

Modelo de Hubbard en redes no-bipartitas: asimetría hueco-partícula

A. E. Feiguin, C. J. Gazza y H. A. Ceccatto

Instituto de Física Rosario, CONICET-UNR, y Departamento de Física, FCEIA, UNR.

e-mail: adrian@ifir.ifir.edu.ar

Recientemente hemos estudiado las propiedades del estado fundamental del modelo de Hubbard sobre la red triangular a banda semillena, mediante la técnica de bosones esclavos. La combinación de correlación fuerte y frustración debida a la topología de esta red produce una rica estructura de fases, incluyendo una transición metal-aislador genuina. En este trabajo obtenemos el diagrama de fases en el espacio (U, δ) , que incluye las fases paramagnética, onda de espín lineal conmensurada, y el orden AF de tres subredes clásico. La falta de simetría electrón-hueco se manifiesta en un comportamiento notablemente diferente del sistema dependiendo del tipo de dopaje (electrones o huecos). Los resultados obtenidos sugieren un comportamiento cuasi-crítico del modelo a banda semillena frente al dopaje con electrones.

Recently we have studied the ground-state properties of the half-filled Hubbard model on the triangular lattice, by means of the slave boson technique. The combination of strong correlation and frustration due to the lattice topology produces a rich behavior, including a genuine metal-insulator transition. In this work we obtain the phase diagram in the parameter space (U, δ) , which includes paramagnetic, antiferromagnetic and linearly-polarized spin density wave phases. The absence of electron-hole symmetry manifests itself as a large anisotropy under particle or hole doping of the half-filled band. The results suggest a quasi-critical behavior at half-filling under electron doping.

En este trabajo reexaminamos el modelo de Hubbard sobre la red triangular, para llenado arbitrario, mediante la técnica de bosones esclavos (TBE). En particular utilizaremos el formalismo invariante ante rotaciones¹, el cual es conveniente para la descripción de órdenes magnéticos no colineales. Hacemos notar que para este modelo sólo existen en la literatura resultados provenientes de tratamientos basados en la técnica de H-F, particularmente para banda semillena^{2,3}.

Consideraremos el hamiltoniano de Hubbard

$$H = -t \sum_{i, \vec{\delta}, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\vec{\delta}, \sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

donde i indica sitios de la red, y los $\vec{\delta}$'s son los vectores que conectan con los seis primeros vecinos de un sitio dado en una red triangular.

Obtendremos las propiedades del estado fundamental de (1) utilizando la TBE invariante rotacional¹. Para ello representamos el

espinor $\mathbf{c}_i \equiv (c_{i\uparrow}, c_{i\downarrow})$ como $\mathbf{c}_i = Z_i \mathbf{f}_i$, donde $\mathbf{f}_i \equiv (f_{i\uparrow}, f_{i\downarrow})$ es un pseudofermión, y Z_i es una matriz de bosones 2×2 que describe el cambio en la ocupación del sitio cuando los fermiones se mueven. Ante rotaciones estos operadores se transforman como $\mathbf{f}_i \rightarrow \psi \mathbf{f}_i$ y $Z_i \rightarrow \psi Z_i \psi^\dagger$ respectivamente, donde ψ es una matriz de $SU(2)$. Lo más conveniente para describir una estructura espiral magnética general con vector de onda \vec{Q} es pasar a un sistema de referencia con el eje z apuntando en cada sitio en la dirección de la magnetización local. En este marco de referencia rotado podemos aproximar las componentes de las matrices de bosones Z_i por valores independientes del sitio. De esta forma, para una espiral alrededor del eje y el Hamiltoniano (1) resulta

$$H'_{bc} = N H_0 - \sum_{i, \vec{\delta}} \mathbf{f}_i^\dagger A(\vec{\delta}) \mathbf{f}_{i+\vec{\delta}} - \sum_i \mathbf{f}_i^\dagger B \cdot \mathbf{f}_i, \quad (2)$$

donde N es el número de sitios de la red. Las

matrices están dadas por

$$A(\vec{\delta}) = t \begin{pmatrix} \alpha_{\uparrow}^2 \cos \frac{\vec{Q} \cdot \vec{\delta}}{2} & \alpha_{\uparrow} \alpha_{\downarrow} \sin \frac{\vec{Q} \cdot \vec{\delta}}{2} \\ -\alpha_{\uparrow} \alpha_{\downarrow} \sin \frac{\vec{Q} \cdot \vec{\delta}}{2} & \alpha_{\downarrow}^2 \cos \frac{\vec{Q} \cdot \vec{\delta}}{2} \end{pmatrix},$$

con α_{\uparrow} y α_{\downarrow} como se definen más abajo, y $B = (\lambda_0^{(2)} + \mu)\tau_0 + \vec{\lambda}^{(2)} \cdot \vec{\tau}$ (τ_0 es la matriz identidad 2×2 y $\vec{\tau}$ el vector de matrices de Pauli). Los cuatro $\lambda^{(2)}$ son multiplicadores de Lagrange que imponen la equivalencia entre el valor medio de las densidades de partícula y de espín calculadas usando alternativamente Z o f_i . En el sistema local no hay componente de espín transversal, de manera que podemos tomar $\lambda_1^{(2)} = 0 = \lambda_2^{(2)}$, y Z queda diagonal: $Z_{\sigma\sigma'} = \alpha_{\sigma} \delta_{\sigma\sigma'}$. Los elementos de la diagonal están dados por

