

## Tesis de Posgrado

# Sistemas de electrones fuertemente interactuantes y superconductividad de alta temperatura crítica

Castillo, Horacio Emilio

1991

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en [digital.bl.fcen.uba.ar](http://digital.bl.fcen.uba.ar). Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in [digital.bl.fcen.uba.ar](http://digital.bl.fcen.uba.ar). It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

**Cita tipo APA:**

Castillo, Horacio Emilio. (1991). Sistemas de electrones fuertemente interactuantes y superconductividad de alta temperatura crítica. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.

[http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis\\_2461\\_Castillo.pdf](http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2461_Castillo.pdf)

**Cita tipo Chicago:**

Castillo, Horacio Emilio. "Sistemas de electrones fuertemente interactuantes y superconductividad de alta temperatura crítica". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1991.

[http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis\\_2461\\_Castillo.pdf](http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_2461_Castillo.pdf)

**EXACTAS** UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



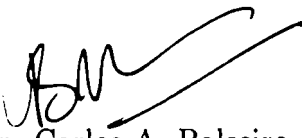
**UBA**

Universidad de Buenos Aires

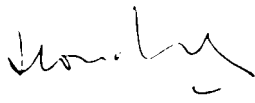
# Sistemas de electrones fuertemente interactuantes y superconductividad de alta temperatura crítica

Tesis presentada a la Facultad de Ciencias Exactas  
y Naturales de la Universidad de Buenos Aires, para  
optar al título de Doctor en Física.

Horacio Emilio Castillo  
Doctorando



Dr. Carlos A. Balseiro  
Director



Dr. Horacio Ceva  
Codirector

San Carlos de Bariloche  
1991

*Tesis*  
*2461*  
*g. 2.*

*a Ofelia y Emilio*  
*a Nancy*

## Agradecimientos

Quiero agradecer a Carlos Balseiro, por todo lo que me enseñó, entre otras cosas a pasarlo muy bien haciendo Física.

A Blas Alascio, Eduardo Gagliano, Alberto Rojo, Jorge Sofo, Karen Hallberg, Marcelo Baliña, Eduardo Jagla y toda la gente de los Grupo de Sólidos y Bajas Temperaturas de Bariloche, por todo lo que aprendí charlando con ellos.

A Maria Elena y Paco de la Cruz, que me alentaron siempre y hasta me prestaron la oficina donde hice gran parte de este trabajo.

A la Comisión Nacional de Energía Atómica, por sostenerme durante estos años y facilitarme sus recursos para mi trabajo.

A mis amigos del Tandar ...

A mis amigos de Bariloche ...

A mis viejos ...

A Nancy.

# Resumen

En esta tesis realizamos contribuciones al estudio de tres aspectos de la teoría de los superconductores de alta temperatura crítica: el mecanismo que produce la superconductividad, las consecuencias de que la longitud de coherencia del sistema sea del orden de la distancia entre portadores, y las propiedades de las excitaciones de baja energía en el estado normal, en particular la existencia (o no) de una superficie de Fermi.

Con referencia al primer aspecto estudiamos un mecanismo basado en las fluctuaciones de carga en los planos de  $CuO_2$ . Calculamos usando la aproximación RPA en un modelo simplificado sin grados de libertad de spin las interacciones efectivas entre agujeros agregados, y encontramos que es atractiva en el límite estático. Discutimos la relación de nuestros resultados con los obtenidos en modelos con spin. Luego demostramos que el signo de la interacción efectiva no depende de la utilización de la aproximación RPA, y extendemos nuestros resultados a modelos un poco más generales.

Con referencia al segundo aspecto, estudiamos un modelo de fermiones con interacción atractiva de corto alcance, en función de la intensidad de esta interacción. Esto nos permite pasar continuamente del caso débilmente interactuante, caracterizado por una longitud de coherencia mucho mayor que la distancia media entre partículas, al caso fuertemente interactuante, donde la longitud de coherencia es mucho menor que la distancia media. Obtenemos por métodos de diagonalización exacta el estado fundamental y los espectros de excitaciones de una partícula, de carga y de spin.

Encontramos que la función de onda y la energía del estado fundamental, y el potencial químico calculados en la aproximación BCS están en buen acuerdo con los resultados exactos para todo el rango de interacciones. El espectro de excitaciones de carga, además de las excitaciones de ruptura de pares que están presentes en la aproximación BCS, contiene un modo colectivo con energía menor, que evoluciona continuamente en función de la interacción. Los resultados de cálculos previos para la energía del modo en la aproximación RPA, coinciden cualitativamente con los exactos.

El espectro de una partícula difiere del de BCS cuando la interacción es intermedia o fuerte: si bien sigue existiendo un gap centrado en el potencial químico cuyo ancho está correctamente dado por la teoría de campo medio; las energías de cuasipartícula calculadas en esta teoría dan la posición de los picos más intensos del cálculo exacto (que asociamos tentativamente a resonancias en el límite termodinámico), pero existen otros picos, de más baja energía, asociados a las cuasipartículas exactas del sistema, y cuyo ancho de banda es mucho menor. Interpretamos la relación de dispersión de las nuevas cuasipartículas en términos de la interacción con las excitaciones colectivas de carga, y obtenemos un buen acuerdo con los resultados exactos por medio de una aproximación simple basada en esa idea.

Con respecto al tercer aspecto, buscamos contestar a la pregunta de si la carga y el spin de las excitaciones en un sistema de electrones fuertemente interactuantes están desacoplados o no. Para ello calculamos numéricamente las densidades espectrales y la conductividad Hall en dos sistemas finitos distintos. Encontramos que si bien las densidades espectrales indican la existencia de una superficie de Fermi similar a la de un sistema poco interactuante, los resultados de conductividad Hall no son consistentes con una dinámica de carga basada en cuasipartículas electrónicas convencionales que se desplazan por esa superficie. En cambio, sugerimos que nuestros resultados pueden entenderse como una evidencia en favor de la separación de carga y spin.

# Prólogo

El descubrimiento en 1986 de la superconductividad de alta temperatura crítica ha despertado un enorme interés, que se tradujo en la publicación de miles de trabajos de investigación sobre el tema. Este interés radica en gran parte en la probable aplicación tecnológica de los nuevos materiales; y también en que se han abierto nuevas cuestiones en los campos de la superconductividad y los sistemas electrónicos fuertemente correlacionados, y se ha reactualizado el interés en viejas cuestiones no resueltas.

En esta tesis se hacen aportes al estudio de tres cuestiones relacionadas con las propiedades de los nuevos materiales:

- La posible existencia de mecanismos alternativos al tradicional basado en la interacción electrón-fonón para generar superconductividad con temperaturas críticas mayores que las hasta entonces alcanzadas [1] era un problema que había sido discutido a lo largo del tiempo y cobró nuevo interés al descubrirse la superconductividad en los nuevos materiales. En el capítulo 2 se estudia un mecanismo de apareamiento basado en el intercambio de fluctuaciones de carga, utilizando técnicas de muchos cuerpos.
- Un problema que había sido estudiado previamente y cobró nuevo interés es la evolución desde la superconductividad de acoplamiento débil a la condensación de Bose de pares de fermiones fuertemente ligados. En el capítulo 3 se estudian el estado fundamental y los espectros de excitaciones de una partícula, de carga y de spin de un modelo de fermiones con interacción atractiva en función de la intensidad de la interacción, usando técnicas de diagonalización exacta en sistemas finitos.
- Otra cuestión central en la teoría de superconductores de alta temperatura crítica consiste en la naturaleza de la superficie de Fermi y las excitaciones de baja energía en la fase normal de estos materiales. Una

de los puntos más controvertidos es si la carga y el spin están desacoplados o bien las excitaciones llevan carga y spin conjuntamente, comportándose como cuasipartículas similares a electrones. En el capítulo 4 buscamos acercarnos a una respuesta a esta pregunta bajo la suposición de que las interacciones entre los electrones son fuertes, por medio de un cálculo numérico en un sistema finito de las densidades espectrales de una partícula y la conductividad Hall.

El capítulo 1 contiene una breve reseña de algunas de las propiedades físicas de los nuevos superconductores, y luego una descripción muy somera de algunas de las ideas teóricas propuestas para explicarlas.

Los resultados que aparecen en esta tesis, salvo los de la sección 2.4, fueron previamente presentados en los siguientes trabajos:

1. *Three-band charge fluctuation model for electron pairing: A many-body problem*; H. Castillo, C. Balseiro, B. Alascio y H. Ceva, Phys. Rev. B **40**, 224 (1989).
2. *Ground State and Excitation Spectrum for the Negative U Hubbard Model*; H. E. Castillo, C. A. Balseiro, enviado a Phys. Rev. B.
3. *Hall Conductivity and Fermi Surface in highly correlated systems*; H. E. Castillo, C. A. Balseiro, enviado a Phys. Rev. Lett.

Esta tesis se realizó en parte en el Departamento de Física y en parte en el Centro Atómico Bariloche, amgos dependientes de la Comisión Nacional de Energía Atómica.

Finalmente, se advierte al lector sobre el el uso abundante de términos en inglés, tales como “gap”, “spin bag”, etc. Se creyó que era preferible este mal uso del lenguaje a la utilización de los equivalentes castellanos de aquellos términos que los físicos de habla hispana normalmente utilizan sólo en inglés.



# Contenido

<b>Resumen</b>	<b>i</b>
<b>Prólogo</b>	<b>iii</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
1.1 Propiedades físicas de los superconductores de alta temperatura crítica . . . . .	1
1.1.1 Un poco de historia . . . . .	1
1.1.2 Estructura cristalina . . . . .	2
1.1.3 Diagrama de fases . . . . .	2
1.1.4 Estructura electrónica . . . . .	5
1.1.5 Algunos experimentos de transporte . . . . .	6
1.1.6 Propiedades magnéticas . . . . .	8
1.1.7 Superconductividad . . . . .	9
1.2 Ideas teóricas sobre superconductividad de alta temperatura crítica . . . . .	10
<b>2 Mecanismo de fluctuaciones de carga para la generación de interacciones atractivas en superconductores de alta temperatura crítica</b>	<b>12</b>
2.1 Introducción . . . . .	12
2.2 Modelos de Hubbard generalizados para los planos de $CuO_2$ : estructura de bandas en la aproximación de Hartree-Fock . . .	18
2.3 La interacción efectiva en la aproximación RPA	23
2.3.1 Formalismo . . . . .	24
2.3.2 Resultados y Discusión . . . . .	30
2.4 Algunos resultados exactos para la interacción efectiva	35

<b>3</b>	<b>Estado fundamental y espectro de excitaciones en un modelo de fermiones con interacción atractiva</b>	<b>39</b>
3.1	Introducción . . . . .	39
3.2	El modelo y algunos resultados previos . . . . .	41
3.2.1	El límite de acoplamiento débil: BCS . . . . .	42
3.2.2	El límite de acoplamiento fuerte: transformación canónica, excitaciones colectivas y excitaciones de una partícula .	44
3.2.3	Excitaciones colectivas para todo $U$ : la aproximación RPA . . . . .	48
3.3	Resultados de diagonalización exacta . . . . .	48
3.3.1	Método de cálculo . . . . .	48
3.3.2	Estado Fundamental . . . . .	50
3.3.3	Densidades espectrales de una partícula . . . . .	56
3.3.4	Excitaciones de carga . . . . .	59
3.3.5	Excitaciones de Spin . . . . .	64
3.3.6	Cuasipartículas . . . . .	67
3.4	Conclusiones . . . . .	71
<b>4</b>	<b>Conductividad Hall y superficie de Fermi de sistemas electrónicos fuertemente interactuantes</b>	<b>73</b>
4.1	Introducción . . . . .	73
4.2	Separación de carga y spin . . . . .	76
4.2.1	Solitones en poliacetileno conductor . . . . .	76
4.2.2	El modelo de Hubbard en una dimensión para $U \rightarrow \infty$	78
4.2.3	Separación de carga y spin en los planos de $CuO_2$ ?	80
4.3	El modelo . . . . .	82
4.4	Resultados . . . . .	83
4.5	Conclusiones . . . . .	88

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1 Propiedades físicas de los superconductores de alta temperatura crítica

#### 1.1.1 Un poco de historia

Desde 1911, en que Kamerlingh Onnes descubrió la superconductividad en el mercurio a  $4.2K$ , muchos otros materiales probaron ser superconductores, y los máximos valores observados de temperatura crítica fueron subiendo gradualmente, hasta llegar a  $23.2K$  en  $Nb_3Ge$  en 1974 [2]. Fue imposible sobrepasar ese valor de temperatura crítica hasta que en 1986 Bednorz y Müller observaron que el sistema  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$  comenzaba su transición superconductoras alrededor de  $35K$ . A partir de este descubrimiento, que les valió a sus autores el Premio Nobel de Física de 1987, se precipitaron los descubrimientos de óxidos superconductores con temperaturas críticas cada vez más altas.

Pronto se descubrió superconductividad con temperatura crítica un poco por encima de  $90K$  en  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  (llamado comúnmente 1-2-3), y más tarde en los sistemas  $Bi - Sr - Ca - Cu - O$ , con temperaturas críticas de hasta  $115K$ , y en los sistemas  $Tl - Ba - Ca - Cu - O$ , con temperaturas críticas de hasta  $125K$ . Muchos otros materiales con temperaturas críticas de entre  $30K$  y  $125K$  se obtuvieron por sustitución de alguno de los átomos en los materiales ya mencionados. También se encontró superconductividad con temperaturas de transición de hasta  $30K$  en compuestos del tipo  $Ba -$

$K - Bi - O$ , y  $Nd - Ce - Cu - O$ .

La preparación de buenas muestras ha resultado difícil, en algunos casos para conseguir muestras con una sola fase, y en otros para crecer cristales de buena calidad y tamaño suficiente. Esto ha retrasado la obtención de resultados confiables para las propiedades físicas de estos materiales, pero últimamente el acuerdo entre resultados obtenidos por distintos grupos ha mejorado marcadamente.

Discutiremos aquí en forma muy breve algunos resultados experimentales sobre los superconductores de alta temperatura crítica. Una descripción más detallada puede encontrarse en [5] o bien, si se desea profundizar en algún tema en particular, en [2,3,4].

### 1.1.2 Estructura cristalina

*La estructura de los cupratos superconductores tiene en común la presencia de grupos de entre una y tres capas de  $CuO_2$  muy cercanas entre sí, separados por regiones que actúan esencialmente como reservorios de carga y que pueden ser muy diferentes de un compuesto a otro (ver figura 1.1).*

En cambio, el compuesto  $Ba - K - Bi - O$  es cúbico y carece de átomos de cobre. Está en discusión en qué medida forma parte de una misma categoría junto con los superconductores que contienen cobre. En lo que sigue nos referiremos, salvo mención en contrario, a los cupratos.

### 1.1.3 Diagrama de fases

Una de las herramientas más útiles para estudiar a los cupratos ha sido variar la cantidad de portadores de carga en los planos por medio de la modificación química de los reservorios de carga adyacentes. Esto se logró por medio de la adición o remoción de oxígeno o la sustitución de algún anion por otro con distinta valencia, por ejemplo de  $Ba^{2+}$  por  $La^{3+}$  en  $La_2CuO_4$  o  $Ce^{4+}$  por  $Nd^{3+}$  en  $Nd_2CuO_4$ . El bario actúa como un dopante de agujeros, y el cerio como un dopante de electrones. Para cada familia de compuestos, la temperatura crítica se maximiza para un rango angosto de concentraciones de electrones o agujeros, normalmente alrededor de 0.15 a 0.20 por grupo  $CuO_2$ .

En la figura 1.2 se muestra un diagrama de fases genérico para los cupratos dopados con agujeros. Partiendo del sistema sin dopaje, que es un aislador

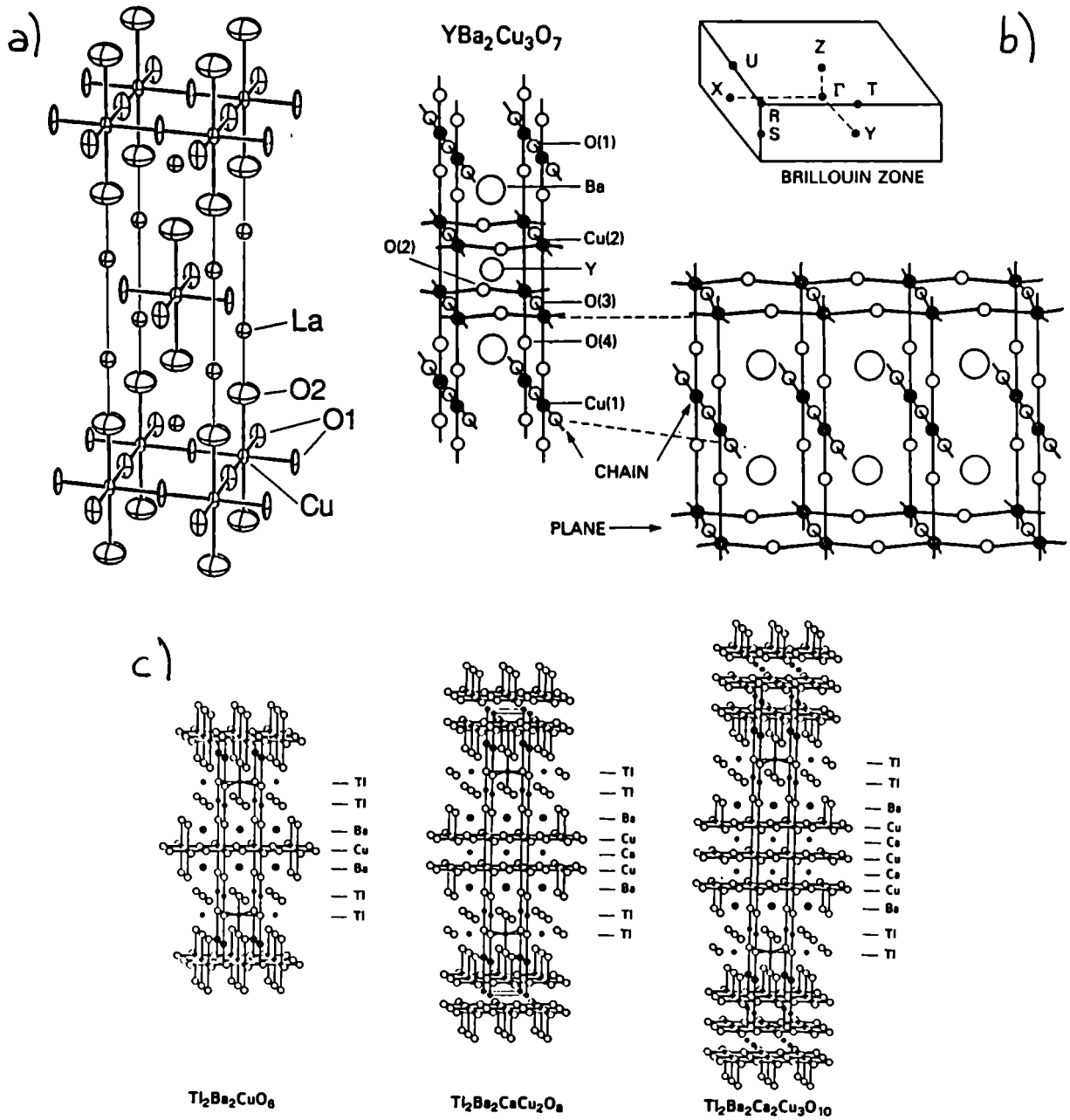


Figura 1.1: Estructura cristalina de: a)  $\text{La}_{2-x}\text{A}_x\text{CuO}_4$ , donde  $A = \text{Ba}, \text{Sr}, \text{Ca}, \dots$ ; b)  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ; c)  $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4}$ .

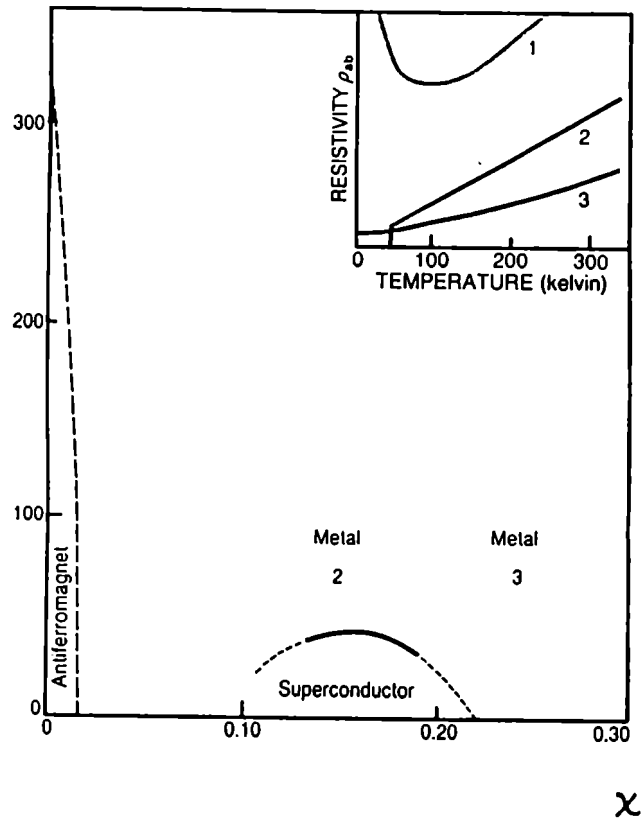


Figura 1.2: Diagrama de fases genérico para los cupratos en función del dopaje con agujeros y la temperatura. El recuadro muestra la dependencia típica de la resistividad en función de la temperatura en cada una de las zonas señaladas.

con orden antiferromagnético de largo alcance, la temperatura de Neel descende rápidamente cuando la concentración de agujeros llega a 0.01 o 0.02. Cuando la concentración de agujeros es del orden de 0.1 por cobre, aparecen la superconductividad a temperatura baja y las propiedades de transporte de tipo metálico a temperatura más alta. Para dopajes aún más altos, los materiales son metálicos pero no superconductores, y sus propiedades se parecen a las de metales normales.

#### 1.1.4 Estructura electrónica

La ligadura entre el cobre y el oxígeno tiene carácter parcialmente covalente. Involucra los orbitales  $3d$  de  $Cu$  y  $2p$  de  $O$ . El origen de la covalencia proviene de la proximidad en energía de esos orbitales, y es por lo tanto específica de esos dos elementos (algo similar ocurre entre los niveles  $6p$  de  $Pb$  y  $Bi$  y el nivel  $2p$  del  $O$  en  $BaBi_{1-x}Pb_xO_3$ ). Diversos tipos de espectroscopía confirman la presencia de esta mezcla covalente [5,6]. Sin embargo, los estados vacíos que aparecen al dopar con agujeros en  $La - Sr - Cu - O$ ,  $Y - Ba - Cu - O$  y  $Bi - Sr - Ca - Cu - O$  corresponden predominantemente a orbitales  $2p_x$  o  $2p_y$  en los planos [7,8].

Una cuestión que ha despertado gran interés teórico y experimental es la existencia y la forma de la superficie de Fermi. La superficie de Fermi es el lugar en el espacio de impulsos donde la ocupación de los estados electrónicos cae abruptamente y donde la energía necesaria para crear excitaciones de partícula-agujero se anula. En un líquido de Fermi (por ejemplo un metal simple) a  $T = 0$ , esa caída de  $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$  es una discontinuidad. En un sistema fuertemente correlacionado como los cupratos superconductores, no es obvio que exista una superficie de Fermi.

Los experimentos de fotoemisión de electrones permiten determinar las relaciones de dispersión  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  de las bandas. Los mejores resultados se han obtenido para el  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$  [9], pues este material puede clivarse en frío y su superficie permanece estable al calentar un poco por encima de la temperatura crítica de alrededor de  $85K$ . Sin embargo también se ha medido a baja temperatura en  $YBa_2Cu_3O_{6.9}$  [10]. Las bandas de energía medidas cruzan la energía de Fermi en los puntos del espacio de impulsos predichos por los cálculos autoconsistentes de una partícula [11]. Los anchos de banda medidos aparecen reducidos respecto de la predicción de la teoría de una partícula, probablemente debido a las correlaciones. Se pueden analizar los

espectros de emisión con más detalle, para determinar si la forma de los picos y la intensidad del fondo corresponden a lo esperado en un líquido de Fermi convencional. Por ahora la resolución experimental no es suficiente para dar una respuesta definitiva, pero hay indicios de que la respuesta es negativa. Por ejemplo, el ensanchamiento de los picos al alejarse de la energía de Fermi crece como  $|E - E_F|^n$ , con  $n$  cercano a 1, mientras que en un líquido de Fermi ordinario debería ser  $n = 2$  [9].

### 1.1.5 Algunos experimentos de transporte

*Las propiedades de transporte de los cupratos por encima de la temperatura crítica superconductoras son marcadamente anisotrópicas, tal como se espera a partir de la estructura cristalina.* Por ejemplo, la resistividad  $\rho_c$  en la dirección perpendicular a los planos de  $\text{CuO}_2$  en  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  es hasta  $10^5$  veces más grande que la resistividad  $\rho_{ab}$  en la dirección paralela a ellos. La resistividad en los planos se comporta como la de un metal, pues aumenta al aumentar la temperatura, mientras que la perpendicular al plano decrece al aumentar la temperatura. En algunos cristales de  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ , que es el material menos anisotrópico,  $\rho_c$  tiene carácter metálico, sin embargo siempre es por lo menos 10 veces mayor que  $\rho_{ab}$ . Las resistividades en el plano para composiciones optimizadas son muy similares entre materiales de distintas familias. Esta es una evidencia de que las capas de  $\text{CuO}_2$  son los sistemas electrónicamente activos.

Por otro lado, la conductividad  $\sigma(\omega)$  no puede ajustarse con un modelo simple basado en una probabilidad de dispersión  $1/\tau_0$  independiente de la frecuencia, sino que se requiere proponer una probabilidad de dispersión proporcional al máximo entre  $\hbar\omega$  y  $k_B T$  o alguna forma similar. Esto implica que no parece haber energías características involucradas, salvo la temperatura, y que los portadores interactúan con un espectro de excitaciones que se extiende más allá de las frecuencias de fonones. También las mediciones de dispersión Raman muestran la existencia de un continuo muy extendido de excitaciones electrónicas.

*El efecto Hall en los cupratos indica conducción por agujeros, salvo en la familia de compuestos  $\text{Nd-Ce-Cu-O}$ , donde si bien el dopaje sugiere que los portadores son electrones los experimentos de efecto Hall no son aún concluyentes al respecto.* En un metal simple, la densidad de Hall  $n_H = 1/(eR_H)$  depende sólo débilmente de la temperatura. En la mayoría de los supercon-



ductores de alta temperatura crítica, en cambio, se observa un fuerte crecimiento al aumentar la temperatura [12]. Por otro lado,  $1/R_H$  varía linealmente con la concentración de portadores determinada por medios químicos para  $La - Sr - Cu - O$ ,  $Nd - Ce - Cu - O$ , y  $Bi - Sr - Ca - Cu - O$ . Esto significa que  $R_H$  diverge como  $1/x$  al llegar a la transición metal-aislador. Para el  $Y - Ba - Cu - O$  la transición puede darse como un cambio abrupto, exponencial, o bien lineal de  $n_H$  con la concentración de dopante.

La variación de  $1/R_H$  con la temperatura no puede ser asociada a dispersión electrón-fonón pues se producen aún a temperaturas del orden de la de Debye.

También hay fuertes argumentos en contra de una explicación basada en la existencia de más de un tipo de portadores: si este fuera el caso se esperaría una importante dependencia de  $R_H$  con la presión, y los experimentos en  $Y - Ba - Cu - O$  dan un valor casi constante; además, la dependencia con el potencial químico tampoco es la esperada para un sistema con una banda de agujeros y una banda de electrones.

Otra explicación que podría proponerse es la dispersión anisotrópica debida a la interacción spin-órbita con los momentos magnéticos de los cobs. En un sistema con momentos localizados, la presencia de un campo magnético alinea parcialmente los momentos, y por lo tanto el sentido de la dispersión cambia con el signo de  $H$ , con lo cual se suma una contribución a la señal del efecto Hall convencional. Esta contribución es proporcional a la polarizabilidad de los momentos locales, esto es la susceptibilidad, y además debe saturar para campos fuertes cuando todos los momentos están alineados. Sin embargo no se ha observado saturación en experimentos en  $Nd - Ce - Cu - O$ . Además, la dependencia con la temperatura de  $R_H$  no escala con la susceptibilidad magnética, que varía débilmente entre  $T_c$  y  $400K$ , para superconductores con composición optimizada.

Por otro lado, existe una fuerte correlación entre la pendiente  $\frac{\partial n_H}{\partial T}$  y la temperatura crítica. En muchos experimentos, al alterar el dopaje de un modo que reduce  $T_c$  al mismo tiempo se reduce  $\frac{\partial n_H}{\partial T}$ . Esto parece indicar que la fuerte variación de la conductividad Hall con la temperatura está relacionada con las mismas propiedades del estado fundamental del sistema electrónico que son responsables de la superconductividad.

Aunque para bandas parabólicas el signo de la resistividad Hall da el signo de los portadores a través de la expresión  $R_H = 1/(ne)$ , en el caso más general de bandas con forma arbitraria el signo de  $R_H$  se determina por

la curvatura de la superficie de Fermi [13]. Esto permite entender el signo de la resistividad Hall a partir de una imagen de cuasipartículas convencionales similares a electrones, utilizando la información obtenida de cálculos de estructura de bandas. En cambio, la divergencia de  $R_H$  parece difícil de entender en este esquema. Por ejemplo Allen, Pickett y Krakauer hicieron un cálculo realista basado en la curvatura local de la superficie de Fermi del  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  determinada en la aproximación LDA. Encontraron un valor aproximadamente constante para  $R_H$  cuando  $x \rightarrow 0$ . Resultados similares fueron obtenidos por Kim, Levin y Auerbach [13] en un esquema de líquido de Fermi sobre un modelo de acoplamiento fuerte para los planos de  $CuO_2$  en el que se tenía en cuenta la localización causada por la fuerte interacción Coulombiana en los estados  $3d$ <sup>1</sup>. Esto induce a pensar que se requiere incorporar de una manera esencial las fuertes correlaciones entre los electrones para poder describir el estado del sistema con  $x < 0.15$ .

Para  $x > 0.3$  las propiedades de transporte no difieren mucho de las esperadas para un metal común. La conductividad Hall es aproximadamente independiente de la temperatura, y cambia de signo al aumentar  $x$ . La transición entre el régimen de líquido de Fermi y el de correlaciones fuertes se produce aparentemente en la región  $0.15 < x < 0.25$ . La región con alta  $T_c$  se encuentra un poco hacia el lado fuertemente correlacionado de la transición.

