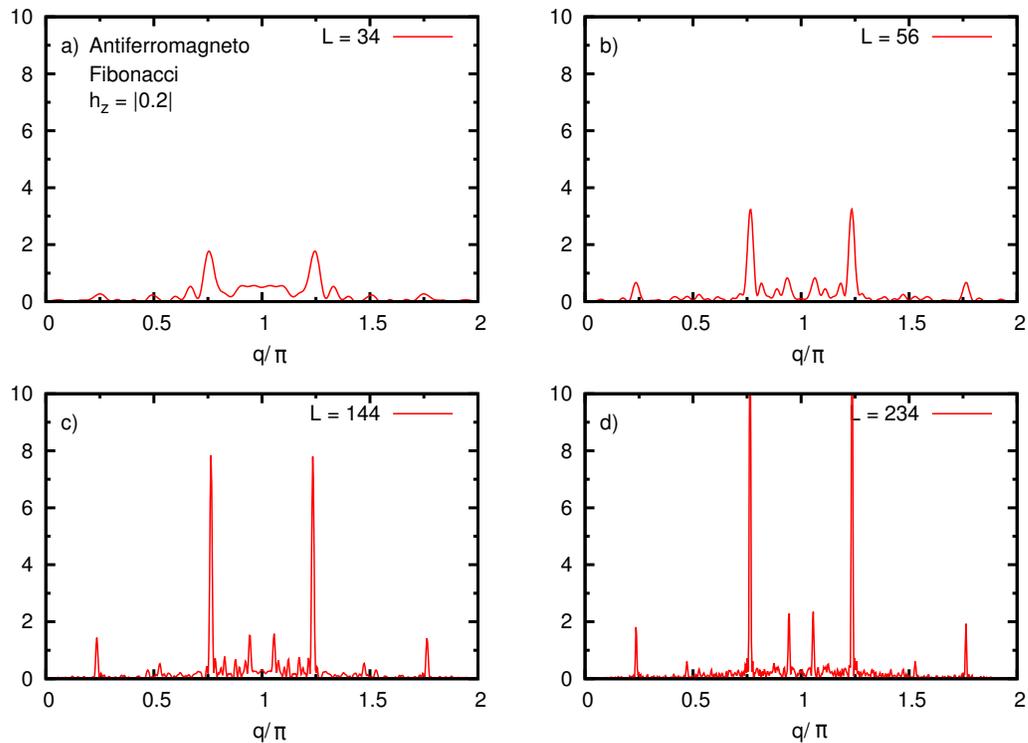


Figura 5.25: SSF para sistemas antiferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = |0,2|$ siguiendo la secuencia de Fibonacci.

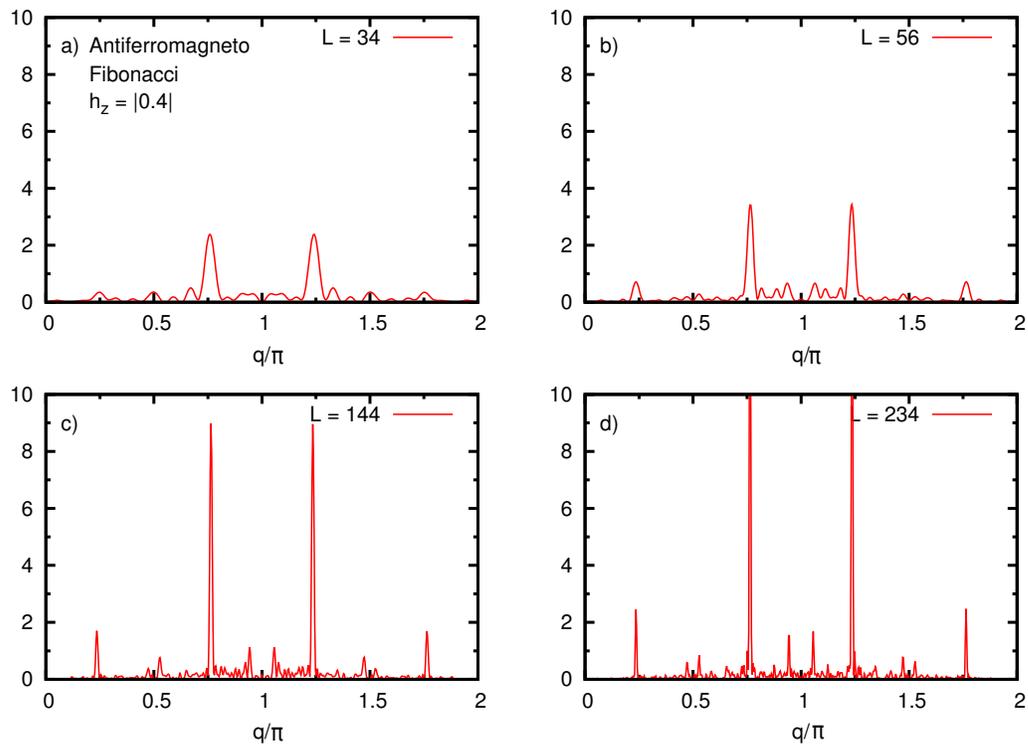


Figura 5.26: SSF para sistemas antiferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = |0,4|$ siguiendo la secuencia de Fibonacci.

5.6.3. Secuencia de Thue-Morse

En la figura 5.27 se presentan los resultados de la función de correlación de espín para un sistema antiferromagnético de $L = 256$ sitios con un campo magnético aplicado siguiendo una secuencia de Thue-Morse.

El comportamiento del antiferromagneto sujeto a un campo magnético con la secuencia de Thue-Morse es análogo a aquel del ferromagneto, es decir, para campos magnéticos de intensidad $h_z \in \{-0,2, 0,2\}$, se observa la formación de picos de una amplitud bien definida para sistemas grandes, ver figura 5.28 d), que se encuentran en $q/\pi = 0,667$ y $1,333$ y en $q/\pi = 0,834$ y $1,166$. Los picos de mayor intensidad se encuentran más cerca de $q/\pi = 1$. Al aumentar la intensidad del campo magnético, aún cuando dichos picos se conservan, sus amplitudes se modifican, ver figura 5.29 d). Es importante notar que se encuentran estructuras magnéticas para valores conmensurados del momento y que, para el ferromagneto, el movimiento de los picos de máxima amplitud es de los extremos hacia adentro, mientras que para el antiferromagneto es de dentro hacia los extremos, al aumentar la intensidad del campo externo.

