CUANTIFICACIÓN DEL MODELO t-J. FORMALISMO PERTURBATIVO Y DIAGRAMÁTICA.

A. FOUSSATS, A. GRECO, E. MANAVELLA, C.E. REPETTO* y O.P. ZANDRON*
Instituto de Física Rosario, Universidad Nacional de Rosario
Bvd. 27 de Febrero 210 Bis, 2000 Rosario, Argentina
e-mail: repetto@ifir.ifir.edu.ar - opz@ifir.ifir.edu.ar

En este trabajo se estudian dos maneras alternativas de definir el propagador fermiónico en el modelo t-J, en el marco de la teoría perturbativa. En la construcción del formalismo Lagrangiano se utilizaron operadores de Hubbard que verifican el álgebra graduada spl(2,1) como variables dinámicas de campo. Se estudia la estructura de vínculos del modelo usando el método Lagrangiano simpléctico de Faddeev-Jackiw, y se muestra que el Lagrangiano de primer orden para el modelo t-J es singular y no polinómico. Mediante el método de la integral de camino se construye la función generatriz de correlación y se define el Lagrangiano efectivo. Finalmente, se definen las reglas de Feynman y se construye la diagramática.

In the present work two alternative ways to define the fermionic propagator for the t-J model, in the framework of the perturbative theory, is discussed. In this approach, the Hubbard X-operators satisfying the graded algebra spl(2,1) as dynamical field variables are used. By means of the Faddeev-Jackiw simplectic formalism, the constraint structure of the model is found. It is shown that the first order Lagrangian for the t-J model is singular and non-polynomic. This model is also analysed in the context of the path integral formalism, and so the correlation generating functional and the effective Lagrangian are constructed. Finally, the Feynman rules and diagramatic are carried out.

I. INTRODUCCIÓN

En los últimos años existe un renovado interés en el estudio de las generalizaciones supersimétricas del modelo de Hubbard, teniendo en cuenta su relevancia en la descripción de sistemas electrónicos fuertemente correlacionados. Una completa revisión sobre sistemas electrónicos fuertemente correlacionados se da en Ref. [1].

El modelo de Hubbard basado en las superálgebras spl(2,1), ospl(2,2) y su(2,2) se formularon utilizando distintos puntos de vista[2–6].

El problema de sistemas electrónicos correlacionados se formuló también en el marco desacoplado de partículas esclavas. La teoría de bosón-esclavo es útil para valores grandes del dopaje cuando el sistema se hace superconductor[7,8]. Mientras que la teoría de fermión-esclavo es útil a muy bajo dopaje cuando la correlación antiferromagnética es importante[9,10]. En estas dos representaciones desacopladas de operadores de espín y de electrones se utilizan diferentes argumentos para eleminar la doble ocupación.

Por otro lado, y desde un punto de vista diferente, recientemente se construyó un formalismo basado en integrales funcionales utilizando estados coherentes generalizados[11,12].

Uno de los problemas cruciales que aparecen en estos modelos, es el tratamiento de la dinámica fermiónica en el espacio vinculado de Hilbert cuando se excluye la doble ocupación en los sitios de la red. En este caso, se puede obtener una representación conveniente en términos de partículas esclavas.[13]. Los modelos de partículas esclavas muestran una invariancia local, la cual se destruye en la aproximación de campo medio. Como se sabe, el vínculo de primera clase asociado a la invariancia local de medida dificulta el tratamiento del modelo en el marco de un formalismo de integral de camino.

Recientemente, hemos analizado el modelo t-J en el contexto del formalismo de la integral de camino[14]. Nuestro punto de partida es la construcción de una familia de Lagrangianos vinculados de primer orden. En nuestro tratamiento no se utiliza ninguna representación desacoplada, sino que las variables de campo son directamente los operadores de Hubbard, los cuales satisfacen el superálgebra spl(2,1). De esta manera, siempre se trabaja con las excitaciones físicas reales. Luego, utilizando técnicas de integral de camino, se halla la funcional generatriz de correlación y se construye el Lagrangiano efectivo del modelo.