### 1.1.6 Propiedades magnéticas

Los compuestos originarios no dopados son aisladores antiferromagnéticos cuyas propiedades magnéticas se entienden bien en la actualidad [4]. Los momentos magnéticos de la capa  $3d^9$  del  $Cu^{2+}$  forman un sistema de Heisenberg de spin  $\frac{1}{2}$  en una red cuadrada bidimensional, con una interacción de intercambio  $J \sim 100meV$ . Un débil acoplamiento entre planos genera orden de largo alcance tridimensional, a una temperatura mucho más baja que  $J$ , y que en  $La_2CuO_4$  es de  $330K$ . Por encima de la temperatura de Néel existen fuertes correlaciones bidimensionales, que se reducen rápidamente al dopar el sistema con agujeros. En los compuestos superconductores, los ex-

---

<sup>1</sup>En este trabajo se discute la influencia del elemento de matriz de salto entre oxígenos para el signo del efecto Hall. Si se lo desprecia,  $R_H$  es nula en el sistema no dopado y se hace negativa al dopar. Si se lo incluye, la curvatura de la superficie de Fermi cambia y se obtiene  $R_H > 0$  para  $0 < x < 0.3$  y  $R_H < 0$  para  $x > 0.3$ .

perimentos de dispersión de neutrones, resonancia de spin de muones, y calor específico indican la ausencia de momentos magnéticos estáticos o lentamente ( $\sim MHz$ ) variables.

### 1.1.7 Superconductividad

Los nuevos superconductores, igual que los tradicionales, tienen una carga efectiva  $e^* = 2e$ , que implica la existencia de pares de electrones. Esta carga fue determinada en mediciones de efecto Josephson alterno, mediciones de salto de flujo, y por medio de la observación de redes de vórtices con técnicas de decoración, entre otros experimentos. Los experimentos de reflexión de Andreev también dan evidencia de un estado superconductor apareado.

*La longitud de coherencia  $\xi$  es muy corta en estos materiales.* En cambio, la longitud de penetración es grande por la pequeña densidad de portadores ( $\sim 2 - 5 \times 10^{21} cm^{-3}$ ) que pueden apantallar el campo. Para  $YBa_2Cu_3O_7$  en el límite de baja temperatura,  $\xi_{ab} = 14 \pm 2 \text{Å}$ ,  $\xi_c = 1.5 - 3 \text{Å}$ ,  $\lambda_{ab} \sim 1400 \text{Å}$  y  $\lambda \sim 7000 \text{Å}$ . En general en estos materiales  $\xi$  es menor o del orden de  $30 \text{Å}$ , y  $\xi \ll \lambda$ , esto significa que son superconductores del tipo II.

La longitud de coherencia corta puede entenderse a partir de la estimación de BCS:  $\xi = \hbar v_F / \pi \Delta(0)$ , donde  $v_F$  es la velocidad de Fermi ( $\sim 1.1 \times 10^7 cm/seg$  para 1-2-3) y  $\Delta(0)$  es el parámetro de gap ( $\sim 6k_b T_c$  para 1-2-3). Con los valores dados se obtiene  $\xi = 15 \text{Å}$ . Como  $\xi_c$  es de unos pocos angstroms, las capas superconductoras están sólo débilmente acopladas cuando las regiones entre ellas son suficientemente gruesas.

El campo crítico superior  $H_{c2}$ , que es el máximo campo en el cual el material permanece superconductor, está dado por  $H_{c2} = \phi_0 / 2\pi \xi^2$ . Para el  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  en un campo perpendicular a los planos, esto da una intensidad mucho mayor que la alcanzable en la actualidad. Esto abre en principio una posibilidad de aplicación muy interesante para estos materiales.

El gap superconductor es distinto de cero en todas direcciones, según lo indican, por ejemplo, mediciones de la longitud de penetración en función de la temperatura, que dan un valor casi constante a baja temperatura. Si el gap tuviera nodos, habría una dependencia más fuerte con la temperatura. Existe evidencia, proveniente de experimentos de efecto túnel, de que es anisotrópico, probablemente entre las direcciones paralelas a los planos y la dirección perpendicular a ellos. Los resultados obtenidos para la razón  $2\Delta/k_b T_c$  varían entre 3 y 8 (3.5 es el valor predicho por la teoría BCS en

acoplamiento débil).

## 1.2 Ideas teóricas sobre superconductividad de alta temperatura crítica

Desde el descubrimiento de los materiales superconductores de alta  $T_c$  se han propuesto una gran variedad de ideas para explicar tanto las propiedades relacionadas con la superconductividad como las propiedades del estado normal en estos materiales. Estas ideas van desde modelos convencionales de apareamiento en un líquido de Fermi mediados por excitaciones bosónicas, a modelos totalmente diferentes, basados en la aparición de nuevos tipos de cuasipartículas en dos dimensiones.

Las excitaciones bosónicas en modelos convencionales incluyen:

- fonones,
- excitaciones de carga,
- excitaciones de spin.

Estos dos últimos grupos de excitaciones podrían estar a energías mayores que los fonones y por lo tanto dar lugar a mayores temperaturas críticas.

El modelo no convencional más estudiado es el RVB (“resonating valence bonds”: ligaduras de valencia resonante), propuesto por Anderson [14]. En él se propone que el estado normal de estos materiales no sea un líquido de Fermi sino un nuevo tipo de líquido cuántico con cuasipartículas de spin (“spinones”) y carga (“holones”) separadas. La superconductividad se debería al efecto túnel de Josephson de pares entre capas de  $CuO_2$ .

Otro modelo no convencional, propuesto por Laughlin [15], parte de proponer la existencia en los planos de  $CuO_2$  de excitaciones de estadística fraccionaria, llamadas “anyons” (“cualquierones”). Estas excitaciones sólo pueden existir en sistemas bidimensionales, y se caracterizan porque el factor que multiplica a la función de onda al intercambiar dos de ellas no es 1 como en los bosones o  $-1$  como en los fermiones sino una fase compleja.

Dentro de los modelos convencionales de apareamiento el que se conoce con más detalle por haber sido estudiado durante décadas es el basado en la interacción electrón-fonón. Si bien la alta temperatura crítica, la constante

de acoplamiento electrón-fonón relativamente pequeña que se deduce de experimentos de absorción infrarroja, y el efecto isotópico pequeño o nulo que se encuentra en los compuestos con  $T_c$  optimizada son factores que inducen a pensar que el intercambio de fonones no es el principal mecanismo involucrado [2,5], otros autores sostienen que los datos existentes pueden explicarse por medio de mecanismos fonónicos, o a lo sumo mecanismos combinados fonón-excitón [16].

Por otro lado, Schrieffer propuso el mecanismo de las “spin bags”, basado en fluctuaciones de spin [17,18,19]. La idea consiste en que un agujero agregado en una región con correlaciones antiferromagnéticas deprime localmente el pseudogap electrónico. Esto produce una región (“spin bag”) dentro de la cual el agujero queda atrapado, y que se mueve con éste, sin alterar sus números cuánticos característicos: carga  $e$  y spin  $\frac{1}{2}$ . Dos agujeros se atraen pues ganan energía al compartir una “spin bag”, ya que así se pierde menos energía de intercambio que si los agujeros estuvieran separados y formaran “bags” independientes.

Finalmente, Varma, Schmitt-Rink y Abrahams propusieron un mecanismo basado en las fluctuaciones de carga que es específico de los planos de  $CuO_2$  [20]. En el capítulo 2 discutiremos más en detalle este mecanismo.

## Capítulo 2

# Mecanismo de fluctuaciones de carga para la generación de interacciones atractivas en superconductores de alta temperatura crítica

### 2.1 Introducción

En este capítulo nos centraremos en el estudio de un mecanismo de apareamiento basado en el intercambio de fluctuaciones de carga.

A principios de 1987 Varma, Schmitt-Rink y Abrahams propusieron por primera vez un mecanismo basado en las fluctuaciones de carga que era específico de los planos de  $CuO_2$  [20]. En la referencia [20] los autores observan que en la mayoría de los óxidos de los metales de transición la banda  $2p$  del oxígeno está bien por debajo de la banda  $d$ , tiene interacciones covalentes pequeñas y está llena. El estado  $O^{--}$  se estabiliza por medio de la interacción electrostática con los iones metálicos positivamente cargados. Sin embargo la posición promedio de la banda  $d$  en los metales de transición desciende en energía a medida que el número atómico aumenta, y en el caso del cobre está muy cerca del nivel del oxígeno. Mattheiss [21] había observado que su cálculo autoconsistente de la estructura de bandas para el  $La_2CuO_4$

se puede ajustar con bandas de un modelo de electrones fuertemente ligados eligiendo la energía de sitio de cobre  $E_d$  aproximadamente igual a la energía de sitio de oxígeno  $E_p$ .

Los cálculos de bandas [21] en  $La_2CuO_4$  muestran que los orbitales  $d_{x^2-y^2}$  del cobre se hibridizan con los orbitales  $p_x$  y  $p_y$  del oxígeno generando una banda ligante y una antiligante, separadas por un conjunto de bandas no ligantes. Según esos cálculos, en el  $La_2CuO_4$  no dopado la banda antiligante está semillena. Esto implica que la celda unidad fluctúa entre los estados de carga  $Cu^+O^{--}O^{--}$  y  $Cu^{++}O^-O^{--}$  (despreciando configuraciones con otras cargas que tienen mucha mayor energía debido a las fuertes correlaciones electrostáticas).

Experimentalmente, el  $La_2CuO_4$  no dopado es semiconductor. En los materiales dopados con agujeros, la densidad de portadores es relativamente baja ( $\leq 10^{22} cm^{-3}$ ). Esto da una distancia media entre partículas  $r_s \geq 3\text{\AA}$  que es mayor que la separación entre los átomos de cobre y oxígeno en el plano ( $\simeq 1.9\text{\AA}$ ). Por lo tanto se espera que la excitación de transferencia de carga  $Cu^{++}O^{--} \rightarrow Cu^+O^-$  esté esencialmente no apantallada. Varma, Schmitt-Rink y Abrahams propusieron que la repulsión Coulombiana  $V$  entre un sitio de  $Cu$  y sus vecinos de  $O$  no se podía despreciar, y conjeturaron la existencia de un excitón localizado que abarcara un peso importante dentro del espectro de fluctuaciones de carga. El hamiltoniano modelo propuesto era el de un sistema de electrones fuertemente ligados, con dos tipos de sitios  $A$  y  $B$  tales que cada sitio sólo tiene vecinos del otro tipo, con un elemento de matriz de salto  $t$  y una interacción Coulombiana  $V$  entre cada par de sitios vecinos.

$$H = \epsilon_A \sum_i n_{Ai} + \epsilon_B \sum_j n_{Bj} + t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{Ai\sigma}^\dagger c_{Bj\sigma} + c_{Bj\sigma}^\dagger c_{Ai\sigma}) + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_{Ai} n_{Bj}. \quad (2.1)$$

El operador  $c_{Ai\sigma}^\dagger$  ( $c_{Bj\sigma}^\dagger$ ) crea un hueco en el sitio  $i$  de tipo  $A$  (en el sitio  $j$  de tipo  $B$ ), mientras que los operadores  $n_{Ai}$  y  $n_{Bj}$  son los operadores de número respectivos. Los sitios  $A$  corresponden a los orbitales  $d_{x^2-y^2}$  del cobre y los  $B$  corresponden a los orbitales  $p_x$  y  $p_y$  del oxígeno y se supone implícitamente que, en el lenguaje de agujeros, la energía de sitio para el cobre es un poco menor que para el oxígeno, de modo que el estado fundamental para el sistema no dopado en el límite atómico ( $t \rightarrow 0$ ) sea  $Cu^{++}O^{--}$ .

En este tratamiento se ignora la repulsión Coulombiana dentro de cada sitio, y se propone que el cobre “fluctúa entre  $Cu^{++}$  y  $Cu^+$  y  $Cu^{+++}$  (especialmente para concentración aumentada de  $Sr$ )”. Efectivamente en este modelo los agujeros agregados aumentan la carga positiva del cobre <sup>1</sup>. Posteriormente, los experimentos de espectroscopía [7] mostraron que esto era erróneo, pues los agujeros agregados al dopar el sistema iban a parar a orbitales de oxígeno.

Poco tiempo después, Hirsch [22] por un lado, e independientemente el grupo de Bariloche por el otro [23] propusieron una variante del modelo basado en fluctuaciones de carga en la cual se postulaba una fuerte interacción Coulombiana  $U_d$  dentro de los sitios de  $Cu$ . Esta propuesta es consistente con la existencia de fases magnéticas para los sistemas con dopaje pequeño o nulo y con la espectroscopía de los materiales, pues ambas indican la existencia de fuertes correlaciones. Por lo tanto los cálculos de bandas convencionales no son confiables y no pueden ser usados como punto de partida para estudiar estos modelos. También se consideraba la posibilidad de una interacción  $U_p$  dentro de los sitios de oxígeno, pero esta interacción parece no jugar un papel tan relevante como la del cobre. En el límite atómico es fácil ver que con estos parámetros los huecos agregados al sistema no dopado van a los sitios de oxígeno en vez de ir a los de cobre: la energía necesaria para agregar un hueco en un sitio de oxígeno es  $\epsilon_p + 2V$ , que es menor que la energía necesaria para agregarlo en un sitio de cobre,  $\epsilon_d + U_d$ , para el caso en que  $U_d > 2V + \epsilon_p - \epsilon_d$ . Este resultado sigue siendo válido si se tiene en cuenta la covalencia de los orbitales: en la referencia [23] se calculan numéricamente valores medios de carga y spin en sistemas unidimensionales finitos para  $U_d$  grande, y se muestra que:

- El sistema tiene un “gap” de transferencia de carga si la interacción  $V$  es suficientemente grande aún cuando las energías de los sitios de  $Cu$  y  $O$  estuvieran muy cercanas.
- Al dopar con agujeros, estos van a parar a los sitios de oxígeno, mientras

---

<sup>1</sup>Es fácil ver que en el límite atómico, la energía necesaria para agregar un hueco en un sitio de cobre a partir del sistema no dopado es  $\epsilon_d$  mientras que para agregarlo en un sitio de oxígeno es  $\epsilon_p + 2V$  pues cada oxígeno tiene dos cobres vecinos con un hueco cada uno; por lo tanto si  $\epsilon_p - \epsilon_d < 2V$  los agujeros agregados aumentan la carga del cobre. También en la aproximación de Hartree-Fock la carga agregada va a parar en mayor medida a los sitios de cobre que a los de oxígeno, como se verá en la sección siguiente.



que el contenido de agujeros en los cobres disminuye.

Posteriormente, estudios más detallados mediante diagonalización exacta en sistemas finitos <sup>2</sup> [22,24,25] y teoría de perturbaciones en  $t$  [26]; dieron como resultado que si dos agujeros se agregaban al sistema no dopado estos agujeros se ligaban para valores suficientemente grandes de las interacciones  $V$  y  $U_d$  (ver figura 2.1). La atracción entre agujeros puede entenderse fácilmente en el límite de acoplamiento fuerte ( $U_d, U_p \rightarrow \infty, t \rightarrow 0$ ): el costo en energía de agregar dos huecos en sitios de oxígeno separados por una distancia grande es, de acuerdo a lo dicho anteriormente,  $2\epsilon_p + 4V$ ; mientras que si los dos huecos se agregan en oxígenos vecinos, el hueco que estaba en el átomo de cobre entre ellos puede desplazarse a un tercer sitio de oxígeno, dando un costo total en energía de  $3\epsilon_p - \epsilon_d + 3V$ , que es menor que el anterior para  $V > \epsilon_p - \epsilon_d$  (ver figura 2.2).

El mecanismo basado en fluctuaciones de carga, a diferencia de los mecanismos basados en las propiedades magnéticas de los planos de  $CuO_2$ , puede extenderse en principio para explicar la superconductividad en  $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ , que es un material sin correlaciones antiferromagnéticas.

Una dificultad subyacente en los cálculos discutidos hasta aquí es que sólo responden a la pregunta de si los agujeros se atraen o no, pero la atracción que se encuentra puede dar lugar no sólo a superconductividad, sino también a condensación en el espacio real. De hecho, es fácil ver que en el límite de acoplamiento fuerte discutido más arriba, se pueden seguir agregando agujeros de modo que el sistema reduzca su energía reuniendo todos los agujeros en una especie de "gota". La energía cinética tiende a destruir esa condensación para  $t \neq 0$ , pero no es obvio en qué rango de parámetros, si existe alguno, el estado fundamental es superconductor. Esta cuestión fue abordada mediante cálculos en sistemas finitos [28], y en ellos se encontró un rango de parámetros para  $V$  intermedio tal que dos agujeros se ligan pero agregar un tercero en la misma región produce un aumento de energía mayor que si se lo agregara lejos de los dos anteriores, esto significa que hay apareamiento pero no condensación en el espacio real.

---

<sup>2</sup>Las referencias [24] y [27] contienen los resultados de la llamada "aproximación de celdas", que consiste en buscar un hamiltoniano efectivo donde los sitios correspondan a las celdas de  $CuO_2$  en el hamiltoniano original. En este hamiltoniano efectivo los sitios vecinos tienen una interacción que se hace negativa aproximadamente en los mismos rangos de parámetros en los que la diagonalización exacta de sistemas finitos indica que los agujeros se ligan.

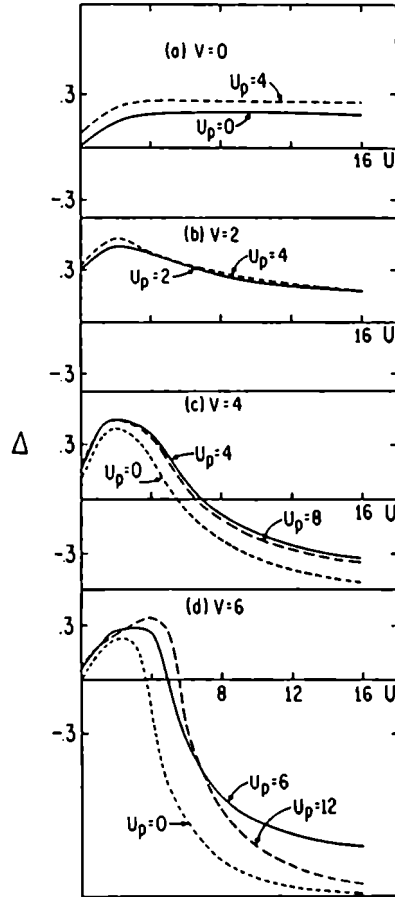


Figura 2.1: Energías de ligadura exactas entre agujeros en función de  $U_d$  calculadas en un sistema finito de nueve sitios, para  $t = 1$ ,  $\epsilon_p = \epsilon_d$ , y los valores indicados de  $V$  (tomado de [22]).

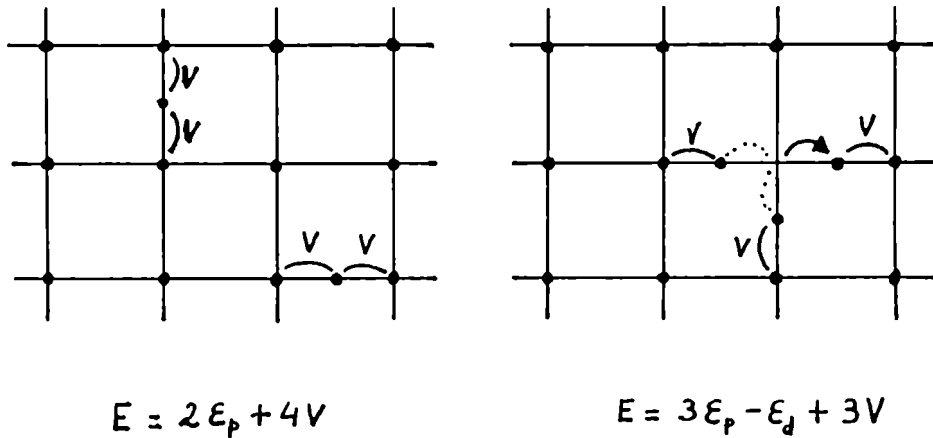


Figura 2.2: Imagen de acoplamiento fuerte para el apareamiento: si dos agujeros están ubicados en orbitales de oxígeno que son primeros vecinos de un mismo átomo de cobre, el sistema reduce su energía desplazando un agujero del átomo de cobre en cuestión a un tercer orbital de oxígeno, pues se reduce el número de pares de sitios vecinos que están ocupados. Todo esto vale para  $V$  y  $U_d$  suficientemente grandes. En la figura los círculos llenos indican sitios ocupados por una carga, y además se señalan las interacciones entre cargas vecinas.

Todos los tratamientos discutidos hasta aquí están sujetos a efectos de tamaño finito, o contienen aproximaciones de acoplamiento fuerte. En particular, agregar dos o tres agujeros en un sistema con cuatro sitios de cobre representa un cambio importante en la concentración de partículas y en la distribución de cargas. Esto hace que sea interesante tratar el problema en forma aproximada desde otro punto de vista: calcular la interacción efectiva entre agujeros para valores pequeños o intermedios de  $V$ , sin limitaciones de tamaño finito. Esto es lo que haremos en la sección 2.3.

Por otro lado, en la sección 2.4 se demuestra rigurosamente que la interacción efectiva es en algunos casos atractiva, para modelos de Hubbard generalizados.

Antes que nada, en la sección 2.2 se discute la estructura electrónica de modelos de Hubbard generalizados para los planos de  $CuO_2$  en la aproximación de Hartree-Fock.

## 2.2 Modelos de Hubbard generalizados para los planos de $CuO_2$ : estructura de bandas en la aproximación de Hartree-Fock

En esta sección estudiaremos la estructura electrónica de los planos de  $CuO_2$ , por medio de algunas aproximaciones muy sencillas. Representamos al sistema por una red cuadrada de orbitales  $3d_{x^2-y^2}$  de cobre con un orbital  $2p$  de oxígeno entre cada par de átomos de cobre. Por lo tanto, tenemos una base con un sitio metálico y dos de oxígeno. Nuestro Hamiltoniano es el de un modelo de Hubbard generalizado con repulsión entre primeros vecinos  $V$ , interacciones en el sitio  $U_d$  y  $U_p$  para los sitios de cobre y de oxígeno respectivamente [22,24]

$$H' = \sum_i (\epsilon_d n_{di} + U_d n_{di} n_{di\downarrow}) + \sum_j (\epsilon_p n_{pj} + U_p n_{pj} n_{pj\downarrow}) + t_0 \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{di\sigma}^\dagger c_{pj\sigma} + c_{pj\sigma}^\dagger c_{di\sigma}) + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_{di} n_{pj}, \quad (2.2)$$

donde  $c_{di\sigma}^\dagger$  ( $c_{pi\sigma}^\dagger$ ) crea un agujero en un orbital de metal (oxígeno) en el sitio  $i$  con spin  $\sigma$ ,  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ ,  $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ ,  $\epsilon_d$  ( $\epsilon_p$ ) es la energía de sitio en los orbitales de metal (oxígeno), y  $t_0$  es el elemento de matriz de salto entre

sitios primeros vecinos. El vacío de agujeros corresponde al estado  $Cu^+O^{2-}$ . Este Hamiltoniano tiene tanto excitaciones de carga como de spin.

En los planos de  $CuO_2$  hay fuertes interacciones intraatómicas. Se ha propuesto [24] que la dinámica de carga en el límite  $U_d, U_p \rightarrow \infty$  se puede describir proyectando fuera del espacio de Hilbert todos los estados con dos agujeros en un mismo sitio, con el siguiente Hamiltoniano de fermiones sin spin<sup>3</sup>:

$$H = \sum_i \epsilon_d n_{di} + \sum_j \epsilon_p n_{pj} + t_0 \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{di}^\dagger c_{pj} + c_{pj}^\dagger c_{di}) + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_{di} n_{pj}, \quad (2.3)$$

donde el significado de los símbolos es similar al caso anterior.

Se puede obtener una estructura de bandas para el modelo con spines en la aproximación de Hartree-Fock. Si se supone que el estado fundamental es uniforme y paramagnético<sup>4</sup>, esto es que  $\langle n_{di\uparrow} \rangle = \langle n_{di\downarrow} \rangle = \langle n_d \rangle / 2$  y  $\langle n_{pi\uparrow} \rangle = \langle n_{pi\downarrow} \rangle = \langle n_p \rangle / 2$ , resulta el siguiente hamiltoniano de un cuerpo:

$$H_{HF} = \epsilon \left( \sum_j n_{pj} - \sum_i n_{di} \right) + \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} ((t_0 - V \langle c_{pj\sigma}^\dagger c_{di\sigma} \rangle) c_{di\sigma}^\dagger c_{pj\sigma} + (t_0 - V \langle c_{di\sigma}^\dagger c_{pj\sigma} \rangle) c_{pj\sigma}^\dagger c_{di\sigma}) \quad (2.4)$$

donde

$$\epsilon = \frac{1}{2} \left\{ (\epsilon_d + U_p \frac{\langle n_p \rangle}{2} + 2V \langle n_d \rangle) - (\epsilon_d + U_d \frac{\langle n_d \rangle}{2} + 4V \langle n_p \rangle) \right\}. \quad (2.5)$$

Si además suponemos que el estado fundamental tiene simetría de reflexión respecto de ambos ejes, quedan sólo dos elementos de matriz de salto posibles,

---

<sup>3</sup>En el caso unidimensional, el espectro y los autoestados del Hamiltoniano sin spin dan directamente el espectro y los autoestados del Hamiltoniano completo para el caso de interacciones infinitas en los sitios. Para ello basta con multiplicar la función de onda fermiónica por una función de onda fija y arbitraria para los spines de los sitios ocupados (ver también [29]). En el caso bidimensional, la equivalencia sólo puede ser aproximada salvo en el caso en que los spines están totalmente polarizados.

<sup>4</sup>En realidad existe también una fase antiferromagnética. Sin embargo, los experimentos muestran que en la región superconductora no hay orden magnético. Por otro lado, una solución antiferromagnética daría lugar en el límite de sistemas no dopados a un aislador de Mott, mientras que los resultados de experimentos de espectroscopía [7] favorecen la imagen de un aislador de transferencia de carga.

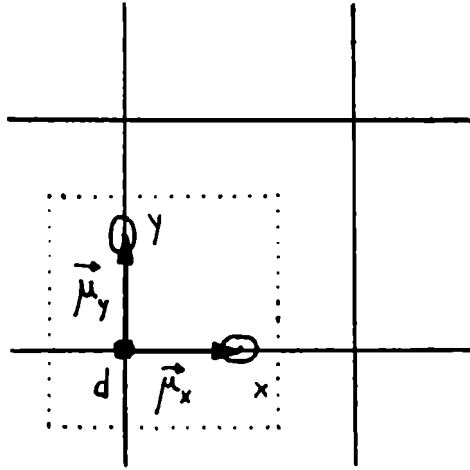


Figura 2.3: Celda unidad en el plano de  $CuO_2$

uno de cobre hacia oxígeno  $t = t_0 - V\langle c_{di\sigma}^\dagger c_{pj\sigma} \rangle$  y otro de oxígeno a cobre  $t^* = t_0 - V\langle c_{pj\sigma}^\dagger c_{di\sigma} \rangle$ , donde  $i$  y  $j$  son cualquier par de sitios vecinos.

Para obtener los autoestados del hamiltoniano conviene pasar a la base de impulsos, definida por:

$$c_{lk\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}+\boldsymbol{\mu}_l)} c_{l\mathbf{r}\sigma}^\dagger \quad (2.6)$$

donde  $l$  toma los valores  $d$ ,  $x$  o  $y$ , correspondientes a los tres orbitales de una base, el vector  $\boldsymbol{\mu}_l$  representa la posición del orbital  $l$  de la celda  $\mathbf{r}$  medida desde el punto  $\mathbf{r}$  de la red, y  $\Omega$  es el número de celdas en la red. En unidades del parámetro de red,  $\boldsymbol{\mu}_d = (0, 0)$ ,  $\boldsymbol{\mu}_x = (\frac{1}{2}, 0)$  y  $\boldsymbol{\mu}_y = (0, \frac{1}{2})$  (ver figura 2.3).

El hamiltoniano de Hartree-Fock se escribe en esta nueva base:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \{ \epsilon (c_{x\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{x\mathbf{k}\sigma} + c_{y\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{y\mathbf{k}\sigma} - c_{d\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{d\mathbf{k}\sigma})$$

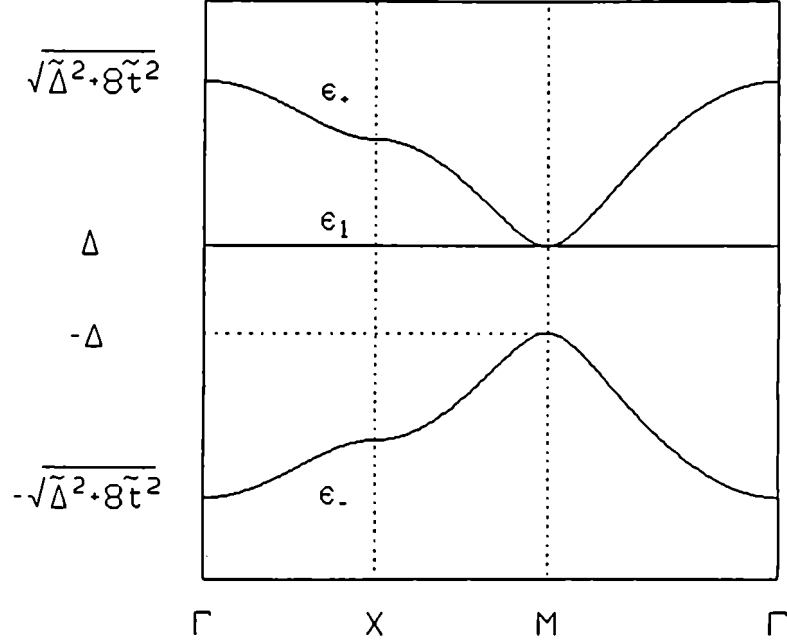


Figura 2.4: Estructura de bandas del modelo

$$\begin{aligned}
 &+2t^* \cos \frac{k_x}{2} c_{dk\sigma}^\dagger c_{xk\sigma} + 2t \cos \frac{k_x}{2} c_{xk\sigma}^\dagger c_{dk\sigma} \\
 &+2t^* \cos \frac{k_y}{2} c_{dk\sigma}^\dagger c_{yk\sigma} + 2t \cos \frac{k_y}{2} c_{yk\sigma}^\dagger c_{dk\sigma} \}. \quad (2.7)
 \end{aligned}$$

Los autoestados dan una banda ligante (-), y una antiligante (+), que mezclan orbitales de cobre y de oxígeno; y una no ligante (0), que contiene peso sólo en los orbitales de oxígeno. Las relaciones de dispersión se muestran en la figura 2.4 [20,30], y están dadas por:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\epsilon^2 + 4|t|^2 \left( \cos^2\left(\frac{k_x}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{k_y}{2}\right) \right)},$$

$$E_0(\mathbf{k}) = \epsilon. \quad (2.8)$$

Los operadores de creación de estados de banda son:

$$c_{\pm\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \pm\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\epsilon}{E_{\pm}(\mathbf{k})}\right)}c_{d\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \frac{2t}{\sqrt{2E_{\pm}(\mathbf{k})(E_{\pm}(\mathbf{k}) - \epsilon)}}\left[\cos\left(\frac{k_x}{2}\right)c_{x\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \cos\left(\frac{k_y}{2}\right)c_{y\mathbf{k}\sigma}^\dagger\right], \quad (2.9)$$

$$c_{0\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\cos^2\left(\frac{k_x}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{k_y}{2}\right)}}\left[-\cos\left(\frac{k_y}{2}\right)c_{x\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \cos\left(\frac{k_x}{2}\right)c_{y\mathbf{k}\sigma}^\dagger\right]. \quad (2.10)$$

Observese que la proporción de oxígeno en la banda antiligante es siempre mayor que la de cobre, tiende a 1 cuando la energía se acerca a su mínimo en el borde de zona, mientras que la proporción de cobre es máxima en el máximo de la energía, en el centro de la zona. Por lo contrario en la banda ligante, la proporción de cobre es mayor que la de oxígeno, el peso del cobre tiende a 1 cuando la energía tiende a su máximo de  $-\epsilon$  en el borde de zona y llega a un mínimo cuando la energía se hace mínima en el centro de la zona. Además, los elementos de matriz que conectan estados de sitio con estados de banda tienen un signo constante en toda la zona de Brillouin.