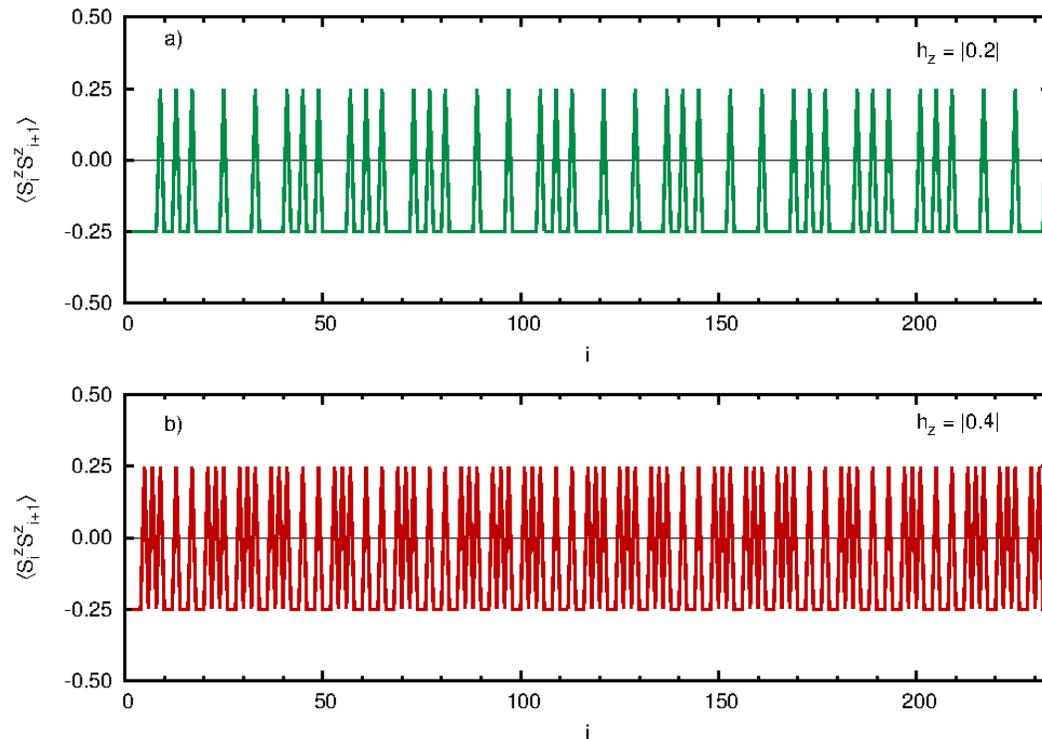


Figura 5.27: Función de correlación de espín para sistemas antiferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo una secuencia de Thue-Morse, de intensidad a) $h^z = |0,2|$ y b) $h^z = |0,4|$.

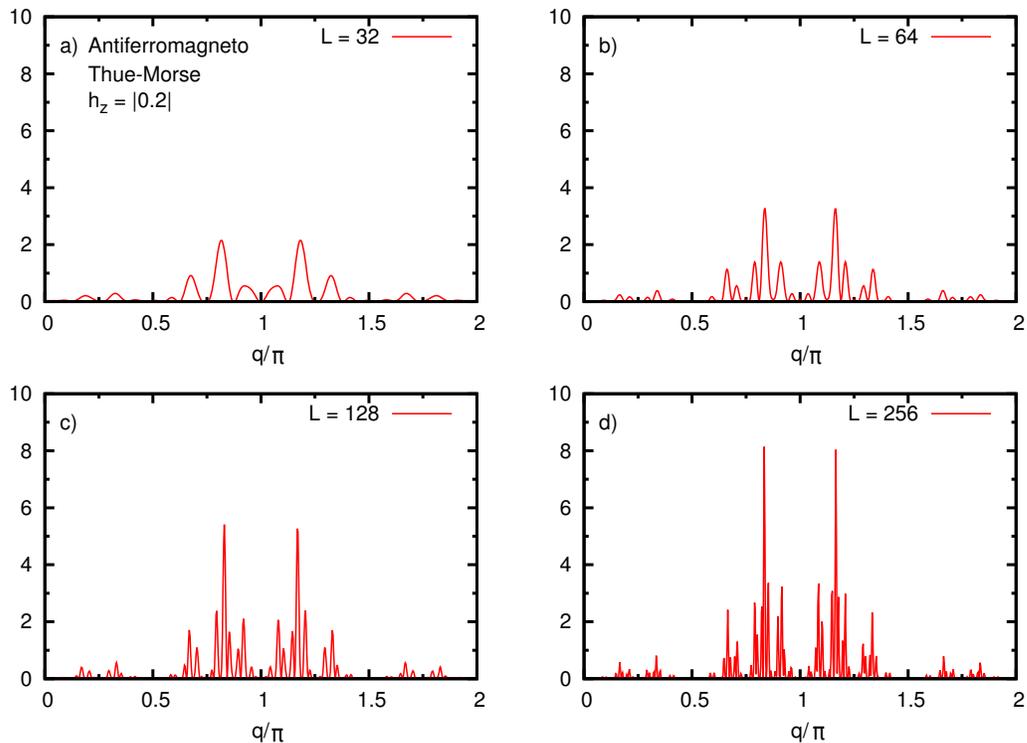


Figura 5.28: SSF para sistemas antiferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = |0,2|$ siguiendo la secuencia de Thue-Morse.

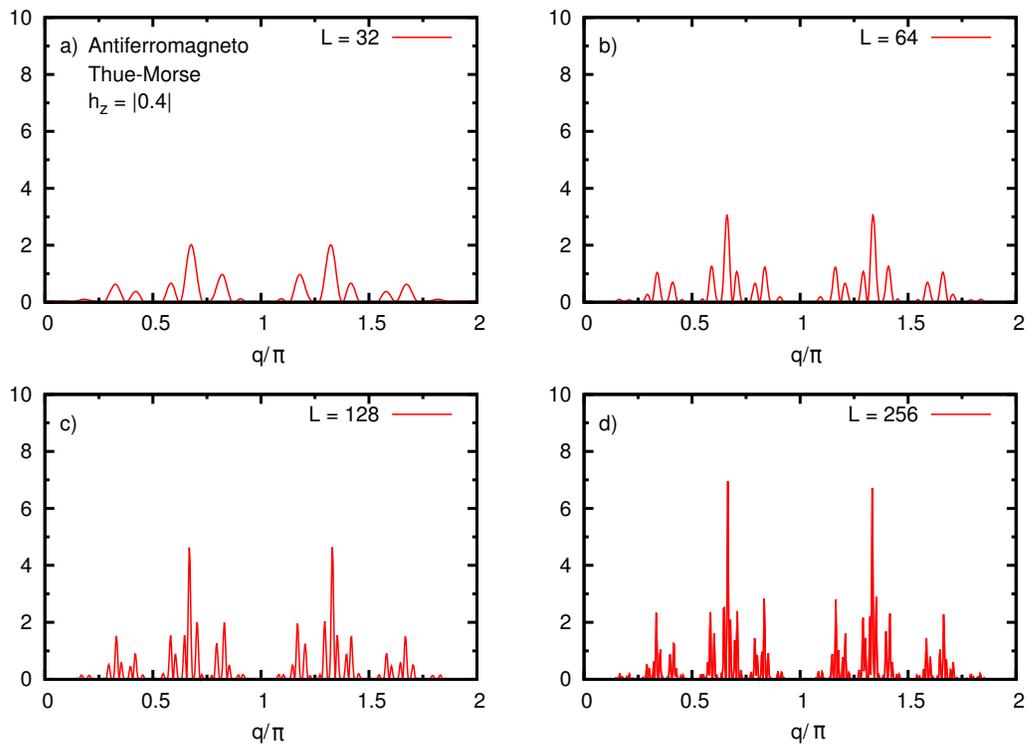


Figura 5.29: SSF para sistemas antiferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = |0,4|$ siguiendo la secuencia de Thue-Morse.

