

# Diagrama de fase del modelo de Hubbard extendido en $d = 1$ con interacciones carga-dipolo

M.E. Torio<sup>a</sup>, A.A. Aligia<sup>b</sup>, K. Hallberg<sup>b,c</sup> y H.A. Ceccatto<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física Rosario, CONICET-UNR

<sup>b</sup> Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, CNEA

<sup>c</sup> Departamento de Física, FCyN-UBA

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

Estudiamos el modelo de Hubbard extendido (MHE) con repulsión  $U$  en el sitio y  $V$  entre vecinos próximos, modificado por efectos de polarización considerados a segundo orden en teoría de perturbaciones. Este modelo es equivalente a un MHE con un  $U$  convenientemente renormalizado y que incluye además repulsión entre segundos vecinos. Usando un nuevo método basado en números topológicos (fases de Berry de carga y espín), generalizamos a valores finitos del salto  $t$  el diagrama de fases en una dimensión obtenido por van den Brink *et al.* (Phys. Rev. Lett. **75**, 4658 (1995)). El modelo presenta distintas fases en su estado fundamental (dos ondas de densidad de carga, una onda de densidad de espín y una fase intermedia con orden de espín y carga) dependiendo de los valores de los parámetros. La región ocupada por la fase intermedia disminuye para  $t$  creciente y desaparece para valores moderados.

We consider an extended Hubbard model (EHM) with on-site repulsion  $U$  and nearest-neighbor repulsion  $V$ , modified taking into account polarization effects in second-order perturbation theory. The model is equivalent to an EHM including next-nearest-neighbor repulsion and with renormalized  $U$ . Using a new method based on topological numbers (charge and spin Berry phases), we generalize to finite hopping  $t$ , the phase diagram in one dimension, constructed by van den Brink *et al.* (Phys. Rev. Lett. **75**, 4658 (1995)). There are two charge-density wave, one spin-density wave and one intermediate phase with charge and spin ordering depending on the parameters. The nature of each phase is confirmed using dynamical correlation functions. The region occupied by the intermediate phase decreases with increasing hopping and disappears for moderate  $t$ .

## I. INTRODUCCIÓN

En sistemas de electrones fuertemente interactuantes el efecto de la polarizabilidad atómica es importante debido a que contribuye al apantallamiento de la repulsión en el sitio, lo cual reduce los valores desnudos<sup>1-3</sup> y puede llegar incluso a generar valores negativos de la repulsión efectiva  $U^4$ . Recientemente se ha propuesto y estudiado un modelo sencillo de una banda que incluye efectos de polarizabilidad<sup>5,6</sup>. La suposición más importante para simplificar el modelo es que las transiciones electrónicas (de un nivel profundo a otro por encima del nivel de Fermi) responsables del apantallamiento no involucran electrones de valencia. Además, sólo se incluyen interacciones carga-dipolo a primeros vecinos, con lo cual resulta más accesible a tratamientos usando teoría de muchos cuerpos. Además de las fases ya conocidas de la cadena de Hubbard –es decir, ondas de densidad de carga (CDW I) y de spin (SDW)– en este modelo aparecen dos nuevas fases para el caso en que el parámetro de salto  $t$  es nulo<sup>5,6</sup>: una nueva onda de densidad de carga con celda unidad de cuatro parámetros de red (CDW II), y una onda de densidad combinada carga-espín, que tiene una celda unidad de seis parámetros de red y a la que llamaremos fase intermedia (I).

A pesar de conocerse el diagrama de fases para  $t = 0$  y de haberse estudiado con métodos numéricos para valores particulares de los parámetros el gap de energía, las funciones de correlación estáticas y el es-

pectro de excitaciones de una partícula, el diagrama de fases para  $t \neq 0$  no ha sido investigado aún. La