Como las bandas no se superponen, es sencillo determinar el nivel de Fermi, que se encuentra en la banda ligante, en la no ligante o en la antiligante, según si el número  $n$  de huecos por átomo de cobre es menor que 2, está entre 2 y 4, o es mayor que 4. De ese modo se cierran las ecuaciones autoconsistentes calculando las cargas en los sitios de cobre y de oxígeno, y el elemento de matriz de salto:

$$\langle n_d \rangle = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left\{ (n_{-\mathbf{k}\sigma} + n_{+\mathbf{k}\sigma}) + \frac{\epsilon}{E_+(\mathbf{k})} (n_{-\mathbf{k}\sigma} - n_{+\mathbf{k}\sigma}) \right\} \quad (2.11)$$

$$\langle n_p \rangle = \frac{1}{2}(n - \langle n_d \rangle) \quad (2.12)$$

$$t = \frac{t_0}{1 - \frac{V}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( \cos^2\left(\frac{k_x}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{k_y}{2}\right) \right) \frac{(n_{-\mathbf{k}\sigma} - n_{+\mathbf{k}\sigma})}{E_+(\mathbf{k})}}, \quad (2.13)$$

donde  $n_{-\mathbf{k}\sigma}$  ( $n_{+\mathbf{k}\sigma}$ ) indica el número de ocupación del estado de impulso  $\mathbf{k}$  y spin  $\sigma$  en la banda ligante (antiligante). De las ecuaciones resulta claramente que el elemento de matriz  $t$  es real.



La estructura de bandas del modelo sin spin puede obtenerse con el mismo método, y sigue estando dada por las ecuaciones 2.8, pero con distintos valores para los parámetros  $\epsilon$  y  $t$ . Los autoestados tienen la misma forma que antes, dada por la ecuación 2.10 pero omitiendo el número cuántico de spin. El parámetro  $\epsilon$  de gap se escribe ahora:

$$\epsilon = \frac{1}{2} \{(\epsilon_d + 2V\langle n_d \rangle) - (\epsilon_d + 4V\langle n_p \rangle)\}, \quad (2.14)$$

y las ecuaciones 2.11, 2.12 y 2.13 para la carga en los sitios y para el elemento de matriz de salto siguen siendo válidas si se omiten las sumas sobre spines.

Estamos interesados en el caso con  $1 + \delta$  agujeros por celda unidad, que corresponde a  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ,  $YBa_2Cu_3O_{6.5+x}$ , con  $\delta \propto x$ . Según la estructura de bandas calculada en el modelo con spin, esto da un nivel de Fermi en la banda ligante, por lo tanto el sistema sería siempre metálico, aún sin dopar. Además los estados tienen predominantemente peso en los orbitales de cobre, con lo cual al agregar agujeros estos van con mayor probabilidad a los sitios de cobre. Ambas características son inconsistentes con el experimento, y se deben a que al tratar las repulsiones intraatómicas en la aproximación de Hartree Fock no se tienen en cuenta las fuertes correlaciones que hay en el sistema. Por otro lado, en el modelo sin spin el nivel de Fermi está en el gap para  $\delta = 0$  y en la banda no ligante para  $0 < \delta < 1$ , luego el sistema se transforma de semiconductor a metálico cuando se lo dopa. Los agujeros agregados para  $\delta < 1$  van a parar a orbitales de oxígeno. Ambos resultados están de acuerdo con los experimentos para  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ . Esto sugiere que congelar los grados de libertad de spin es una aproximación que, si bien es gruesa, permite reproducir correctamente los efectos de la fuerte repulsión intraatómica en la estructura electrónica.

## 2.3 La interacción efectiva en la aproximación RPA

En esta sección calculamos interacciones efectivas en la aproximación de fases al azar (RPA) para el Hamiltoniano de Hubbard generalizado que modela los planos de  $CuO_2$ . Nuestros resultados demuestran que las fluctuaciones de carga en los planos pueden proveer un mecanismo de apareamiento en los superconductores cerámicos de alta temperatura crítica.

### 2.3.1 Formalismo

Queremos evaluar la interacción efectiva entre dos agujeros agregados al sistema. Para ello deberemos considerar no sólo la interacción desnuda, es decir tal como aparece en el hamiltoniano, sino también los efectos de interacción indirecta a través de fluctuaciones de carga. Dicho de otra manera, la presencia de una carga produce una alteración del medio que a su vez modifica el “potencial promedio” sobre otra carga. Esta corrección al potencial promedio se suma a la interacción desnuda para obtener la interacción efectiva.

La dinámica de las fluctuaciones de carga se representa matemáticamente por el propagador de polarización:

$$\Pi_{j'j}(\mathbf{r}'t', \mathbf{r}t) = -i\langle\psi_0|T[(n_{j'\mathbf{r}'}(t') - \langle n_{j'\mathbf{r}'}\rangle)(n_{j\mathbf{r}}(t) - \langle n_{j\mathbf{r}}\rangle)]|\psi_0\rangle, \quad (2.15)$$

donde  $n_{j\mathbf{r}}(t)$  es el operador de Heisenberg a tiempo  $t$  para el número de partículas en el orbital  $j$  de la celda  $\mathbf{r}$ , y  $\langle n_{j\mathbf{r}}\rangle$  es su valor medio en el estado fundamental  $|\psi_0\rangle$  del sistema. A partir de aquí trabajamos con el sistema sin spin para simplificar el álgebra, el formalismo en el caso con spin es muy similar.

La interacción efectiva se calcula a partir de la interacción desnuda y el propagador de polarización como:

$$V_{i'i}^{eff}(\mathbf{r}'t', \mathbf{r}t) = V_{i'i}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) + \sum_{j'j\mathbf{r}'} V_{i'j'}(\mathbf{r}', \mathbf{x}')\Pi_{j'j}(\mathbf{x}'t', \mathbf{x}t)V_{ji}(\mathbf{x}, \mathbf{r}), \quad (2.16)$$

donde  $V_{i'i}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$  es la interacción desnuda entre el sitio  $i'$  de la celda  $\mathbf{r}'$  y el sitio  $i$  de la celda  $\mathbf{r}$ , que vale  $V$  para pares de sitios primeros vecinos, y cero en todo otro caso. Queda claro de la ecuación 2.16 que el propagador de polarización produce una interacción efectiva retardada, esto se debe a que una alteración en la carga de un sitio afecta la distribución de carga del resto del sistema en tiempos posteriores.

Necesitamos ahora calcular el propagador de polarización para poder obtener la interacción efectiva. Como el hamiltoniano es invariante traslacional conviene pasar a la base de impulsos para calcular, usando las fórmulas:

$$n_{i\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}+\boldsymbol{\mu}_i)} n_{i\mathbf{q}}^\dagger \quad (2.17)$$

$$n_{i\mathbf{q}}^\dagger = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} c_{i\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{i\mathbf{k}} \quad (2.18)$$

$$= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} g'_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) c_{\alpha\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\beta\mathbf{k}} \quad (2.19)$$

$$g'_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \xi_{\alpha l}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta l}(\mathbf{k}) \quad (2.20)$$

$$\xi_{\alpha l}(\mathbf{k}) = \langle l\mathbf{k} | \alpha \mathbf{k} \rangle \quad (2.21)$$

$$\Pi_{j'j}(\mathbf{r}'t', \mathbf{r}t) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}(b\mathbf{f}\mathbf{r}' - \mathbf{r} + \mu_{j'} - \mu_j)} \Pi_{j'j}(\mathbf{q}, t' - t), \quad (2.22)$$

$$\Pi_{j'j}(\mathbf{q}, t' - t) = -i \langle \psi_0 | T[(n_{j'\mathbf{q}}(t') - \langle n_{j'\mathbf{q}} \rangle)(n_{j\mathbf{q}}^\dagger(t) - \langle n_{j\mathbf{q}}^\dagger \rangle)] | \psi_0 \rangle, \quad (2.23)$$

$$\Pi_{j'j}(\mathbf{q}, t' - t) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta\mathbf{p}'\mathbf{p}} g_{\gamma\alpha}^{j'}(\mathbf{p}', \mathbf{q}) g_{\delta\beta}^j(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \Pi_{\alpha\gamma\mathbf{p}'\delta\beta\mathbf{p}}(\mathbf{q}, t' - t), \quad (2.24)$$

$$\Pi_{\alpha\gamma\mathbf{p}'\delta\beta\mathbf{p}}(\mathbf{q}, t' - t) = -i \langle \psi_0 | T[(c_{\gamma\mathbf{p}'+\mathbf{q}}^\dagger c_{\alpha\mathbf{p}'}) (t') - \langle c_{\gamma\mathbf{p}'+\mathbf{q}}^\dagger c_{\alpha\mathbf{p}'} \rangle] [(c_{\delta\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\beta\mathbf{p}}) (t) - \langle c_{\delta\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\beta\mathbf{p}} \rangle] | \psi_0 \rangle, \quad (2.25)$$

donde las letras griegas representan índices de bandas.

La ecuación 2.25 permite entender  $\Pi$  como el propagador de pares partícula-agujero (ph). Si el hamiltoniano de Hartree-Fock fuera equivalente al original, los pares ph serían autoestados del hamiltoniano y se propagarían sin ser dispersados. Como en realidad hay una interacción residual despreciada en la aproximación de Hartree-Fock, esta interacción mezcla los distintos pares ph. Esto puede representarse mediante diagramas de teoría de perturbaciones [31].

Si se suma la serie de todos los diagramas “de anillo”, (figura 2.5), se obtiene la aproximación RPA sin diagramas de intercambio, tal como se la aplica usualmente para estudiar el gas de electrones [31].

Si se agregan todos los diagramas del tipo de los representados en la figura 2.6 se obtiene la aproximación RPA con diagramas de intercambio, tal cual suele usarse, por ejemplo, en cálculos de estructura nuclear [31].

En ambos casos la serie se puede escribir en la forma:

$$\Pi = \Pi^0 + \Pi^0 K^* \Pi^0 + \Pi^0 K^* \Pi^0 K^* \Pi^0 + \dots, \quad (2.26)$$

$$\Pi = \Pi^0 + \Pi^0 K^* [\Pi^0 + \Pi^0 K^* \Pi^0 + \Pi^0 K^* \Pi^0 K^* \Pi^0 + \dots], \quad (2.27)$$

$$\Pi = \Pi^0 + \Pi^0 K^* \Pi, \quad (2.28)$$

donde  $K^*$  representa a los elementos de matriz de la interacción,  $\Pi^0$  es el propagador de polarización no perturbado (es decir, calculado a partir de

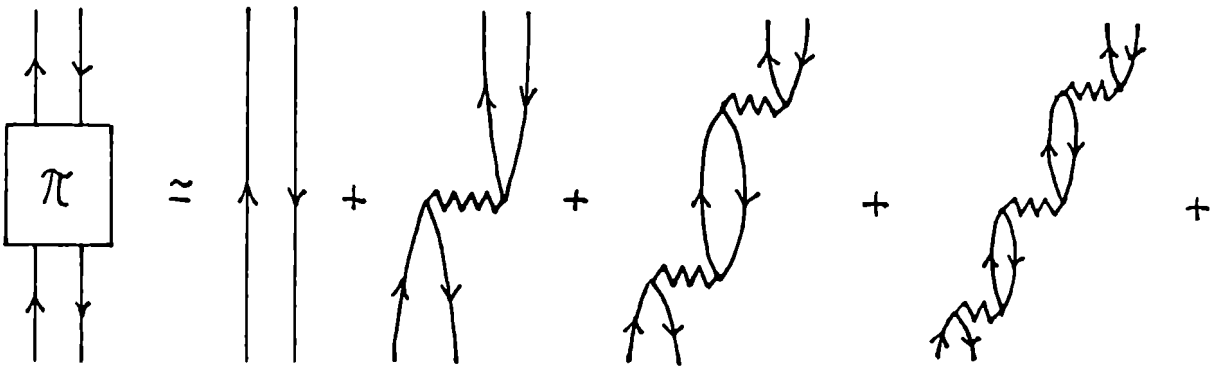


Figura 2.5: Diagramas “de anillo” para el cálculo del propagador de polarización.

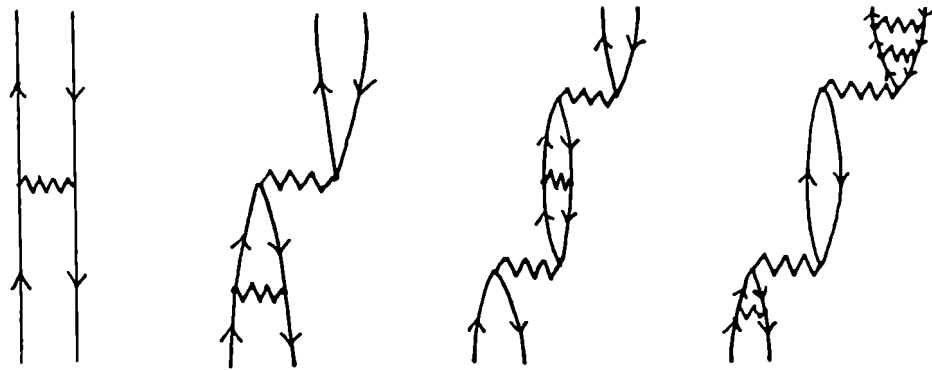


Figura 2.6: Ejemplos de diagramas con términos de intercambio.

la estructura de bandas de Hartree-Fock), y se omiten todos los índices por simplicidad. La ecuación 2.28 es la que se denomina de Bethe-Salpeter. A partir de aquí haremos algunas manipulaciones algebraicas para resolverla y obtener  $\Pi$ .

En primer término, escribimos la ecuación de Bethe-Salpeter en forma completa, transformando Fourier las variables temporales:

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\gamma\rho'\delta\beta\rho}(\mathbf{q}, \omega) &= \Pi_{\alpha\gamma\rho'\delta\beta\rho}^0(\mathbf{q}, \omega) \\ &+ \sum_{\rho\eta\zeta\lambda k'k} \Pi_{\alpha\gamma\rho'\rho\eta k'}^0(\mathbf{q}, \omega) K_{\rho\eta k'\zeta\lambda k}^*(\mathbf{q}, \omega) \Pi_{\zeta\lambda k\delta\beta\rho}(\mathbf{q}, \omega), \end{aligned} \quad (2.29)$$

donde en el caso sin intercambio:

$$K_{\rho\eta k'\zeta\lambda k}^*(\mathbf{q}, \omega) = \langle \rho k' + \mathbf{q} \lambda k | \hat{V} | \eta k' \zeta k + \mathbf{q} \rangle, \quad (2.30)$$

y en el caso con intercambio:

$$K_{\rho\eta k'\zeta\lambda k}^*(\mathbf{q}, \omega) = \langle \rho k' + \mathbf{q} \lambda k | \hat{V} | \eta k' \zeta k + \mathbf{q} \rangle - \langle \rho k' + \mathbf{q} \lambda k | \hat{V} | \zeta k + \mathbf{q} \eta k' \rangle. \quad (2.31)$$

Utilizando los elementos de matriz de cambio de base entre la base de sitios y la de bandas se puede escribir:

$$K_{\rho\eta k'\zeta\lambda k}^*(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\Omega} \sum_{n'n} a_{n'n}(\mathbf{q}) g_{\rho\eta}^{n'}(k', \mathbf{q}) g_{\zeta\lambda}^n(k, \mathbf{q}), \quad (2.32)$$

donde las sumas van de 1 a 3 para la RPA sin intercambio y de 1 a 11 para la RPA con intercambio, las cantidades  $g$  se definen por:

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta}^1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \xi_{\alpha d}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta d}(\mathbf{k}) \\ g_{\alpha\beta}^2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \xi_{\alpha x}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta x}(\mathbf{k}) \\ g_{\alpha\beta}^3(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \xi_{\alpha y}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta y}(\mathbf{k}) \\ g_{\alpha\beta}^4(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \cos \frac{k_x}{2} \xi_{\alpha x}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta d}(\mathbf{k}) \\ g_{\alpha\beta}^5(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \cos \frac{k_x}{2} \xi_{\alpha d}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta x}(\mathbf{k}) \\ g_{\alpha\beta}^6(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \sin \frac{k_x}{2} \xi_{\alpha x}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta d}(\mathbf{k}) \\ g_{\alpha\beta}^7(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \sin \frac{k_x}{2} \xi_{\alpha d}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta x}(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
g_{\alpha\beta}^8(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \cos \frac{k_y}{2} \xi_{\alpha y}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta d}(\mathbf{k}) \\
g_{\alpha\beta}^9(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \cos \frac{k_y}{2} \xi_{\alpha d}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta y}(\mathbf{k}) \\
g_{\alpha\beta}^{10}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \sin \frac{k_y}{2} \xi_{\alpha y}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta d}(\mathbf{k}) \\
g_{\alpha\beta}^{11}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \sin \frac{k_y}{2} \xi_{\alpha d}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \xi_{\beta y}(\mathbf{k}), \tag{2.33}
\end{aligned}$$

y los elementos de matriz no nulos de  $a(\mathbf{q})$  son:

$$\begin{aligned}
a_{12}(\mathbf{q}) &= V \cos\left(\frac{q_x}{2}\right) \\
a_{21}(\mathbf{q}) &= V \cos\left(\frac{q_x}{2}\right) \\
a_{13}(\mathbf{q}) &= V \cos\left(\frac{q_y}{2}\right) \\
a_{31}(\mathbf{q}) &= V \cos\left(\frac{q_y}{2}\right) \\
a_{nn}(\mathbf{q}) &= -V \quad \text{para } 4 \leq n \leq 11 \tag{2.34}
\end{aligned}$$

Si ahora definimos un propagador de polarización generalizado:

$$\hat{\Pi}_{n'n}(\mathbf{q}, t' - t) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta\mathbf{p}'\mathbf{p}} g_{\gamma\alpha}^{n'}(\mathbf{p}', \mathbf{q}) g_{\delta\beta}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \Pi_{\alpha\gamma\mathbf{p}'\delta\beta\mathbf{p}}(\mathbf{q}, t' - t), \tag{2.35}$$

vemos que la submatriz con  $n$  y  $n'$  entre 1 y 3 coincide con el propagador de polarización definido antes, y que el nuevo propagador es la función de Green de dos tiempos asociada a los operadores:

$$\rho_{n\mathbf{q}}^\dagger = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} g_{\alpha\beta}^n(\mathbf{k}, \mathbf{q}) c_{\alpha\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\beta\mathbf{k}} \tag{2.36}$$

Usando estas definiciones resulta, en notación matricial:

$$\hat{\Pi}(\mathbf{q}, \omega) = \hat{\Pi}^0(\mathbf{q}, \omega) + \hat{\Pi}^0(\mathbf{q}, \omega) a(\mathbf{q}) \hat{\Pi}(\mathbf{q}, \omega), \tag{2.37}$$

y por lo tanto:

$$\hat{\Pi}(\mathbf{q}, \omega) = [1 - \hat{\Pi}^0(\mathbf{q}, \omega) a(\mathbf{q})]^{-1} \hat{\Pi}^0(\mathbf{q}, \omega), \tag{2.38}$$

con lo cual la ecuación de Bethe-Salpeter quedó resuelta pues  $a$  es conocida y  $\hat{\Pi}^0$  se calcula a partir de la estructura de bandas usando la representación de Lehmann:

$$\hat{\Pi}_{n'n}^0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta\mathbf{p}'\mathbf{p}} g_{\gamma\alpha}^{n'}(\mathbf{p}', \mathbf{q}) g_{\delta\beta}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \left\{ \frac{\theta(E_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_F)\theta(E_F - E_\beta(\mathbf{k}))}{\omega - (E_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_\beta(\mathbf{k})) + i\eta} - \frac{\theta(E_\beta(\mathbf{k}) - E_F)\theta(E_F - E_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\omega - (E_\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_\beta(\mathbf{k})) - i\eta} \right\} \quad (2.39)$$

En resumen, el cálculo consiste ahora en obtener  $\hat{\Pi}^0$  numéricamente, insertarlo en la ecuación 2.38 para obtener  $\hat{\Pi}$  y por lo tanto  $\Pi$ , y usar el propagador de polarización para calcular la interacción efectiva según:

$$V_{i'i}^{eff}(\mathbf{q}, \omega) = V_{i'i}(\mathbf{q}) + \sum_{j'j} V_{i'j'}(\mathbf{q}) \Pi_{j'j}(\mathbf{q}, \omega) V_{ji}(\mathbf{q}), \quad (2.40)$$

### 2.3.2 Resultados y Discusión

Se obtuvieron resultados numéricos para el modelo sin spin con  $\delta = 0$  y 0.2 (casos semiconductor y metálico respectivamente), y  $\epsilon/2t = 0.1, 1.0$  y 10 (gap pequeño, mediano y grande).

En este modelo, la interacción efectiva relevante es la que se produce entre orbitales de oxígeno, pues los agujeros agregados van a parar a la banda no ligante de oxígeno. La interacción efectiva entre orbitales de oxígeno  $V_{O-O}^{eff}(\mathbf{q}, \omega = 0)$  es siempre atractiva para los parámetros considerados. En la sección siguiente demostraremos que esto es válido en forma exacta para el modelo sin spin.

Nuestros resultados confirman que la interacción efectiva es mayor cuando  $\epsilon$  es menor [20,24,22].

La relación de la interacción efectiva con la posición del nivel de Fermi, esto es la dependencia con el parámetro  $\delta$ , se puede ver en la figura 2.7: para el valor más grande de  $V$  que se ha considerado,  $V_{O-O}^{eff}(\mathbf{q}, \omega = 0)$  tiene un fuerte pico alrededor de  $\mathbf{q} = 0$  en el caso metálico, mientras que en el caso semiconductor es una función más suave de  $\mathbf{q}$ .

La parte imaginaria de  $\Pi$  es proporcional a la densidad de excitaciones de carga. Se ve que se desarrolla un pico excitónico a medida que crece  $V$  (figura 2.8). Si se desprecian los diagramas de intercambio la densidad de



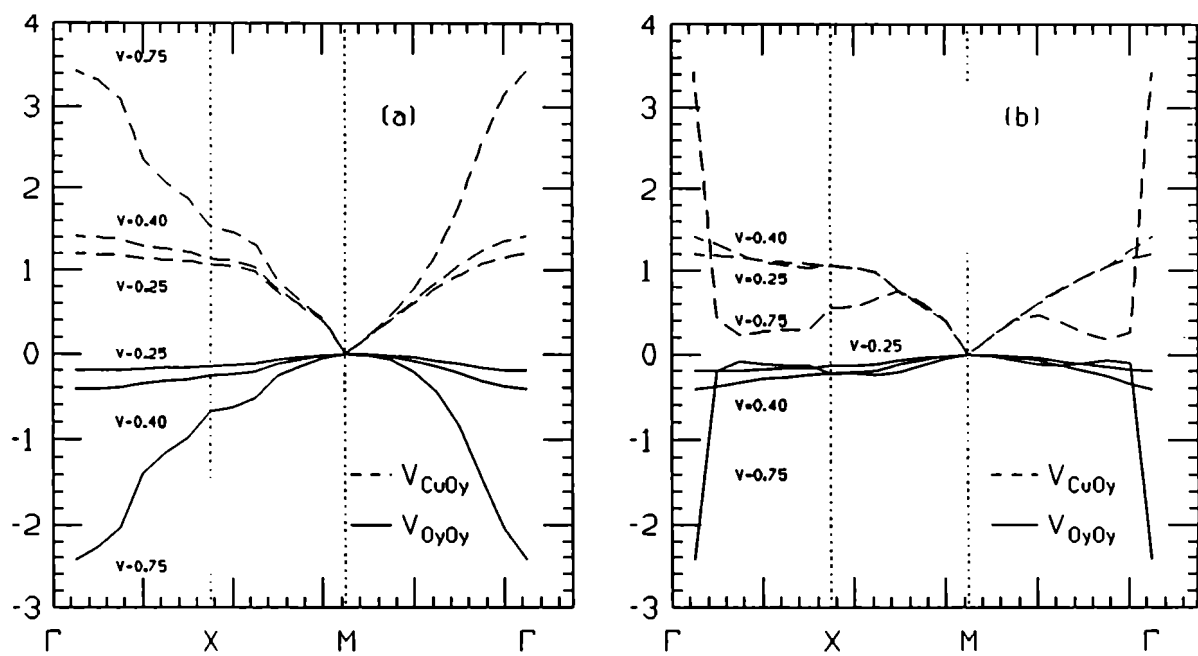


Figura 2.7: Interacciones efectivas en función del impulso  $q$ , a frecuencia  $\omega = 0$ , para  $\epsilon = 0.1$  y  $t = 0.5$ , con (a)  $\delta = 0$  y (b)  $\delta = 0.2$ .

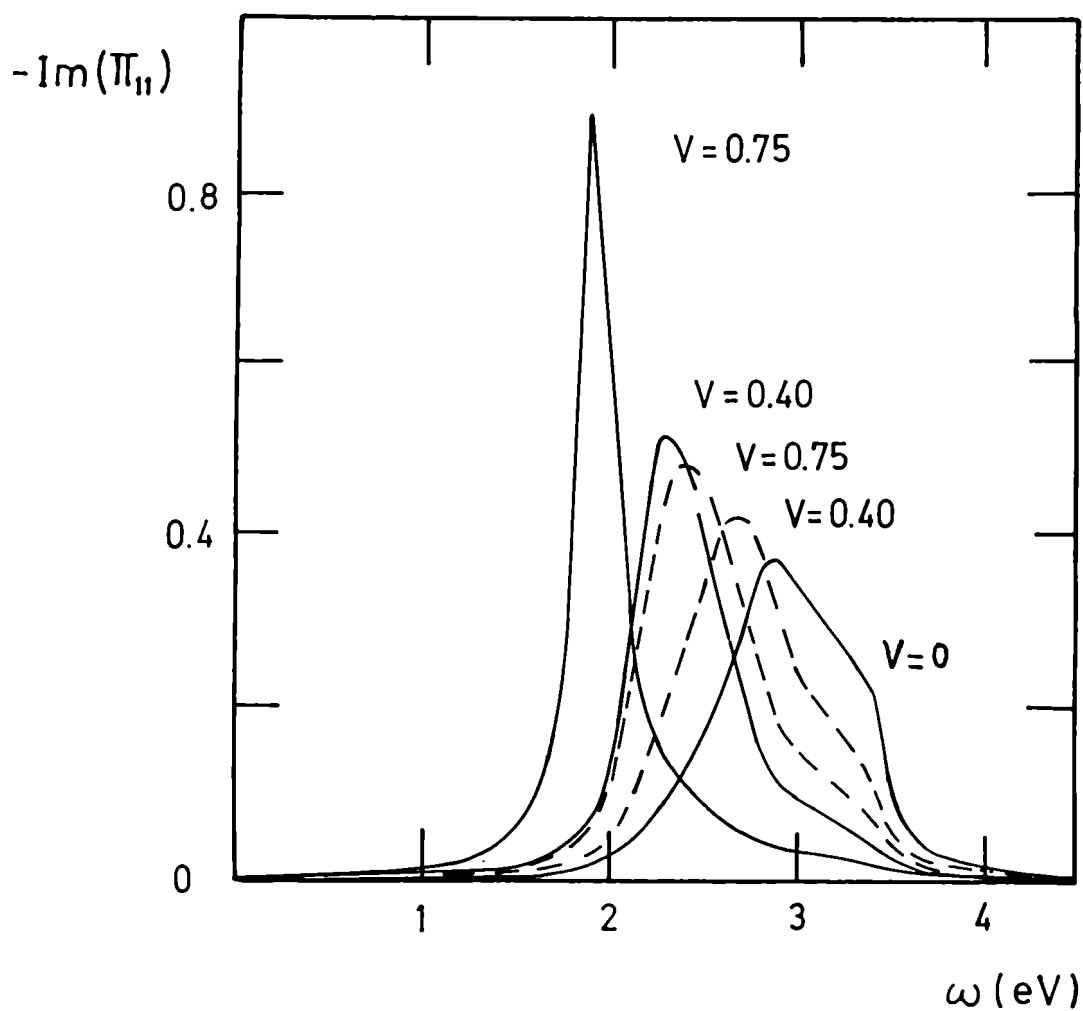


Figura 2.8: Densidad de excitaciones de carga, calculada como la parte imaginaria cambiada de signo de la componente  $Cu-Cu$  del propagador de polarización en función de la frecuencia, para  $\epsilon = 1$ ,  $t = 0.5$ , con  $\mathbf{q} = (0, 0)$ . Línea llena: incluyendo términos de intercambio; línea punteada: despreciando los términos de intercambio.

estados cambia menos al aumentar  $V$  pero la interacción efectiva para  $\omega = 0$  no se ve afectada para los valores estudiados para la interacción.