Finalmente, en el marco del formalismo perturbativo se estudia la diagramática y se definen apropiados propagadores y vértices.

Como fue comentado recién, un problema interesante no completamente resuelto es estudiar la dinámica del sector fermiónico cuando se excluye la doble ocupación. En particular, el rol de los vínculos fermiónicos es crucial en la determinación del espacio de Hilbert vinculado y debe ser estudiado en profundidad. Esto conduce a distintas alternativas para definir el propagador fermiónico. Por lo tanto, el propósito principal de este trabajo es la discusión de las differentes alternativas que nos permiten definir el propagador fermiónico en el modelo t-J.

II. FUNCIÓN DE PARTICIÓN Y LAGRANGIANO EFECTIVO

En el modelo t-J, los tres posibles estados sobre un sitio de la red son $|\,\alpha> = |\,0>, |+>, |->$. Estos estados corresponden, respectivamente, a un sitio vacío, a un sitio ocupado con un electrón "spin-up" y a un sitio ocupado con un electrón "spin-down". La doble ocupación en el modelo t-J está prohibida. En términos de estos estados, los operadores de Hubbard se definen:

$$\hat{X}_i^{\alpha\beta} = |\, i\alpha >< i\beta\,| \ . \tag{2.1}$$

En la ecuación (2.1), cuando uno de los índices es cero y el otro diferente de cero el correspondiente operador es de tipo fermiónico, de otra manera es de tipo bosónico.

Los operadores de Hubbard $\hat{X}$ satisfacen las siguientes relaciones de conmutación graduadas:

$$[\hat{X}_i^{\alpha\beta}, \hat{X}_j^{\gamma\delta}]_{\pm} = \delta_{ij}(\delta^{\beta\gamma}\hat{X}_i^{\alpha\delta} \pm \delta^{\alpha\delta}\hat{X}_i^{\gamma\beta}) \ , \tag{2.2}$$

donde el signo $+$ se usa cuando ambos operadores son de tipo fermiónico, de otra manera corresponde el signo $-$; i, j denotan índices de sitio.

Siguiendo Ref. [14], nuestro punto de partida se basa en considerar la función de partición para el modelo t-J escrita en términos de los cuatro operadores de tipo bosónico (X^{+-} , X^{-+} , X^{++} , X^{--}) y de los cuatro operadores de tipo fermiónico (X^{0+} , X^{0-} , X^{+0} , X^{-0}) :

$$Z = \int \mathcal{D}X_i \ \delta(\Omega_{i1})\ \delta(\Omega_{i2})\ \delta(\Xi_{i3})\ \delta(\Xi_{i4})\ (sdet M_{AB})^{1/2} \cdot \\ exp\ i \int dt\ L(X,\dot{X}) \ , \tag{2.3}$$

donde $L(X,\dot{X})$ está dado por:

$$L(X,\dot{X}) = i\sum_i \frac{(1+\rho_i)u_i - 1}{(2-v_i)^2 - 4\rho_i - u_i^2}\left(X_i^{-+}\dot{X}_i^{+-} - \right. \\ \left. -X_i^{+-}\dot{X}_i^{-+}\right) + \frac{i}{2}\sum_{i,\sigma}\left(X_i^{\sigma 0}\dot{X}_i^{0\sigma} + X_i^{0\sigma}\dot{X}_i^{\sigma 0}\right) \\ -H_{t-J}(X) \ , \tag{2.4}$$

y $H_{t-J}(X)$ es el Hamiltoniano usual del modelo t-J:

$$H_{t-J} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}\ X_i^{\sigma 0}X_j^{0\sigma} + \frac{1}{4}\sum_{i,j,\sigma,\bar{\sigma}} J_{ij}\ X_i^{\sigma\bar{\sigma}}X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \\ -\frac{1}{4}\sum_{i,j,\sigma,\sigma'} J_{ij}\ X_i^{\sigma\sigma'}X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}'} \ . \tag{2.5}$$