dificultad más importante en el cálculo del diagrama de fases es que, para sistemas finitos, los parámetros de orden convencionales son funciones suaves de las constantes del modelo, lo que no permite determinar precisamente los valores para los cuales las transiciones de fases tienen lugar. Sin embargo, recientemente se ha mostrado que en ciertos casos –que incluyen al modelo de Hubbard extendido<sup>7</sup>– las diferentes fases termodinámicas pueden ser caracterizadas por distintos números topológicos (fases de Berry de carga y espín), los que presentan discontinuidades al pasar de una fase a otra para sistemas de cualquier tamaño<sup>7,8,11</sup>. Extrapolando la posición de estos saltos al límite termodinámico se puede obtener una determinación muy precisa de las líneas de transición, como se ha podido comprobar por comparación con resultados exactos existentes en el límite de acoplamiento fuerte y resultados de bosonización en el caso de acoplamiento débil<sup>8</sup>.

En este trabajo utilizamos el método de fases de Berry para calcular el diagrama de fases general del modelo con polarizabilidad atómica. Las cuatro fases termodinámicas se caracterizan por diferentes números topológicos, confirmando la naturaleza de cada una de ellas mediante el cálculo de las funciones de correlación dinámicas de carga y espín. Tanto las fases de Berry como las funciones de correlación dinámicas se determinan mediante diagonalización ex-

acta del hamiltoniano en anillos de longitud  $L = 8, 12$  sitios.

## II. MODELO Y FASES DEL ESTADO FUNDAMENTAL

El modelo está definido por el hamiltoniano

$$H = H_0 + H_{cd} \quad (1)$$

donde  $H_0$  es la conocida cadena de Hubbard extendida:

$$H_0 = -t \sum_{i\sigma} (c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \text{H.c.}) + U_0 \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1} \quad (2)$$

y  $H_{cd}$  describe interacciones carga-dipolo (las interacciones dipolo-dipolo son despreciadas):

$$H_{cd} = - \sum_i \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{E}_i \quad (3)$$

En esta expresión  $\mathbf{p}_i$ ,  $\mathbf{E}_i$  son, respectivamente, el operador momento dipolar y el campo eléctrico en el sitio  $i$ . Tratando este término a segundo orden en teoría de perturbaciones<sup>5,6,9,10</sup> y tomando sólo la contribución al campo eléctrico procedente de los primeros vecinos, el hamiltoniano total resulta

$$H = -t \sum_{i\sigma} (c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \text{H.c.}) + (U_0 - 4P) \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1} + 2P \sum_i n_i n_{i+2} - 2P \sum_i n_i \quad (4)$$

donde  $\alpha$  es la polarizabilidad, supuesta independiente del sitio y  $P = \alpha e^2 / 2a^4$  ( $a$  es el parámetro de red). El último término simplemente renormaliza el potencial químico. Dentro de las aproximaciones realizadas, el efecto de  $H_{cd}$  es el de reducir la interacción en el sitio y aumentar la repulsión entre segundos vecinos<sup>5,6</sup>.

A diferencia de las ondas de densidad de carga que rompen la simetría discreta de traslación, el caso de ondas de densidad de espín corresponde a la ruptura de la simetría continua de rotación  $SU(2)$ . Por el teorema de Mermin-Wagner es sabido que no puede haber ruptura de una simetría continua en dimensión  $d = 1$ . En consecuencia, si bien no existe orden magnético de largo alcance y por lo tanto las funciones de correlación espín-espín decaen a cero, los resultados indican que hay una correlación antiferromagnética dominante en cierta región del espacio de parámetros. Resulta entonces que se tienen efectivamente cuatro fases diferentes en el estado fundamental. Para el caso  $t = 0$  y banda semillena —una partícula por sitio— el modelo se puede resolver exactamente<sup>5,6</sup>, lo que proporciona una descripción inicial aproximada de dicho diagrama de fases. Utilizando la notación  $\circ$ ,  $\bullet$ ,  $\uparrow$ , y  $\downarrow$  para representar un sitio vacío, doblemente ocupado y ocupado con una partícula con espín up y down respectivamente, las cuatro fases mencionadas son:

- Si  $V$  es mucho mayor que las otras interacciones se evita la ocupación de los primeros vecinos y el estado fundamental se puede representar como  $\dots \circ \bullet \circ \bullet \circ \bullet \circ \bullet \dots$ . Este estado se denota como CDW I.