Conclusiones

En este trabajo investigamos numéricamente las propiedades magnéticas de sistemas lineales de espines bajo la influencia de campos magnéticos externos ordenados espacialmente. Para llevar a cabo esta tarea, primero hemos discutido con detalle el método de bosonización, con el que es posible dar una representación bosónica simple de un Hamiltoniano fermiónico. Después se ha presentado el grupo de renormalización con matrices de densidad, método numérico variacional que se desarrolló para obtener propiedades físicas de sistemas fermiónicos fuertemente correlacionados y de bajas dimensiones. Con este último se realizaron todos los cálculos de este trabajo.

Para estudiar la interacción de los espines con un campo magnético externo ordenado hemos utilizado el modelo de Ising bajo la influencia de un campo externo ordenado de forma periódica y cuasiperiódica. Encontramos que las energías del estado fundamental para sistemas con campo modulado de forma aperiódica, como es el caso de la secuencia de Fibonacci, secuencia de Thue-Morse y un campo aleatorio, se mantienen dentro de un intervalo pequeño conformando un grupo que se separa del intervalo de energías obtenidas para el caso de sistemas periódicos con un campo modulado de forma binaria y constante. Estos resultados se obtuvieron tanto para sistemas con una interacción ferromagnética como antiferromagnética.

Se realizaron cálculos del factor de estructura de espín y los resultados que obtuvimos tienen que analizarse por separado para cada caso considerado. Por una parte tenemos el caso de sistemas con interacciones ferromagnéticas para los cuales encontramos que, al aplicar un campo magnético externo aleatorio, surge la formación de estructuras magnéticas cuyos efectos se anulan entre sí, mientras que para los sistemas cuyos campos externos se modularon de acuerdo a la secuencia de Fibonacci y de Thue-Morse se encontró la formación de regiones magnéticas para valores inconmensurables del momento. Por otra parte al estudiar los sistemas con interacciones antiferromagnéticas encontramos que, si se aplica un campo magnético externo aleatorio, el factor de estructura de espín mantiene algunas de las características de los sistemas antiferromagnéticos sin influencia de un campo, al presentar un pico central pero que pierde amplitud conforme se aumenta la intensidad del campo externo, mientras que para campos externos que obedecen las secuencias de Fibonacci y de Thue-Morse se encontró un factor de estructura con momentos en valores conmensurables del momento, caso contrario al de sistemas con interacciones ferromagnéticas.

Por otro lado, en el apéndice B se investigó el modelo de Heisenberg con un campo magnético externo constante. Para este modelo se llevó a cabo el proceso de bosonización, obteniendo así expresiones analíticas del Hamiltoniano y de las fun-

ciones de correlación de espín.

Calculamos numéricamente las funciones de correlación de espín para este modelo considerando diferentes valores en las interacciones. Los resultados obtenidos nos permitieron relacionar las expresiones bosonizadas con los valores obtenidos mediante DMRG, a través del parámetro de Tomonaga-Luttinger para el sector de espín. Se encontró que, en general, existe una buena correspondencia entre ambos métodos que mejora al medir correlaciones entre sitios distantes.

Apéndices

Apéndice A

Método de Lanczos

El algoritmo de Lanczos es un método eficiente para tridiagonalizar una matrices simétricas y reales. En el algoritmo de DMRG se utiliza este método para facilitar el proceso de diagonalización de matrices como la del Hamiltoniano y matriz de densidad. Consideremos el caso de una matriz Hermítica H que actúa sobre $|x_0\rangle$ nos interesa minimizar la distancia entre $H|x_0\rangle$ y $|x_0\rangle$ de manera que escribimos la siguiente combinación lineal

$$|x_1\rangle = H|x_0\rangle - a_0 e^{i\alpha} |x_0\rangle \quad (\text{A.1})$$

donde a_0 es real y α es una fase. Como H es una matriz Hermítica se cumple que

$$\langle x_1|x_1\rangle = \langle x_0|H^2|x_0\rangle - a_0(e^{i\alpha} + e^{-i\alpha})\langle x_0|H|x_0\rangle + a_0^2\langle x_0|x_0\rangle, \quad (\text{A.2})$$

la cual queremos minimizar respecto a_0 y α . Entonces

$$0 \equiv \frac{\delta\langle x_1|x_1\rangle}{\delta\alpha} = 2a_0 \sin\alpha \langle x_0|H|x_0\rangle \quad (\text{A.3})$$

$$0 \equiv \frac{\delta\langle x_1|x_1\rangle}{\delta a_0} = 2a_0\langle x_0|H|x_0\rangle + 2a_0\langle x_0|x_0\rangle. \quad (\text{A.4})$$

La ecuación (A.3) se cumple para $\alpha = \pi, 2\pi, \dots, n\pi$ con n entero, lo que se utiliza en la ecuación (A.4) de la cual se obtienen los parámetros a_0 y $|x_1\rangle$

$$a_0 = \frac{\langle x_0|H|x_0\rangle}{\langle x_0|x_0\rangle} \quad (\text{A.5})$$

$$|x_1\rangle = H|x_0\rangle - a_0|x_0\rangle. \quad (\text{A.6})$$

Repetamos este proceso dejando ahora que H actúe ahora sobre $|x_1\rangle$ y encontremos las condiciones que minimizan el nuevo vector

$$|x_2\rangle = H|x_1\rangle - a_1|x_1\rangle - b_1^2|x_0\rangle \quad (\text{A.7})$$

aquí los parámetros variacionales son a_1 y b_1^2 . Calculemos la amplitud del vector $|x_2\rangle$ y minimicemos con respecto a a_1 y b_1^2

$$\langle x_2|x_2\rangle = \langle x_1|H^2|x_1\rangle - 2a_1\langle x_1|H|x_1\rangle - 2b_1^2\langle x_1|H|x_0\rangle + a_1^2\langle x_1|x_1\rangle + (b_1^2)^2\langle x_0|x_0\rangle \quad (\text{A.8})$$

al minimizar respecto a a_1 y b_1^2 se obtiene

$$a_1 = \frac{\langle x_1 | H | x_1 \rangle}{\langle x_1 | x_1 \rangle}, \quad (\text{A.9})$$

$$b_1^2 = \frac{\langle x_1 | H | x_0 \rangle}{\langle x_0 | x_0 \rangle}. \quad (\text{A.10})$$

Ahora consideremos otro vector $|x_3\rangle$ dado por

$$|x_3\rangle = H|x_2\rangle - a_2|x_2\rangle - b_2^2|x_1\rangle - \gamma|x_0\rangle, \quad (\text{A.11})$$

que al minimizar este vector con respecto a γ encontramos que

$$0 \equiv \frac{\partial \langle x_3 | x_3 \rangle}{\langle x_0 | x_0 \rangle} = \langle x_0 | H | x_2 \rangle + \langle x_2 | H | x_0 \rangle - 2\gamma \langle x_0 | x_0 \rangle. \quad (\text{A.12})$$