En ec.(2.3), $sdet M_{AB}$ es el superdeterminante de la supermatriz simpléctica M_{AB} y los vínculos bosónicos y fermiónicos están respectivamente dados por:

$$\Omega_1 = X_i^{++} + X_i^{--} + \rho_i - 1 = 0 \ , \tag{2.6a}$$

$$\Omega_2 = X_i^{+-}X_i^{-+} + \frac{1}{4}(X_i^{++} - X_i^{--})^2 - \\ -[1 - \frac{1}{2}(X_i^{++} + X_i^{--})]^2 + \rho_i = 0 \ , \tag{2.6b}$$

$$\Xi_3 = X_i^{0+}X_i^{+-} - X_i^{0-}X_i^{++} = 0 \ , \tag{2.6c}$$

$$\Xi_4 = X_i^{+0}X_i^{-+} - X_i^{-0}X_i^{++} = 0 \ , \tag{2.6d}$$

donde se define $\rho_i = X_i^{0+}X_i^{+0} + X_i^{0-}X_i^{-0}$.

Los coeficientes del Lagrangiano, como así también los vínculos, se determinan usando el método simpléctico de Faddeev-Jackiw (FJ) con la condición de reproducir a nivel clásico los corchetes generalizados de FJ o corchetes graduados de Dirac del modelo t-J.

Ahora, es útil escribir los operadores de Hubbard de tipo bosónico en términos de las componentes reales S_α ($\alpha = 1,2,3$) de un campo vectorial $\mathbf{S}$:

$$X^{++} = \frac{1}{2s}\ (1-\rho)\,(s + S_3) \ , \\ X^{--} = \frac{1}{2s}\ (1-\rho)\,(s - S_3) \ , \\ X^{+-} = \frac{1}{2s}\ (1-\rho)\,(S_1 + iS_2) \ , \\ X^{-+} = \frac{1}{2s}\ (1-\rho)\,(S_1 - iS_2) \ ;$$

y los operadores de Hubbard de tipo fermiónico en términos de adecuadas componentes de espinores (variables de Grassmann):

$$X^{-0} = \Psi_+ \quad , \quad X^{0-} = \Psi_+^* \, ,$$
$$X^{+0} = \Psi_- \quad , \quad X^{0+} = \Psi_-^* \, .$$

Después de realizado el cambio de variables, la función de partición toma la forma:

$$Z = \int \mathcal{D}S_{i1}\, \mathcal{D}S_{i2}\, \mathcal{D}S_{i3}\, \mathcal{D}\Psi_{i\sigma}\, \mathcal{D}\Psi_{i\sigma}^*\, \mathcal{D}\lambda_i \mathcal{D}\xi_i\, \mathcal{D}\xi_i^* \cdot$$
$$(sdet M_{AB})^{1/2}\, \frac{\partial X}{\partial S}\, exp\, (i \int dt\, L_{eff}) . \tag{2.7}$$

donde λ_i , ξ_i y ξ_i^* son adecuados multiplicadores de Lagrange.

El Lagrangiano efectivo L_{eff} escrito en ec. (2.7), en términos de las nuevas variables, se escribe:

$$L_{eff} = -\frac{i}{2s} \sum_i \frac{S_{i1}\dot{S}_{i2} - S_{i2}\dot{S}_{i1}}{s + S_{i3}} + \sum_{i,\sigma} \Psi_{i\sigma} \dot{\Psi}_{i\sigma}^* + H_{t-J}$$
$$+ \sum_i \lambda_i (S_{i1}^2 - S_{i2}^2 - S_{i3}^2 + s^2) + \sum_i \bar{\eta}_i \mathcal{M}_i \eta_i \, , \tag{2.8}$$

siendo $\eta = \begin{pmatrix} \Psi \\ \xi \end{pmatrix}$ un espinor de cuatro componentes y el Hamiltoniano H_{t-J} resulta:

$$H_{t-J} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \Psi_{i\sigma} \Psi_{j\sigma}^* + \frac{1}{8s^2} \sum_{i,j} J_{ij} (1-\rho_i)(1-\rho_j) \, \cdot$$
$$[S_{i1}S_{j1} + S_{i2}S_{j2} + S_{i3}S_{j3} - s^2] \tag{2.9}$$