- Si  $U_0$  es la interacción dominante todos los sitios estarán ocupados por sólo una partícula, y será suficiente introducir un valor infinitesimalmente pequeño de  $t$  para generar correlaciones antiferromagnéticas entre primeros vecinos. Por lo tanto representaremos este estado como  $\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots$  y lo denotaremos SDW.

- Si  $P$  es muy grande, la ocupación de los segundos vecinos es eliminada y el estado fundamental que se obtiene es  $\dots \circ \circ \bullet \bullet \circ \circ \bullet \bullet \dots$ . Lo denotaremos CDW II.

- Finalmente, para valores intermedios de los parámetros (por ejemplo  $t = 1$ ,  $U_0 = 10$ ,  $V = 5$ ,  $P = 1.5$ ) hay una fase intermedia (I), cuya celda unidad se puede representar en la forma  $\bullet \uparrow \circ \bullet \downarrow \circ$ .

## III. FASES DE BERRY

Hemos calculado el estado fundamental  $|g(\Phi_\uparrow, \Phi_\downarrow)\rangle$  del modelo en anillos de longitudes  $L = 8, 12$  sitios atravesados por un flujo magnético  $\Phi_\sigma$  (el salto para cada espín  $\sigma$  está afectado por un factor  $e^{i\Phi_\sigma}$  como se describe en detalle en<sup>7,8,11</sup>). Llamaremos fase de Berry de carga (espín)  $\gamma_c$  ( $\gamma_s$ ), a la fase adquirida por el estado fundamental luego de haber sido llevado adiabáticamente por el ciclo  $0 \leq \Phi \leq 2\pi$ , manteniendo  $\Phi_\uparrow = \Phi_\downarrow = \Phi$  ( $\Phi_\uparrow = -\Phi_\downarrow = \Phi$ )<sup>7</sup>.

Una propiedad fundamental de la fase de Berry de carga es que si el sistema es modificado por alguna perturbación, el cambio en la polarización  $P_\uparrow + P_\downarrow$  del sistema es proporcional al correspondiente cambio en  $\gamma_c$ <sup>12</sup>; de igual modo, cambios en  $\gamma_s$  están relacionados con cambios en la diferencia  $P_\uparrow - P_\downarrow$  entre las polarizabilidades eléctricas para espín up y down<sup>11</sup>:

$$\Delta P_\uparrow \pm \Delta P_\downarrow = e \Delta \gamma_{c,s} / 2\pi \pmod{e}. \quad (5)$$

Es de crucial importancia para nuestros propósitos que en sistemas que tienen simetría de inversión, como el considerado aquí,  $\gamma_c$  y  $\gamma_s$  sólo pueden tomar los valores  $0$  o  $\pi \pmod{2\pi}$ . Así, el vector de fases de Berry  $\gamma = (\gamma_c, \gamma_s)$  no puede variar en forma continua, y saltos en el mismo corresponden a transiciones en al menos uno de los números topológicos  $\gamma_c/\pi$ ,  $\gamma_s/\pi$ . Nuestra principal hipótesis es que las transiciones topológicas corresponden a transiciones de fase en el límite termodinámico. Esta afirmación ha sido confirmada en otros trabajos en el modelo de Hubbard con salto correlacionado<sup>8</sup>.

Un simple cálculo algebraico para  $t = 0$  da como resultado el valor que toman las fases de Berry en cada una de las fases del sistema:  $\gamma(\text{CDWI}) = (0, 0)$ ,  $\gamma(\text{SDW}) = (\pi, \pi)$ ,  $\gamma(\text{CDWII}) = (\pi, 0)$ , y  $\gamma(\text{I}) = (0, \pi)$ .

#### IV. RESULTADOS NUMÉRICOS

En las figuras 1, 2 y 3 presentamos el diagrama de fases calculado diagonalizando cadenas con  $L = 8$  sitios; el mismo fue obtenido utilizando como parámetros de orden las fases de Berry tal como explicamos en la sección anterior. Como puede observarse, la fase intermedia (I) tiende a desaparecer a medida que el valor de  $t$  disminuye.