Al utilizar en la expresión (A.12) que los vectores $|x_0\rangle$ y $|x_2\rangle$ son ortogonales obtenemos que $\gamma = 0$, de este modo continuando con más procesos de minimización se encuentra que la combinación lineal mas óptima solo incluye tres términos,

$$|x_{n+1}\rangle = H|x_n\rangle - a_n|x_n\rangle - b_n^2|x_{n-1}\rangle \quad (\text{A.13})$$

con $n \geq 0$ y $|x_{-1}\rangle = 0$, siendo

$$a_n = \frac{\langle x_n | H | x_n \rangle}{\langle x_n | x_n \rangle} \quad (\text{A.14})$$

con $n = 0, 1, 2, \dots$ y

$$b_n^2 = \frac{\langle x_{n-1} | H | x_n \rangle}{\langle x_{n-1} | x_{n-1} \rangle} = \frac{\langle x_n | x_n \rangle}{\langle x_{n-1} | x_{n-1} \rangle} \quad (\text{A.15})$$

con $n = 1, 2, \dots$. De este modo se obtiene un conjunto base de vectores $\gamma = \{|x_0\rangle, |x_1\rangle, \dots\}$, que se puede normalizar y emplear como base de la matriz H si formamos una matriz Q con los vectores columna (normalizados) $\{|x_0\rangle, |x_1\rangle, \dots\}$ al realizar el producto matricial

$$Q^T H Q \equiv H_l, \quad (\text{A.16})$$

obtendremos como resultado la matriz de Lanczos H_l , la cual se distingue por tener una forma tridiagonal dada por

$$H_l = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ b_1 & a_1 & b_2 & \cdots & \vdots \\ \vdots & b_2 & a_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & b_n \\ 0 & 0 & 0 & b_n & a_n \end{pmatrix}. \quad (\text{A.17})$$

El algoritmo de Lanczos se puede resumir en las siguientes líneas al utilizar el vector inicial $|x_0\rangle = A_q|\psi_0\rangle$:

$$\begin{aligned} |x_0\rangle &= \frac{A_q|\psi_0\rangle}{\langle\psi_0|A_q^\dagger A_q|\psi_0\rangle} \\ a_n &= \langle x_n|H|x_n\rangle \\ b_n^2 &= |||x_n|||^2 \\ |x_n\rangle &= (H - a_n)|x_n\rangle - b_{n-1}|x_{n-1}\rangle \\ |x_{n+1}\rangle &= \frac{|x_n\rangle}{b_{n+1}}. \end{aligned}$$

Apéndice B

Modelo de Heisenberg, bosonización y DMRG

En este apartado se lleva a cabo el proceso de bosonización para el modelo de una cadena de Heisenberg de espín $S = 1/2$, con la intención de clarificar los aspectos técnicos del método, además se presentan los resultados del cálculo de las funciones de correlación de espín para este modelo empleando las herramientas de DMRG. Mediante la bosonización se obtienen expresiones analíticas para las funciones de correlación que contienen parámetros cuyo valor es desconocido, pero que pueden ser ajustados a través de los resultados dados por DMRG. De esta manera, se muestra como el empleo de estos dos métodos es una herramienta sólida para el estudio de sistemas magnéticos a bajas dimensiones [34, 5, 35].

B.1. Bosonización del modelo de Heisenberg

El modelo unidimensional de Heisenberg de espín $S = 1/2$ describe una cadena de espines en una dimensión que interactúan por medio de fuerzas de intercambio. Para esta sección vamos a considerar que la dichas interacciones ocurren solamente entre los primeros vecinos. El Hamiltoniano correspondiente es:

$$H = -J \sum_n \left(\frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) + \Delta S_n^z S_{n+1}^z \right) - h \sum_n S_n^z, \quad (\text{B.1})$$

en donde Δ es un término de anisotropía y S^+, S^-, S^z son los operadores de espín definidos en el sitio n como sigue:

$$S_n^\pm = S_n^x \pm i S_n^y, \quad (\text{B.2})$$

con

$$S^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad S^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Para llevar a cabo la bosonización del modelo (B.1) primero transformemos los operadores de espín a operadores de campo fermiónicos mediante una transformación de Jordan-Wigner¹

$$\begin{aligned} S_n^+ &= \psi_n^+ (e^{i\pi \sum_{j=0}^{n-1} (\psi_j^\dagger \psi_j)}), \\ S_n^- &= \left(e^{-i\pi \sum_{j=0}^{n-1} (\psi_j^\dagger \psi_j)} \right) \psi_n, \\ S_n^z &= \psi_n^\dagger \psi_n - 1/2, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

en donde ψ_n son fermiones sin espín que obedecen la siguiente regla de anticonmutación

$$\{\psi_n, \psi_{n'}^\dagger\} = \delta_{n,n'}. \quad (\text{B.5})$$

Haciendo uso de las expresiones (B.4) podemos reescribir el Hamiltoniano (B.1) como:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{int}, \\ H_0 &= -J \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} (\psi_n^\dagger \psi_{n+1} + \psi_{n+1}^\dagger \psi_n), \\ H_{int} &= -J \sum_{n=1}^N \Delta (\psi_n^\dagger \psi_n - 1/2) (\psi_{n+1}^\dagger \psi_{n+1} - 1/2). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Primero analicemos el término H_0 , este término puede ser reescrito al tomar la transformada de Fourier de ψ_n ,

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} \psi(k), \quad (\text{B.7})$$

que al sustituir en (B.6), obtenemos

$$H_0 = -J \sum_k \cos(ka) \psi_n^\dagger \psi_n, \quad (\text{B.8})$$

donde a es la constante de red. Ahora bien, se puede simplificar más el modelo al considerar únicamente las propiedades del sistema en el intervalo de bajas energías es decir, restringirnos al sector de momentos cercanos a la superficie de Fermi, que en este caso consta de dos puntos $\pm k_f = \pm \frac{\pi}{2a}$, de modo que se puede linealizar el espectro de las partículas $\epsilon(k) = J \cos(ka)$ en la vecindad de estos puntos como:

$$\epsilon(k) = \mp v(k \mp k_f) \quad (\text{B.9})$$

¹Mediante esta transformación se cambian los operadores de espín por operadores de creación y aniquilación fermiónicos al transformar los espines “up” en sitios ocupados y los espines “down” en sitios sin ocupar.

donde $v = Ja$ es la velocidad de los fermiones de Jordan-Wigner. Al tomar esta restricción estamos definiendo un límite continuo del modelo en el que se puede reemplazar ψ_n por un par de campos fermiónicos que varían lentamente en el espacio, $\psi_R(x)$ y $\psi_L(x)$, los cuales describen partículas propagándose a la derecha y hacia la izquierda, respectivamente. En términos de estos campos podemos escribir ψ_n como sigue:²

$$\begin{aligned}\psi_n &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{|k| < \frac{\pi}{a}} e^{ikna} \psi(k) \\ &= \sqrt{a} \left((-i)^n \psi_R(x) + (i)^n \psi_L(x) \right),\end{aligned}\quad (\text{B.10})$$

en donde

$$\begin{aligned}\psi_R(x) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{|k| < \frac{\pi}{a}} e^{ikx} \psi(k - k_f), \\ \psi_L(x) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{|k| < \frac{\pi}{a}} e^{-ikx} \psi(k + k_f).\end{aligned}\quad (\text{B.11})$$