$$\alpha_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{(1-d^2-p_{\sigma}^2)}} (ep_{\sigma} + dp_{-\sigma}) \frac{1}{\sqrt{(1-e^2-p_{-\sigma}^2)}}$$

donde e^2 , p_{\uparrow}^2 , p_{\downarrow}^2 , y d^2 son las probabilidades de tener en el sitio un hueco, un electrón polarizado paralelo o antiparalelo al eje z , y doble ocupación respectivamente. La constante en (2) es $H_0 = Ud^2 - \lambda^{(1)}(e^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 + d^2 - 1) + \lambda_0^{(2)}(p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 + 2d^2) + \lambda_3^{(2)}(p_{\uparrow}^2 - p_{\downarrow}^2)$. El multiplicador de Lagrange $\lambda^{(1)}$ impone la restricción a un bosón por sitio, lo cual asegura, en promedio, que el espacio de estados contenga sólo configuraciones físicas.

Pasando al espacio de los momentos diagonalizamos el índice de sitios, con lo cual se obtiene $\frac{H_{SB}}{N} = H_0 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{f}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \Gamma_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{f}_{\mathbf{k}}$, donde $\Gamma_{\mathbf{k}}^{\sigma\sigma'} = \sum_{\vec{\delta}} A(\vec{\delta}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} + B = A_{\mathbf{k}\sigma} \delta_{\sigma\sigma'} + B_{\mathbf{k}\sigma} \delta_{\sigma-\sigma'}$. Hemos llamado $A_{\vec{k},\sigma} = t\alpha_{\sigma}^2 \gamma_{\vec{k}}^{\sigma} + \lambda_0^{(2)} + \sigma \lambda_3^{(2)}$, y $B_{\vec{k}} = t\gamma_{\vec{k}}^{\uparrow} \alpha_{\uparrow} \alpha_{\downarrow}$, con $\gamma_{\vec{k}}^{\sigma} = 1/2 \sum_{\vec{\delta}, \sigma} \cos(\vec{k} + \sigma \vec{Q}/2) \cdot \vec{\delta}$ y $\gamma_{\vec{k}}^{\downarrow} = 1/2 \sum_{\vec{\delta}, \sigma} \sigma \cos(\vec{k} + \sigma \vec{Q}/2) \cdot \vec{\delta}$. Finalmente, la diagonalización en el índice de espín del Hamiltoniano de fermiones efectivo arroja la siguiente relación de dispersión:

$$\epsilon_{\sigma}(\vec{k}) = \frac{(A_{\vec{k},\uparrow} + A_{\vec{k},\downarrow})}{2} - \sigma \sqrt{\left(\frac{A_{\vec{k},\uparrow} - A_{\vec{k},\downarrow}}{2}\right)^2 + B_{\vec{k}}^2},$$

con $\sigma = \pm$. De esta manera, la energía por sitio viene dada por $\frac{E_{SB}}{N} = H_0 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\sigma}(\vec{k}) n_{\sigma\mathbf{k}}$.

Minimizando la misma con respecto a $\lambda^{(1)}$ y $\lambda_0^{(2)}$ se obtiene

$$\begin{aligned} e^2 + d^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 &= 1 \\ 2d^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} n_{\sigma\mathbf{k}} = n. \end{aligned} \quad (3)$$

Definiendo $\delta = 1 - n$ y $m = p_{\uparrow}^2 - p_{\downarrow}^2$, para un dopaje δ dado las ecuaciones anteriores nos permiten expresar los campos bosónicos en términos de d y m :

$$e = \sqrt{d^2 + \delta}, \quad p_{\sigma} = \sqrt{\frac{1 + \sigma m - \delta}{2} - d^2}. \quad (4)$$

Las restantes ecuaciones de autoconsistencia se obtienen de minimizar la energía respecto de los parámetros $\lambda_3^{(2)}$, e , p_{σ} , y d . Estas ecuaciones se resuelven numéricamente en forma iterativa, ajustando en cada paso el potencial químico μ para fijar la densidad de partículas n y determinando la correspondiente superficie de Fermi.

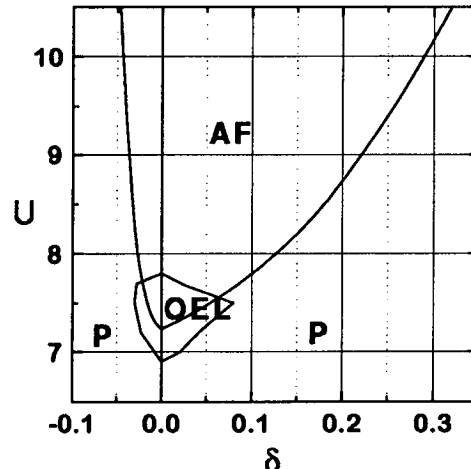


FIG. 1. Diagrama de fases del modelo de Hubbard sobre la red triangular. P: fase metálica paramagnética; AF: fase antiferromagnética; OEL: fase semiconductor con densidad de onda de espín lineal

Los resultados obtenidos para el modelo fuera de banda semillena se presentan en la Fig. 1. La misma muestra las asimetrías esperadas para esta red no-bipartita, vinculadas a la falta de simetría electrón-hueco. Es de destacar la diferente estabilidad del orden AF con respecto al dopaje con electrones o huecos.