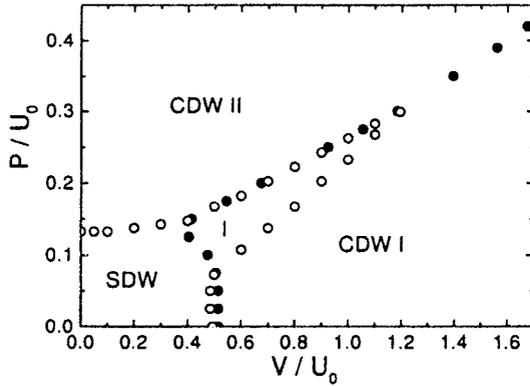


FIG. 1. Diagrama de fases para  $U_0 = 10$ . Los círculos llenos indican un salto en  $\gamma_c$  y los abiertos, un salto en  $\gamma_s$ . En el resto del trabajo se mantiene la notación utilizada para simbolizar cada fase.

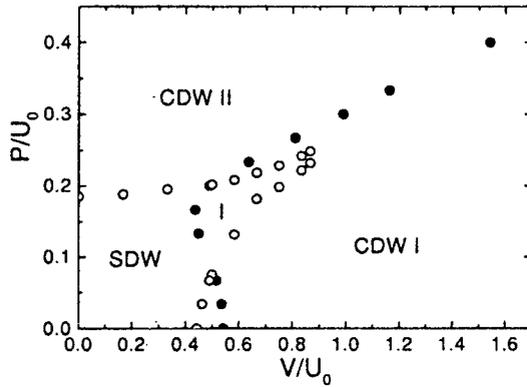


FIG. 2. Diagrama de fases para  $U_0 = 3$ .

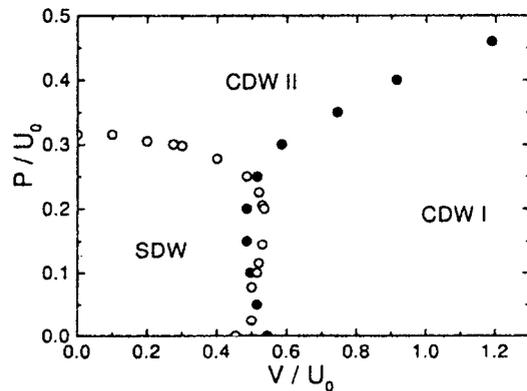


FIG. 3. Diagrama de fases para  $U_0 = 1$ .

En la determinación de los bordes de fase entre SDW y CDW I y entre I y CDW II debería haber

un salto tanto en la fase de carga  $\gamma_c$  como en la de espín  $\gamma_s$ ; sin embargo, ambos saltos no ocurren simultáneamente. Una explicación posible es que ello se debe a efectos de tamaño finito. Hemos podido verificar, por comparación con resultados correspondientes a cadenas con  $L = 12$  sitios, que para la transición I-CDW II los saltos de  $\gamma_c$  y  $\gamma_s$  tienden a coincidir al pasar de 8 a 12 sitios; este hecho, en cambio, no resulta evidente para la transición SDW-CDW I. Hacemos notar que en este caso un trabajo muy reciente sobre el modelo de Hubbard extendido<sup>14</sup> ofrece una explicación alternativa para la diferencia en las posiciones de salto de  $\gamma_c$  y  $\gamma_s$ . El mismo sugiere la existencia de una fase intermedia con la carga polarizada en los 'bonds' en forma alternada y los espines formando un arreglo dimerizado. Este punto requiere una investigación más profunda, la cual ésta fuera de los límites del presente trabajo.

Una manera alternativa de determinar dónde se localizan los bordes de fase consiste en calcular las funciones de correlación dinámicas y comparar las posiciones de las excitaciones de menor energía de los operadores de carga y espín<sup>13</sup>. Es de esperar que el punto donde se cruzan estas excitaciones corresponda al borde de fase. Hemos comprobado que para la transición SDW-CDW I dicho punto coincide con la posición del cambio de la fase de Berry de carga (ver figura 4), lo cual agrega un significado físico adicional a  $\gamma_c$ . La equivalencia del método propuesto en<sup>13</sup> para determinar la transición y el método de las fases de Berry se discute en<sup>11</sup>.