Haciendo uso de las expresiones (B.10) y (B.11) obtenemos el Hamiltoniano H_0

$$H_0 = iv \int dx [\psi_R^\dagger \partial_x \psi_R - \psi_L^\dagger \partial_x \psi_L]. \quad (\text{B.12})$$

El término H_{int} puede ser tratado de manera similar. Recordemos que el operador de densidad para un sistema fermiónico en una dimensión está dado por $\rho_q = \sum_k \psi_k^\dagger \psi_{k+q}$, con q cercano a 0 y a $\pm 2k_F$, de este modo, en el límite continuo el operador de densidad de espín $S_n^z(x)$ queda dado por:

$$S^z(x) = \rho(x) + (-1)^n M(x) \quad (\text{B.13})$$

en donde

$$\rho(x) =: \psi_R^\dagger \psi_R(x) + \psi_L^\dagger(x) \psi_R(x) :, \quad (\text{B.14})$$

y

$$M(x) =: \psi_R^\dagger \psi_L + \psi_L^\dagger \psi_R(x) :, \quad (\text{B.15})$$

de manera que en límite continuo se tiene que

$$H_{int} = v\Delta \int dx \left(\rho(x) + (-1)^x M(x) \right) \left(\rho(x+a) + (-1)^{x+a} M(x+a) \right). \quad (\text{B.16})$$

²Nótese que $x = na$.

Expandiendo hasta primer orden en a y eliminando los términos que oscilan obtenemos

$$H_{int} = v\Delta \int dx \left(J_R^2 + J_L^2 + 4J_R J_L - (\psi_L^\dagger \psi_R)^2 - (\psi_R^\dagger \psi_L)^2 \right), \quad (\text{B.17})$$

en donde se ha introducido las corrientes derecha e izquierda:

$$J_R =: \psi_R^\dagger \psi_R :, \quad (\text{B.18})$$

$$J_L =: \psi_L^\dagger \psi_L :. \quad (\text{B.19})$$

Las expresiones (B.12) y (B.17) pueden ser bosonizadas [5] al reescribir los operadores fermiónicos en términos de los campos

$$\psi_R(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} : e^{i\sqrt{4\pi}\phi_R(x)} : \quad (\text{B.20})$$

y

$$\psi_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} : e^{-i\sqrt{4\pi}\phi_L(x)} :, \quad (\text{B.21})$$

en donde los $\phi_{R,L}$ son las componentes derecha e izquierda del campo bosónico ϕ y se definen como:

$$\phi = \phi_R + \phi_L, \quad \tilde{\phi} = \phi_R - \phi_L. \quad (\text{B.22})$$

Las corrientes de fermiones pueden ser bosonizadas como sigue [34]

$$\begin{aligned} J_R &= -\frac{i}{\sqrt{\pi}} \partial_x \phi_R(x), \\ J_L &= \frac{i}{\sqrt{\pi}} \partial_x \phi_L(x). \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Con las ecuaciones (B.20), (B.21) y (B.23) las ecuaciones (B.12) y (B.17) se transforman en

$$H_0 = iv \int dx [\psi_R^\dagger \partial_x \psi_R - \psi_L^\dagger \partial_x \psi_L] \quad (\text{B.24})$$

y

$$H_{int} = \frac{v\Delta}{\pi} \int dx [4\partial_x \phi_L \partial_x \phi_R - (\partial_x \phi_R)^2 - (\partial_x \phi_L)^2], \quad (\text{B.25})$$

respectivamente. Con lo que finalmente al sumar estos dos términos se obtiene el Hamiltoniano completo de Heisenberg en una base bosónica

$$H = \frac{v}{2} \int dx \left[\frac{1}{K} (\partial_x \phi)^2 + K (\partial_x \tilde{\phi})^2 \right], \quad (\text{B.26})$$

en donde

$$K = 1 - \frac{2\Delta}{\pi}. \quad (\text{B.27})$$

B.2. Funciones de correlación para el modelo de Heisenberg

Con los resultados de la sección previa es posible obtener expresiones bosonizadas de los operadores de espín S^z y S^\pm , para el modelo de Heisenberg. En particular nos interesa la función de correlación entre dos sitios de la cadena para el operador S^z , y cuya representación bosónica es la siguiente [34]:

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle \approx \frac{\langle M \rangle^2}{4} + \frac{K}{4\pi^2} \frac{1}{|i-j|^2} + \frac{b \cos(2k_f(i-j))}{2 |i-j|^K}, \quad (\text{B.28})$$

donde K es conocido como el parámetro de Tomonaga-Luttinger para el sector de espín (véase ecuación (3.132)). Dicho parámetro surge de las interacciones del sistema y determina el comportamiento asintótico de las funciones de correlación de espín, permitiendo una caracterización de la fase el sistema. Con el método de DMRG calculamos numéricamente las funciones de correlación $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ de la expresión (B.28) para cadenas de 256 sitios y diferentes valores de las interacciones J, Δ y h . En la figura B.1 se presentan los resultados obtenidos para $J = 1$, $\Delta = 1,217$ y $h = 0$, y se comparan con el modelo (B.28) al ajustar los parámetros K y b .

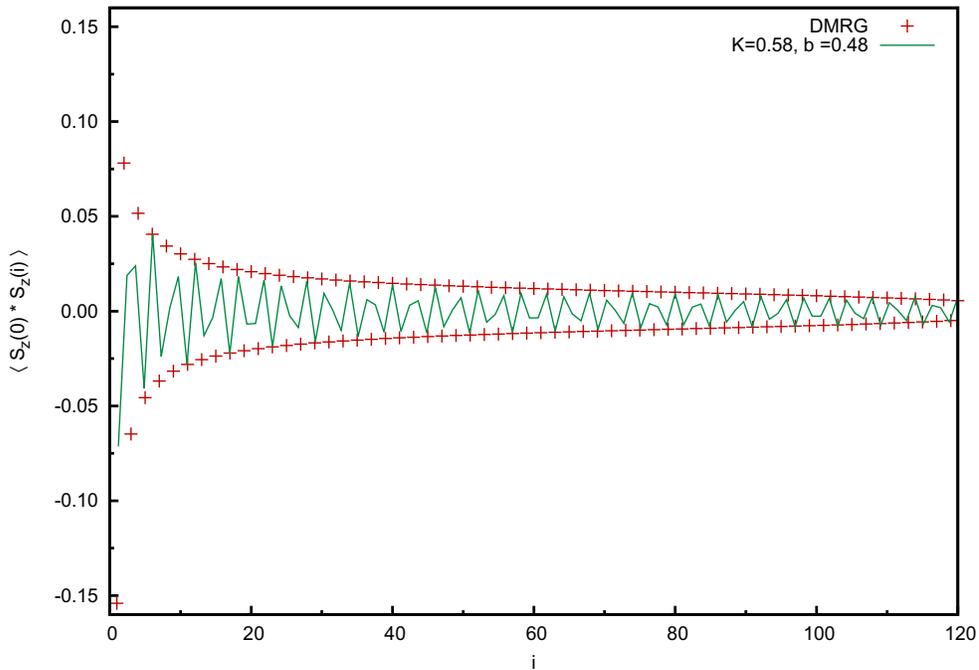


Figura B.1: Función de correlación $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ para $J = 1$, $\Delta = 1,217$ y $h = 0$.

