

El modelo de Hubbard en redes no-bipartitas

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

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

e-mail: adrian@ifir.edu.ar

Estudiamos las propiedades del estado fundamental del modelo de Hubbard sobre la red triangular mediante la técnica de bosones esclavos. A diferencia de lo que ocurre en una red cuadrada, los efectos combinados de correlación fuerte y frustración en esta red no-bipartita producen un diagrama de fases muy rico, incluyendo una transición metal-aislador. A banda semillena, y para valores crecientes de la repulsión en el sitio U , el estado fundamental presenta: a) una fase paramagnética metálica, b) una fase tipo onda de espín lineal conmensurada semimetálica, y c) una fase espiral conmensurada aislante (correspondiente al orden antiferromagnético de tres subredes clásico). La técnica de bosones esclavos no predice la existencia de fases espirales inconmensuradas como las halladas en estudios previos de este modelo mediante la aproximación de Hartree-Fock.

El modelo de Hubbard¹, el prototipo de sistemas de electrones fuertemente correlacionados, ha recibido particular atención en los últimos años en conexión con nuevos mecanismos para explicar las altas T_c observadas en los compuestos cerámicos². Problemas relacionados a este modelo, tales como la transición metal-aislador³ y las propiedades de antiferromagnetos (AFM) cuánticos levemente dopados, han sido también temas de intenso estudio. En una red cuadrada, a banda semillena se sabe que el modelo de Hubbard es un aislador AFM para todos los valores de la repulsión U . Sólo fuera de medio llenado aparecen estructuras interesantes en las propiedades magnéticas del estado fundamental, tales como fases espirales inconmensuradas⁴⁻⁶. En cambio, sobre redes no-bipartitas como la triangular, aún a banda semillena el modelo presenta una rica estructura en su estado fundamental^{7,8}, incluyendo una fase paramagnética, diferentes órdenes magnéticos de largo alcance, y una transición metal-aislador. Cabe recordar que la red triangular sirvió en el pasado como banco de pruebas para la búsqueda de fases no-convencionales de AFM frustrados, tales como estados RVB⁹ y la idea asociada de "líquido

de espín"¹⁰. Estos estados han sido propuestos como fase precursora de la superconductividad en los materiales cerámicos.

Todos los fenómenos arriba mencionados están originados en la combinación de fuerte correlación electrónica y frustración, efectos que aparecen naturalmente ligados en el modelo de Hubbard sobre la red triangular,

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

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. Este modelo fue previamente estudiado en^{7,8} usando la aproximación de Hartree-Fock (HF). En este trabajo reexaminamos las propiedades de su estado fundamental utilizando la aproximación de bosones esclavos (BE) invariante rotacional¹¹. Para ello representamos el espinor $\mathbf{c}_i \equiv (c_{i\uparrow}, c_{i\downarrow})$ como $\mathbf{c}_i = Z_i \mathbf{f}_i$, con Z_i una matriz 2×2 que describe el cambio de ocupación en el sitio cuando los fermiones se mueven. El espinor fermiónico $\mathbf{f}_i \equiv (f_{i\uparrow}, f_{i\downarrow})$ se hace cargo de la estadística de Fermi en cada salto (ver¹¹ para la definición de Z_i y otros detalles). 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 $SU(2)$.

A fin de describir estructuras magnéticas espirales caracterizadas por un vector de onda \vec{Q} , tales como las que aparecen en una red triangular, lo más conveniente 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 reemplazar las componentes de las matrices Z_i por valores independientes del sitio. Dado que en dicho sistema no hay componentes de espín transversales, 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. Un multiplicador de Lagrange $\lambda^{(1)}$ asegura que estos valores sumen 1, lo cual garantiza, en promedio, que el sector bosónico del espacio de estados no contenga configuraciones no-físicas.