Para discutir el límite de interacciones débiles en los sitios, debemos considerar el modelo con spines. En él hay tres parámetros de interacción:  $V$ ,  $U_d$  y  $U_p$ , y el nivel de Fermi en la aproximación de Hartree-Fock para la fase paramagnética está en la banda ligante. Los estados de esta banda tienen peso en los orbitales tanto de  $Cu$  como de  $O$ , y la interacción singlete al orden más bajo en  $V$ ,  $U_d$  y  $U_p$  es directamente la interacción desnuda, que resulta repulsiva pues es una combinación lineal con coeficientes positivos de los tres parámetros de interacción:

$$\begin{aligned}
\langle -\mathbf{k}' + \mathbf{q}\sigma, -\mathbf{k}\sigma' | \hat{V} | -\mathbf{k}'\sigma, -\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma' \rangle = & \\
& \xi_{-d}(\mathbf{k}' + \mathbf{q})\xi_{-d}(\mathbf{k}')\xi_{-d}(\mathbf{k})\xi_{-d}(\mathbf{k} + \mathbf{q})U_d\delta_{\sigma\sigma'} \\
& + \xi_{-x}(\mathbf{k}' + \mathbf{q})\xi_{-x}(\mathbf{k}')\xi_{-x}(\mathbf{k})\xi_{-x}(\mathbf{k} + \mathbf{q})U_p\delta_{\sigma\sigma'} \\
& + \xi_{-y}(\mathbf{k}' + \mathbf{q})\xi_{-y}(\mathbf{k}')\xi_{-y}(\mathbf{k})\xi_{-y}(\mathbf{k} + \mathbf{q})U_p\delta_{\sigma\sigma'} \\
& + \xi_{-d}(\mathbf{k}' + \mathbf{q})\xi_{-d}(\mathbf{k}')\xi_{-x}(\mathbf{k})\xi_{-x}(\mathbf{k} + \mathbf{q})V \cos\left(\frac{q_x}{2}\right) \\
& + \xi_{-x}(\mathbf{k}' + \mathbf{q})\xi_{-x}(\mathbf{k}')\xi_{-d}(\mathbf{k})\xi_{-d}(\mathbf{k} + \mathbf{q})V \cos\left(\frac{q_x}{2}\right) \\
& + \xi_{-d}(\mathbf{k}' + \mathbf{q})\xi_{-d}(\mathbf{k}')\xi_{-y}(\mathbf{k})\xi_{-y}(\mathbf{k} + \mathbf{q})V \cos\left(\frac{q_y}{2}\right) \\
& + \xi_{-y}(\mathbf{k}' + \mathbf{q})\xi_{-y}(\mathbf{k}')\xi_{-d}(\mathbf{k})\xi_{-d}(\mathbf{k} + \mathbf{q})V \cos\left(\frac{q_y}{2}\right), \quad (2.41)
\end{aligned}$$

Los coeficientes que multiplican a los parámetros de interacción son positivos pues los elementos de matriz  $\xi$  tienen signos independientes de los impulsos, y aparecen siempre multiplicados de a pares en la fórmula 2.41. En el caso triplete sólo aparece el término proporcional a  $V$  pero eso basta para que la interacción sea repulsiva.

Como decíamos antes, en el modelo sin spin la interacción efectiva entre agujeros agregados es siempre atractiva. Esto implica que si despreciamos efectos de retardo, el estado fundamental es siempre inestable frente a la formación de pares (o bien como se dijo en la Introducción, frente a la condensación en el espacio real). Por lo tanto, pareciera que el modelo sobreestima la tendencia de los agujeros a atraerse. Esto se debe probablemente a las aproximaciones realizadas al formularlo. Por ejemplo, la introducción de una repulsión desnuda entre sitios de oxígeno daría lugar a una interacción repulsiva para  $V$  pequeño. Por otro lado, Hirsch y colaboradores [22] en sus

cálculos en el modelo con spin en sistemas finitos obtienen atracción entre agujeros sólo para  $V$  mayor que un cierto valor crítico que depende de los demás parámetros. Esta diferencia con nuestros resultados puede deberse a dos causas diferentes, y quizás concurrentes: por un lado los efectos de tamaño finito conspiran contra la formación de pares cuando la interacción atractiva es débil (pues en este caso el tamaño del par es del orden o mayor que las dimensiones del sistema finito), y por otro lado podría ocurrir que los grados de libertad de spin, ignorados en nuestro tratamiento, produzcan un efecto contrario al apareamiento cuando  $V$  es finito. Un indicio en favor de la segunda hipótesis está dado por la siguiente observación: si suponemos que el modelo sin spin da una descripción correcta de las correlaciones en el límite de interacciones intraatómicas infinitas, vemos que la interacción efectiva cerca del nivel de Fermi es atractiva para ese límite pero repulsiva cuando esas repulsiones son débiles. En ese caso es claro que debería existir un valor crítico de la repulsión Coulombiana en el sitio que separe esos dos regímenes. Esta interpretación concuerda con la tendencia encontrada en los resultados de Hirsch y colaboradores, que en sus cálculos con  $U_p > 0$  obtienen atracción entre agujeros para  $U_d \approx 10t$  en un amplio rango de valores de  $V$  (si bien no para todo  $V$ ), pero no encuentran atracción para  $U_d < 2t$  [22,28].

Vale la pena finalmente comentar el caso en que  $\delta < 0$ , correspondiente a los superconductores dopados con electrones, tales como  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$  [32].

En el modelo sin spin con dopaje pequeño, el nivel de Fermi está cerca del borde superior de la banda ligante. Allí los estados tienen un carácter predominante de cobre. La interacción desnuda entre orbitales de cobre es nula en este modelo, pues no hay dos orbitales de cobre que sean primeros vecinos; pero la interacción efectiva resulta atractiva en la aproximación RPA (ver también la sección siguiente).

Debido a que la banda tiene cierto peso en los orbitales de oxígeno, que aumenta a medida que se dopa el sistema, la interacción efectiva para  $V$  está dada por la competencia entre dos términos: uno repulsivo lineal en  $V$ , dado por la interacción desnuda entre orbitales de cobre y de oxígeno multiplicada por un prefactor debido al cambio de base que tiende a cero para  $\delta \rightarrow 0$ , y uno atractivo cuadrático en  $V$ , proveniente de la interacción efectiva cobre-cobre, con un prefactor debido al cambio de base que es esencialmente 1. Por lo tanto, a diferencia del modelo de Hubbard de una banda, este modelo NO es simétrico frente al intercambio  $\delta \rightarrow -\delta$ . En el caso de dopaje con electrones, la interacción será atractiva para dopaje suficientemente pequeño

e interacción interatómica suficientemente grande, y repulsiva para dopajes mayores e interacciones menores.

## 2.4 Algunos resultados exactos para la interacción efectiva

En esta sección consideramos modelos de Hubbard generalizados y demostramos que la interacción efectiva en el límite estático es atractiva para varios casos de interés en relación con la superconductividad de alta temperatura crítica. Esto incluye modelos de tres bandas sin interacción en los sitios de oxígeno, modelos de fermiones sin spin de tres bandas, el canal triplete del modelo de Hubbard, y modelos para superconductores de alta temperatura crítica dopados con electrones.

Consideraremos un modelo de Hubbard generalizado

$$H = \sum_{\mathbf{r}\delta ij\sigma} \epsilon_{ij}^{\delta} c_{\mathbf{r}+\delta i\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}j\sigma} + \sum_{\mathbf{r}\delta ij\sigma\tau} \frac{1}{2} V_{ij\sigma\tau}^{\delta} n_{\mathbf{r}+\delta i\sigma} n_{\mathbf{r}\tau}, \quad (2.42)$$

donde  $c_{\mathbf{r}j\sigma}^{\dagger}$  ( $c_{\mathbf{r}j\sigma}$ ) crea (destruye) un fermión con spin  $\sigma$  en el orbital  $j$  de la celda  $\mathbf{r}$  y  $n_{\mathbf{r}j\sigma} = c_{\mathbf{r}j\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}j\sigma}$ . La suma sobre  $\delta$  indica la suma sobre todas las celdas primeras vecinas de la dada.

Los coeficientes  $V, \epsilon$  respectivamente dan la interacción de dos cuerpos y los elementos de matriz de un cuerpo, tanto energías de sitio como amplitudes de probabilidad de salto entre sitios. Definiendo operadores transformados de Fourier por la ecuación 2.6, el Hamiltoniano se escribe:

$$H = \sum_{ijk\sigma} \epsilon_{ij}(\mathbf{k}) c_{ik\sigma}^{\dagger} c_{jk\sigma} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{ijq\sigma\tau} V_{ij\sigma\tau}(q) \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} c_{ik'+q\sigma}^{\dagger} c_{jk-q\tau}^{\dagger} c_{jk\tau} c_{ik'\sigma} \quad (2.43)$$

con

$$\epsilon_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta} \epsilon_{ij}^{\delta} e^{-i\mathbf{k}(\delta+\mu_i-\mu_j)} \quad (2.44)$$

$$V_{ij\sigma\tau}(\mathbf{k}) = \sum_{\delta} V_{ij\sigma\tau}^{\delta} e^{-i\mathbf{k}(\delta+\mu_i-\mu_j)} \quad (2.45)$$

La interacción efectiva en el espacio de Fourier se define por [31]:

$$V_{ij\sigma\tau}^{eff}(\mathbf{q}, \omega) = V_{ij\sigma\tau}(\mathbf{q}) + \sum_{lm\sigma'\tau'} V_{il\sigma\sigma'}(\mathbf{q}) \Pi_{lm\sigma'\tau'}(\mathbf{q}, \omega) V_{mj\tau'\tau}(\mathbf{q}) \quad (2.46)$$

Desarrollamos ahora  $\Pi(\mathbf{k}, \omega)$  en términos de autoestados exactos  $|n\rangle$  y autoenergías exactas  $E_n$  del Hamiltoniano por medio de la representación de Lehmann [31]:

$$\Pi_{lm\sigma\tau}(\mathbf{k}, \omega) = \Omega \sum_n \left\{ \frac{\langle 0|n_{l\sigma}(\mathbf{k})|n\rangle \langle n|n_{m\tau}^\dagger(\mathbf{k})|0\rangle}{\omega - (E_n - E_0) + i\eta} - \frac{\langle 0|n_{m\tau}^\dagger(\mathbf{k})|n\rangle \langle n|n_{l\sigma}(\mathbf{k})|0\rangle}{\omega + (E_n - E_0) - i\eta} \right\}, \quad (2.47)$$

con

$$n_{l\sigma}^\dagger(\mathbf{q}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} c_{l\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{l\mathbf{k}\sigma}. \quad (2.48)$$

Si ahora insertamos la ecuación 2.47 en la ecuación 2.46 obtenemos

$$V_{ij\sigma\tau}^{eff}(\mathbf{k}, \omega) = V_{ij\sigma\tau}(\mathbf{k}) + \Omega \sum_n \left\{ \frac{\langle 0|W_{i\sigma}(\mathbf{k})|n\rangle \langle n|W_{j\tau}^\dagger(\mathbf{k})|0\rangle}{\omega - (E_n - E_0) + i\eta} - \frac{\langle 0|W_{j\tau}^\dagger(\mathbf{k})|n\rangle \langle n|W_{i\sigma}(\mathbf{k})|0\rangle}{\omega + (E_n - E_0) - i\eta} \right\} \quad (2.49)$$

$$W_{j\tau}^\dagger(\mathbf{q}) = \sum_{l\sigma} V_{lj\sigma\tau}(\mathbf{q}) n_{l\sigma}^\dagger(\mathbf{q}) \quad (2.50)$$

De la ecuación 2.49 se deduce que  $V^{eff}$  en el límite estático es atractivo en los siguientes casos

1. En el modelo de Hubbard de una o varias bandas con repulsiones interatómicas sólo entre diferentes tipos de átomos,  $V_{ii\sigma\sigma} = 0$ , y por lo

tanto la interacción triplete en el límite estático es negativa<sup>5</sup> o nula para todos los valores de  $\mathbf{k}$ :

$$V_{ii\sigma\sigma}^{eff}(\mathbf{k}, \omega \rightarrow 0) = -2\Omega \sum_n \frac{|\langle n | W_{i\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \leq 0 \quad (2.51)$$

2. En una red cúbica simple de átomos A en  $d$  dimensiones con un átomo B entre cada par de átomos A, si las interacciones intraatómicas sólo son no nulas para los átomos de tipo A y el rango de la interacción alcanza sólo a primeros vecinos, la interacción efectiva entre cualquier par de orbitales B es negativa para todos los valores de  $\mathbf{k}$ :

$$V_{B_1 B_2}^{eff}(\mathbf{k}, \omega \rightarrow 0) = -2\Omega \sum_n \frac{|\langle n | \sum_A V_{AB} n_{A\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \cos \frac{k_\mu}{2} \cos \frac{k_\nu}{2} \leq 0, \quad (2.52)$$

donde los orbitales  $B_1$  y  $B_2$  están desplazados a partir del átomo A en las direcciones  $\mu$  y  $\nu$  respectivamente y  $\sum_A$  denota una suma sobre todos los orbitales en el átomo A.

Podemos aplicar estos resultados a varios modelos físicamente interesantes:

1. *Modelo de Hubbard de una banda.* En este caso la interacción efectiva triplete es atractiva pues se aplica el caso 1.
2. *Modelos de tres bandas de los planos de  $\text{CuO}_2$  en superconductores de alta temperatura crítica dopados con agujeros.* Sabemos por experimentos de espectroscopía que en estos materiales los agujeros agregados van principalmente a los orbitales  $2p$  del O, por lo tanto la interacción efectiva en el nivel de Fermi es esencialmente la que existe entre orbitales

---

<sup>5</sup>Se supone al escribir las fórmulas 2.51 y 2.52 que el sistema tiene un gap, de modo que las expresiones no tienen polos para  $\omega \rightarrow 0$ . En caso contrario, la interacción efectiva tiene una parte imaginaria para  $\omega \rightarrow 0$ . Esto puede interpretarse como que el sistema tiene una constante dieléctrica compleja, o dicho de otra manera, que hay un pico de Drude de la conductividad debido a la presencia de portadores libres. En ese caso, las fórmulas que se presentan dan la parte real de la interacción efectiva y el razonamiento sigue siendo válido.

de O. Para modelos con repulsión cero dentro de los sitios de O [33] y para el modelo con fermiones sin spin discutido en las secciones anteriores se aplica el caso 2 y la interacción efectiva oxígeno-oxígeno es atractiva. El único papel que juega el hecho de que el átomo metálico sea de *Cu* es el de generar una estructura electrónica en la que los estados cercanos a la energía de Fermi son combinaciones lineales de los orbitales de oxígeno. Por lo tanto el *Cu* podría reemplazarse por otro átomo siempre y cuando se siguiera cumpliendo esa condición.

3. *Modelos de tres bandas de los planos de  $\text{CuO}_2$  aplicados a superconductores de alta temperatura crítica dopados con electrones.* Para superconductores dopados con electrones [32], el modelo de tres bandas de fermiones sin spin [24], y también cálculos de bosones esclavos [31] sugieren que los electrones agregados van principalmente a orbitales de *Cu*. Por lo tanto la interacción efectiva cerca del nivel de Fermi es esencialmente la que existe entre orbitales de *Cu*, y aplicando el caso 1 vemos que es atractiva para el modelo sin spin de tres bandas, y también para un modelo de tres bandas con spin si se considera el canal triplete. Sin embargo, como se discutió en la sección anterior, se debe tener en cuenta la posible hibridización con estados de oxígeno, que da lugar a una contribución de la repulsión cobre-oxígeno.

En resumen, hemos demostrado rigurosamente que la interacción efectiva en el límite estático es atractiva para todos los valores de  $k$  en los orbitales cercanos a la energía de Fermi en varios casos de interés físico.

Esto implica que según el criterio de BCS [35], esto es, que el promedio angular sobre la superficie de Fermi de la interacción efectiva sea negativo, estos sistemas deberían tener una inestabilidad superconductora. Sin embargo, no está claro si este criterio se aplica en sistemas donde las correlaciones en el estado normal son tan fuertes que pueden llegar a hacer que el término “superficie de Fermi” no tenga más sentido. Además, no podemos descartar la posibilidad de otras inestabilidades, como la condensación en el espacio real o la formación de ondas de densidad de carga, que también podrían producirse por efecto de las interacciones atractivas.



## Capítulo 3

# Estado fundamental y espectro de excitaciones en un modelo de fermiones con interacción atractiva

### 3.1 Introducción

Una de las características distintivas de los superconductores de alta  $T_c$  es su corta longitud de coherencia  $\xi$ , que es un poco mayor que el tamaño de una celda dentro de los planos y vale unos pocos  $\text{\AA}$  en la dirección perpendicular a los planos [5]. Con una concentración de portadores del orden de uno por base de  $\text{CuO}_2$  (o mucho menos, según si se consideran simplemente los resultados de cálculos de bandas, ignorando correlaciones, o bien se toma la densidad de portadores deducida de experimentos como el efecto Hall), y un volumen de coherencia de alrededor de 5 o 10 bases de  $\text{CuO}_2$ , hay menos de 5 pares dentro de un volumen de coherencia. Esta cantidad es varios órdenes de magnitud menor que en un superconductor convencional como el aluminio, que tiene del orden de  $10^4$  pares en un volumen de coherencia, y es bien descrito por la teoría BCS.

Esta característica de los superconductores de alta temperatura crítica ha generado nuevo interés en un viejo problema: la evolución de un gas de fermiones con una interacción atractiva  $U(r)$ , desde el límite de acoplamiento

débil a la condensación de Bose de pares fuertemente ligados, en función de la intensidad de la interacción [36,37,38]

Si  $U$  es pequeño, los pares de Cooper tienen un tamaño característico  $\xi$  que es mucho mayor que la distancia media entre fermiones  $r_0$ , el apareamiento es un efecto colectivo y la termodinámica está dominada por excitaciones de ruptura de pares con un gap  $2\Delta$ . En el límite opuesto, para  $\xi \ll r_0$ , se forman pares que no se superponen entre sí y que se comportan como un gas de bosones de carozo duro que sufre una condensación de Bose a baja temperatura. A pesar de la aparente disparidad entre ambos estados fundamentales, se ha demostrado [39,40] que la función de onda de BCS es una buena función variacional en ambos límites, y que evoluciona continuamente de uno a otro. La única salvedad es que, a diferencia de la superconductividad para sistemas con acoplamiento débil, donde el potencial químico es prácticamente el mismo que en el sistema no interactuante, aquí el potencial químico varía significativamente cuando la interacción se hace fuerte, sale de la banda de fermiones y baja hasta ubicarse en  $\epsilon/2$ , donde  $\epsilon$  es la energía de un par ligado. Este resultado se obtiene simplemente resolviendo las ecuaciones autoconsistentes de BCS. La técnica de bosones esclavos se ha usado para estudiar el estado fundamental, y se obtuvo solo un pequeño mejoramiento de la energía para valores intermedios de la intensidad de interacción [41,42].

Sin embargo, el espectro de excitaciones y por lo tanto la termodinámica del sistema son muy distintos en ambos límites: en el límite de acoplamiento fuerte, las excitaciones de ruptura de pares tienen muy alta energía, pero existen excitaciones colectivas del gas de bosones a energías mucho más bajas [40,38]. Esto se debe a que los bosones se comportan como entidades poco interactuantes, salvo por el carozo duro.

Un modelo sencillo que puede utilizarse para estudiar la evolución entre los dos regímenes es el modelo de Hubbard de  $U$  negativo. Este modelo describe un sistema de electrones en una red, con una interacción local atractiva de intensidad  $U$ , que es el parámetro que podemos variar continuamente para pasar del límite de acoplamiento débil al de acoplamiento fuerte. Sin embargo, este modelo no incluye la interacción repulsiva de largo alcance entre electrones. Esto implica que hay excitaciones colectivas que involucran redistribución de carga y tienen longitud de onda larga, que deberían tener energías del orden de la frecuencia de plasma pero que aparecen a bajas energías. Si se quiere interpretar algún resultado experimental en términos de este tipo de modelo, se debe tener en cuenta este aspecto no físico del mismo.

En este capítulo estudiamos el estado fundamental y los espectros de excitaciones del modelo de Hubbard de  $U$  negativo en dos dimensiones con técnicas de diagonalización exacta [43,44] en un sistema finito, para todo el rango de intensidades de interacción. Examinamos la validez de la aproximación de campo medio para la energía y la función de onda del estado fundamental, y estudiamos excitaciones de carga, de spin y de una partícula. Mostramos que en las densidades espectrales de una partícula hay un máximo intenso y ancho en la energía de la cuasipartícula de BCS, y también un pico de cuasipartícula de baja energía que corresponde a una excitación de BCS fuertemente vestida.

En la sección siguiente discutiremos el modelo, sus escalas de energía características y algunos resultados conocidos sobre excitaciones colectivas. En la sección 3.3.1 comentamos brevemente acerca del método numérico utilizado para calcular. En la sección 3.3.2 presentamos los resultados obtenidos para el estado fundamental, luego presentamos los espectros de excitaciones de una partícula (3.3.3), de carga (3.3.4), y de spin (3.3.5), en la sección (3.3.6) discutimos el acoplamiento de modos de una partícula y colectivos; y por último, en la sección 3.4 discutimos todos los resultados presentados.

## 3.2 El modelo y algunos resultados previos

El modelo de Hubbard de  $U$  negativo está definido por el Hamiltoniano:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) - U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (3.1)$$

donde  $c_{i\sigma}^\dagger$  crea una partícula en el sitio  $i$  con spin  $\sigma$ ,  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  es el operador de número para el sitio  $i$  con spin  $\sigma$ ,  $t$  es el elemento de matriz de "salto" y  $U$  es la intensidad de la interacción atractiva ( $U > 0$ ). Esta es la forma del hamiltoniano que es más útil para el cálculo numérico.

Podemos reescribir el Hamiltoniano pasando a la base de impulsos en un sistema con  $N$  sitios, e introduciendo el potencial químico  $\mu$  y el número de electrones  $N_e$ :

$$H - \mu N_e = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (3.2)$$

donde el operador  $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  crea un electrón con impulso  $\mathbf{k}$  y spin  $\sigma$ ,  $\epsilon_{\mathbf{k}} = -t\gamma_{\mathbf{k}}$ ,  $\gamma_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta} c^{i\mathbf{k}\delta}$ , y los  $\delta$  son los vectores que unen un sitio dado de la red con todos sus primeros vecinos.

### 3.2.1 El límite de acoplamiento débil: BCS

En esta sección resumiremos algunos resultados de la teoría BCS de superconductores que nos serán de utilidad posteriormente, principalmente con la idea de establecer la notación, y sin ninguna pretensión de completitud.

La función de onda propuesta por Bardeen, Cooper y Schrieffer como estado fundamental para un superconductor es:

$$|BCS\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |-\rangle, \quad (3.3)$$

donde los coeficientes  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$  determinados variacionalmente están dados por:

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu}}{E_{\mathbf{k}}} \right)}, \\ v_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu}}{E_{\mathbf{k}}} \right)}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde:

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}} &= \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu})^2 + \Delta^2}, \\ \tilde{\mu} &= \mu + U \frac{n}{2}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

y los parámetros  $\Delta$  (el gap) y  $\tilde{\mu}$  (el potencial químico con la corrección de Hartree-Fock) se determinan autocosistentemente resolviendo las ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{1}{U} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}}, \\ n &= 1 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu}}{E_{\mathbf{k}}}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

donde  $n$  es la densidad de partículas;  $n = \langle N_e \rangle / N$ . El valor medio es necesario pues en la función de onda de BCS no está bien definido el número de

partículas. Es fácil comprobar que  $|BCS\rangle$  es el vacío de los operadores  $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}$  definidos por:

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger - \sigma v_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}} \\ \alpha_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}} &= u_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma} + \sigma v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger\end{aligned}\quad (3.7)$$

donde  $\sigma = \pm$  es el signo de la proyección de spin. Los nuevos operadores cumplen relaciones de conmutación fermiónicas. El Hamiltoniano puede reescribirse en términos de los nuevos operadores como:

$$H - \mu N_e = (E_G - \mu \langle N_e \rangle) + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}\uparrow} + \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}) + H_{int}, \quad (3.8)$$

donde:

$$\begin{aligned}E_G &= \langle BCS | H | BCS \rangle, \\ &= - \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu}) \epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} - NU \left[ \left( \frac{n}{2} \right)^2 + \left( \frac{\Delta}{U} \right)^2 \right],\end{aligned}\quad (3.9)$$

y  $H_{int}$  es un término que contiene sumandos con cuatro operadores, del tipo  $\alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha^\dagger$ ,  $\alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha$ ,  $\alpha^\dagger \alpha^\dagger \alpha \alpha$ ,  $\alpha^\dagger \alpha \alpha \alpha$ , y  $\alpha \alpha \alpha \alpha$ . En la aproximación BCS se desprecia  $H_{int}$ , la energía del estado fundamental es  $E_G$ , y los operadores  $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  crean excitaciones elementales del sistema, llamadas cuasipartículas o Bogoliubones, con energías  $E_{\mathbf{k}}$ . Este espectro de excitaciones de una partícula tiene un gap dado por  $\Delta$ .

Las excitaciones con igual número de partículas son creadas por los operadores del tipo  $\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ , que generan estados con dos partículas desapareadas, es decir con un par roto. Las energías posibles para este tipo de excitaciones forman un continuo para cada impulso total  $\mathbf{q}$ , a partir de una energía mínima  $E_{cont}(\mathbf{q}) = \min_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}}$ . En el límite de acoplamiento débil  $\tilde{\mu} \simeq \epsilon_F$ , por lo tanto  $E_{cont}(\mathbf{q}) = 2\Delta$  para  $q < 2k_F$ , y luego crece rápidamente para  $q$  mayor.

Por último la función de Green normal de una partícula se calcula en la aproximación de BCS como:

$$\begin{aligned}\langle \langle c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega &= u_{\mathbf{k}}^2 \langle \langle \alpha_{\mathbf{k}\sigma}, \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega + v_{\mathbf{k}}^2 \langle \langle \alpha_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}^\dagger, \alpha_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}} \rangle \rangle_\omega \\ &= u_{\mathbf{k}}^2 \frac{1}{\omega - E_{\mathbf{k}}} + v_{\mathbf{k}}^2 \frac{1}{\omega + E_{\mathbf{k}}}\end{aligned}\quad (3.10)$$

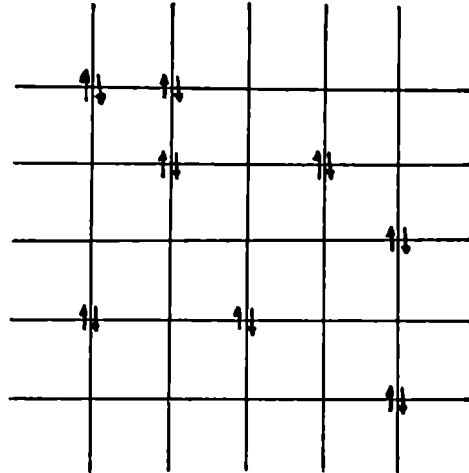


Figura 3.1: Estado fundamental en el límite de acoplamiento fuerte

Esto significa que si se inyecta un electrón en el sistema, tiene una probabilidad  $u_k^2$  de propagarse y lo hace con una energía  $E_k$  (medida a partir del potencial químico); y que si se inyecta un agujero, tiene una probabilidad  $v_k^2$  de propagarse, y lo hace con una energía  $-E_k$ .

### 3.2.2 El límite de acoplamiento fuerte: transformación canónica, excitaciones colectivas y excitaciones de una partícula

En el límite de acoplamiento fuerte,  $U \gg t$ , el estado fundamental para un número par de partículas tiene a todos los electrones formando pares en los sitios (figura 3.1). A orden cero en  $t/U$  este estado fundamental tiene una gran degeneración, pues hay muchas maneras de elegir los sitios de la red donde se ubicarán los pares ligados.

Romper un par cuesta una energía de excitación del orden de  $U$ . Por otro lado, si existe algún electrón desapareado, su elemento de matriz para saltar

de un sitio a otro vecino es  $t$ . A segundo orden en teoría de perturbaciones, aparecen procesos virtuales que pueden sufrir los pares sin destruirse: primero uno de los electrones se desplaza a un sitio vecino y después o bien vuelve al sitio original o bien el segundo electrón se desplaza acompañándolo. El primero de los procesos virtuales reduce en  $2t^2/U$  por cada sitio vecino vacío la energía del par ligado, y por lo tanto produce una interacción repulsiva entre pares ligados ubicados en sitios primeros vecinos que vale  $4t^2/U$ . El segundo proceso da un elemento de matriz  $2t^2/U$  para el desplazamiento de un par a un sitio vecino. Los distintos procesos discutidos se ilustran en la figura 3.2.

De este modo quedan definidas tres escalas de energía:  $U \gg t \gg t^2/U$ , bien diferenciadas en el límite de acoplamiento fuerte.

Notemos de paso que, como se decía más arriba, las excitaciones (colectivas) que no involucran ruptura de pares, tienen una escala de energía (en este caso  $t^2/U$ ) que es mucho menor que la escala de energía ( $U$ ) de las excitaciones que implican ruptura de pares.