En este caso se obtiene un valor para K muy cercano a $1/2$, este valor de K

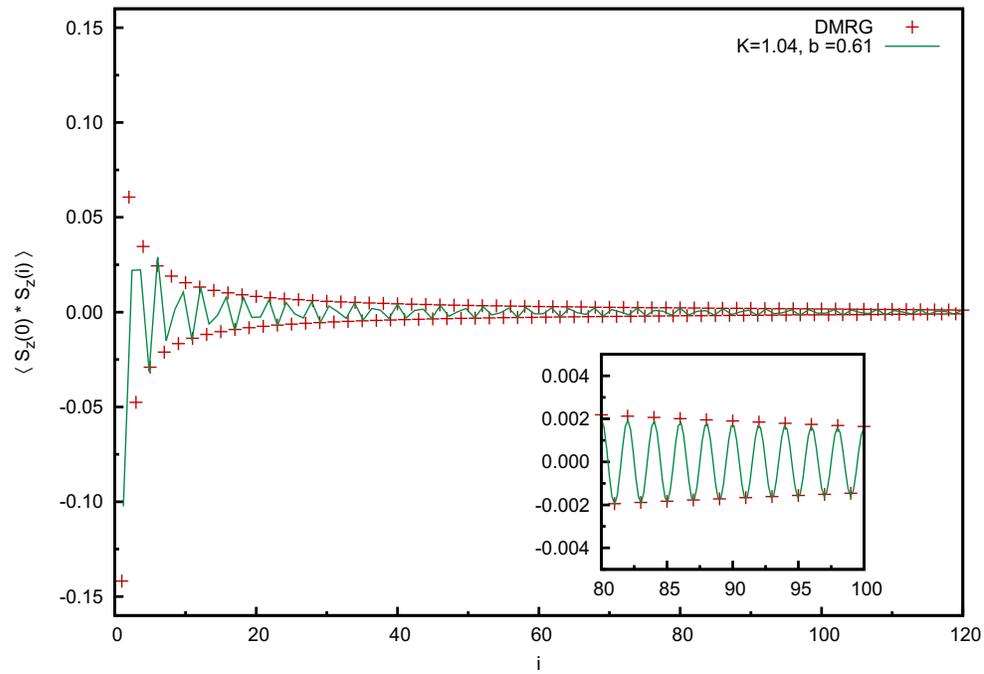


Figura B.2: Función de correlación $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ para $J = 1$, $\Delta = 1$ y $h = 0$.

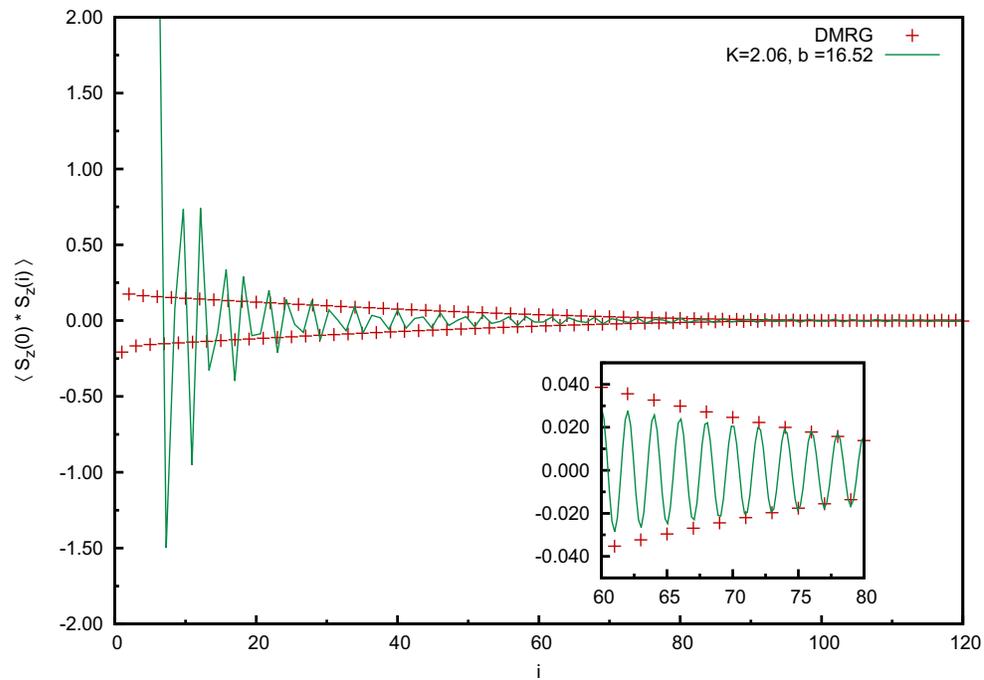


Figura B.3: Función de correlación de $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ para $J = 1$, $\Delta = 2,5$ y $h = 3,5$.

corresponde al de una fase en la frontera entre las fases ferromagnética y antiferromagnética. Aquí se observa una competencia entre el término oscilatorio y el término que decae como el inverso del cuadrado de la distancia entre los sitios. Del mismo modo en la figura B.2 se presentan los resultados obtenidos para $J = 1$, $\Delta = 1,0$ y $h = 0$. Para este conjunto de valores encontramos un valor de $K = 1,04$. Este valor del parámetro de Tomonaga-Luttinger también corresponde al de una fase antiferromagnética. En este caso las funciones de correlación muestran un patrón que oscila con poca amplitud. Por último se muestran en la figura B.3 los resultados obtenidos para $J = 1$, $\Delta = 2,5$ y $h = 3,5$. Para este caso se obtiene un valor de $K = 2,06$, valor que es propio de sistemas ferromagnéticos. Aquí se observa un patrón que oscila con gran amplitud para valores pequeños de la distancia entre sitios y que continua oscilando con menor amplitud para distancias mayores. En general, se encuentra una muy buena correspondencia entre los resultados obtenidos por medio de DMRG y los predichos mediante la bosonización, resultados que mejoran al medir las funciones de correlación entre sitios a grandes distancias.

Índice de figuras

1.1.	La función de distribución para el estado base de un sistema sin interacciones muestra una discontinuidad en el nivel de Fermi.	10
1.2.	(a) Una partícula es añadida al sistema en su estado fundamental. (b) La partícula extra, de manera lenta, interacciona con las partículas en su vecindad formando una cuasipartícula.	12
1.3.	Posibles procesos de decaimiento de una partícula cerca de la SF. La cuasipartícula hace una transición de k a k' produciendo un par partícula-hueco. La conservación de energía y momento restringe los procesos a las áreas sombreadas.	15
1.4.	En un líquido de Fermi se forma un pico infinitamente puntiagudo en $k = k_F$, correspondiente a una cuasipartícula. El peso de este pico es $z_k \sim \frac{m}{m^*}$ donde m^* es la masa efectiva.	17
1.5.	En el sistema de fermiones con interacciones se encuentra que la función de distribución sufre una discontinuidad en el nivel de Fermi, la cual esta suavizada con respecto de su contraparte sin interacciones. . . .	18
2.1.	(a) En $D > 1$ una partícula es capaz de propagarse perturbando de manera leve a las partículas vecinas. (b) En $D = 1$ un electrón no puede propagarse sin influir en toda la cadena de electrones, es por esto que solo existen excitaciones colectivas.	22
2.2.	La falta de una discontinuidad en la función de distribución para el líquido de Tomonaga-Luttinger denota la falta de cuasipartículas en el nivel de Fermi invalidando la descripción dada por el líquido de Fermi. La línea punteada muestra la discontinuidad en el caso de un gas de Fermi.	22
2.3.	Relación de dispersión cuadrática para un sistema de electrones libres. En la figura se muestra el nivel de Fermi el cual separa el nivel más alto ocupado del nivel más bajo desocupado.	23
2.4.	El modelo de Tomonaga-Luttinger se obtiene al linealizar la relación de dispersión en una región cercana al nivel de Fermi. Dicha región corresponde a las excitaciones de baja energía delimitada por las líneas punteadas.	24

