

# FORMALISMO LAGRANGIANO DEL MODELO DE HUBBARD GENERALIZADO PARA UN ESTADO SUPERCONDUCTOR

C.L. Abecasis<sup>1</sup>, C.E. Repetto<sup>1,2\*</sup> y O.P. Zandron<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura – UNR

<sup>2</sup> Instituto de Física Rosario – CONICET

27 de Febrero 210 bis - (2000) -Rosario - Argentina

e-mail: repetto@ifir.edu.ar

Se considera la expansión no perturbativa para  $N$  grande aplicada al modelo de Hubbard generalizado que describe  $N$  bandas degeneradas correlacionadas. Nuestros resultados, obtenidos en el marco del formalismo Lagrangiano para el caso del estado normal, se extienden por medio de la notación de Nambu al estado superconductor. El propósito es obtener la corrección  $1/N$  de los propagadores bosónico y fermiónico renormalizados cuando se considera un estado con condensación de pares de Cooper. Con este objetivo, se obtiene la diagramática de Feynman estandar, y a partir de ésta las autoenergías bosónica y fermiónica.

The non perturbative large  $N$  expansion applied to the generalized Hubbard model describing  $N$  correlated degenerated bands is considered. Our previous results obtained in the framework of the Lagrangian formalism for the normal-state case, are extended by the Nambu notation to the superconducting state. Our purpose is to obtain the  $1/N$  corrections to the renormalized boson and fermion propagator when a state with Cooper-pair condensation is considered. The standard Feynman diagrammatic and the boson and fermionic self-energy are obtained.

## I. INTRODUCCIÓN

Dado que la representación natural para tratar los efectos de correlación electrónica es la de los operadores de Hubbard<sup>1</sup>, se ha desarrollado un formalismo Lagrangiano que describe la dinámica del modelo t-J a través de una familia de Lagrangianos de primer orden escritos en términos de estos operadores (variables de campo) los cuales representan las excitaciones físicas reales y son tratados como objetos indivisibles que verifican un álgebra graduada  $\text{spl}(2,1)^{2,3}$ . La estructura de vínculos se halló usando el método simpléctico de Faddeev-Jackiw (FJ), del cual resultan todos de segunda clase<sup>4,5</sup>. El Lagrangiano de partida es:

$$L = a_{\alpha\beta}(X)\dot{X}^{\alpha\beta} - (H(X) + \lambda^a \Omega_a) \quad (1.1)$$

donde  $H(X)$  es el Hamiltoniano del modelo t-J:

$$H(X) = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} (X_i^{+-} X_j^{-+} - X_i^{++} X_j^{--}) - \mu \sum_{i\sigma} X_i^{\sigma\sigma} \quad (1.2)$$

con  $\lambda^a$  multiplicadores de Lagrange para los vínculos  $\Omega_a$ ,  $\mu$  el potencial químico y  $t_{ij}$  y  $J_{ij}$  representan el salto y el intercambio entre los sitios  $i$  y  $j$ .

Con el algoritmo de FJ se obtiene el siguiente conjunto de coeficientes y vínculos<sup>4</sup>:

$$a_{i0\sigma} = \frac{i}{2X_i^{00}} X_i^{\sigma 0}, \quad a_{i\sigma 0} = \frac{i}{2X_i^{00}} X_i^{0\sigma} \quad (1.3)$$

$$\Omega_i^{00} = X_i^{00} + X_i^{++} + X_i^{--} - 1 = 0 \quad (1.4)$$

$$\Omega_i^{\sigma\sigma'} = X_i^{\sigma\sigma'} - \frac{X_i^{\sigma 0} X_i^{0\sigma'}}{X_i^{00}} = 0 \quad (1.5)$$

Los coeficientes bosónicos del Lagrangiano son todos cero. En esta configuración los bosones están totalmente fijos, y la dinámica recae sólo en los fermiones<sup>4</sup>. Entonces, se está en condiciones de construir la función de partición  $Z$ :

$$Z = \int DX_i^{\alpha\beta} \delta(\Omega_i^{00}) \delta(\Omega_i^{\sigma\sigma'}) (\text{sdet } M_{AB})^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left(i \int dt L(X, \dot{X})\right) \quad (1.6)$$