Si se resuelven las ecuaciones de BCS en el límite de acoplamiento fuerte, se encuentra que  $\tilde{\mu}$  sale de la banda de una partícula (este es precisamente el criterio de Leggett para distinguir el régimen de acoplamiento fuerte del de acoplamiento débil). Por lo tanto, ahora  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  nunca puede ser igual a  $\tilde{\mu}$  y la energía mínima para generar una excitación de ruptura de pares vale  $2\sqrt{(\tilde{\mu} - \epsilon_0)^2 + \Delta^2}$ , donde  $\epsilon_0$  es la energía mínima del espectro de una partícula. En el orden más bajo en  $t/U$  se obtiene:

$$E_{\mathbf{k}} \simeq \frac{U}{2} \quad (3.11)$$

$$\Delta \simeq \frac{U}{2} \sqrt{n(2-n)} \quad (3.12)$$

$$\tilde{\mu} \simeq \frac{U}{2}(n-1) \quad (3.13)$$

$$\mu \simeq -\frac{U}{2} \quad (3.14)$$

$$E_G \simeq -\frac{U}{2} N_e \quad (3.15)$$

Si se quiere estudiar el estado fundamental y las excitaciones de baja energía del modelo, conviene describir al sistema en un lenguaje de pseudospines. Hay dos estados posibles en cada sitio: doblemente ocupado, al que se

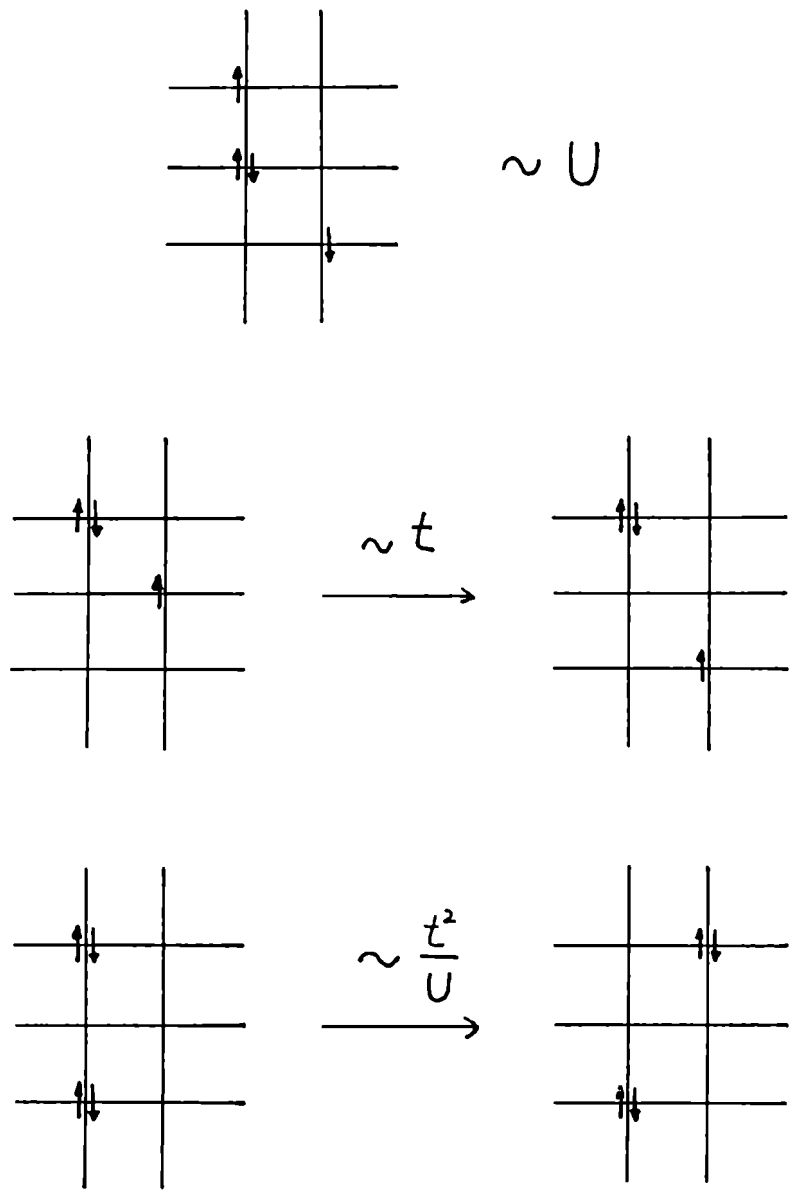


Figura 3.2: Procesos físicos y su escala de energía asociada en el límite de acoplamiento fuerte



asocia un pseudospín  $\uparrow$ , y vacío, al que se asocia un pseudospín  $\downarrow$ . Utilizando teoría de perturbaciones degeneradas a segundo orden en  $t/U$ , se obtiene un hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico [45]:

$$H = \frac{4t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^z S_j^z - \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)) \quad (3.16)$$

con la condición:

$$\frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle = \frac{1}{2}(n - 1) \quad (3.17)$$

El término antiferromagnético en la dirección  $z$  corresponde a la repulsión entre sitios primeros vecinos doblemente ocupados, y el término ferromagnético en el plano  $xy$  al elemento de matriz de salto de los bosones compuestos. En la teoría de ondas de spin el estado fundamental corresponde a un estado ordenado de spines inclinados más fluctuaciones de punto cero. Para  $n \neq 1$  esto equivale a un estado superconductor para el modelo de Hubbard original,  $U \langle S^{'+} \rangle$  da el parámetro de orden. Para  $n = 1$  el estado superconductor es degenerado con una onda de densidad de carga. El espectro de excitaciones (ondas de spin) para  $n \neq 1$  está dado por:

$$\omega_{\mathbf{q}} = z \frac{4t^2}{U} \sqrt{1 + (2(1-n)^2 - 1) \left(\frac{\gamma_{\mathbf{q}}}{z}\right)^2 - 2(1-n)^2 \frac{\gamma_{\mathbf{q}}}{z}} \quad (3.18)$$

donde  $z$  es el número de coordinación de la red.

Las excitaciones de una partícula también fueron estudiadas en el límite de acoplamiento fuerte [46,42,47] para sistemas bidimensionales. La presencia de una partícula desapareada distorsiona la fase del parámetro de orden a su alrededor, en una región cuyo tamaño crece con  $U$ . Para  $t/U = 0$  el espectro es totalmente incoherente pues el fermión crea al moverse un número divergente de excitaciones colectivas de energía cero y la región deformada se hace infinita. Para  $0 < 4t^2/U \ll t$  existe un estado de cuasipartícula bien definido con una relación de dispersión cuyo mínimo en el espacio recíproco evoluciona continuamente con la densidad desde el centro de la zona de Brillouin para  $n \rightarrow 0$  hasta  $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$  cuando la banda está semillena.

### 3.2.3 Excitaciones colectivas para todo $U$ : la aproximación RPA

La teoría BCS no tiene en cuenta la posibilidad de excitaciones colectivas del sistema, y existe un gap para las excitaciones de igual número de partículas que es la energía necesaria para romper un par ( $2\Delta$  en el límite de acoplamiento débil).

Sin embargo, como fue señalado por primera vez por Anderson [48] para el caso de acoplamiento débil, la falta de interacciones de largo alcance da lugar a la existencia de un modo de Goldstone asociado a la conservación de la carga. En el límite considerado por Anderson, la energía resulta  $\omega_q = a\hbar v_F q$ , donde  $v_F$  es la velocidad de Fermi y  $a$  es una constante numérica del orden de la unidad.

En realidad, usando la aproximación RPA se muestra [38] que existe un modo colectivo para todo  $q$  que se encuentra siempre por debajo del continuo de excitaciones de ruptura de pares, cuya energía varía continuamente con  $q$  entre el centro y el borde de banda, y varía también continuamente con  $U$ . En el límite de acoplamiento débil, para  $q \simeq 1/\xi$  la energía de este modo se hace casi indistinguible del borde inferior del continuo, y recién se separan las dos energías cuando el borde inferior del continuo empieza a subir, para  $q > 2k_F$ . Para  $U \gg t$  la energía del modo coincide con la obtenida usando la transformación a pseudoespines, es por lo tanto del orden de  $t^2/U$  y está muy por debajo del espectro de ruptura de pares. La energía del estado colectivo deja de tener una zona en la que es casi idéntica al borde inferior del continuo para  $U$  intermedio, o equivalentemente  $\xi \simeq r_0$ . En la figura 3.3 se muestra la relación de dispersión para el modo colectivo y el continuo de ruptura de pares para tres valores de  $U$  correspondientes respectivamente a acoplamiento débil, intermedio y fuerte.

## 3.3 Resultados de diagonalización exacta

### 3.3.1 Método de cálculo

Hemos diagonalizado exactamente el Hamiltoniano en un sistema finito de  $4 \times 4$  sitios, con condiciones de contorno periódicas y diferentes números de partículas. El cálculo de la función de onda y energía del estado fundamental

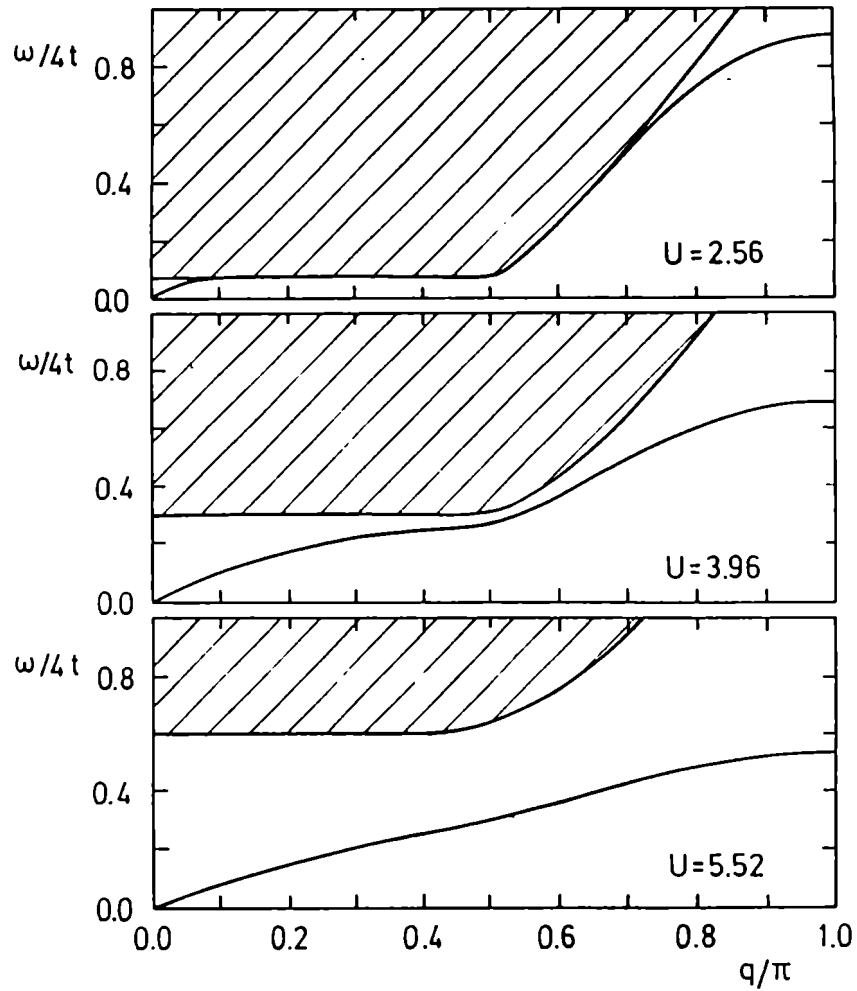


Figura 3.3: Relación de dispersión del modo colectivo y continuo de ruptura de pares en la aproximación RPA, para  $n = 0.2$  y los valores de interacción indicados. Tomado de [38].

se realizaron usando un método de Lanczos modificado [43]. En este cálculo se usaron las simetrías espaciales de traslación e inversión del sistema, así como la inversión de spines.

También hemos calculado funciones de correlación en función de la frecuencia [44]. Para estudiar excitaciones de una partícula calculamos la función de Green  $\langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega$ , donde  $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  crea un electrón con impulso cristalino  $\mathbf{k}$  y spin  $\sigma$ . Las excitaciones de carga y spin fueron estudiadas por medio de las funciones de Green de dos partículas  $\langle\langle n_{-\mathbf{q}}, n_{\mathbf{q}} \rangle\rangle_\omega$  y  $\langle\langle S_{-\mathbf{q}}^z, S_{\mathbf{q}}^z \rangle\rangle_\omega$ ,  $n_{\mathbf{q}}$  y  $S_{\mathbf{q}}^z$  son las transformadas de Fourier de las densidades de carga y spin respectivamente.

Obtuvimos resultados para números de electrones  $N_e = 2, 4, 6$  y  $8$ . El caso de una banda casi semillena, que en este sistema correspondería a  $N_e \simeq 16$  puede ser muy interesante, pues para este llenado la superconductividad y las ondas de densidad de carga compiten [49,37]. Desgraciadamente, el espacio de estados para banda casi semillena en este sistema es demasiado grande para la memoria de los equipos de computación disponibles, por lo que tuvimos que restringirnos a densidades menores.

### 3.3.2 Estado Fundamental

Primeramente presentaremos resultados para las energías de los estados fundamentales para diferentes valores de  $U/t$  y  $N_e$ . Todos los resultados presentados en este capítulo corresponden a estados fundamentales calculados en el sector de magnetización nula, esto es  $N_\uparrow = N_\downarrow$ . En la figura 3.4 se muestra la energía del estado fundamental  $E_0$  como función de  $U$  para  $N_e = 4, 6$  y  $8$  partículas. La línea continua es el resultado obtenido en la aproximación BCS. La energía de BCS fue obtenida resolviendo las ecuaciones de campo medio en el mismo sistema de  $4 \times 4$ . Para comparar en una manera más cuantitativa los resultados exactos con la teoría de campo medio, graficamos en la figura 3.5 la diferencia relativa entre ambas energías. La máxima diferencia relativa se obtiene para acoplamiento intermedio,  $U$  del orden del semiancho de banda de una partícula  $W = 4t$ , y es siempre menor que 3,5 por ciento. Estos resultados muestran que la teoría BCS es una excelente aproximación para la energía del estado fundamental en todo el rango de parámetros.

No es posible una comparación directa de la función de onda exacta con la función de onda de BCS pues esta última no tiene un número total de partículas bien definido. Una posibilidad es proyectar la función de onda de

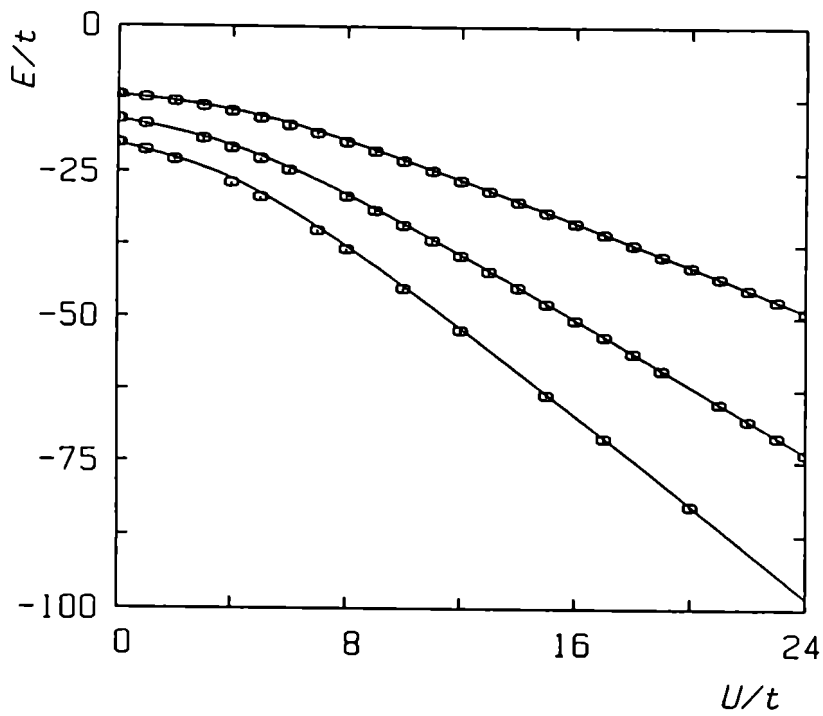


Figura 3.4: Energía del estado fundamental en función de  $U$  para  $N_e = 4$  (curva superior), 6 (curva intermedia) y 8 partículas (curva inferior). Cuadrados: resultados exactos, línea llena: aproximación BCS con parámetros determinados autoconsistentemente para el sistema finito.

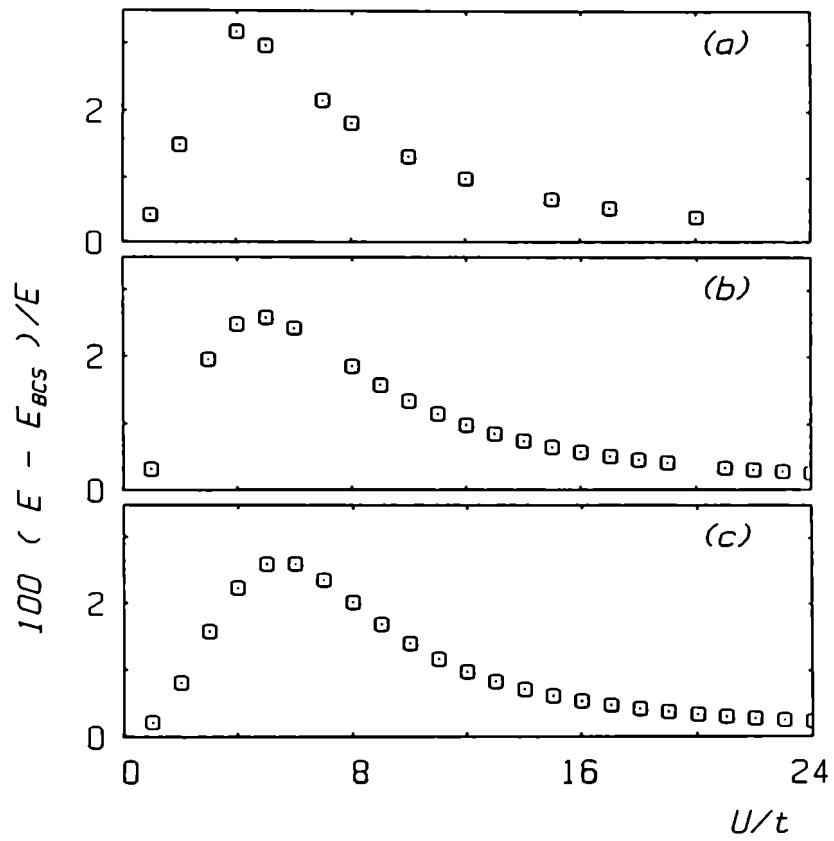


Figura 3.5: Diferencias relativas entre el valor exacto y la aproximación BCS para la energía del estado fundamental para (a)  $N_e = 8$ , (b)  $N_e = 6$ , and (c)  $N_e = 4$ .

BCS en el subespacio con un dado número de partículas. Otra posibilidad es calcular valores medios de diferentes observables. Hemos usado el segundo enfoque: en la figura 3.6 mostramos el valor medio de  $n_{\mathbf{k}\sigma}$  para diferentes valores de  $U$ ,  $N_e = 6$  y todos los vectores de onda  $\mathbf{k}$  compatibles con el sistema finito usado y no equivalentes entre sí. Las líneas continuas en la figura son los resultados de campo medio obtenidos para el mismo sistema finito, por claridad graficados considerando  $\mathbf{k}$  como una variable continua. Nuevamente encontramos un excelente acuerdo entre los resultados exactos y de campo medio, sólo para valores intermedios de  $U$  hay una diferencia apreciable para el caso de  $\mathbf{k} = 0$ . Resultados similares se obtuvieron para otros números de partículas  $N_e$ .

Finalmente, calculamos el potencial químico  $\mu$  como función de  $U$  y la densidad de partículas  $n = N_e/16$ . En el límite termodinámico, el potencial químico se define como  $\mu = \partial E_0 / \partial N_e$ . Hemos calculado  $\mu$  como la diferencia entre energías de estados fundamentales con diferentes números de partículas. Nótese que los números de partículas pares e impares se comportan muy diferentemente en el límite de  $U$  grande, donde la energía total está dada aproximadamente por el número de pares multiplicado por  $-U$ . Por lo tanto definimos:

$$\mu = \frac{1}{2}(E_0(N_e) - E_0(N_e - 2)) . \quad (3.19)$$

En la figura 3.7 se muestra el potencial químico corregido en la aproximación de Hartree-Fock  $\mu^* = \mu + \frac{1}{2}Un$  como función de  $N_e$  para diferentes valores de  $U$ . Para  $N_e = 2$  el potencial químico es la mitad de la energía del estado ligado de dos partículas, a medida que el número de partículas aumenta  $\mu^*$  también aumenta y, dependiendo de los parámetros puede entrar en la banda de una partícula que empieza en  $-4t$ . Esto significa que el potencial químico  $\mu$  entra en la banda de una partícula en la aproximación de Hartree-Fock, cuyo fondo está en  $-4t - \frac{1}{2}Un$ . Estos resultados también tienen un buen acuerdo con la teoría BCS.

Todos los resultados numéricos presentados arriba muestran que la aproximación BCS describe correctamente el estado fundamental del sistema. Evoluciona continuamente desde el límite de  $U$  pequeño al límite de  $U$  grande, como se dijo anteriormente. Sin embargo, nuestro cálculo no da mucha información para el sistema débilmente interactuante, pues la longitud de coherencia en este límite es mayor que el tamaño del sistema. Se espera que las excitaciones sean muy diferentes de las calculadas en la aproximación de campo medio

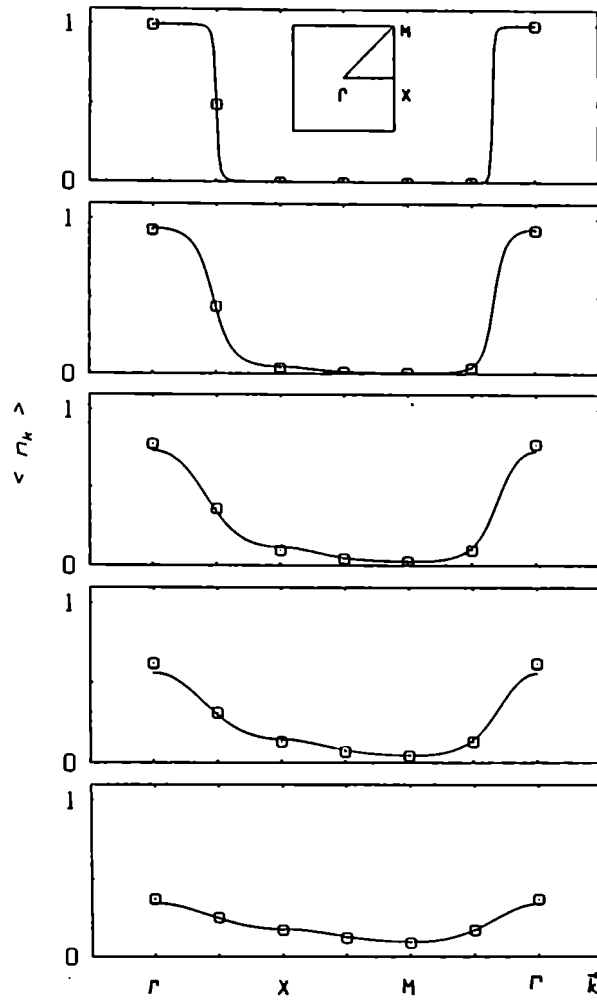


Figura 3.6: Valores medios de  $n_{k\sigma}$  para  $N_e = 6$ , con  $U = 1, 4, 7, 10$  y  $20$  (desde la gráfica superior a la inferior). Cuadrados: resultados exactos, línea llena: aproximación BCS con parámetros determinados autoconsistentemente para el sistema finito. El esquema en la gráfica superior muestra los puntos considerados en la primera zona de Brillouin.



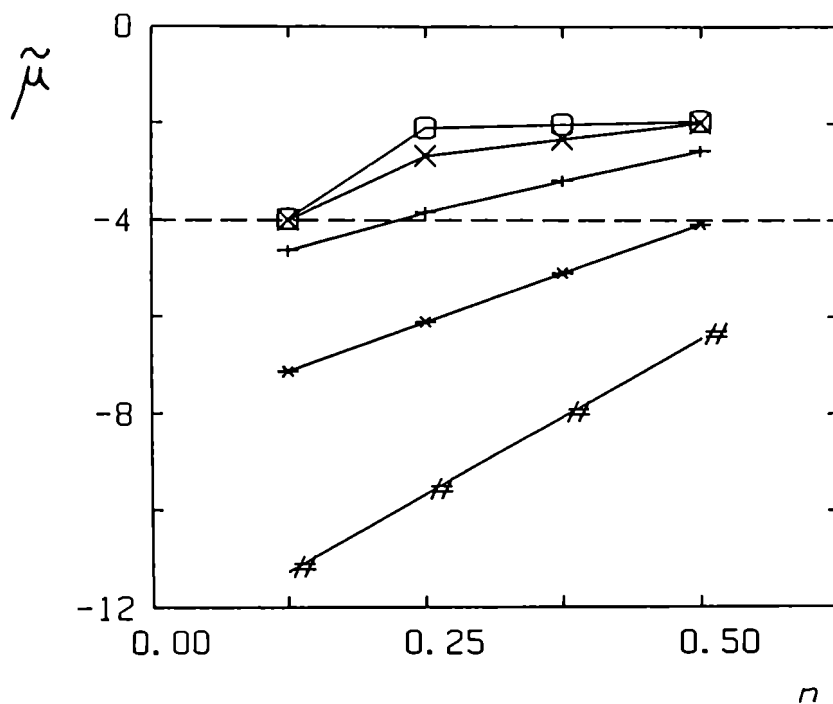


Figura 3.7: Potencial químico con la corrección de Hartree-Fock  $\tilde{\mu} = \mu + \frac{1}{2}Un$  en función de la densidad; para ( $\square$ )  $U = 1$ , ( $\times$ )  $U = 4$ , ( $+$ )  $U = 8$ , ( $*$ )  $U = 15$  y ( $\#$ )  $U = 25$ . La línea de trazos señala el fondo de la banda de una partícula. Las líneas llenas son sólo para guiar al ojo.

para  $U$  intermedios y grandes. En las secciones siguientes mostramos que esto es exactamente lo que sucede.

### 3.3.3 Densidades espectrales de una partícula

Calculamos las densidades espectrales de una partícula, definidas por:

$$A_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left( \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{k}\sigma} \frac{1}{\omega + i0^+ - H + E_0} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \frac{1}{-\omega + i0^+ - H + E_0} c_{\mathbf{k}\sigma} | \Phi_0 \rangle \right), \quad (3.20)$$

donde  $|\Phi_0\rangle$  y  $E_0$  son la función de onda y la energía del estado fundamental respectivamente, el primer término del lado derecho de la ecuación 3.20 da la contribución correspondiente a agregar una partícula al sistema y está relacionada con el experimento de fotoemisión inversa, el segundo término da la contribución correspondiente a quitar una partícula y da el espectro de fotoemisión.

La densidad de estados de una partícula está dada por:

$$D(\omega) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} A_\sigma(\mathbf{k}, \omega). \quad (3.21)$$

En la figura 3.8 se muestra la densidad de estados de una partícula para  $N_e = 4$  y diferentes valores de  $U$ . Como se ve claramente, hay un “gap” en la energía de Fermi que se agranda a medida que  $U$  se incrementa. En la figura 3.9 el tamaño del “gap” se compara con los resultados de la aproximación BCS. También se muestra allí que el tamaño finito del sistema produce efectos apreciables para  $U < W$ . El mismo comportamiento se observa para otros números de partículas, y el “gap” está siempre centrado en la energía de Fermi. Resultados similares fueron obtenidos por Dagotto y colaboradores en un sistema de  $\sqrt{10} \times \sqrt{10}$  sitios [51].

Es instructivo analizar el comportamiento de las densidades espectrales de una partícula  $A_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$  para diferentes valores de  $\mathbf{k}$ . En la figura 3.10 se muestran las densidades espectrales para todos los valores no equivalentes de  $\mathbf{k}$  en la red. Cada pico en la densidad espectral se indica con una línea horizontal con una longitud proporcional a la intensidad del pico. La relación de dispersión de la cuasipartícula de BCS  $E_{\mathbf{k}}$  se grafica con una línea continua.

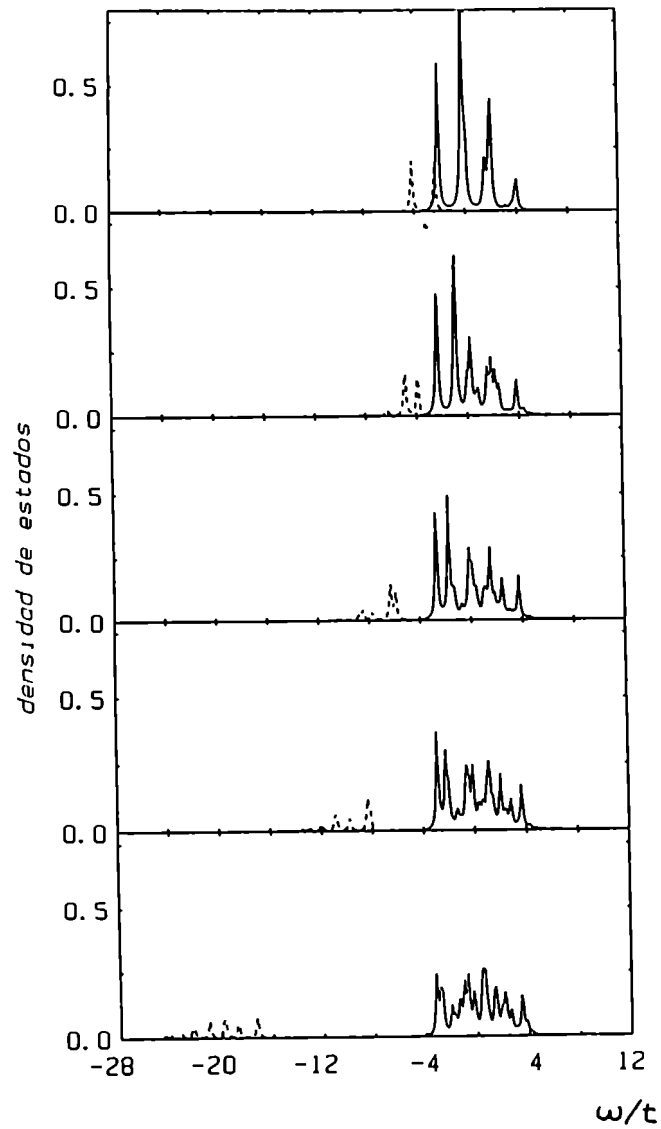


Figura 3.8: Densidad total de estados de una partícula para  $N_e = 4$ , con  $U = 1, 4, 7, 10$  y  $20$  (desde la gráfica superior a la inferior). Línea de trazos: densidad de estados ocupados; línea llena: densidad de estados desocupados. Las funciones delta fueron ensanchadas incluyendo una pequeña parte imaginaria  $\eta = 0.1t$ .

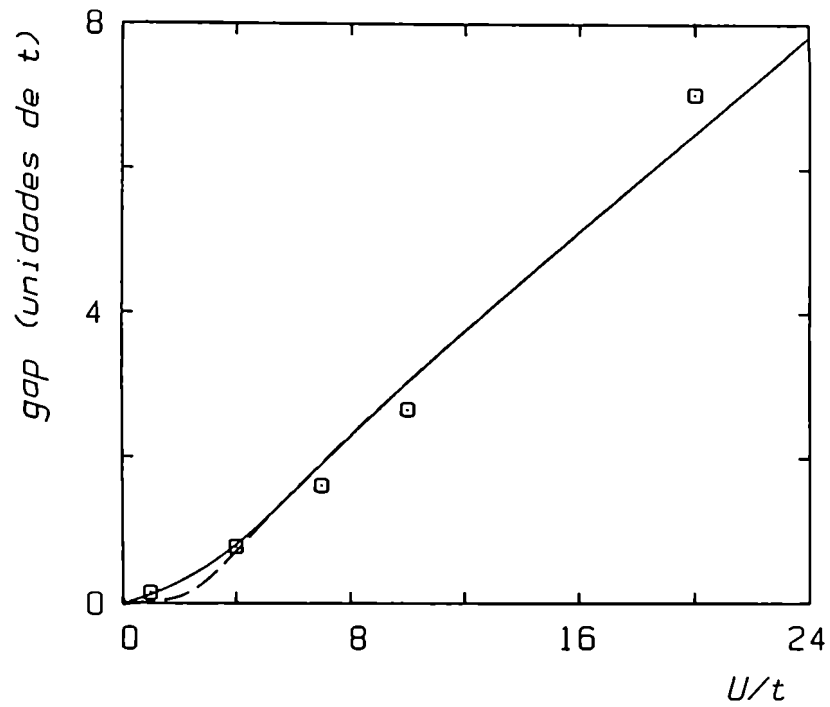


Figura 3.9: Gap de una partícula en función de  $U$  para  $N_e = 4$ . Cuadrados: resultados exactos obtenidos de las funciones de Green de una partícula, línea llena: parámetro de gap de BCS para el mismo sistema de  $4 \times 4$  sitios, línea de trazos: parámetro de gap de BCS para un sistema de  $16 \times 16$  sitios con la misma densidad. Los efectos de tamaño finito se notan sólo para  $U$  pequeño.