2.5. (a) En el modelo de Tomonaga se introduce un corte en en las bandas de momento. (b) En el modelo de Luttinger se extiende la relación de dispersión hasta $-\infty$ para facilitar los cálculos, los estados no físicos con energías negativas son removidos al hacer uso de operadores ordenados normalmente.	25
2.6. Esquema de la equivalencia energética entre sistemas de fermiones y de bosones. Los polígonos rellenos indican un estado ocupado mientras que los polígonos vacíos indican un estado desocupado.	27
2.7. (a) Proceso de dispersión frontal en diferentes ramas. Este proceso se identifica con la constante de acoplamiento g_2 . (b) Dispersión hacia adelante en la misma rama con constante de acoplamiento g_4	28
2.8. a) Dispersión hacia atrás con constante de acoplamiento g_1 . b) Proceso de Umklapp identificado con la constante de acoplamiento g_3	28
4.1. Transformación de una red de espines en bloques. La Transformación se lleva a cabo al remplazar al conjunto de espines dentro de un rectángulo delimitado por las líneas punteadas, por un solo espín que toma el valor promedio de estos.	57
4.2. Superbloque compuesto de la unión de un sistema de 4 sitios con un reservorio de 6 sitios.	58
4.3. Esquema del algortimo infinito. En cada iteración se añade un sitio al sistema y luego se conecta con el reservorio. El sistema se puede crecer hasta una longitud arbitrariamente grande.	62
4.4. Conexión del sistema S con el reservorio R mediante los sitios a y b	63
4.5. Esquema del algoritmo finito. El bloque derecho cede un sitio en cada iteración al bloque izquierdo, para mantener un sistema total de longitud finita.	64
5.1. (a) Red de espines en $2D$. (b) Cadena de espines.	70
5.2. Energía por sitio del estado fundamental como función de la constante de acoplamiento. a) $J > 0$, caso ferromagnético. b) $J < 0$, caso antiferromagnético	72
5.3. Energía por sitio del estado fundamental en función del campo magnético externo. a) Sistemas ferromagnéticos ($J = 1$). b) Sistemas antiferromagnéticos ($J = -1$).	72
5.4. a) Función de correlación de espín. b) Factor de estructura de espín para un sistema ferromagnético ($J = 1$) en ausencia de campo externo.	73
5.5. a) Función de correlación de espín. b) Factor de estructura de espín para un sistema antiferromagnético ($J = -1$) en ausencia de campo externo.	74
5.6. Primeras 6 generaciones de la secuencia de Fibonacci.	76
5.7. Primeras cinco generaciones de la secuencia de Thue-Morse.	77
5.8. Energía del estado fundamental como función del tamaño del sistema para $h^z = 0,2 $. Sistema ferromagnético.	79

5.9. Energía del estado fundamental como función del tamaño del sistema para $h^z = 0,4 $. Sistema ferromagnético	79
5.10. Energía del estado fundamental como función del tamaño del sistema para $h^z = 0,2 $. Sistema antiferromagnético	80
5.11. Energía del estado fundamenta como función del tamaño del sistema para $h^z = 0,4 $. Sistema antiferromagnético	80
5.12. Función de correlación de espín para sistemas ferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético aleatorio de intensidad a) $h^z = 0,2 $ y b) $h^z = 0,4 $	81
5.13. SSF para un sistema ferromagnético en un campo aleatorio de intensidad $h^z = 0,2 $	83
5.14. SSF para un sistema ferromagnético en un campo aleatorio de intensidad $ h^z = 0,4 $	83
5.15. Función de correlación de espín para sistemas ferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo una secuencia de Fibonacci de intensidad a) $h^z = 0,2 $ y b) $h^z = 0,4 $	84
5.16. SSF para sistemas ferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = 0,2 $ siguiendo la secuencia de Fibonacci	85
5.17. SSF para sistemas ferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = 0,4 $ siguiendo la secuencia de Fibonacci	85
5.18. Función de correlación de espín para sistemas ferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo la secuencia de Thue-Morse de intensidad a) $h^z = 0,2 $ y b) $h^z = 0,4 $	86
5.19. SSF para sistemas ferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = 0,2 $ siguiendo la secuencia de Thue-Morse.	87
5.20. SSF para sistemas ferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = 0,4 $ siguiendo la secuencia de Thue-Morse.	87
5.21. Función de correlación de espín para sistemas antiferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo una secuencia de aleatoria de intensidad a) $h^z = 0,2 $ y b) $h^z = 0,4 $	88
5.22. SSF para un sistema antiferromagnético en un campo aleatorio de intensidad $h^z = 0,2 $	89
5.23. SSF para un sistema antiferromagnético en un campo aleatorio de intensidad $h^z = 0,4 $	89
5.24. Función de correlación de espín para sistemas antiferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo una secuencia de Fibonacci de a) $h^z = 0,2 $ y b) $h^z = 0,4 $	90
5.25. SSF para sistemas antiferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = 0,2 $ siguiendo la secuencia de Fibonacci.	91
5.26. SSF para sistemas antiferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = 0,4 $ siguiendo la secuencia de Fibonacci.	91
5.27. Función de correlación de espín para sistemas antiferromagnéticos con 234 sitios y un campo magnético siguiendo una secuencia de Thue-Morse, de intensidad a) $h^z = 0,2 $ y b) $h^z = 0,4 $	92

5.28. SSF para sistemas antiferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = 0,2 $ siguiendo la secuencia de Thue-Morse.	93
5.29. SSF para sistemas antiferromagnéticos con un campo magnético de intensidad $h^z = 0,4 $ siguiendo la secuencia de Thue-Morse.	93
B.1. Función de correlación $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ para $J = 1$, $\Delta = 1,217$ y $h = 0$	107
B.2. Función de correlación $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ para $J = 1$, $\Delta = 1$ y $h = 0$	108
B.3. Función de correlación de $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ para $J = 1$, $\Delta = 2,5$ y $h = 3,5$	108