Si se supone una situación física cercana a un estado no dopado donde el sistema es un aislador antiferromagnético, es posible tratar el Lagrangiano no polinómico (2.8) en el marco de un formalismo perturbativo. De esta manera, es posible la siguiente partición:

$$L_{eff} = L^B(\mathbf{S}, \lambda) + L^F(\boldsymbol{\eta}) + L^I(\mathbf{S}, \boldsymbol{\eta}) \, , \tag{2.10}$$

donde

$$L^B(\mathbf{S}, \lambda) = -\frac{i}{2s} \sum_i \frac{\widetilde{S}_{i1}\dot{\widetilde{S}}_{i2} - \widetilde{S}_{i2}\dot{\widetilde{S}}_{i1}}{s + s'} + 2s' \sum_i \lambda_i \widetilde{S}_{i3}$$
$$+ \frac{1}{8s^2} \sum_{i,I} J' \Big[\widetilde{S}_{i1}\widetilde{S}_{(i+I)1} - \widetilde{S}_{i2}\widetilde{S}_{(i+I)2} -$$
$$- \widetilde{S}_{i3}\widetilde{S}_{(i+I)3} + \widetilde{S}_i^2 \Big] \, , \tag{2.11a}$$

y

$$L^F(\boldsymbol{\eta}) + L^I(\mathbf{S}, \boldsymbol{\eta}) = \sum_{i,\sigma} \Psi_{i\sigma} \dot{\Psi}_{i\sigma}^* + \mu \sum_{i,\sigma} \Psi_{i\sigma} \Psi_{i\sigma}^* +$$
$$+ \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \Psi_{i\sigma} \Psi_{j\bar{\sigma}}^* + \sum_i \bar{\eta}_i\, \mathcal{M}_i\, \eta_i \, . \tag{2.11b}$$

En estas condiciones, es posible dar las reglas de Feynman y construir una diagramática para el modelo.

En particular, el sector bosónico da origen al propagador antiferromagnético usual del magnón.

El sector fermiónico contiene una parte bilineal en fermiones, la cual se puede escribir en términos del espinor de cuatro componentes $\boldsymbol{\eta}$ como sigue:

$$L^F(\boldsymbol{\eta}) = \sum_{i,j} \bar{\eta}_{i\alpha}\, (G_{(0)ij}^{-1})^{\alpha\beta}\, \eta_{j\beta} \, , \tag{2.12}$$

donde en el espacio de Fourier, la matriz 4×4 simétrica, no singular $G_{(0)}^{-1}$ se define:

$$(G_{(0)}^{\alpha\beta})^{-1}(k, \nu_n, \nu_n') = \delta(\nu_n, \nu_n') \cdot$$
$$\begin{pmatrix} -(i\nu_n + \mu) & \varepsilon_k & \frac{1}{2}(s+s') & 0 \\ \varepsilon_k & -(i\nu_n + \mu) & 0 & \frac{1}{2}(s-s') \\ \frac{1}{2}(s+s') & 0 & f & g \\ 0 & \frac{1}{2}(s-s') & g & -f \end{pmatrix} , \tag{2.13}$$

donde k y ν_n son respectivamente el momento y la frecuencia de Matsubara del campo fermiónico.

En ec.(2.10), es $\varepsilon_k = -t \sum_I exp(-i\mathbf{I}.\mathbf{k})$. Las funciones f y g en ec. (2.10) son totalmente arbitrarias. Estas funciones no aparecen en el Lagrangiano debido a la condición de Majorana sobre el espinor de dos componentes $\boldsymbol{\xi}$.

El propagador $G_{(0)\alpha\beta}$ queda definido como la matriz inversa de (2.13).