La gran diferencia en el dopaje necesario para desestabilizar el orden AF sugiere un comportamiento cuasi-crítico del mismo a banda

semillena frente al dopaje con electrones. Observar por ejemplo que para $U/t = 9$ se necesita aproximadamente el 22% de huecos contra un 4% de electrones, aumentando considerablemente la diferencia para valores más grandes de U .

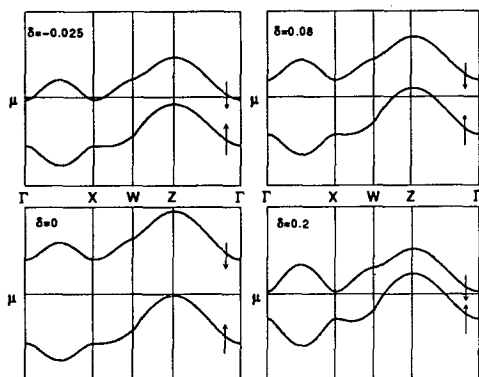


FIG. 2. Bandas de energía de las cuasipartículas, para $U/t = 9$ y distintos valores de llenado correspondientes a la fase AF.

En la Fig. 2 mostramos la relación de dispersión siguiendo el camino en la zona de Brillouin $\Gamma = (0,0) \rightarrow X = (\pi, \pi/\sqrt{3}) \rightarrow W = (2/3\pi, 2\pi/\sqrt{3}) \rightarrow Z = (0, 2\pi/\sqrt{3})$, para $U/t = 9$ (orden AF) y distintos valores de dopaje. Se puede ver el comportamiento de las bandas a semilleno y para valores intermedios y cercanos a la transición hacia la fase paramagnética, apreciándose la renormalización en la estructura de las mismas y la disminución del gap existente a banda semillena para ambos tipos de llenado. En el momento en que la fase paramagnética se establece como estado de menor energía, existe aún un valor finito para la magnetización en el sitio. Esto indica que la transición hacia la fase paramagnética es de primer orden. La Fig. 2 indica que el estado magnético itinerante pierde rápidamente en energía con el estado desordenado en cuanto se comienzan a poblar los dos tipos de excitaciones.

En resumen, hemos aplicado la TBE invariante rotacional al estudio del modelo de Hubbard sobre una red triangular. A banda semillena y para valores crecientes de U , el estado fundamental presenta una fase metálica paramagnética, una fase semimetálica con un orden conmensurado correspondiente a una onda de

densidad de espín lineal, y la fase antiferromagnética de tres subredes clásica.

A diferencia de la aproximación de Hartree-Fock, la técnica de bosones esclavos nunca predice una fase metálica con una estructura espiral inconmensurada como la más estable. La presencia de dichas fases en Hartree-Fock se debe probablemente a que dicha aproximación es muy mala en la fase paramagnética. En forma alternativa, se podría argumentar que la ausencia de las mismas en la TBE se debe a que esta técnica baja demasiado la energía paramagnética, debido a los denominadores *ad hoc* que requiere la solución de campo medio para recobrar el límite $U = 0$.¹ Aproximaciones más confiables o el cálculo de fluctuaciones gaussianas en la TBE podrían discernir esta cuestión.

Los resultados obtenidos fuera de banda semillena indican un comportamiento cuasocrítico al dopar con electrones. Esto hace plausible la conjetura de Anderson respecto a la existencia de fases magnéticas no convencionales, como los estados RVB, para este tipo de red (al menos levemente fuera de banda semillena). Por otro lado, el modelo presenta una notable asimetría en el dopaje con huecos y electrones, con un antiferromagnetismo robusto frente al dopaje con huecos.

¹ T. Li, P. Wölfle, y P. J. Hirschfeld, Phys. Rev. B40, 6817 (1989); R. Frésard y P. Wölfle, Int. J. Mod. Phys. B6, 685 (1992); R. Frésard, M. Dzierzawa, y P. Wölfle, Europhys. Lett. 15, 325 (1991); R. Frésard y P. Wölfle, J. Phys.: Condens. Matter 4, 3625 (1992).

² H. R. Krishnamurthy, C. Jayaprakash, S. Sarker, y W. Wenzel, Phys. Rev. Lett. 64, 950 (1990).

³ C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy, S. Sarker, y W. Wenzel, Europhys. Lett. 15, 625 (1991).

⁴ C. J. Gazza, A.E. Trumper y H.A. Ceccatto, J.Phys.: Condens. Matter 6 L625 (1994).

⁵ C. J. Gazza, A.E. Trumper y H.A. Ceccatto, Anales de AFA (1994).