Lista de símbolos

k	Momento de partícula
σ	Espín de partícula
$n_{k,\sigma}$	Número de ocupación del estado k, σ
n_k^0	Número de ocupación del estado fundamental
δn_k	Cambio en el número de ocupación del estado fundamental
F	Energía libre de Helmholtz
ϵ_F	Energía de Fermi
k_F	Momento de Fermi
v_F	Velocidad de Fermi
$f_{k\sigma,k'\sigma'}$	Parámetro de Landau para la interacción de cuasipartículas
$c_{k,\sigma}^\dagger, c_{k,\sigma}$	Operadores de creación y aniquilación de fermiones
$Z_{k\sigma}$	Función de renormalización
$A(k, \omega)$	Función espectral
$:$	Operador de ordenamiento normal
$\theta(x)$	Función escalón
r	Rama de dispersión lineal
$\hat{\psi}_r(x)$	Operador de campo fermiónico
$\rho_r(x), \rho_{r,q}$	Operadores de fluctuación de densidad
a_q^\dagger, a_q	Operadores de creación y aniquilación de bosones
g_1, g_2, g_3, g_4	Constantes de interacción en el líquido de Tomonaga-Luttinger
H_0	Hamiltoniano libre
H_{int}	Hamiltoniano con interacción
N_r	Operador de número
λ	Sector de carga o espín
K_λ	Constante adimensional de Tomonaga-Luttinger para el sector λ
u_λ	Velocidad del sector λ
\otimes	Producto de Kronecker
S^x, S^y, S^z	Matrices de espín
S^{zz}	Factor de estructura de espín

Bibliografía

- [1] C. Kittel and H. Kroemer. *Thermal Physics*. W.H. Freeman, 1980.
- [2] David Pines and Philippe Nozières. *The theory of quantum liquids*. Westview press, 1999.
- [3] Piers Coleman. *Introduction to many body physics*, <http://www.physics.rutgers.edu/~coleman/620/mbody/pdf/bkx.pdf>.
- [4] F.D.M. Haldane. Luttinger liquid theory of one-dimensional quantum fluids: I. properties of the luttinger model and their extension to the general 1d interacting spinless fermi gas. *J. Phys. C:Solid state phys.*, 14:2585, 1981.
- [5] H. Schoeller J. Von Delft. Bosonization for beginners - refermionization for experts. *Annalen der Physik*, 7:225, 1998.
- [6] H. Bethe. On the theory of metals. i. eigenvalues and eigenfunctions of the linear atom chain. *Zeitschrift f. Physik*, 71:205, 1931.
- [7] César Gomez Rodolfo Cuerno, German Sierra. *Teoría de campos conformes, sistemas integrables y grupos cuánticos*. Ediciones Universidad de Salamanca, 1991.
- [8] Y. Arredondo. *A study of low-dimensional inhomogeneous systems*. PhD thesis, Universität Bonn. Physikalisches Institut, 2008, <http://hss.ulb.uni-bonn.de/2009/1657/1657.pdf>.
- [9] L.P. Kadanoff. Scaling laws for ising models near T_c . *Physics*, 2:263, 1966.
- [10] Jun Kondo. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of theoretical physics*, 32:37, 1964.
- [11] Walter Steurer and Sofia Deloudi. *Crystallography of quasicrystals*. Springer, 2009.
- [12] John Cardy. *Scaling and renormalization in statistical physics*. Cambridge University Press, 1996.
- [13] Sin-Itiro Tomonaga. Remarks on Bloch's method of sound waves applied to many-fermion problems. *Progress of theoretical physics*, 5:544.

-
- [14] Giovanni Vignale Gabriele F. Giuliani. *Quantum physics in one dimension*. Cambridge University Press, 2005.
- [15] J. M. Luttinger. An exactly soluble model of a many-fermion system. *J. Math. Phys.*, 4:1154, 1963.
- [16] Thierry Giamarchi. *Quantum physics in one dimension*. Clarendon Press. Oxford, Oxford, 2003.
- [17] C. Kittel. *Introduction to solid state physics*. Wiley, 1995.
- [18] V.J. Emery. *In highly conducting one-dimensional solids*, Plenum Press. New York, 1979.
- [19] E. Miranda. Introduction to bozonization. *Brazilian Journal of Physics*, 33:3, 2003.
- [20] E.H. Lieb and F.Y. Wu. The one-dimensional Hubbard model: a reminiscence. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 321:1, 2003.
- [21] H.J. Schulz. Correlation exponents and the metal-insulator transition in the one-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 64:2831, 1990.
- [22] Javier Rodriguez Laguna. *Real space renormalization group. Techniques and applications*. PhD thesis, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, 2001, <http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0207340.pdf>.
- [23] R. M. Noack and S. R. White. *Density Matrix Renormalization: A New Numerical Method in Physics*, volume 528, page 27. Springer, Lecture Notes in Physics, Berlin, 1999.
- [24] K.G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, 47:773, 1975.
- [25] B. Widom. Equation of state in the neighborhood of critical point. *J. Chem. Phys.*, 43:3898, 1965.
- [26] S. R. White and A. Feiguin. Real-time evolution using density matrix renormalization group. *Phys. Rev. Lett.*, 93:76401, 2004.
- [27] R. P. Feynman. *Statistical mechanics: a set of lectures*. Addison-Wesley, 1972.
- [28] Y. Arredondo and O. Navarro. Electron pairing in one-dimensional quasicrystals. *Solid State Commun*, 150:1313, 2010.
- [29] S.G. Brush. History of the Lenz-Ising model. *Rev. Mod. Phys.*, 39:883, 1967.
- [30] D.V. Dmitriev A.A. Ovchinnikov and V. Ya. Krivnov. Antiferromagnetic ising chain in a mixed transverse an longitudinal magnetic field. *Physical Review B*, 68:214406, 2003.

-
- [31] R. Clarke F. T. Juang R. Merlin, K. Bajema and P. K. Batacharya. Quasiperiodic GaAs-AlAs heterostructures. *Phys. Rev. Lett.*, 55:1768, 1985.
- [32] A. Thue. *Norske vid Selsk. Skr. I. Christiania*, 7:1, 1906.
- [33] M. Morse. *Trans Am. Math. Soc.*, 22:84, 1921.
- [34] P. Pujol D.C. Cabra. *Field-Theoretical Methods in Quantum Magnetism*. Lecture Notes in Physics - New York, 2004.
- [35] R. Shankar. Bosonization: how to make it work for you in condensed matter. *Acta Physyca Polonica B*, 26:1835, 1995.

Agradecimientos

Esta tesis representa la materialización de lo que alguna vez fue un sueño lejano. Va dedicada a mis padres, Isabel y Armando, con quienes siempre estaré en deuda por su gran amor y sacrificio.

En primer lugar quisiera agradecer a mi asesora Yesenia Arredondo por su apoyo en este y otros trabajos, y sobre todo por tener siempre un minuto para resolver mis dudas e inquietudes, su gran disciplina y conocimiento me han inspirado a seguir preparándome. Agradezco a mi asesor Oracio Navarro por invitarme a participar en este proyecto, y por toda la atención y apoyo que me ha brindado en mi estadía en la casa de vista bella, su calidad humana y capacidad de análisis son admirables. Quisiera agradecer a mi maestro Elíseo y a mis compañeros de practica, sin sus enseñanzas no hubiera llegado a este punto. También agradezco a Thalía, por estar siempre ahí para brindarme su apoyo incondicional día con día, gracias por devolverme la alegría. Por ultimo quisiera agradecer a los habitantes de la casa en vista bella, Outmane, Francisco, Reginaldo y la Sra. Lupita, por haber hecho de la realización de este trabajo una experiencia placentera y enriquecedora.