A partir de esta ecuación, los cuatro vínculos bosónicos de (1.5) pueden ser explícitamente usados en la integración utilizando la función delta. Transformando al espacio Euclídeo y luego de algunas consideraciones algebraicas, se puede definir el Lagrangiano efectivo  $L_{\text{eff}}^E$ :

$$L_{\text{eff}}^E(X, \dot{X}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} \frac{1}{X_i^{00}} (\dot{X}_i^{0\sigma} X_i^{\sigma 0} + \dot{X}_i^{\sigma 0} X_i^{0\sigma}) + \sum_{i,j,\sigma} (t_{ij} - \mu \delta_{ij}) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum_i \lambda_i \left( X_i^{00} - \frac{\rho}{X_i^{00}} - 1 \right) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{J_{ij}}{X_i^{00} X_j^{00}} (X_i^{+0} X_i^{0-} X_j^{-0} X_j^{0+} + X_i^{+0} X_j^{0-} X_j^{-0} X_i^{0+}) \quad (1.7)$$

donde  $\rho = X^{0+} X^{+0} + X^{0-} X^{-0}$ .

Debido a la dependencia del superdeterminante de (1.6) con los campos  $(\text{sdet } M_{AB})^{\frac{1}{2}} = X_i^{00}$ , se introducen adecuados campos fantasmas con el propósito de subirlo a la exponencial de  $Z$ .

Se utilizará la técnica no perturbativa "large- $N$ " en la descripción del modelo de Hubbard generalizado para  $N$  bandas degeneradas correlacionadas en el límite  $U$  infinito ( $J=0$ )<sup>6</sup>. Se comienza ajustando la ecuación de  $Z$  para que el caso  $N=2$  esté en equivalencia con el

modelo de Hubbard de una banda. Así, se expande de la ocupación simple a  $N$  grande, y el índice  $\sigma$  toma  $p$  valores corriendo de 1 a  $N$ , donde  $N$  es el número de grados de libertad electrónicos por sitio, y  $1/N$  puede ser considerado un parámetro pequeño. La nueva supermatriz  $M_{AB}$  queda subdividida en cuatro matrices (bosón-bosón  $2 \times 2$ , bosón-fermión  $2 \times 2N$ , fermión-bosón  $2N \times 2$  y fermión-fermión  $2N \times 2N$ ).

Los campos bosónicos se escriben como suma de un término estático y fluctuaciones dinámicas:

$$\begin{aligned} X_i^{00} &= Nr_0(1 + \delta R_i) \\ \lambda_i &= \lambda_0 + \delta \lambda_i \end{aligned} \quad (1.8)$$

mientras que para los campos fermiónicos se realiza el siguiente cambio de variables:

$$f_{ip}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{Nr_0}} X_i^{p0}, \quad f_{ip} = \frac{1}{\sqrt{Nr_0}} X_i^{0p} \quad (1.9)$$

A partir de estos nuevos campos se reescriben los vínculos anteriores y la supermatriz  $M_{AB}$

$$Nr_0(1 + \delta R_i) + \sum_p \frac{f_{ip}^\dagger f_{ip}}{(1 + \delta R_i)} - \frac{N}{2} = 0 \quad (1.10)$$

El Lagrangiano Euclideanizado  $L^E$  se escribe

$$L^E = L_{eff}^E + L_{ghost} \quad (1.11)$$

El Lagrangiano de los campos fantasmas se obtiene a partir de la exponenciación, como ya se mencionó, del  $(\text{sdet } M_{AB})^{\frac{1}{2}} = X_i^{00} = Nr_0 / (-1 + \delta R)^N$ , cuyo denominador se sube con campos fantasmas bosónicos complejos  $Z_p$  (propagantes) y el numerador con campos fantasmas fermiónicos  $\theta$  (variables de Grassman) que van a la norma de la integral de camino.