Una manera alternativa de definir el propagador fermiónico es ejecutar en la expresión (2.3) las dos deltas correspondientes a los vínculos fermiónicos

En este caso, el Lagrangiano efectivo resulta:

$$L_{eff} = -\frac{i}{2s} s \sum_i (1+\rho) \frac{S_{i1}\dot{S}_{i2} - S_{i2}\dot{S}_{i1}}{s + s'} + H_{t-J}$$
$$+ \sum_i \lambda_i (S_{i1}^2 - S_{i2}^2 - S_{i3}^2 + s^2) +$$
$$+ \frac{s}{s+s'} s \sum_i (\Psi_{-i} \dot{\Psi}_{-i}^* + \Psi_{-i}^* \dot{\Psi}_{-i}). \tag{2.14}$$

El propagador fermiónico que se obtiene de esta manera es:

$$G_{(0)}(k, \nu_n) = -\frac{s+s'}{2s} \frac{1}{i\nu_n + \mu} \, . \tag{2.15}$$

La función espectral del electrón se define a partir del propagador fermiónico $G_{(0)\alpha\beta}$ considerando las componentes $G_{(0)11}$ y $G_{(0)22}$. Los elementos de matriz directamente conectados con las propiedades electrónicas, como por ejemplo la superficie de Fermi, son precisamente $G_{(0)11}$ y $G_{(0)22}$. La función espectral del electrón medida en experimentos de fotoemisión está relacionada con el opuesto de la parte imaginaria de estos elementos de matriz.

Utilizando nuestra expresión para el propagador fermiónico, el potencial químico se puede calcular mediante los procedimientos usuales.

Contrariamente al método de la función de Green[10], nuestro propagador fermiónico que se obtiene a partir de (2.13) contiene dos polos. Es posible ver que el pico de energía negativa se puede interpretar como la extracción de un electrón, mientras que el pico de energía positiva representa la incorporación de un electrón al sistema. Por lo tanto, los dos picos dan cuenta de la fotoemisión y del proceso inverso, respectivamente. La presencia de estos dos picos implica que, para un dado valor de k, el estado no está ni completamente lleno ni completamente vacío.

Además, el hecho que para un dado vector k la posición del primer pico se localiza a energía cero, debe interpretarse que tal vector k pertenece a la superficie de Fermi. Pensamos que la distancia entre los dos picos trae reminiscencias al pseudogap[11].

Finalmente, la expresión (2.15) del propagador fermiónico es la expresión usual del propagador del electrón que se obtiene mediante el método de la función de Green.

III. REFERENCIAS

[1] A. Izyumov, *Physics - Uspekhi* **40** (1997), 445.

[2] M. W. Kirson, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997), 4241.

[3] A. Angelucci, *Physical Review* B**51** (1995), 11580.

[4] A. J. Bracken, M.D. Gould, J.R. Links and Y.Z. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995), 2768.

[5] Z. Maassarani, *J. Phys.* A**28** (1995), 1305.

[6] M. J. Martins and P. B. Ramos, *Physical Review* B**56** (1997), 6376.

[7] G. Baskaran, Z. Zou and P.W. Anderson, *Solid State Commun.* **63** (1987) 973.

[8] G. Kotliar and J. Liu, *Phys. Review* B**38** (1988) 5142.

[9] C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy and S. Sarker, *Phys. Rev.* B**40** (1989), 2610.

[10] C. L. Kane, P. A. Lee, T.K. Ng, B. Chakraborty and N. Read, *Phys. Rev.* B**41** (1990), 2653.

[11] J. R. Klauder, *Ann. Phys.* (NY) **254** (1997), 419.

[12] E. . Tüngler and T. Kopp, "Functional integrals for Hubbard operators and projection methods for strong interaction". *Preprint Institut für Theorie der Kondensierten Materie, Universität Karlsruhe* (1999), and bibliograpy cuoted therein.

[13] J. C. Le Guillou and E. Ragoucy, *Phys. Rev.* B**52** (1995), 2403.

[14] A. Foussats, A. Greco and O. S. Zandron, *Annals of Physics* (NY) **275** (1999), 1.

CEILAP
CITEFA CONICET
ZUFRIATEGUI Y VARELA
1603 - VILLA MARTELLI
REPUBLICA ARGENTINA