Los parámetros de BCS usados son las soluciones autoconsistentes de las ecuaciones de campo medio para el mismo sistema finito, el mismo  $U$  y  $N_e$  del cálculo exacto. Se ve en la figura que la relación de dispersión de campo medio ajusta muy bien *sin ningún parámetro libre* los picos más intensos del cálculo exacto. Estos picos pueden ser asociados con la cuasipartícula de BCS no vestida. La amplitud de los picos de fotoemisión es pequeña excepto para  $k$  cerca del punto  $\Gamma$ , debido al factor de coherencia  $v_k^2$ . En el espectro de fotoemisión inversa, todos los picos salvo aquellos correspondientes al centro de la zona son intensos, como lo sugiere el cálculo de campo medio, que predice una intensidad dada por  $u_k^2$ . Estos picos intensos están rodeados por otros de menor intensidad que, en el límite termodinámico, presumiblemente forman un continuo dando lugar a una resonancia con un ancho finito, que refleja el hecho de que las cuasipartículas de BCS (“Bogoliubones”) adquieren una vida media finita. Para la mayor parte de los valores de  $k$  estas no son las excitaciones de más baja energía, hay picos de pequeña intensidad mucho más cercanos a la energía de Fermi que  $E_k$ . En lo que sigue nos referimos a estos picos como los picos de cuasipartícula y mostraremos más adelante que corresponden a Bogoliubones fuertemente vestidos.

### 3.3.4 Excitaciones de carga

En esta sección y la siguiente discutimos la naturaleza de las excitaciones colectivas del sistema con un dado número de partículas. Estas son excitaciones de carga y de spin, que van a dominar la termodinámica del sistema. Estudiamos las excitaciones de carga por medio de la función de correlación densidad-densidad dependiente de frecuencia, dada por:

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \langle \Phi_0 | n_{-\mathbf{q}} \frac{1}{\omega + i0^+ - H + E_0} n_{\mathbf{q}} | \Phi_0 \rangle, \quad (3.22)$$

donde  $n_{\mathbf{q}}$  es la transformada de Fourier de la densidad de partículas. Nótese que esta no es la función de Green completa usualmente asociada con la polarización, que está dada por la ecuación 3.22 antisimetrizada.

En el límite de  $U$  grande, esperamos que dos tipos de excitaciones con diferentes escalas de energía contribuyan a  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ : por un lado excitaciones de ruptura de pares a energías mayores que  $2\Delta$  y por otro lado excitaciones colectivas del gas de Bose de carozos duros a bajas energías. Estos modos

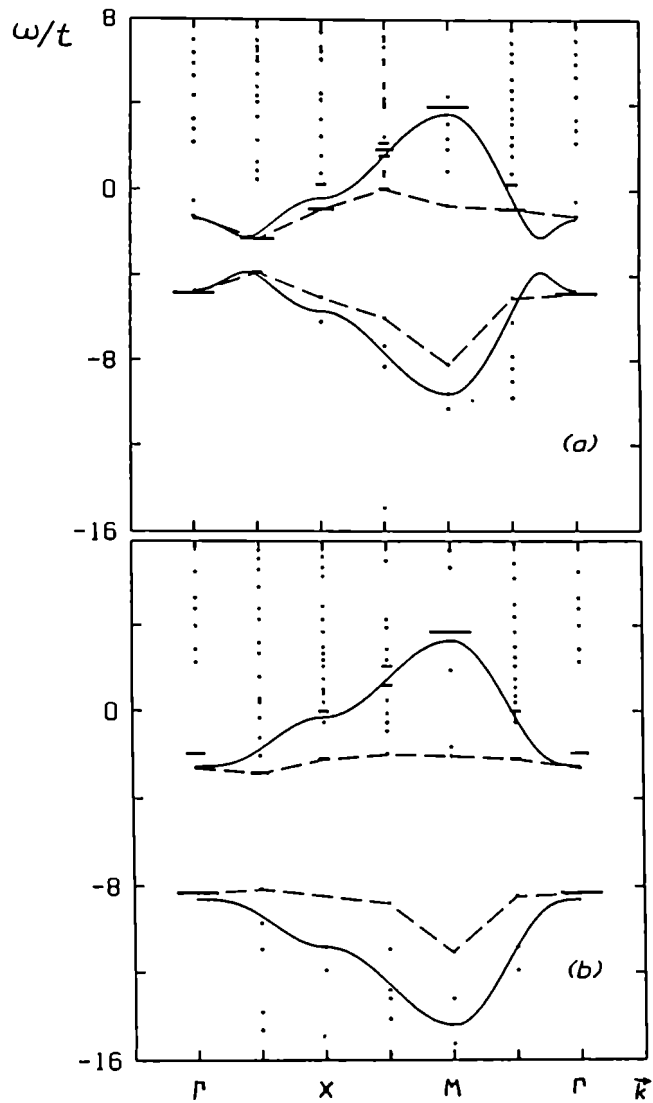


Figura 3.10: Densidades espectrales de una partícula para  $N_e = 4$  y todos los valores de  $k$ , con (a)  $U = 4$  y (b)  $U = 10$ . Cada pico en la densidad espectral se indica por una línea horizontal con una longitud proporcional a la intensidad del pico. Línea llena: relación de dispersión  $E_k$  de la cuasipartícula de BCS no perturbada calculada con parámetros autoconsistentes correspondientes al mismo sistema finito. La línea de trazos es sólo para guiar al ojo y une las energías exactas de los picos de cuasipartícula para diferentes valores de  $k$ .

colectivos han sido estudiados en el límite de  $U$  grande usando una transformación canónica del Hamiltoniano original [45,50], y para  $U$  arbitrario con una aproximación RPA [38].

La densidad total de excitaciones de carga,  $\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} -\frac{1}{\pi} \text{Im} \Pi(\mathbf{q}, \omega)$  se muestra en la figura 3.11. En el caso de  $U$  intermedio, la separación entre las excitaciones de baja energía y de alta energía se observa claramente. Las primeras son excitaciones colectivas mientras que las segundas son excitaciones de ruptura de pares que contribuyen con un peso pequeño a  $\Pi$ . A medida que  $U$  disminuye, la energía característica de ambos tipos de excitaciones se hace del mismo orden y para  $U$  pequeño no podemos distinguir una de la otra. Para  $U$  grande el peso de las excitaciones de ruptura de pares es tan pequeño que apenas se observan.

En la figura 3.12 mostramos que la densidad espectral de excitaciones de carga, definida como  $-\frac{1}{\pi} \text{Im} \Pi(\mathbf{q}, \omega)$ , para todos los valores de  $\mathbf{q}$  y diferentes valores de  $U$ . El gráfico está hecho como en la figura 3.10. Para cada valor de  $\mathbf{q}$  el pico con mayor amplitud es el de más baja energía y corresponde al estado colectivo. La relación de dispersión de este estado está indicada con una línea de trazos en la figura. Aunque la relación de dispersión está afectada por efectos de tamaño finito, hay algunos aspectos generales que están bien descritos por los cálculos. Para  $\mathbf{q} = 0$  aparece sólo un pico de energía cero. Esto refleja la simetría del sistema asociada con la conservación del número de partículas. En el límite termodinámico esta simetría da lugar a un modo de Goldstone con una relación de dispersión lineal en  $q$ . Para  $\mathbf{q} = (\pi/a, \pi/a)$  la energía del modo colectivo es  $-U - 2\mu$ . Esto ha sido demostrado rigurosamente por Zhang [52], quien definió

$$J_+ = \sum_j e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_j} c_{j1}^\dagger c_{j1} \quad (3.23)$$

con  $\mathbf{Q}$  el vector de onda de la esquina de la zona de Brillouin y  $\mathbf{R}_j$  la coordenada del sitio  $j$ . Se puede mostrar fácilmente que  $J_+$  es un autooperador de  $H$  que satisface la ecuación

$$[H, J_+] = (-U - 2\mu)J_+, \quad (3.24)$$

de esta manera  $J_+$  actuando sobre el estado fundamental crea un autoestado exacto de  $H$  con energía de excitación  $E_0 - U - 2\mu$ . Si usamos el potencial químico  $\mu$  como fue definido en la ecuación 3.19, encontramos que la energía del pico corresponde exactamente a este valor.

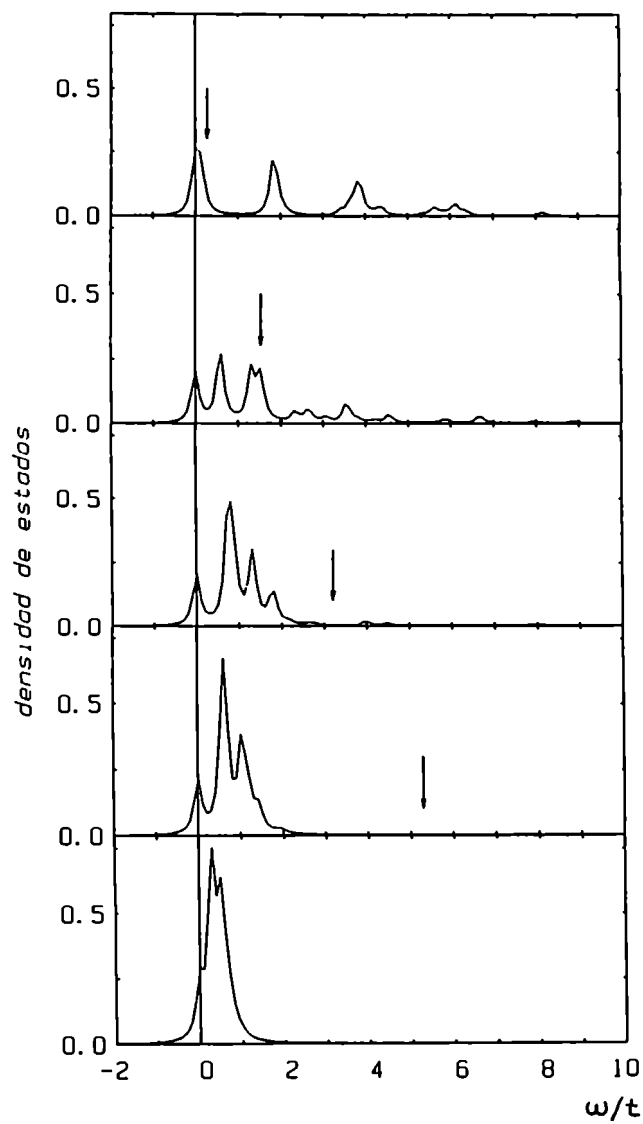


Figura 3.11: Densidad total de excitaciones de carga para  $N_e = 4$  con  $U = 1, 4, 7, 10$  y  $20$  (desde la gráfica superior a la inferior); y  $\eta = 0.1t$ . Las flechas señalan la posición de  $2\Delta$  para cada valor de  $U$ .



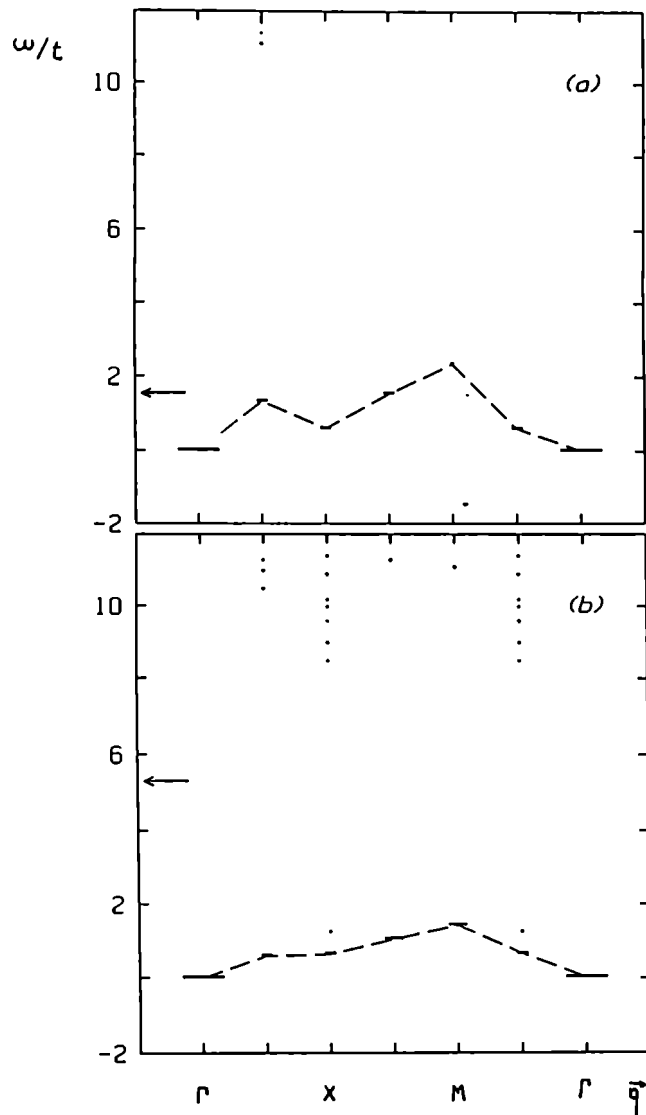


Figura 3.12: Densidades espectrales de excitaciones de carga para  $N_e = 4$  y todos los valores de  $q$  con (a)  $U = 4$  y (b)  $U = 10$ . El gráfico está hecho como en la figura 3.10. Las flechas muestran la posición de  $2\Delta$  para cada valor de  $U$ . Las líneas de trazos son para guiar al ojo y unen las energías de excitación más bajas.

En la figura 3.12.b se hace más evidente que hay dos escalas de energías: excitaciones de ruptura de pares con energía mayor o igual que  $2\Delta$  y excitaciones colectivas con una energía mucho menor.

Como una tendencia general, vemos en la figura 3.13 que la energía de la excitación colectiva para  $q \leq 2k_F$  aumenta con  $U$  en el régimen de acoplamiento débil y luego decrece para  $U$  mayores; mientras que el ancho de banda de las excitaciones colectivas (dado por la energía para  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ ) decrece monótonamente con  $U$ . Los resultados de la aproximación RPA [38] coinciden cualitativamente con los numéricos.

### 3.3.5 Excitaciones de Spin

Para estudiar las excitaciones de spin calculamos las funciones de correlación de spin dependientes de frecuencia, dadas por

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \langle \Phi_0 | S_{-\mathbf{q}}^z \frac{1}{\omega + i0^+ - H + E_0} S_{\mathbf{q}}^z | \Phi_0 \rangle, \quad (3.25)$$

donde  $S_{\mathbf{q}}^z$  es la transformada de Fourier de la componente  $z$  del spin de la partícula. Como antes, esta no es la función de Green completa asociada usualmente con la susceptibilidad.

La densidad total de excitaciones de spin, definida como  $\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} -\frac{1}{\pi} \text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$  se muestra en la figura 3.14. La integral  $I$  de esta densidad decrece a medida que  $U$  aumenta. Esto se debe a la regla de suma que da  $I = \frac{1}{N} \sum_i \langle (S_i^z)^2 \rangle = n/4 - \frac{1}{2N} \sum_i \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ ; esta cantidad va de  $\frac{1}{8}n(2-n)$  para  $U = 0$  a cero para  $U \rightarrow \infty$ .

Como se puede ver en la figura, las excitaciones de spin siempre tienen un gap al menos del orden de  $2\Delta$ , porque crear este tipo de excitaciones necesariamente implica romper un par. En el caso de  $U$ , los efectos de tamaño finito son fuertes y el gap de spin es mayor que el esperado en el límite termodinámico. En la aproximación de campo medio, una excitación de spin corresponde a crear dos cuasipartículas de BCS con el mismo spin. En el sistema finito, y debido al principio de exclusión, el estado excitado de más baja energía contiene una cuasipartícula de BCS con una energía igual al gap de una partícula y otra con un  $\mathbf{k}$  diferente y una energía significativamente mayor.

En la figura 3.15 la densidad espectral de excitaciones de spin  $-\frac{1}{\pi} \text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega)$  se muestra para todos los valores de  $\mathbf{q}$ . Si calculamos las energías de ex-

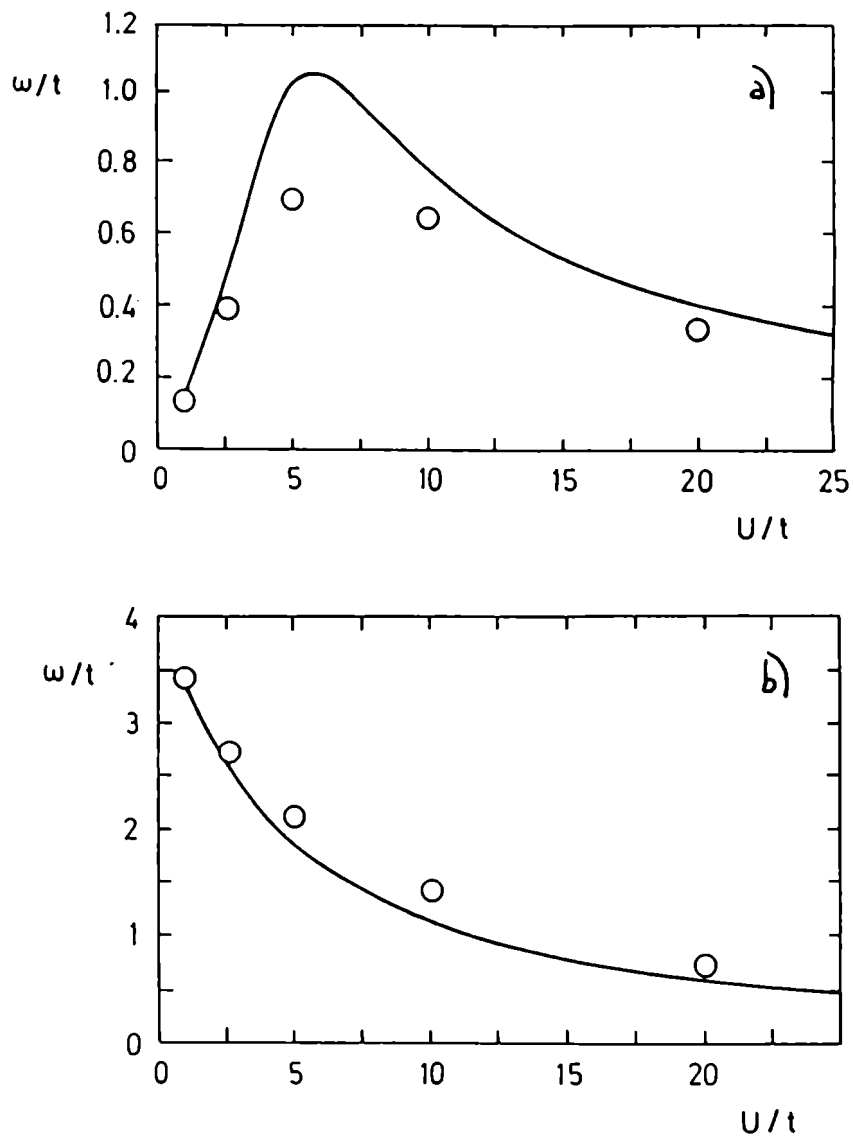


Figura 3.13: Dependencia con  $U$  de la energía del modo colectivo, calculada para  $n = 0.25$ , con (a)  $q = (\pi/2, \pi/2)$  y (b)  $q = (\pi, \pi)$ . Los círculos dan los resultados exactos, y la línea continua los de la aproximación RPA. Tomado de [38].

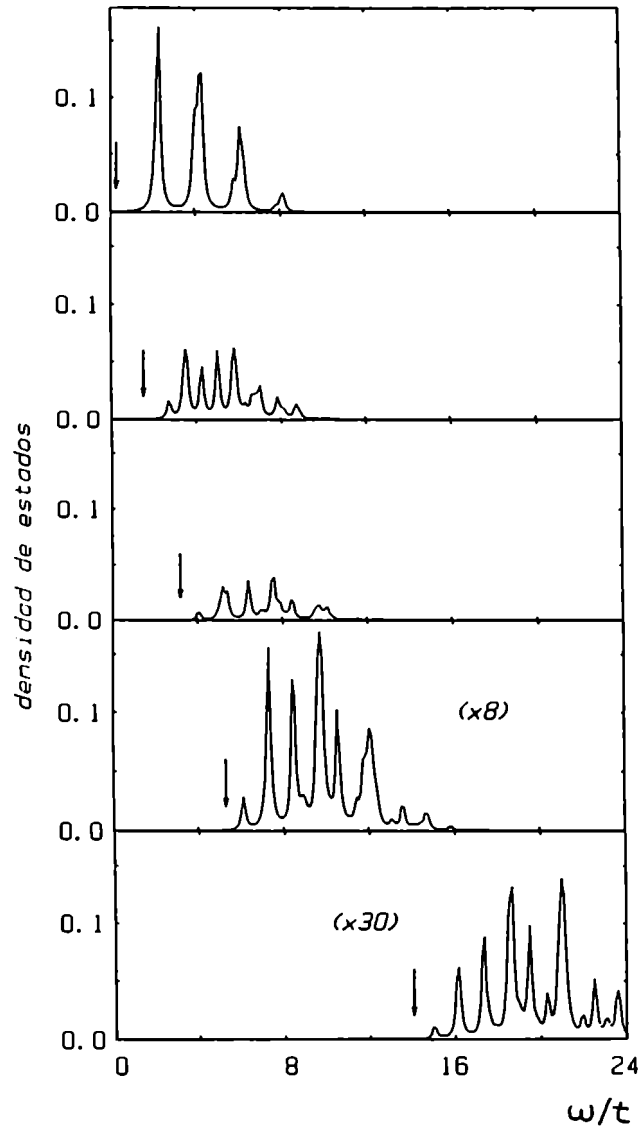


Figura 3.14: Densidad total de excitaciones de spin para  $N_e = 4$ , con  $U = 1, 4, 7, 10$  y  $20$  (desde la gráfica superior a la inferior); y  $\eta = 0.1t$ . Para  $U = 10$  y  $U = 20$  el peso espectral fue multiplicado por los factores indicados en la figura para hacerlo visible. Las flechas señalan la posición de  $2\Delta$  para cada valor de  $U$ .

citación de spin como una suma de dos energías de cuasipartículas de BCS (ver la línea llena en la figura), el estado más bajo para casi todo  $\mathbf{q}$  es bien reproducido en el caso de acoplamiento débil. A medida que  $U$  aumenta, la energía más baja está por debajo del resultado de campo medio. Esto está relacionado con la interacción residual entre cuasipartículas de BCS que renormaliza los resultados de campo medio.

### 3.3.6 Cuasipartículas

Como se mencionó más arriba, hay excitaciones de una partícula con energías mucho menores que la energía de campo medio  $E_{\mathbf{k}}$ . En la densidad espectral de una partícula  $A(\mathbf{k}, \omega)$ , el pico con energía más cercana al potencial químico corresponde a un verdadero estado de cuasipartícula. El pico de cuasipartícula tiene una relación de dispersión con un ancho de banda que se reduce fuertemente a medida que  $U$  aumenta. Estos estados de cuasipartícula pueden verse como bogoliubones que están fuertemente vestidos por excitaciones colectivas. Las excitaciones colectivas que van a renormalizar las excitaciones de una partícula son las excitaciones de carga y spin discutidas más arriba. Sin embargo, como hemos mostrado, las excitaciones de carga y de spin tienen escalas de energía diferentes, las primeras de baja energía y las segundas por encima de  $2\Delta$ . En esta situación esperamos que las excitaciones de carga sean las más importantes para renormalizar las excitaciones de una partícula. El propagador de una partícula tiene correcciones que se muestran esquemáticamente en la figura 3.16.

En el orden más bajo, la energía de esta excitación de una partícula está dada por la mínima energía de todos los estados que contribuyen a su función de onda. En particular, para  $\mathbf{k}$  distinto de  $k_F$ , esta energía es  $E_{k_F} + \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_F}$ , donde  $\omega_{\mathbf{q}}$  es la energía de una excitación colectiva de impulso  $\mathbf{q}$ . Como las excitaciones de carga tienen un ancho de banda pequeño para  $U$  grande, esta energía es mucho menor que  $E_{\mathbf{k}}$ . Calculamos la energía del pico de cuasipartícula usando este criterio y la comparamos con los resultados exactos. En la figura 3.17 se muestran ambas relaciones de dispersión. Para  $U$  pequeño, el acuerdo entre ambas es cuantitativo, excepto porque algunos estados aparecen en la relación de dispersión aproximada pero tienen peso cero en el cálculo exacto.

A medida que  $U$  aumenta se pueden observar algunas pequeñas diferencias. Esto se puede entender en términos de la mezcla entre diferentes estados

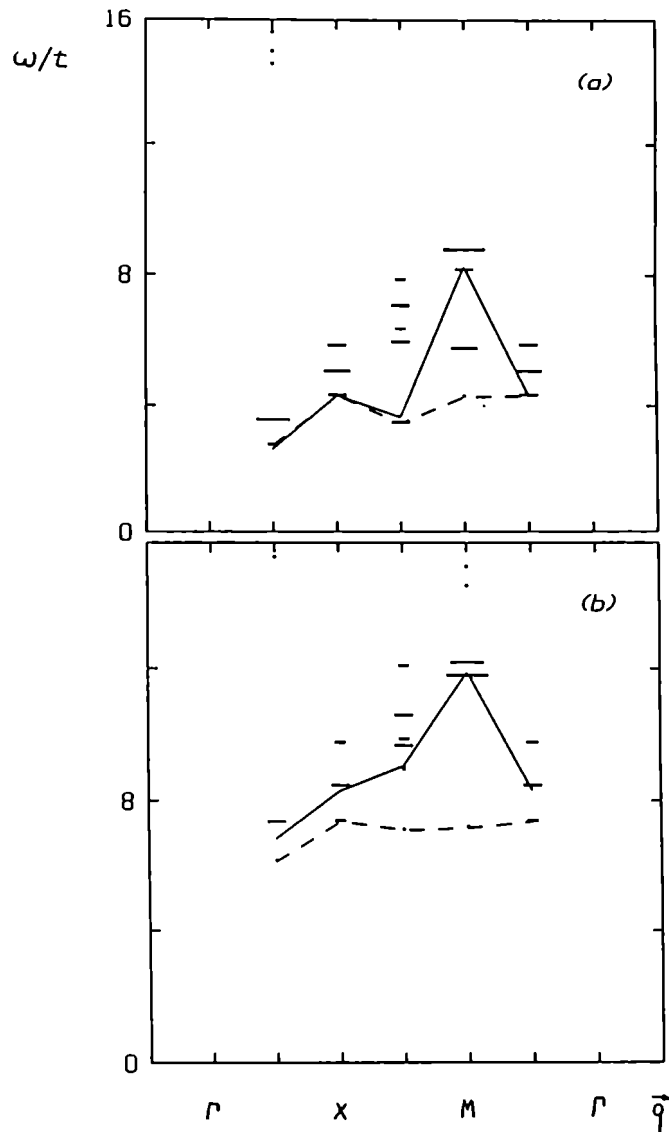


Figura 3.15: Densidades espectrales de excitaciones de spin para  $N_e = 4$  y todos los valores de  $q$  con (a)  $U = 4$  y (b)  $U = 10$ . El gráfico está hecho como en la figura 3.10. Las líneas llenas y de trazos son sólo quías para el ojo, las primeras unen las energías mas bajas de las excitaciones de spin en la aproximación de BCS, las segundas unen las energías de excitación más bajas calculadas exactamente.

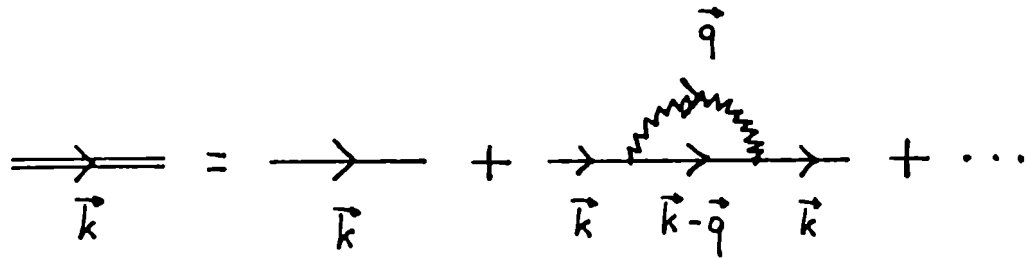


Figura 3.16: Correcciones perturbativas a la cuasipartícula de BCS. La línea ondulada representa una excitación colectiva.

en la figura 3.16, dado que los elementos de matriz de mezcla se hacen mayores a medida que  $U$  aumenta. Esto es consistente con el hecho de que las energías exactas de cuasipartícula son generalmente menores que las energías aproximadas mínimas obtenidas con el criterio de orden cero.

Como mencionamos arriba, y se ve en la figura, hay algunos estados que no aparecen en las densidades espectrales exactas. Se ha chequeado que hay estados con  $N_e + 1$  o  $N_e - 1$  partículas con energías muy cercanas a las predichas por nuestro criterio sencillo. Estos estados no se observan en la densidad espectral exacta porque el elemento de matriz de  $c_{k\sigma}^\dagger$  ( $c_{k\sigma}$ ) que conecta el estado fundamental de  $N_e$  partículas con el estado fundamental de  $N_e + 1$  ( $N_e - 1$ ) partículas e impulso  $k$  ( $-k$ ) es menor que el error en el cálculo numérico de las funciones de onda ( $10^{-8}$ ). Sería posible que estos elementos de matriz fueran exactamente cero debido a una regla de selección basada en una operación de simetría, sin embargo se ha chequeado que las propiedades de transformación de los estados inicial y final en cada caso son compatibles con un valor no nulo del elemento de matriz.