Para tener en cuenta todos los términos de orden  $1/N$  es suficiente retener términos hasta orden  $\delta R_i^2$ ; en consecuencia, el Lagrangiano Euclideanizado se escribe como:

$$\begin{aligned} L^E &= -\frac{1}{2} \sum_{i,p} (f_{ip}^\dagger f_{ip} + f_{ip} f_{ip}^\dagger) (1 - \delta R_i + \delta R_i^2) + \\ &+ r_0 \sum_{i,j,p} t_{ij} f_{ip}^\dagger f_{jp} - (\mu - \lambda_0) \sum_{i,p} f_{ip}^\dagger f_{ip} (1 - \delta R_i + \delta R_i^2) + \\ &+ Nr_0 \sum_i \delta \lambda_i \delta R_i + \sum_{i,p} f_{ip}^\dagger f_{ip} (1 - \delta R_i + \delta R_i^2) \delta \lambda_i - \\ &- \sum_p Z_p^\dagger (1 - \delta R_i + \delta R_i^2) Z_p \end{aligned} \quad (1.12)$$

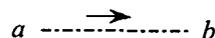
## II. REGLAS DE FEYNMAN Y DIAGRAMÁTICA

Escribiendo (1.12) en el espacio de los momentos, las partes bilineales dan lugar a los propagadores de los campos, mientras que las partes restantes representan vértices.

De los términos bilineales bosónicos, se obtiene el propagador bosónico libre  $D_{(0)}$  asociado al campo bosónico de dos componentes  $\delta X^a = (\delta R, \delta \lambda)$ :

$$(D_{(0)ab})^{-1}(q, \omega_n) = \begin{pmatrix} 0 & 1/Nr_0 \\ 1/Nr_0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

donde  $q$  es el momento y  $\omega_n$  es la frecuencia de Matsubara del campo bosónico, y está representado por una línea que conecta dos puntos genéricos  $a$  y  $b$ :



De la parte bilineal fermiónica del Lagrangiano  $L^E$  se obtiene el propagador fermiónico libre  $G_{(0)}$ :

$$G_{(0)pp'}(k, \nu_n) = -\frac{\delta_{pp'}}{i\nu_n - (\epsilon_k - \mu + \lambda_0)} \quad (2.2)$$

donde  $k$  es el momento,  $\nu_n$  es la frecuencia de Matsubara fermiónica,  $\epsilon_k = -r_0 t \sum_l \exp(-il \cdot k)$ ; e  $l$  es el vector de la red. Este propagador está representado por una línea que conecta dos puntos genéricos  $p$  y  $p'$ :



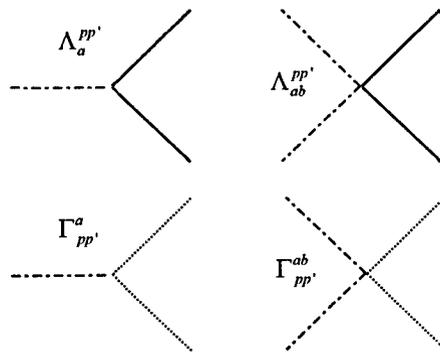
De igual manera se define el propagador libre del campo fantasma  $Z_p$ :

$$D_{pp'} = -\delta_{pp'} \quad (2.3)$$

y se lo representa por la siguiente línea:



De las piezas remanentes se obtienen los vértices de tres patas (1 bosón-2 fermiones)  $\Lambda_a^{pp'}$ , de cuatro (2 bosones-2 fermiones)  $\Lambda_{ab}^{pp'}$  y los vértices de tres y cuatro patas con los campos fantasmas  $\Gamma_{pp'}^a$  y  $\Gamma_{pp'}^{ab}$ :

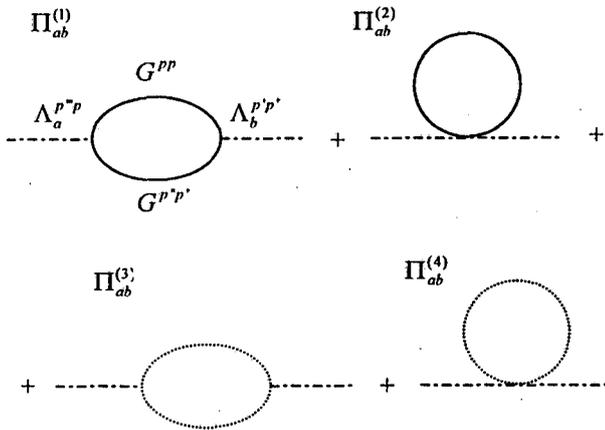


Las expresiones correspondientes a estos diagramas, permiten calcular la corrección  $1/N$  a la autoenergía bosónica, la que a su vez, usando la ecuación de Dyson, da el propagador bosónico vestido:

$$(D_{ab(\nu)})^{-1} = (D_{0ab})^{-1} - \Pi_{ab}^{ren} \quad (2.4)$$

De la siguiente ecuación, en la que los campos fantasmas de  $\Pi^3$  y  $\Pi^4$  cancelan los infinitos de  $\Pi^1$  y  $\Pi^2$ , se obtiene la autoenergía bosónica renormalizada:

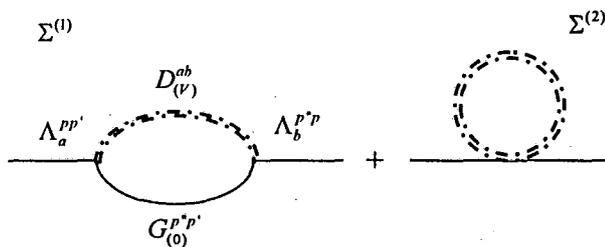
$$\Pi_{ab} = \Pi_{ab}^1(\Lambda_a^{p^*p}, G^{pp'}, \Lambda_b^{p'p^*}, G^{p^*p''}) + \Pi_{ab}^2(\Lambda_{ab}^{pp'}, G^{pp'}) + \Pi_{RR}^3(\Gamma_R^{p^*p}, D^{pp'}, \Lambda_R^{p'p^*}, D^{p^*p''}) + \Pi_{RR}^4(\Gamma_{ab}^{pp'}, D^{pp'}) \quad (2.5)$$



$$\Pi_{ab}^{ren} = \Pi_{ab}^{(1)ren} + \Pi_{ab}^{(2)ren} \quad (2.6)$$

El propagador bosónico renormalizado  $D_{ab(\nu)}$  se utilizará en la corrección  $1/N$  a la autoenergía fermiónica  $\Sigma^6$ :

$$\Sigma = \Sigma^{(1)}(\Lambda_a^{pp'}, D_{(\nu)}^{ab}, \Lambda_b^{p^*p}, G^{p^*p'}) + \Sigma^{(2)}(\Lambda_{ab}^{pp'}, D_{(\nu)}^{ab}) \quad (2.7)$$



la cual permitirá vestir el propagador fermiónico libre  $\hat{G}_{(0)}$ , usando nuevamente la ecuación de Dyson.

Es importante mencionar que la diagramática dada anteriormente fue chequeada, por cálculo numérico, obteniéndose muy buen acuerdo con resultados previos.

### III. NOTACIÓN DE NAMBU. ESTADO SUPERCONDUCTOR

El modelo más simple que permite la descripción del estado superconductor está dado por el formalismo Hamiltoniano reducido de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS)<sup>7,8</sup>, cuya característica más importante es la condensación de pares de Cooper. El estado superconductor es introducido en el formalismo utilizando la notación matricial de Nambu<sup>9</sup>. Cuando se considera el estado superconductor, el propagador fermiónico renormalizado  $\hat{G}_{(\nu)}$  es una matriz, que esquemáticamente se escribe:

$$\hat{G}_{(\nu)} = \begin{pmatrix} \Rightarrow\Rightarrow & \Leftarrow\Leftarrow \\ \Rightarrow\Leftarrow & \Leftarrow\Rightarrow \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

donde los elementos diagonales (flechas apuntando con igual sentido) son los propagadores fermiónicos normales, mientras que los elementos no diagonales (flechas apuntando con sentido opuesto) son los propagadores fermiónicos anómalos.

Al introducir la notación matricial de Nambu, se define el operador de campo fermiónico de dos componentes:

$$\Psi_{im} = \begin{pmatrix} f_{im\uparrow} \\ f_{im\downarrow} \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

Así, puede reescribirse el Lagrangiano  $L^E$  en esta nueva notación, del cual se obtendrán los propagadores libres fermiónicos y bosónicos del modelo:

$$L_{eff}^E = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{m=1}^{N/2} [\hat{\Psi}_{im}^\dagger \hat{\Psi}_{im} - \Psi_{im}^\dagger \hat{\Psi}_{im}] (1 - \delta R_i + \delta R_i^2) + \sum_{i,j} \sum_{m=1}^{N/2} (r_{0ij} - \mu \delta_{ij}) \Psi_{im}^\dagger \hat{\tau}_3 \Psi_{jm} (1 - \delta R_i + \delta R_i^2) + N r_0 \sum_i \delta \lambda_i \delta R_i + \sum_i \sum_{m=1}^{N/2} \Psi_{im}^\dagger \hat{\tau}_3 \Psi_{jm} (1 - \delta R_i + \delta R_i^2) \delta \lambda_i \quad (3.3)$$

donde se llamó  $\mu = \mu' - \lambda_0$ .