La diagonalización en el espacio de los momentos del Hamiltoniano de fermiones efectivo arroja la siguiente relación de dispersión:

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

donde $A_{\vec{k},\sigma} = t\alpha_\sigma^2 \gamma_{\vec{k}}^c + \lambda_0^{(2)} + \sigma \lambda_3^{(2)}$ y $B_{\vec{k}} = t\gamma_{\vec{k}}^s \alpha_\uparrow \alpha_\downarrow$, con $\gamma_{\vec{k}}^c = 1/2 \sum_{\delta,\sigma} \cos(\vec{k} + \sigma \vec{Q}/2) \cdot \vec{\delta}$ y $\gamma_{\vec{k}}^s = 1/2 \sum_{\delta,\sigma} \sigma \cos(\vec{k} + \sigma \vec{Q}/2) \cdot \vec{\delta}$. Hemos llamado $\lambda_0^{(2)}$ y $\lambda_3^{(2)}$ a los multiplicadores de Lagrange que aseguran la equivalencia de calcular los valores medios de la densidad de partícula y de la componente z del espín usando alternativamente Z o f_i . La minimización de la energía del estado fundamental con respecto a $\lambda_0^{(2)}$, $\lambda_3^{(2)}$, $\lambda^{(1)}$, e , p_σ , y d produce siete ecuaciones de consistencia que se resuelven numéricamente. Usamos un método iterativo, que en cada paso ajusta el potencial químico μ para fijar la densidad de partículas $n = 1$ y determina la correspondiente superficie de Fermi. Estos cálculos se realizan para diferentes \vec{Q} 's, de manera de determinar la estruc-

tura magnética correcta del estado fundamental como función de U .

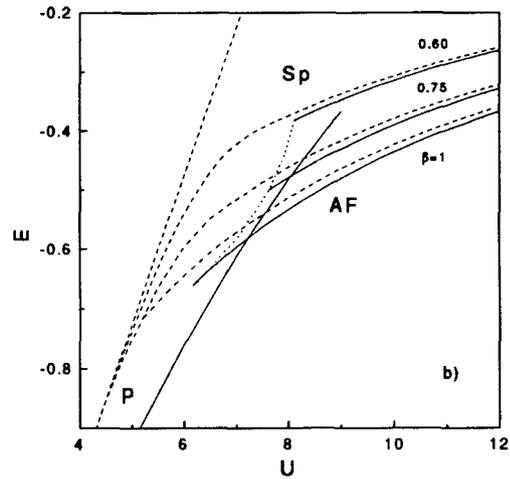
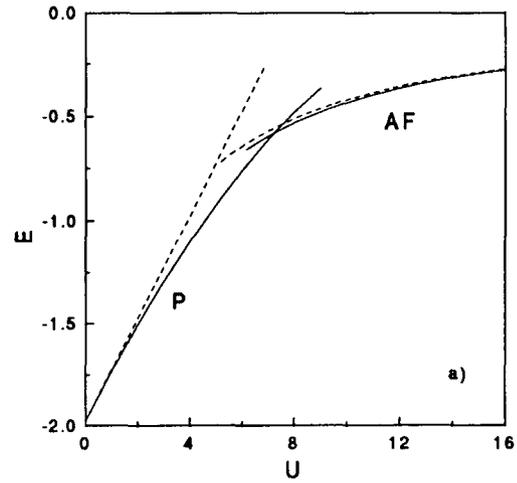


FIG. 1. Energía del estado fundamental E como función de la repulsión en el sitio U . Las líneas llenas son los resultados de la técnica de bosones esclavos; las líneas de trazos corresponden a la aproximación de Hartree-Fock. (a) P: Solución paramagnética; AF: solución antiferromagnética con vector de onda magnético $\vec{Q}_0 = (4\pi/3a, 0)$. (b) Sp: solución espiral incommensurada con vectores de onda magnéticos $\beta \vec{Q}_0$, para $\beta = 0.60$ y 0.75 . La línea de puntos señala la región en que se abre un "gap" en las soluciones espirales.

Antes de presentar los resultados obtenidos con el método de BE discutiremos brevemente los resultados que emergen de la aproximación de HF⁷. A $T = 0$, para valores de U/t chicos el sistema es un metal paramagnético.