En resumen, hemos presentado una clara evidencia de que las excitacio-

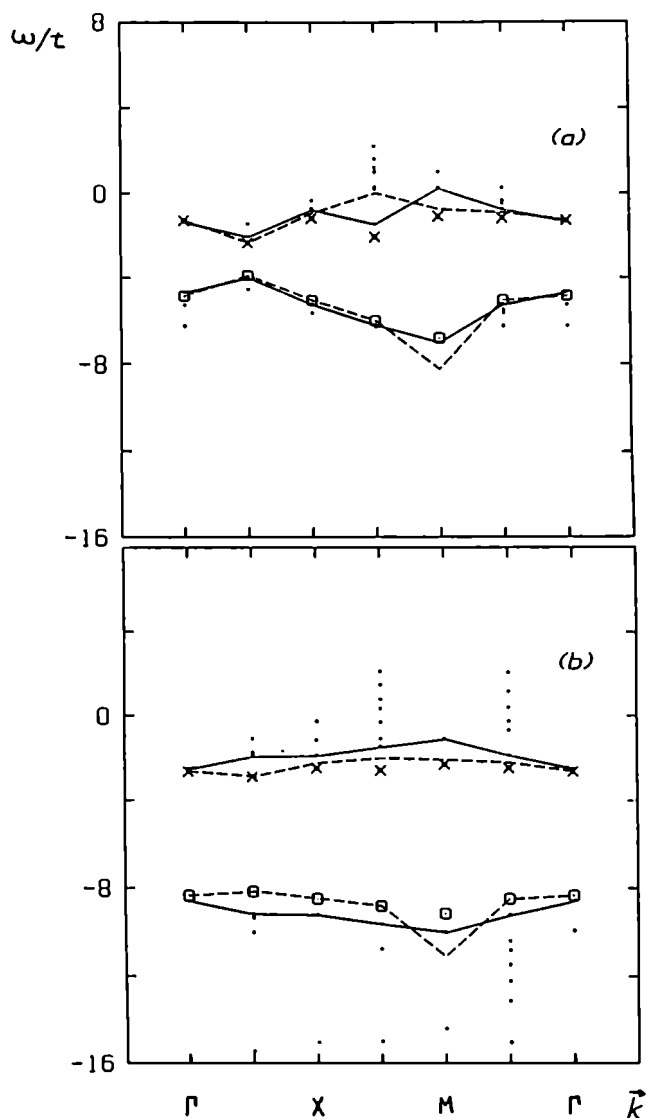


Figura 3.17: Energías de cuasipartícula en función  $k$  para  $N_e = 4$  con (a)  $U = 4$  y (b)  $U = 10$ . Puntos: espectros obtenidos en la aproximación de orden cero discutida en el texto, ( $\times$ ) diferencias de energía entre el estado fundamental con  $N_e + 1$  partículas en cada subespacio de simetría y el estado fundamental con  $N_e$  partículas, ( $\square$ ) diferencias de energía entre el estado fundamental con  $N_e$  partículas y el estado fundamental con  $N_e - 1$  en cada subespacio de simetría. Las líneas de trazos y llenas son guías para el ojo, las primeras unen energías exactas de cuasipartículas obtenidas de las densidades espectrales de una partícula, y las últimas unen los mínimos de los espectros en la aproximación de orden cero.



nes de una partícula de baja energía son Bogoliubones fuertemente vestidos. Estas cuasipartículas vestidas han sido estudiadas en el límite de  $U$  grande transformando el Hamiltoniano en el de un modelo  $t - J$  polarizado [46,47] y están relacionadas con las excitaciones de “pairing bag” discutidas por Bishop y colaboradores usando una aproximación de campo medio de Bogoliubov - de Gennes [53].

### 3.4 Conclusiones

Las conclusiones obtenidas se refieren por un lado a propiedades del estado fundamental y por el otro a las excitaciones elementales y pueden resumirse como sigue:

- Para el estado fundamental mostramos que
  1. La aproximación BCS da muy buenos resultados para la energía y función de onda en todo el rango de valores de  $U$ . Las mayores discrepancias aparecen para  $U \simeq W = 4t$ , pero aún en este caso la energía de BCS es correcta dentro de un margen de error de 3.5 por ciento o menos. Los valores medios  $\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$  calculados en el estado fundamental se desvian ligeramente del resultado de BCS sólo para  $\mathbf{k} = 0$  y  $U \simeq W$ .
  2. El potencial químico está también en buen acuerdo con el valor dado por BCS, aumenta con el aumento de densidad y puede entrar o no en la banda de Hartree-Fock dependiendo de la intensidad de la interacción.
- Para las excitaciones elementales encontramos que
  1. La densidad total de estados tiene un gap centrado en el potencial químico, cuyo ancho también está correctamente dado por la aproximación de BCS.
  2. Aparecen dos tipos de excitaciones de carga: ruptura de pares con energía mayor que  $2\Delta$  y excitaciones colectivas con menor energía. Para valores intermedios o grandes de  $U$  los dos tipos de excitaciones están bien separados en energía, y las colectivas contienen la mayor parte del peso espectral. Para  $U$  pequeño, sin

embargo, los dos tipos de excitaciones no están tan claramente separados y las de ruptura de pares tienen un gran peso espectral. Los resultados para la energía del modo colectivo se reproducen en forma cualitativamente correcta en la aproximación RPA, en particular la energía de excitación disminuye al crecer  $U$  para el caso de interacción intermedia o fuerte.

3. Las excitaciones de spin siempre tienen un gap por lo menos del orden de  $2\Delta$ , porque crear este tipo de excitaciones necesariamente involucra romper un par. El peso total de las excitaciones de spin es proporcional al cuadrado del momento magnético, y va a cero para  $U \rightarrow \infty$  a medida que el momento magnético es suprimido por la interacción.
4. Las densidades espectrales de una partícula muestran dos aspectos especialmente interesantes. Por un lado, la relación de dispersión de BCS ajusta casi perfectamente la posición de los picos más intensos del cálculo exacto. Sugerimos que estos picos dan lugar en el límite termodinámico a una resonancia de ancho finito. Por otro lado, los picos de cuasipartícula, que para la mayoría de los valores de  $k$  difieren de los anteriores y tienen una intensidad menor, tienen una relación de dispersión con una masa efectiva mayor. Esto se puede entender como que los bogoliubones están fuertemente vestidos por las excitaciones colectivas de carga. Estas cuasipartículas pueden asociarse con las "pairing bags" discutidas en las Refs. [53,46]. Una cuestión que queda abierta es qué pasaría con la relación de dispersión de cuasipartículas en un modelo más realista donde la interacción de largo alcance de Coulomb transformara las excitaciones de carga de baja energía para  $q \rightarrow 0$  en modos de plasma de alta energía.

## Capítulo 4

# Conductividad Hall y superficie de Fermi de sistemas electrónicos fuertemente interactuantes

### 4.1 Introducción

Las propiedades electrónicas de aisladores de Hubbard-Mott dopados se han venido estudiando desde hace muchos años. El descubrimiento de los materiales cerámicos superconductores de alta temperatura crítica, y la idea propuesta por Anderson de que modelos simples de una banda con fuertes correlaciones retienen la física esencial de estos sistemas, renovaron el interés en este problema [14].

Una cuestión central en la teoría de la superconductividad de alta temperatura crítica concierne a la naturaleza de la superficie de Fermi y las excitaciones de baja energía en estos materiales. Una de las cuestiones más controvertidas es si las excitaciones llevan carga y spin conjuntamente, siendo verdaderas cuasipartículas similares a electrones [55], o bien si la carga y el spin están deconfinados como en algunos problemas unidimensionales [54].

Como se dijo en el capítulo 1, los experimentos de fotoemisión resuelta en ángulo y fotoemisión inversa en algunos superconductores de alta  $T_c$  indican la existencia de una “superficie de Fermi grande” compatible con la

hipótesis de que el sistema fuera débilmente interactuante [10,9]. De hecho los cálculos de bandas, que claramente no pueden ser usados para describir los sistemas aisladores no dopados, predicen para los sistemas dopados una superficie de Fermi consistente con la obtenida en los experimentos de fotoemisión [11]. Sin embargo esta exitosa predicción de los cálculos de bandas de un electrón no puede ser tomada como evidencia de interacciones débiles en estos sistemas. Los anchos de banda deducidos del experimento indican una fuerte renormalización probablemente debida a las interacciones, y la forma en que el ancho de los picos depende de la distancia a la energía de Fermi no parece ser consistente con las propiedades de un líquido de Fermi. Por otro lado, si se obedece el Teorema de Luttinger [56], el volumen de Fermi es invariante frente a los efectos de la interacción y un sistema fuertemente interactuante también debería tener una “superficie de Fermi grande”. En este sentido, se ha mostrado recientemente que en una red cuadrada bidimensional la superficie de Fermi de un modelo  $t - J$  es consistente con el teorema de Luttinger [57]. Este resultado también se obtiene en simulaciones de Monte Carlo para un modelo de Hubbard bidimensional con banda casi semillena [58] (ver figura 4.1).

Una de las cuestiones importantes es si esta superficie de Fermi puede usarse para construir una teoría semiclásica para la dinámica de cuasipartículas en un campo magnético externo. Si esto fuera cierto, la resistencia Hall debería ser negativa para  $n < 1$ , indicando portadores de tipo electrón. El efecto de Haas - van Alphen debería indicar la presencia de tal superficie de Fermi grande. Si por lo contrario las excitaciones de carga y spin estuvieran desacopladas, la dinámica de carga debería estar dominada por la existencia de una “pseudo superficie de Fermi” para las excitaciones de carga que podría ser muy distinta de la observada en experimentos de fotoemisión.

Una imagen ingenua e incompleta, pero que quizás ayude a entender algunos de los resultados se obtiene si se desprecia la interacción entre excitaciones de spin y de carga, y se describe a los agujeros como fermiones sin spin. En ese caso el signo positivo de  $n_H$  y su dependencia lineal con  $x$  resultan naturalmente pues  $x$  da directamente la concentración de fermiones sin spin.

Recientemente Ioffe, Kalmayer y Weigmann [59] mostraron que un aislador de Mott dopado con agujeros tiene una resistencia Hall positiva y que su dependencia en temperatura es consistente con los experimentos hechos en superconductores cerámicos. Su punto de partida es un Hamiltoniano

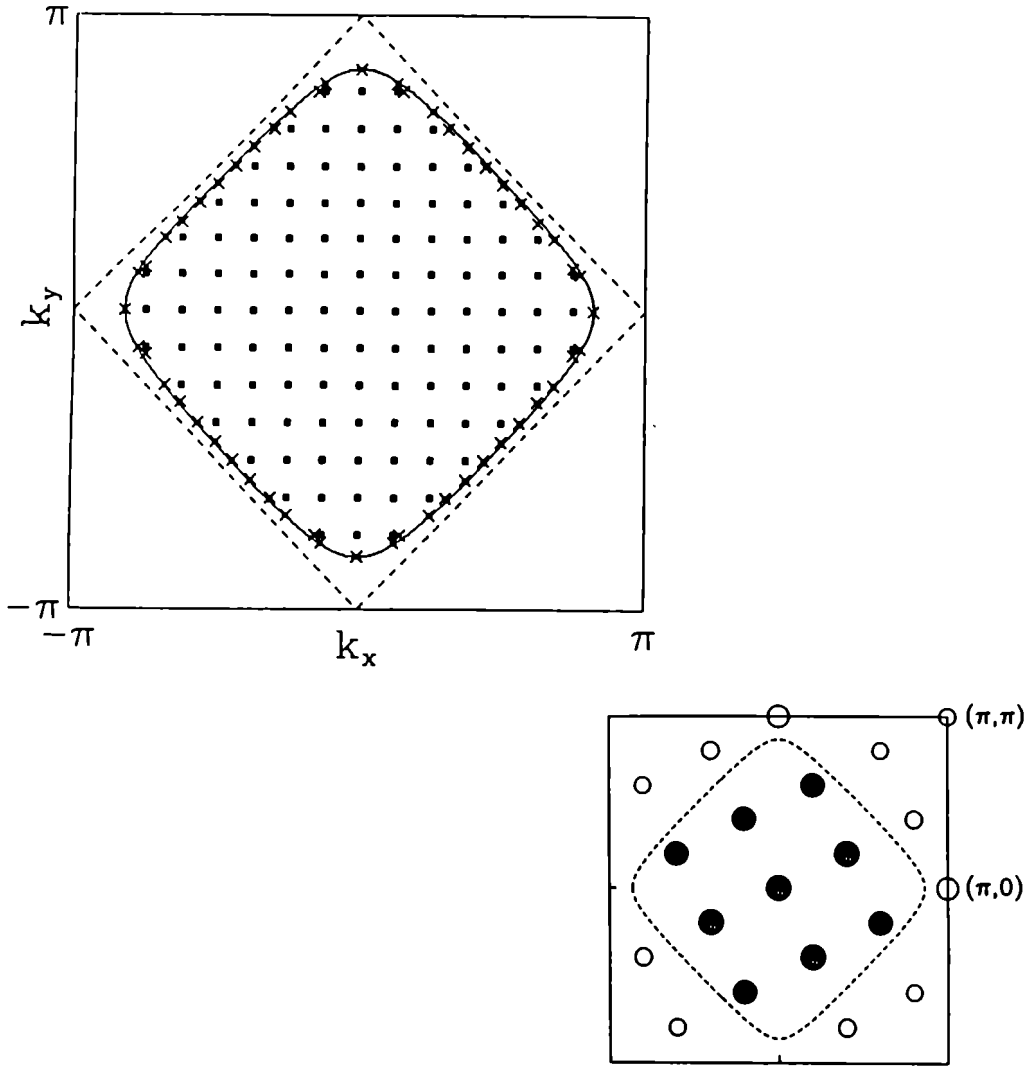


Figura 4.1: Superficie de Fermi en sistemas de electrones interactuantes: (a) Modelo de Hubbard con  $U/t = 4$ , a una temperatura  $\beta t = 6$ , en una red de  $16 \times 16$  y con un llenado  $n = 0.87$ . Los cuadrados llenos indican valores de impulso para los cuales  $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle > 0.5$ , las cruces indican los puntos donde  $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$  sería igual a 0.5 si se interpola linealmente entre impulsos vecinos, la línea continua indica la superficie de Fermi para  $U = 0$  con la misma densidad, y la línea de trazos indica la superficie de Fermi para  $U = 0$  y  $n = 1.0$  (tomado de [58]). (b) Estado fundamental del modelo  $t - J$  para un sistema de 20 sitios con 18 partículas, para  $J = 0.4$ . El diámetro de los círculos es proporcional a  $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ , los puntos con  $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle > 0.5$  ( $< 0.5$ ) se indican con círculos llenos (vacíos). La línea de trazos es la superficie de Fermi para el mismo llenado en el sistema no interactuante, en el límite termodinámico (tomado de [57]).

efectivo donde las excitaciones de carga y spin están desacopladas.

Para construir una teoría consistente es importante calcular simultáneamente y en una buena aproximación las diferentes propiedades del sistema, es decir por un lado propiedades medibles en experimentos de alta energía, como la densidad espectral de una partícula, y por otro lado propiedades de transporte como la resistencia Hall del sistema.

Como un paso en esta dirección, en este capítulo estudiamos numéricamente la superficie de Fermi y la resistividad Hall de un modelo de Hubbard bidimensional en el límite de interacciones fuertes. Pero antes, en la sección que sigue discutimos brevemente algunos casos conocidos de separación de carga y spin, y la manera en que se ha propuesto que esta separación aparece en los superconductores de alta temperatura crítica.

## 4.2 Separación de carga y spin

### 4.2.1 Solitones en poliacetileno conductor

El poliacetileno  $((HC)_x)$  es un polímero lineal donde cada átomo de carbono aporta un electrón a un orbital  $\pi$  que está parcialmente lleno y es el responsable de las propiedades electrónicas de baja energía [60].

Si el sistema no está dopado, la banda  $\pi$  está semillena, y por ser el sistema cuasiunidimensional tiene una fuerte tendencia a sufrir la transición de Peierls, es decir, dimerizarse para abrir así un gap en el nivel de Fermi y reducir su energía total. El efecto de reducción de energía electrónica compite con la energía elástica de la red, dando una modulación de equilibrio de la distancia entre monómeros del orden del 3%. El sistema es entonces un semiconductor.

Hay dos posibles estados dimerizados, el estado A:  $1 = 2 - 3 = 4 - 5 \dots$ , donde los números indican átomos, los signos  $=$  ligaduras cortas (o fuertes) y los signos  $-$  ligaduras largas (o débiles); y el estado B:  $1 - 2 = 3 - 4 = 5 \dots$ . Ambos estados tienen exactamente la misma energía. Esto permite que existan, además de las excitaciones usuales de partícula y agujero, paredes de dominio que separan regiones A de regiones B. Estas paredes tienen un ancho grande comparado con la constante de red, lo que permite que la energía del sistema sea prácticamente independiente de la posición de la pared, y además que la masa efectiva de ésta sea muy pequeña, del orden de la masa

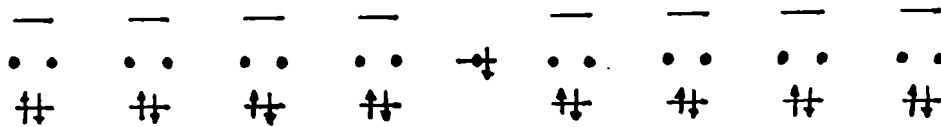


Figura 4.2: Estructura electrónica de un solitón neutro en el límite de dimerización completa

electrónica, pues los desplazamientos atómicos asociados con su movimiento son muy leves. Estas excitaciones se llaman solitones.

Cuando se crea un solitón, aparece un estado electrónico en el centro del gap. Esto es fácil de entender en el límite de dimerización extrema. Allí un solitón es simplemente un átomo que queda sin formar dímero hacia ninguno de los dos lados. Los dímeros pueden verse en este límite como moléculas diatómicas con un orbital ligante y uno antiligante, de modo que este último está doblemente ocupado con los dos electrones asociados a la molécula, y que la energía de condensación asociada a la dimerización es simplemente la energía del estado ligante. En el sitio aislado, en cambio, existe sólo el nivel atómico que no está hibridizado, y por lo tanto tiene una energía exactamente en el punto medio entre la del estado ligante y la del antiligante (ver figura 4.2). Este cálculo puede refinarse y se demuestra la existencia de un autoestado electrónico de energía 0 localizado cerca de cada solitón o antisolitón de la red, para el caso en que la dimerización es débil y el solitón tiene un ancho de varias constantes de red, que es el que se observa experimentalmente.

Si el sistema no está dopado, el estado en el gap debe estar simplemente ocupado. Por lo tanto tiene un spin  $1/2$ . Pero carece de carga, pues la carga promedio de cada sitio sigue siendo de un electrón. Por otro lado, si se dopa el sistema, el estado puede quedar vacío, en cuyo caso se el spin vale

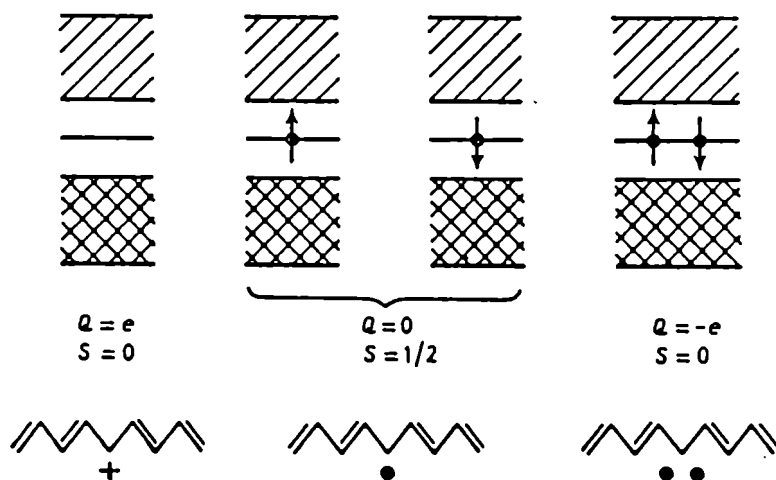


Figura 4.3: Estados posibles para la carga y el spin de un solitón.

0 pero se crea una carga positiva  $e$  en la región del solitón. También puede quedar doblemente ocupado, en cuyo caso se genera una excitación de carga negativa  $-e$  y spin 0. Por lo tanto, a diferencia de los electrones y agujeros, los solitones llevan separadamente carga o spin (ver figura 4.3). Mediciones ópticas, de transporte y de resonancia de spin realizadas en el poliacetileno dan claras evidencias de que la presencia de estos objetos con carga y spin separados.

#### 4.2.2 El modelo de Hubbard en una dimensión para $U \rightarrow \infty$

El modelo de Hubbard en una dimensión para  $U \rightarrow \infty$  es equivalente a un modelo de electrones fuertemente ligados con el vínculo de que ningún sitio puede estar doblemente ocupado:

$$H = -t \sum_{(ij)} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}),$$



$$n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \leq 1 \quad \forall i. \quad (4.1)$$

En este modelo, dada una configuración en la base de sitios, si se le aplica el Hamiltoniano se obtiene una combinación lineal de otras configuraciones que difieren de la original en la posición de las cargas, pero que *tienen los spines de los sitios ocupados exactamente en el mismo orden que la configuración original*. Dicho de otra manera, los spines no se cruzan entre sí. Esto implica que cada subespacio con un orden fijo para las variables de spin de los sitios ocupados es invariante por  $H$ , y que por lo tanto el hamiltoniano se puede diagonalizar separadamente en cada uno de estos subespacios. Pero dentro de uno de estos subespacios el problema se reduce a diagonalizar un Hamiltoniano de electrones sin spin y sin interacción, y es por lo tanto trivial de resolver. Además, para obtener un autoestado para el Hamiltoniano basta tomar un autoestado en la cadena sin interacción y multiplicar por un estado fijo para los espines de los sitios ocupados. Esto implica que los espectros de los dos problemas son idénticos, pero en el caso del modelo de Hubbard con interacción infinita se agrega un factor  $2^{N_e}$  de degeneración debida a las diferentes funciones de onda de spin posibles, donde  $N_e$  es el número de electrones.

Ogata y Shiba [29] calcularon el límite para  $U \rightarrow \infty$  de cada autofunción exacta del Hamiltoniano de Hubbard. Mostraron que se puede escribir la amplitud de la función de onda  $f(x_1, \dots, x_{N_e}; y_1, \dots, y_M)$ , donde  $x_1, \dots, x_{N_e}$  son las posiciones de los electrones y  $y_1, \dots, y_M$  son las posiciones de los electrones con spin hacia abajo dentro del subconjunto de sitios ocupados, en la forma:

$$f(x_1, \dots, x_{N_e}; y_1, \dots, y_M) = \det[\exp(ik_r x_s)] \Phi(y_1, \dots, y_M), \quad (4.2)$$

Aquí  $\Phi$  es una autofunción del Hamiltoniano de Heisenberg y el primer factor es un determinante de Slater de fermiones sin spin<sup>1</sup>. Por lo tanto la corrección de orden más bajo de la función de onda cuando  $U < \infty$  sigue conservando la separación entre carga y spin.

La diferencia de funciones de onda entre un sistema de fermiones sin spin y un modelo de Hubbard con  $U \rightarrow \infty$  tiene consecuencias cruciales: como

---

<sup>1</sup>Sin embargo los números cuánticos  $k_r$  se eligen de modo levemente distinto que en un sistema de fermiones sin spin:  $k_r = 2\pi(I_j + \frac{1}{N_e} \sum_{\alpha} J_{\alpha})$ , donde los  $I_j$  son enteros para  $M$  par y semienteros para  $M$  impar, y los  $J_{\alpha}$  son enteros para  $N_e - M$  par y semienteros para  $N_e - M$  impar.

mostraron Ogata y Shiba, dado un sistema con impulso de Fermi  $k_F$ , si la interacción tiende a infinito, el valor medio de  $\langle n_k \rangle$  sigue siendo singular en  $k_F$ , a pesar de que un sistema de fermiones sin spin con la misma densidad de partículas tiene su singularidad en  $2k_F$ . Por lo tanto en este ejemplo la separación de carga y spin es compatible con la existencia de una superficie de Fermi similar a la del caso no interactuante.

### 4.2.3 Separación de carga y spin en los planos de $CuO_2$ ?

Poco tiempo después del descubrimiento de los cupratos superconductores de alta temperatura crítica, P. W. Anderson propuso [14] que la fase aisladora de estos materiales era un ejemplo del estado RVB (“resonating valence bonds”: ligaduras de valencia resonantes), que él había propuesto años antes como estado fundamental para el modelo de Heisenberg cuántico en una red triangular plana [61].

El estado RVB para un sistema de spines consiste de una combinación lineal de estados, cada uno de los cuales tiene todos los spines formando singletes (ligaduras de valencia) con spines vecinos. El estado es una superposición coherente de todos los posibles arreglos de singletes, y no tiene orden magnético de largo alcance, a diferencia del estado de Néel. Anderson propuso que la energía de resonancia entre configuraciones lo estabilizaba. Si bien posteriormente fue quedando claro de las mediciones magnéticas que los momentos de los cobres mostraban orden de largo alcance en los sistemas no dopados, el estado RVB siguió estudiándose pues puede ser una buena base para entender el comportamiento del sistema al agregar agujeros.

Kivelson, Rokhsar y Sethna propusieron, poco después de lanzada la idea del estado RVB para los cupratos, que las excitaciones elementales del estado RVB dopado con agujero son fermiones de spin  $\frac{1}{2}$  y sin carga, y bosones sin spin de carga  $\pm e$ , análogas a los solitones en el poliacetileno<sup>2</sup> [62]. El análisis que realizaron es, en líneas generales, el que sigue:

Los sitios no ligados son defectos (topológicos) del estado RVB (ver figura 4.4). Son enteramente análogos a los solitones neutros del poliacetileno. Tienen spin  $\frac{1}{2}$  por no estar apareados y carga 0. Se crean por pares al romper una

---

<sup>2</sup>Posteriormente también se propuso la asignación inversa de estadística: portadores de carga fermiónicos y portadores de spin bosónicos [63]

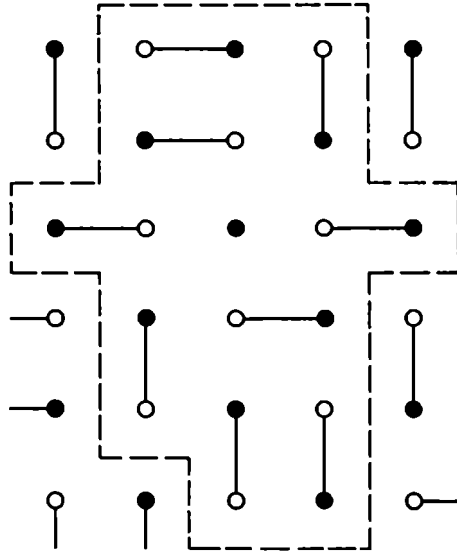


Figura 4.4: Excitación de spin en el estado RVB. La línea de trazos no corta ninguna ligadura, y rodea una región que contiene distinto número de sitios “blancos” y “negros”, delatando la existencia del spin desapareado. Tomado de [62].

ligadura y, como el estado RVB no tiene orden cristalino de largo alcance, actúan como partículas libres. Como en el poliacetileno, el defecto presumiblemente se extiende sobre varios sitios y es bastante móvil. Al dopar el sistema, los electrones o huecos agregados prefieren unirse a los spines libres, formando un solitón cargado. De esta manera se evita romper una ligadura adicional, dando así una energía del orden de la constante  $J$  de acoplamiento antiferro. El defecto cargado tiene spin 0 y carga  $\pm e$ .

Posteriormente se les dio el nombre de “spinones” a los defectos con spin y sin carga y “holones” a los defectos sin spin y con carga  $e$ .

### 4.3 El modelo

Pasemos ahora al estudio del Hamiltoniano de Hubbard en dos dimensiones en el límite de interacción fuerte. Todos los resultados presentados a partir de aquí se obtienen por técnicas de diagonalización exacta en sistemas finitos [43,44]. Para reducir el tamaño del espacio de Hilbert, eliminamos usando la transformación canónica usual los estados doblemente ocupados. El Hamiltoniano resultante es:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\langle ij \rangle} (t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + \sum_{\langle ij \rangle} \frac{4|t_{ij}|^2}{U} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j) \\
 & + \sum_{\langle ijk \rangle} \frac{t_{ij}^* t_{kj}}{U} c_{k\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} ,
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

donde el operador  $c_{i\sigma}$  destruye un fermión de spin  $\sigma$  en el sitio  $i$ ,  $\mathbf{S}_i$  es el operador de spin para el sitio  $i$ ,  $n_{i\sigma}$  es el operador de número de fermiones para el sitio  $i$  con spin  $\sigma$  ( $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ ), el símbolo  $\langle ij \rangle$  denota la suma sobre todos los pares de primeros vecinos,  $\langle ijk \rangle$  denota la suma sobre todos los conjuntos de tres sitios con  $i$  y  $k$  primeros vecinos de  $j$ , y  $t_{ij}$  es el elemento de matriz de salto entre los sitios  $i$  y  $j$ . Todos los operadores de fermiones están sujetos al vínculo de que no haya doble ocupación en un sitio. En lo que sigue indicamos por  $t_x$  y  $t_y$  los elementos de matriz de salto a lo largo de las direcciones  $x$  e  $y$  respectivamente, y definimos  $J_x = 4t_x^2/U$ .

Resolvimos exactamente el problema en dos sistemas finitos de  $N = 12$  sitios cada uno con todos los posibles números de electrones  $N_e$  ( $1 \leq N_e \leq N$ ), y magnetización total  $S_z = \frac{1}{2}(N_\uparrow - N_\downarrow) = 0$ . Consideramos sistemas rectangulares con condiciones de contorno periódicas en la dirección  $x$  y abiertas en la dirección  $y$ . Utilizamos la simetría de traslación en la dirección  $x$  y la simetría frente a la inversión simultánea de todos los spines para reducir el tamaño del espacio de Hilbert. Los dos tipos de sistemas considerados fueron  $4 \times 3$  y  $6 \times 2$  (la notación  $m \times l$  indica  $m$  sitios en la dirección  $x$  y  $l$  sitios en la dirección  $y$ ). Estas geometrías fueron elegidas para poder incluir un campo magnético externo  $B$  perpendicular al plano y de intensidad arbitraria. Consideramos sólo el acoplamiento diamagnético de las partículas cargadas con el campo externo. Esto se hace a través de la sustitución de Peierls [64], que en este caso se reduce a agregar una fase a los elementos de matriz de salto en la dirección  $x$  (esto afecta todos los términos excepto el

de acoplamiento spin-spin). En lo que sigue presentaremos resultados para las densidades espectrales de una partícula sin campo magnético y la conductividad transversal  $\sigma_{xy}$  en la presencia de un pequeño campo magnético  $B$ .