El sector bosónico se mantiene sin cambios, mientras que el sector fermiónico fue escrito usando las matrices de Pauli  $\hat{I}$  y  $\hat{\tau}_3$  (diagonales), describiendo sólo estados normales. Es importante aclarar que en el momento de considerar los estados superconductores se deben introducir las cuatro matrices de Pauli.

### IV. DIAGRAMÁTICA EN LA NOTACIÓN DE NAMBU

Se examinará la estructura del modelo a un loop para calcular las correcciones  $1/N$  a los propagadores.

Se escribe la parte fermiónica del Lagrangiano  $L^E$  en el espacio de los momentos para obtener el propagador fermiónico libre. De los términos bilineales en los campos se extrae el propagador fermiónico libre  $\hat{G}_{(0)}$  a partir de:

$$(\hat{G}_{(0)})^{-1} = -[iv_n \hat{I} - (\epsilon_k - \mu) \hat{\tau}_3] = -iv_n \hat{I} + \Delta_k \hat{\tau}_3 \quad (4.1)$$

$$\hat{G}_{(0)}(k, iv_n) = - \begin{pmatrix} \frac{1}{iv_n - \Delta_k} & 0 \\ 0 & \frac{1}{iv_n + \Delta_k} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

Los vértices de tres (1 bosón-2 fermiones) y cuatro (2 bosones-2 fermiones) patas resultan:

$$\Lambda_a^{mm'} = (-1) \left( \frac{i}{2} (v_n + v'_n) \hat{I} + \mu \hat{\tau}_3, \hat{\tau}_3 \right) \delta^{mm'} \quad (4.3)$$

$$\Lambda_{ab}^{mm'} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i(v_n + v'_n) \hat{I} + \mu \hat{\tau}_3 & \hat{\tau}_3 \\ \hat{\tau}_3 & 0 \end{pmatrix} \delta^{mm'}$$

Con estas expresiones se calcula la corrección  $1/N$  a la autoenergía fermiónica sólo para los estados normales en términos de las matrices de Pauli:

$$\hat{\Sigma}(k, iv_n) = -iv_n [1 - Z(k, iv_n)] \hat{I} + \chi(k, iv_n) \hat{\tau}_3 \quad (4.4)$$

A partir del propagador fermiónico libre, se obtiene el vestido utilizando la ecuación de Dyson:

$$\left(\hat{G}_{(v)}\right)^{-1}(k, iv_n) = \left(\hat{G}_{(0)}\right)^{-1}(k, iv_n) - \hat{\Sigma}(k, iv_n) \quad (4.5)$$

Para incorporar el estado superconductor, como se dijo previamente, se incorporan todas las matrices de Pauli<sup>10</sup>. A diferencia de (4.4) se asume que la forma más general de escribir la autoenergía fermiónica total es:

$$\hat{\Sigma}(k, iv_n) = -iv_n [1 - Z(k, iv_n)] \hat{I} + \chi(k, iv_n) \hat{\tau}_3 + \phi(k, iv_n) \hat{\tau}_1 + \bar{\phi}(k, iv_n) \hat{\tau}_2 \quad (4.6)$$

donde  $Z, \chi, \phi, \bar{\phi}$  son cuatro funciones arbitrarias independientes.

En consecuencia, cuando el estado superconductor es tenido en cuenta, el propagador fermiónico vestido (anómalo) también está determinado por la ecuación de Dyson (donde  $\hat{\Sigma}$  está dada en (4.6)), de esta forma:

$$\left(\hat{G}_{(v)}\right)^{-1}(k, iv_n) = -iv_n Z \hat{I} - (\chi - \Delta_k) \hat{\tau}_3 - \phi(k, iv_n) \hat{\tau}_1 - \bar{\phi}(k, iv_n) \hat{\tau}_2 \quad (4.7)$$

Esta matriz puede invertirse, resultando:

$$\hat{G}_{(v)}(k, iv_n) = \frac{1}{\det\left(\hat{G}_{(v)}\right)^{-1}} \left[ -iv_n Z \hat{I} + (\chi - \Delta_k) \hat{\tau}_3 + \phi(k, iv_n) \hat{\tau}_1 + \bar{\phi}(k, iv_n) \hat{\tau}_2 \right] \quad (4.8)$$

Las funciones  $Z$  y  $\chi$  se determinan a partir del estado normal. La única función que se determina a partir del estado superconductor es  $\phi$ . Además la solución más simple es considerar  $\phi = 0$  y  $\bar{\phi} \neq 0$  lo que corresponde a fijar el factor de fase, lo cual es posible puesto que los observables físicos no pueden depender de dicha fase.