A $U_{P \rightarrow Sp} \simeq 3.98t$ se produce una transición hacia un estado semimetálico con una estructura espiral incommensurada. Cuando se consideran solamente estados espirales, para un valor mayor $U_{Sp \rightarrow AF} \simeq 5.27t$ hay una transición de primer orden desde el metal con estructura magnética espiral hacia un aislador. El estado aislador presenta el orden de Néel de tres subredes característico de una red triangular AFM clásica, que describimos con un vector de onda commensurado $\vec{Q}_0 = (4\pi/3a, 0)$. En la región entre $U_{P \rightarrow Sp}$ y $U_{Sp \rightarrow AF}$ el vector \vec{Q} cambia continuamente con U , pasando de $\vec{Q}_1 \simeq 0.58\vec{Q}_0$ en $U_{P \rightarrow Sp}$, a $\vec{Q}_2 \simeq 0.88\vec{Q}_0$ para $U_{Sp \rightarrow AF}$. Justo en este punto hay un repentino salto a $\vec{Q}_0 = (4\pi/3a, 0)$, correspondiente a las tres subredes ordenadas antiferromagnéticamente.

La aproximación de BE produce los resultados que se muestran en la Fig. 1, correspondientes a la energía del estado fundamental como función de U . A fin de comparar presentamos también los resultados de HF. Como era de esperar, no hay mucha diferencia entre las predicciones para las fases magnéticas, mientras que la energía para la fase paramagnética baja considerablemente en la aproximación de BE. La ganancia de energía en esta fase borra la posibilidad de tener orden espiral incommensurado, tal como el obtenido en el diagrama de fase de HF. De esta forma, de acuerdo con la técnica de BE el sistema iría directamente de la fase paramagnética a la fase aisladora AFM a través de una transición de primer orden para $U_{P \rightarrow AF} \simeq 7.23t$ (Fig. 1a)). Las estructuras magnéticas incommensuradas aparecen solo como estados metaestables (Fig. 1b)). Si la fase paramagnética se continúa dentro de la región de estabilidad AFM, al igual que en el caso de la red cuadrada hay una transición de Mott en $U_{Mott} = 8|\epsilon_0| \simeq 15.813$, donde ϵ_0 es la energía de "tight-binding" de la red triangular.

En un posterior trabajo⁸ Jayaprakash *et al.* consideraron la posibilidad de que una onda de densidad de espín lineal (ODEL) compita en energía con los estados espirales, encontrando que un orden lineal commensurado con vector de onda $\vec{Q} = (\pi, 0)$ aparece entre el estado espiral y el AFM. Para $U_{Sp \rightarrow L} \simeq 4.45t$ el orden

espiral con $\vec{Q} \simeq 0.66\vec{Q}_0$ se hace inestable y el sistema sufre una transición de primer orden hacia un estado semiconductor con la magnetización polarizada linealmente. Este estado es el fundamental para $U_{Sp \rightarrow L} < U < U_{L \rightarrow AF} \simeq 6.2t$. En este punto hay una nueva transición de primer orden hacia el estado AFM de tres subredes.

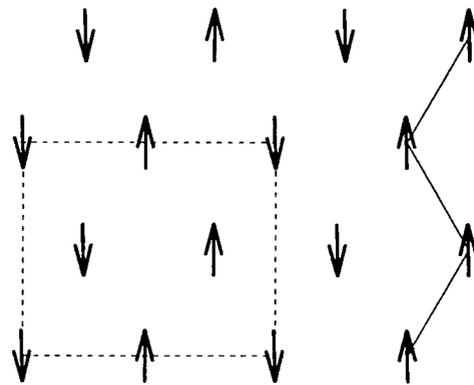


FIG. 2. Patrón de magnetización en la onda de densidad de espín lineal. La línea de trazos muestra la celda unitaria de cuatro sitios. Advierta los caminos ferromagnéticos zigzagueantes.