Para un sistema rectangular  $m \times l$  con condiciones periódicas sólo a lo largo de la dirección  $x$  el espectro de energías para partículas no interactuantes contiene  $l$  bandas. Dentro de cada banda el número cuántico  $k_x$  varía entre  $-\pi/a$  y  $\pi/a$  donde  $a$  es el parámetro de red. Cada banda se caracteriza por un número cuántico  $\alpha$  correspondiente a una diferente función de onda en la dirección  $y$ . Para nuestro sistema de  $4 \times 3$  definimos  $\alpha = -1, 0$  y  $1$  para la banda inferior, intermedia y superior respectivamente. A medida que estos estados de una partícula se van llenando, cada banda tiene un impulso de Fermi  $k_{\alpha F}$  diferente. Esta colección de impulsos  $k_{\alpha F}$  define una “superficie de Fermi”. Aunque esta geometría no es la más apropiada para estudiar la superficie de Fermi, es necesaria para calcular la conductividad Hall y como mencionamos más arriba calculamos todas las propiedades en el mismo sistema para minimizar las posibles inconsistencias debidas a efectos de tamaño finito.

## 4.4 Resultados

En el sistema interactuante el valor medio para el número de ocupación  $n_{\alpha k_x}$  del estado  $|\alpha k_x\rangle$  es mayor que 0 y menor que 1. Definimos  $k_{\alpha F}$  como el impulso donde este valor medio es igual a 0.5. Con este criterio la superficie de Fermi en el sistema interactuante es la misma que en el no interactuante. En la figura 4.5 se muestra el valor medio de  $n_{\alpha k_x}$  calculado en el estado fundamental; para presentar todos los estados en la misma figura, graficamos,  $\langle n_{\alpha k_x} \rangle$  como función de las energías de una partícula en el sistema no interactuante  $\epsilon_{\alpha k_x}$ . Como resulta evidente de la figura, para todas las densidades  $n = N_e/N$  la superficie de Fermi es consistente con el teorema de Luttinger. Esto nos sirve también para confirmar la validez de nuestro cálculo, pues se reproducen en él las características cualitativas de las superficies de Fermi obtenidas en sistemas de mayor tamaño. En la figura 4.5(c), correspondiente a  $N_e = 10$  partículas y  $J_x = 0.1 t_x$  en el sistema de  $4 \times 3$  sitios, hay algunas oscilaciones en  $\langle n_{\alpha k_x} \rangle$ . Esta es una consecuencia de haber graficado todas las bandas en una misma escala; dentro de cada banda, sin embargo, el com-

portamiento de  $n_{\alpha k_x}$  es monótono. Los mismos resultados se obtienen para  $U$  infinito ( $J_x = 0$ ).

Las densidades espectrales de una partícula, definidas a partir de las funciones de Green como  $-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle c_{\alpha k_x}, c_{\alpha k_x}^\dagger \rangle \rangle$  se muestran en la figura 4.6. Las densidades espectrales muestran mucha estructura que se extiende lejos de la superficie de Fermi. Hay un pico intenso que cruza la energía de Fermi cuando  $k_x$  cruza el correspondiente impulso de Fermi  $k_{\alpha F}$ . Estas densidades espectrales están cualitativamente de acuerdo con los espectros de fotoemisión obtenidos en materiales superconductores de alta  $T_c$ . Aunque los sistemas estudiados son pequeños y no tienen simetría  $x-y$  estos resultados, junto con los obtenidos en las referencias [57,58] son una evidencia de que la posición de la superficie de Fermi en estos sistemas fuertemente interactuantes es consistente con el Teorema de Luttinger si el número de agujeros es suficientemente grande. El caso de un solo agujero puede tener un comportamiento particular [57,65].

Presentamos ahora resultados para la conductividad transversa  $\sigma_{xy}$ . La resistencia Hall  $R_H = R_{yx}/B$  y el número de Hall  $n_H$  se calculan invirtiendo el tensor de conductividad y tienen el mismo signo que  $\sigma_{xy}$ . Calculamos la conductividad transversal usando teoría de respuesta lineal. Incluimos un campo magnético perpendicular al plano y consideramos la perturbación producida por un pequeño campo eléctrico transversal. El acoplamiento de los electrones con el campo eléctrico está dado simplemente por  $H_{int} = -eE \sum_i y_i$  donde  $e$  es la carga del electrón,  $E$  es el campo eléctrico, y  $y_i$  es la coordenada  $y$  del  $i$ -ésimo electrón. La conductividad transversal es:

$$\sigma_{xy} = -e^2 a^2 t_x \langle \langle \bar{j}_x, \bar{y} \rangle \rangle_{ret} |_{\omega=0}, \quad (4.4)$$

donde  $\bar{j}_x$  y  $\bar{y}$  son operadores adimensionales de corriente y de posición. Esta ecuación de para electrones no interactuantes en los sistemas considerados una conductividad transversal negativa para todas las densidades ( $0 < n < 1$ ), de acuerdo con la teoría semiclásica. En la figura 4.7 mostramos los resultados obtenidos en función de  $N_e$  para los sistemas de  $4 \times 3$  y  $6 \times 2$  sitios y diferentes valores de  $U$ . Hay tres puntos que no han sido incluidos, pues para esos puntos, y debido a la cuasidegeneración del estado fundamental en estas geometrías, el cálculo de  $\sigma_{xy}$  está sujeto a grandes errores numéricos.

Hay varias características que merecen ser comentadas: la conductividad

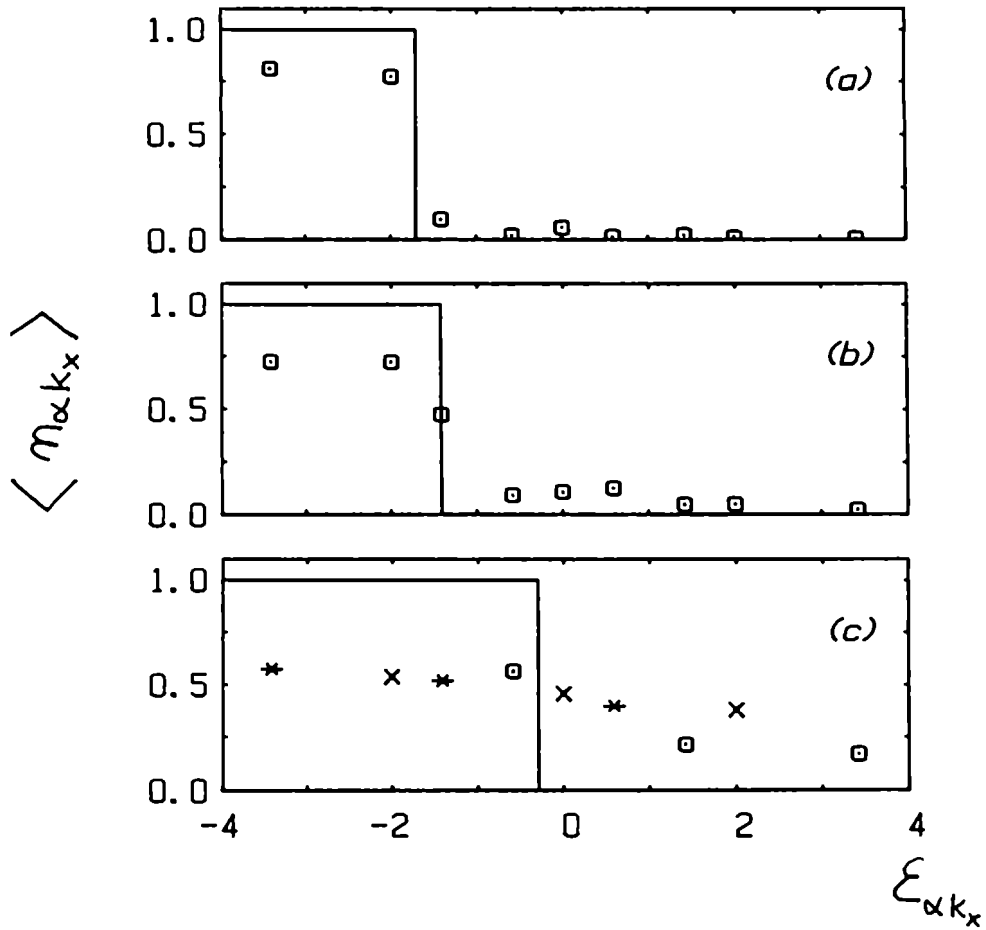


Figura 4.5: Números de ocupación  $\langle n_{\alpha k_x} \rangle$  en función de las energías de una partícula del sistema no interactuante  $\epsilon_{\alpha k_x}$ , para  $J_x/t_x = 0.1$  en el sistema de  $4 \times 3$  sitios. (a)  $N_e = 4$ , (b)  $N_e = 6$ , y (c)  $N_e = 10$ . En (c), diferentes símbolos indican diferentes valores del número cuántico  $\alpha$ :  $\alpha = -1$  (estrellas),  $\alpha = 0$  (cruces),  $\alpha = 1$  (cuadrados). La línea continua indica los números de ocupación para electrones no interactuantes.

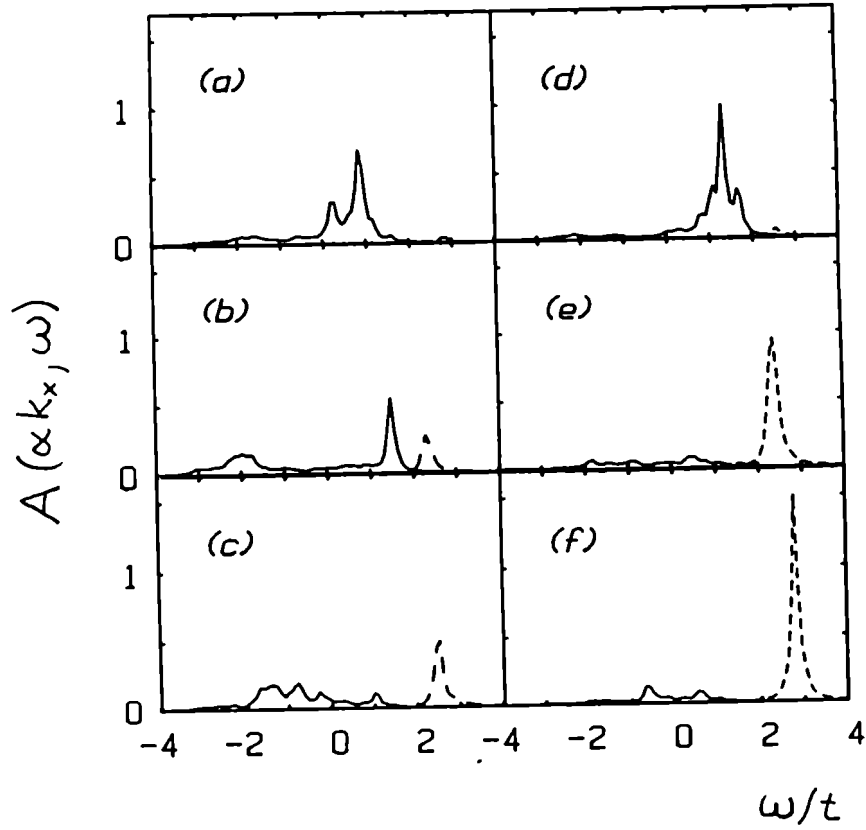


Figura 4.6: Densidades espectrales para 10 partículas en el sistema de  $4 \times 3$  sitios con  $J_x/t_x = 0.1$ . (a), (b) y (c) corresponden a  $\alpha = 0$  con  $k_x = 0, \pi/2$  y  $\pi$  respectivamente, (d), (e), y (f) a  $\alpha = 1$  con  $k_x = 0, \pi/2, \pi$ . Las líneas llena y de trazos corresponden a los espectros de fotoemisión y fotoemisión inversa respectivamente. Las densidades espectrales se graficaron con un ensanchamiento Lorentziano de  $\delta = 0.08t_x$ . La energía de Fermi está ubicada en  $\omega \simeq 2t_x$ .



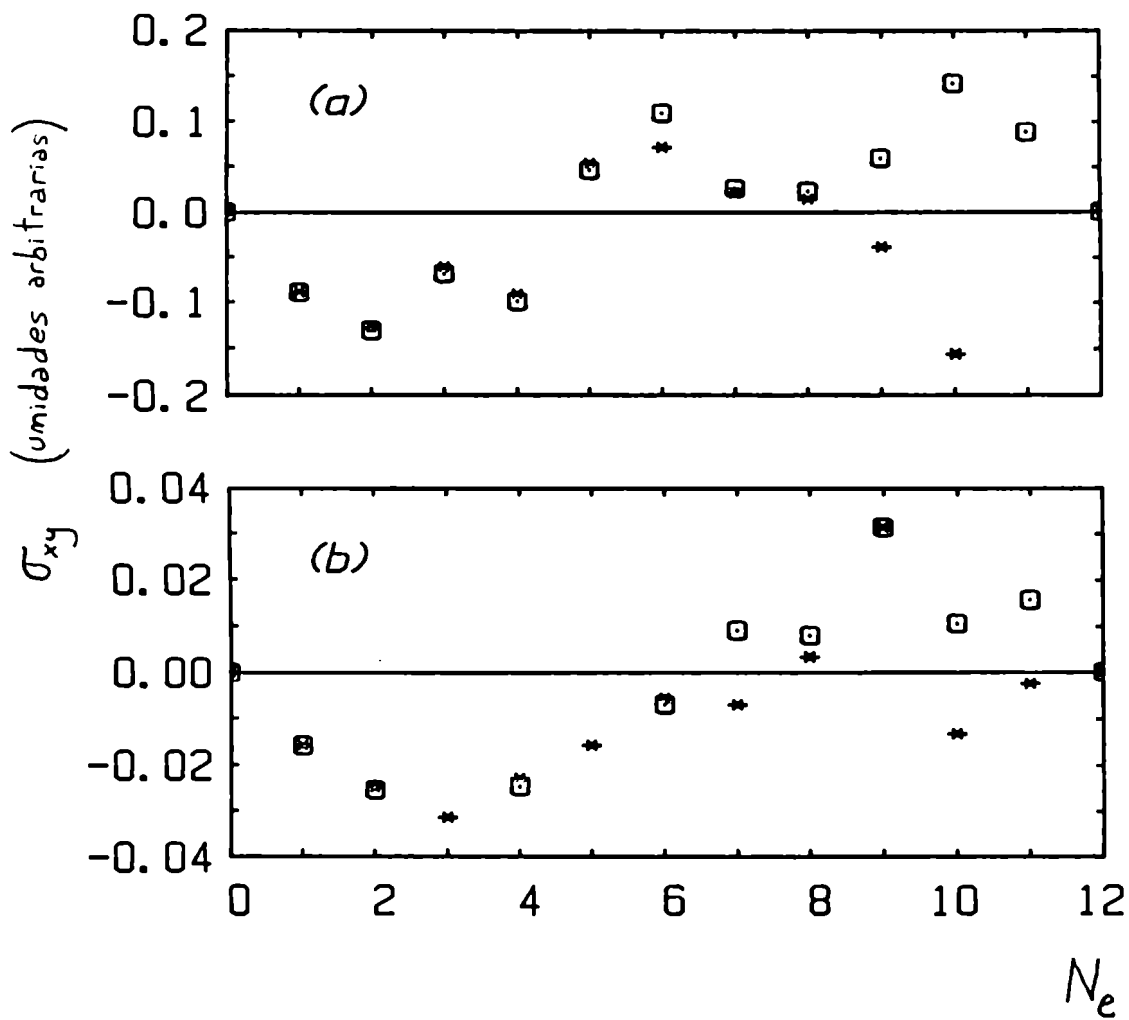


Figura 4.7: Conductividad transversal en función del número total de partículas para (a) sistema de  $4 \times 3$  sitios con  $t_y = t_x$ , y (b) sistema de  $6 \times 2$  sitios con  $t_y = 2t_x$ . Los cuadrados y las estrellas corresponden a  $J_x/t_x = 0$  y  $0.1$  respectivamente.

transversal para  $J_x = 0$  es de tipo electrón para  $n$  pequeño y de tipo agujero para  $n$  mayor. La densidad de Hall cambia de signo cuando la banda inferior de Hubbard está aproximadamente semillena ( $n \simeq 0.5$ ). El problema de un solo agujero es un punto especial, pues el spin total del sistema con un agujero y  $J_x = 0$  es máximo de acuerdo con el Teorema de Nagaoka, por lo tanto las conductividades transversales para un agujero y para un electrón son iguales en módulo y de signo opuesto. Para todas las demás densidades en el sistema de  $4 \times 3$  sitios el spin total es cero para  $N_e$  par y  $1/2$  o  $3/2$  para  $N_e$  impar. Para este sistema, el comportamiento de los números pares e impares de agujeros parece ser ligeramente diferente, esto se debe probablemente a efectos de tamaño finito. En el sistema de  $6 \times 2$  sitios, tanto el estado fundamental de 11 partículas como el de 9 están completamente polarizados, pero para todas las demás densidades el spin total está entre 0 y  $3/2$ . Nótese que, aunque no hay simetría electrón-agujero en la banda inferior de Hubbard, el valor absoluto de la conductividad transversa para el caso de unos pocos electrones  $N_e$  es del mismo orden de magnitud que la conductividad para unos pocos agujeros  $N - N_e$ . A medida que  $U$  decrece hay una tendencia hacia la desaparición del comportamiento tipo agujero para  $n \simeq 1$ . Esto podría ser una consecuencia de las correlaciones antiferromagnéticas, que aumentan rápidamente cuando  $U$  decrece. De hecho, como se muestra en la figura 4.8 la conductividad Hall para el sistema de  $4 \times 3$  sitios con  $N_e = 10$  cambia de signo cuando aparecen fuertes correlaciones de corto alcance.

## 4.5 Conclusiones

Como una tendencia general, nuestros resultados muestran que para  $U$  grande ( $J_x \leq 0.1 t_x$ ) la densidad de Hall cambia de signo cuando la banda inferior de Hubbard está aproximadamente semillena, siendo los portadores de tipo electrón para baja densidad y de tipo agujero para densidades intermedias. Para densidades mayores ( $n \simeq 1$ ) el comportamiento de la conductividad transversal está dominado por las correlaciones de spin; si  $U$  es suficientemente grande la densidad de Hall sigue siendo positiva hasta  $n = 1$ , si  $U$  es menor, sin embargo, la conductividad transversal se hace negativa para pequeñas cantidades de agujeros. Para los sistemas que estudiamos hay una región de densidades que difiere de una a otra geometría (típicamente  $0.5 < n < 0.75$ ) donde la densidad de Hall es positiva para un amplio rango

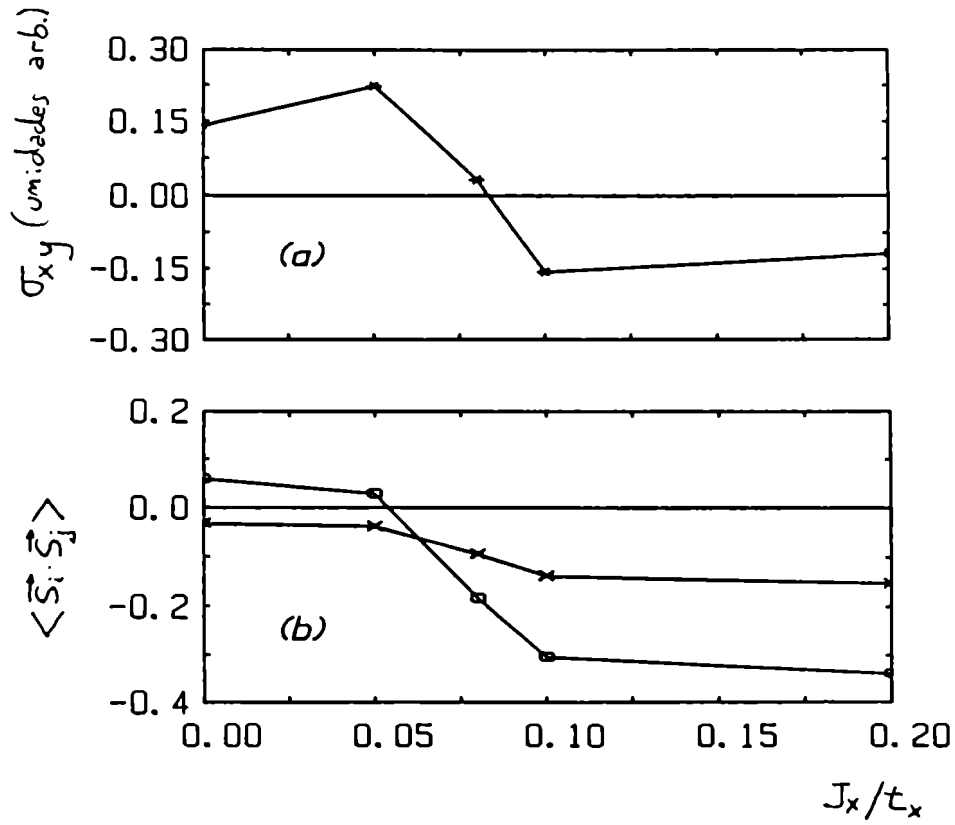


Figura 4.8: (a) Conductividad transversal en función de  $J_x/t_x$  para el sistema de  $4 \times 3$  sitios con  $N_e = 10$  y  $t_y = t_x$ . (b) Correlaciones spin-spin entre primeros vecinos. Los parámetros son los mismos que en (a). Los cuadrados indican correlaciones a lo largo de las cadenas de los bordes, y las cruces correlaciones a lo largo de la cadena central. Las líneas son sólo para guiar al ojo.

de valores de  $U$ . La relación entre antiferromagnetismo y conductividad Hall en la región  $n \simeq 1$  no puede ser estudiada en detalle en estos sistemas pequeños, desgraciadamente los espacios de Hilbert para sistemas mayores no se pueden tratar con los recursos computacionales disponibles.

Nuestros resultados pueden considerarse una evidencia indirecta de que en el modelo de Hubbard bidimensional, en el límite de  $U$  grande, las excitaciones de carga y spin están deconfinadas, y aunque los cálculos de estructura de bandas en la aproximación de una partícula puedan predecir correctamente la forma de la superficie de Fermi, no pueden ser usados para predecir la dinámica de las excitaciones de carga. Este comportamiento parece análogo al del modelo de Hubbard en una dimensión para  $U \rightarrow \infty$ , donde los autoestados muestran separación de carga y spin, pero la superficie de Fermi es similar a la del caso no interactuante.

Otro punto interesante es qué “superficie de Fermi” es la determinada por un experimento de de Haas - van Alphen. Este problema es mucho más difícil de estudiar en un sistema pequeño.

En resumen, calculamos exactamente las densidades espectrales y la conductividad Hall en el mismo sistema fuertemente interactuante. Nuestros resultados muestran que la superficie de Fermi determinada a partir de las densidades espectrales de una partícula es consistente con el teorema de Luttinger y que la conductividad Hall para un sistema casi semilleno ( $n \simeq 1$ ) indica portadores de tipo agujero si los parámetros son tales que las correlaciones antiferromagnéticas son débiles. Esto hace evidente el fracaso de las teorías de una partícula que predecirían un signo incorrecto para la conductividad transversal. Esta aparente contradicción entre la forma de la superficie de Fermi y la conductividad Hall puede tomarse como una evidencia en favor de la deconfinamiento de las excitaciones de carga y de spin.

# Bibliografía

- [1] D. Allender, J. Bray, y J. Bardeen, Phys. Rev. B **7**, 1020 (1973); Phys. Rev. B **8**, 4433 (1973).
- [2] Physical Properties of High Temperature Superconductors I, editado por D. M. Ginsberg (World Scientific, Singapur, 1989).
- [3] Physical Properties of High Temperature Superconductors II, editado por D. M. Ginsberg (World Scientific, Singapur, 1990).
- [4] B. Batlogg en *High temperature superconductivity: proceedings*, editado por K. Bedell y colaboradores (Addison-Wesley, Redwood City, 1990).
- [5] B. Batlogg, Physics Today **44**, 44 (1991).
- [6] R. S. List y colaboradores, Physica C **159**, 439 (1989).
- [7] N. Nucker, J. Fink, J. C. Fuggle, P. J. Durham, y W. M. Temmerman, Phys. Rev. B **37**, 5158 (1988).
- [8] Véase el artículo de H. M. Meyer III y J. H. Weaver en la referencia [3].
- [9] B. O. Wells y colaboradores, Phys. Rev. Lett. **65**, 6636 (1990); C. G. Olson y colaboradores, Phys. Rev. B **42**, 381 (1990); T. Takahashi y colaboradores, *ibid.* **39**, 6636 (1989).
- [10] J. C. Campuzano y colaboradores Phys. Rev. Lett. **64**, 2308 (1990).
- [11] S. Massida, J. Yu, y A. J. Freeman, Physica C **152**, 251 (1988); L. F. Mattheiss, Phys. Rev. Lett. **58**, 1028 (1987); J. Yu, A. J. Freeman, y J. H. Xu, *ibid.* **58**, 1035 (1987).

- [12] Véase el artículo de N. P. Ong en la referencia [3].
- [13] J. H. Kim, K. Levin y A. Auerbach, *Phys. Rev. B* **39**, 11633 (1989); K. Levin, J. H. Kim, J. P. Lu, y Q. Si, no publicado.
- [14] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [15] R. B. Laughlin, *Science* **242**, 525 (1988).
- [16] J. P. Carbotte, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 1027 (1990).
- [17] J. R. Schrieffer, X. G. Wen y S. C. Zhang, *Physica C* **153-155**, 21 (1988).
- [18] J. R. Schrieffer, X. G. Wen y S. C. Zhang *Phys. Rev. Lett.* **60**, 944 (1988).
- [19] J. R. Schrieffer, X. G. Wen y S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **39**, 11663 (1989).
- [20] C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, y E. Abrahams, *Solid State Commun.* **62**, 681 (1987).
- [21] L. F. Mattheis, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1028 (1987).
- [22] E. Hirsch, S. Tang, E. Loh, Jr., y D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1668 (1988).
- [23] E. R. Gagliano, A. G. Rojo, C. A. Balseiro, y B. Alascio, *Solid State Commun.* **64**, 901 (1987).
- [24] C. A. Balseiro, A. G. Rojo, E. R. Gagliano, y B. Alascio, *Physica C* **153-155**, 1223 (1988).
- [25] E. R. Gagliano, Tesis doctoral, Instituto Balseiro.
- [26] M. D. Núñez Regueiro, y A. A. Aligia, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1889 (1988).
- [27] A. G. Rojo, Tesis doctoral, Instituto Balseiro.
- [28] J. E. Hirsch, E. Loh, Jr., D. J. Scalapino, S. Tang, *Phys. Rev. B* **39**, 243 (1989).

- [29] M. Ogata y H. Shiba, *Phys. Rev. B* **41**, 2326 (1990); H. Shiba y M. Ogata, en *Strongly Correlated Electron Systems II*, editado por G. Baskaran, A. E. Ruckenstein, E. Tosatti, y Yu Lu (World Scientific, Singapur, 1991).
- [30] J. Lorenzana, Tesis de Licenciatura, Instituto Balseiro.
- [31] A. L. Fetter y J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particle Systems* (Mc Graw-Hill, New York, 1971).
- [32] Y. Tokura y colaboradores, *Nature* **337**, 345 (1989); H. Tagaki, S. Uchida, y Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1197 (1989).
- [33] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [34] C. Balseiro, M. Avignon, A. Rojo, B. Alascio, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2664 (1989).
- [35] Véase G. Ryckayzen en *Superconductivity*, editado por R. D. Parks (Marcel Dekker, 1969).
- [36] M. Randeria, J. Duan, y L. Shieh, *Phys. Rev. B* **41**, 327 (1990).
- [37] R. T. Scalettar, E. Loh, J. Gubernatis, A. Moreo, S. White, D. Scalapino, R. Sugar, y E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1407 (1989).
- [38] J. O. Sofo, C. A. Balseiro, y H. E. Castillo, *Phys. Rev. B*, en prensa.
- [39] A. J. Leggett, en *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter*, editado por A. Pekalski y J. Przystawa (Springer-Verlag, Berlin, 1980), p. 13.
- [40] P. Nozières y S. Schmitt-Rink, *J. Low Temp. Phys.* **59**, 195 (1985).
- [41] J. O. Sofo y C. A. Balseiro, enviado a *Phys. Rev. B*.
- [42] J. O. Sofo, Tesis doctoral, Instituto Balseiro.
- [43] E. R. Gagliano y colaboradores *Phys. Rev. B* **34**, 1677 (1986).
- [44] E. R. Gagliano y C. A. Balseiro, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2999 (1987); R. Haidock, V. Heine, y M. Kelly, *J. Phys. C* **5**, 2845 (1972).

- [45] S. Robaszkiewicz, R. Micnas, y K. A. Chao, *Phys. Rev. B* **23**, 1447 (1981).
- [46] A. G. Rojo, J. O. Sofo, y C. A. Balseiro, *Phys. Rev. B* **42**, 10241 (1990).
- [47] K. Hallberg, A. G. Rojo, y C. A. Balseiro, *Phys. Rev. B* **43**, 8005 (1991).
- [48] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **114**, 1002 (1959).
- [49] Ver por ejemplo R. Micnas, J. Ranninger, y S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 113 (1990); y las referencias allí citadas.
- [50] A. Alexandrov y J. Ranninger, *Phys. Rev. B* **23**, 1796 (1981).
- [51] E. Dagotto y colaboradores, UCSBTH-91-22 preprint, 1991.
- [52] S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 120 (1990).
- [53] A. R. Bishop, P. S. Lomdahl, J. R. Schrieffer, y S. A. Trugman, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2709 (1988).
- [54] P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1839 (1990).
- [55] Kampf y Schrieffer, *Phys. Rev. B* **41**, 6399 (1990).
- [56] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **121**, 942 (1961).
- [57] W. Stephan y P. Horsch, *Phys. Rev. Lett.* **66** 2258 (1991).
- [58] D. J. Scalapino, en *High Temperature Superconductivity: Proceedings of the Los Alamos Symposium 1989*, editado por K. S. Bedell, D. Coffey, D. E. Meltzer, D. Pines, y J. R. Schrieffer (Addison-Wesley, New York, 1990).
- [59] L. B. Ioffe, V. Kalmeyer, y P. B. Weigmann, *Phys. Rev. B* **43**, 1219 (1991).
- [60] A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer y W. P. Su, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 781 (1988).
- [61] P. W. Anderson, *Mater. Res. Bull.* **8**, 153 (1973); P. Fazekas y P. W. Anderson, *Philos. Mag.* **30**, 432 (1974).



- [62] S. A. Kivelson, D. S. Rokhsar, y J. P. Sethna, *Phys. Rev. B* **35**, 8865 (1987).
- [63] Ver K. Flensberg, P. Hedegard y M. B. Pedersen *Phys. Rev. B* **40**, 850 (1989) y referencias allí citadas.
- [64] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976) y las referencias allí citadas.
- [65] E. Dagotto y colaboradores, *Phys. Rev. B* **41**, 2585 (1990); **41**, 9049 (1990); K. J. von Szczepanski y colaboradores, *ibid.* **41**, 2017 (1990).