## V. CONCLUSIONES

Como ya se comentó, el aspecto más importante a remarcar es que la teoría BCS es el modelo apto para la descripción del estado superconductor. En el marco de esta teoría los pares de estados  $(k \uparrow, -k \downarrow)$  pueden ocuparse coherentemente dando lugar a la condensación de pares de Cooper. La amplitud de pares de Cooper  $\langle c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \rangle$ , la cual es cero en el estado normal, toma un valor finito a temperaturas por debajo de la  $T_c$ .

En trabajos previos<sup>5</sup> fue estudiada una familia de Lagrangianos que mapea en la representación bosón esclavo. En el caso del estado normal se desarrolló el formalismo no-perturbativo para el modelo de Hubbard generalizado utilizando una expansión  $N$  grande en el límite  $U$  infinito. Se construyó la diagramática de Feynman para calcular la corrección  $1/N$  del propagador bosónico, adecuada para calcular la corrección  $1/N$  de la autoenergía fermiónica.

Utilizando la notación matricial de Nambu se reescribió el Lagrangiano del modelo y se construyó la diagramática de Feynman teniendo en cuenta el estado

superconductor. Se evaluaron, para este caso, los propagadores, vértices y las cantidades físicas renormalizadas. Se encontró la ecuación para la autoenergía fermiónica total que debe ser resuelta autoconsistentemente. Así, fue dado el marco teórico adecuado para describir el estado superconductor en el formalismo Lagrangiano para el modelo de Hubbard generalizado.

En el caso del estado normal, la diagramática fue chequeada calculando numéricamente las funciones de correlación carga-carga y spin-spin sobre una red cuadrada con "hopping"  $t$  a primeros vecinos<sup>11</sup>. Además se chequeó el formalismo a través del cálculo de otras cantidades físicas relevantes<sup>12</sup>. Todos estos resultados están en acuerdo con resultados previos obtenidos por otros métodos<sup>13</sup>.

Finalmente, será estudiado el caso más general con  $J_{ij} \neq 0$  que incorpora el vértice fermiónico de cuatro patas.

## Referencias

- 1- A. Izyumov, Physics-Uspekhi, **40**, 445 (1997).
- 2- A. Foussats, A. Greco and O.S. Zandron, Annals of Physics (NY), **275**, 238 (1999).
- 3- P. Coleman, J. Hopkinson and C. Pépin, Phys Rev. B, **63**, 140411 (2001).
- 4- A. Foussats, A. Greco, C.E. Repetto, O.P. Zandron and O.S. Zandron, J. of Phys. A, **33**, 5849 (2000).
- 5- A. Foussats, C.E. Repetto, O.P. Zandron and O.S. Zandron, Int. J. of Theor. Phys., **41**, 1053 (2002); y bibliografía allí citada.
- 6- G. Kotliar and J. Liu, Phys. Review B, **38**, 5142 (1988); M. Grilli and G. Kotliar, Phys. Review Letters, **64**, 1170 (1990); A. Tandon, Z. Wang and G. Kotliar, Phys. Rev Lett., **83**, 2046 (1999).
- 7- J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, Phys. Rev., **108**, 1175 (1997).
- 8- J. Bardeen and M. Stephen, Phys. Rev. A, **136**, 1485 (1964).
- 9- Y. Nambu, Phys. Rev., **117**, 648 (2000).
- 10- P.B. Allen and B. Mitrović, "Theory of Superconducting Tc", Solid State Physics, **37**, Pags. 1-92, Academic Press Inc. (1982).
- 11- A. Foussats et al, Phys. Rev. B, **65**, 1951 (2002).
- 12- J. Merino et al, Phys. Rev. B, **66**, (2003)
- 13- Z. Wang, Int. J. of Mod. Phys. B, **6**, 155 (1992).