El estado ODEL se hace más favorable con respecto al orden espiral debido a los caminos ferromagnéticos que presenta (Fig. 2). Estos caminos contribuyen a disminuir la energía cinética, con lo cual, para el rango de U mencionado, se supera la pérdida en energía magnética con respecto a la fase espiral. Resulta plausible que este mecanismo pueda estabilizar la fase ODEL en la aproximación de BE también. Para buscar soluciones a las ecuaciones de consistencia teniendo en cuenta esta simetría se hace necesario diagonalizar una matriz 4×4 en cada \vec{k} perteneciente a la superficie de Fermi, lo cual demanda un mayor esfuerzo computacional. Se encontró que para un pequeño rango $U_{P \rightarrow L} \simeq 6.9t < U < U_{L \rightarrow AF} \simeq 7.8t$ el ODEL se transforma en estado fundamental (Fig. 3). Notar que este estado tiene menor energía que el paramagnético debido a su estructura magnética, y menor energía que el orden AFM debido a su energía cinética. En la Fig. 3 incluimos un gráfico mostrando como la ODEL interpola entre estas dos fases. Además, concordando con las predicciones de HF⁸, este estado es semiconductor en su región de estabilidad.

En resumen, hemos aplicado la aproximación de BE invariante rotacional al estudio del modelo de Hubbard, en banda semi-llena, sobre una red triangular. Para valores crecientes de U , el estado fundamental presenta una fase metálica paramagnética, una fase semimetalica con un orden conmensurado dado por una ODEL, y la fase clásica AFM de tres subredes. A diferencia de la aproximación de HF, la técnica de BE nunca predice una fase metálica con una estructura espiral inconmensurada como la más estable. La existencia de dichas fases en HF parece deberse a la pobre caracterización del estado paramagnético en esta aproximación. Alternativamente, podría argumentarse que la técnica de BE baja demasiado la energía paramagnética, especialmente debido a los denominadores *ad hoc* que requiere la solución de campo medio para recobrar el límite $U = 0$ ¹¹. Resultan necesarias aproximaciones más confiables para discernir esta cuestión.

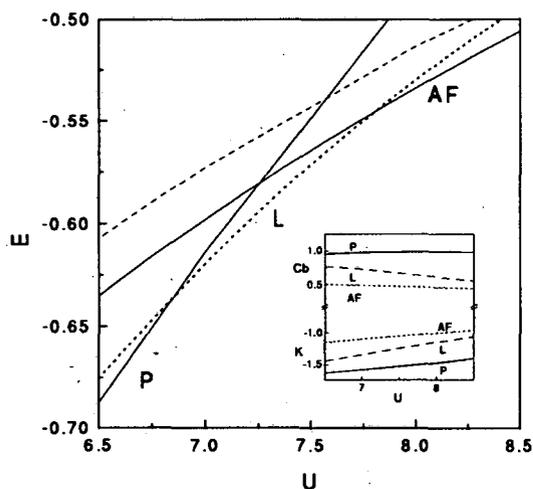


FIG. 3. Energía del estado fundamental E como función de U . P: Solución paramagnética; AF: Solución antiferromagnética; L: Onda de densidad de espín lineal. La línea de trazos es la solución AF de Hartree-Fock. Inserción: Energías cinética (K) y de repulsión (Cb) en las distintas fases.

Agradecimientos

HAC agradece a la Fundación Antorchas por el financiamiento parcial de este trabajo.

- ¹ J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A **276**, 238 (1963); **281**, 401 (1964).
- ² T. M. Rice, Z. Phys. **B67**, 141 (1987).
- ³ N. F. Mott, *Metal Insulator Transitions* (Taylor and Francis, London, 1974).
- ⁴ B. I. Shraiman and E. D. Siggia, Phys. Rev. Lett. **62**, 1564 (1989).
- ⁵ H. J. Schultz, Phys. Rev. Lett. **64**, 1445 (1990).
- ⁶ R. Frésard, M. Dzierzawa, and P. Wölfle, Europhys. Lett. **15**, 325 (1991); R. Frésard and P. Wölfle, J. Phys.: Condens. Matter **4**, 3625 (1992).
- ⁷ H. R. Krishnamurthy, C. Jayaprakash, S. Sarker, and W. Wenzel, Phys. Rev. Lett. **64**, 950 (1990).
- ⁸ C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy, S. Sarker, and W. Wenzel, Europhys. Lett. **15**, 625 (1991).
- ⁹ P. W. Anderson, Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973).
- ¹⁰ P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- ¹¹ T. Li, P. Wölfle, and P. J. Hirschfeld, Phys. Rev. **B40**, 6817 (1989); R. Frésard and P. Wölfle, Int. J. Mod. Phys. **B6**, 685 (1992).