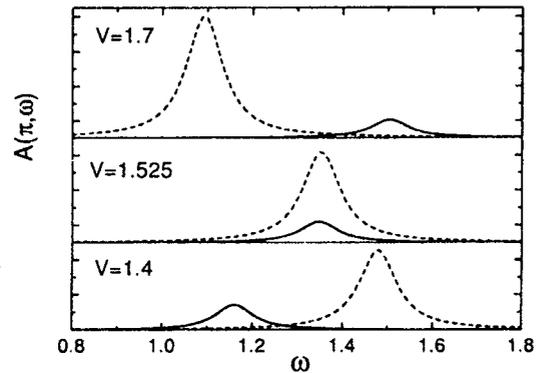


FIG. 4. Funciones de correlación dinámicas para valores de  $U_0 = 3$ ,  $P = 0.1$  y diferentes valores de  $V$ . Las líneas continuas corresponden a los operadores de espín y las de trazas a los de carga, en todos los casos para  $q = \pi$ .

#### V. CONCLUSIONES

Hemos calculado el diagrama de fases del modelo con polarizabilidad atómica para valores de  $t \neq 0$  utilizando como parámetros de orden discretos las fases de Berry. Se ha caracterizado la naturaleza de cada fase utilizando las funciones de correlación dinámicas. En el caso en que las fases de Berry no determinaban con precisión la línea de transición, ésta fue determi-

nada en forma alternativa investigando el punto de cruce de las excitaciones de menor energía en cada fase (excitaciones de carga en CDW I y de espín en SDW), lo cual coincide con el punto de salto de  $\gamma_c$ . Se propone el estudio futuro de la posible existencia de una fase adicional a las consideradas en este trabajo, intermedia entre la SDW y CDW I.

## VI. AGRADECIMIENTOS

A.A.A. agradece a J. Lorenzana por útiles discusiones. Este trabajo fue parcialmente financiado mediante el PICT 03-00121-02153 de ANPCyT y el PIP 4952/96 de CONICET.

- 
- <sup>1</sup> J.F. Annet, R.M. Martin, A.K. Mc Mahan and S. Satpathy, *Phys. Rev. B* **40**, 2620 (1989).
  - <sup>2</sup> M.S. Hybertsen, E.B. Stechel, M. Schlüter, and D.R. Jeninson, *Phys. Rev. B* **41**, 11068 (1990); references therein.
  - <sup>3</sup> J.B. Grant and A.K. Mc Mahan, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 488 (1991).
  - <sup>4</sup> C.M. Varma, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2713 (1988).
  - <sup>5</sup> J. van den Brink, M.B.J. Meinders, J. Lorenzana, R. Eder, and G.A. Sawatzky, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4658 (1995).
  - <sup>6</sup> M.B.J. Meinders, J. van den Brink, J. Lorenzana, and G.A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **52**, 2484 (1995).
  - <sup>7</sup> A.A. Aligia and E.R. Gagliano, *Physica C* **304**, 29 (1998).
  - <sup>8</sup> A.A. Aligia, K. Hallberg, C.D. Batista, and G. Ortiz, cond-mat/9903213; *J. Low Temp. Phys.* (to be published).
  - <sup>9</sup> M.E. García, G. Pastor, and K.H. Bennemann, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1142 (1991).
  - <sup>10</sup> A.A. Aligia, M.E. García, and K.H. Bennemann, *Europhys. Lett.* **21**, 177 (1993).
  - <sup>11</sup> A.A. Aligia, *Europhys. Lett.* **45**, 411 (1999).
  - <sup>12</sup> G. Ortiz, P. Ordejón, R. Martin, and G. Chiappe, *Phys. Rev. B* **54**, 13515 (1996).
  - <sup>13</sup> L. Arrachea, E.R. Gagliano y A.A. Aligia, *Phys. Rev. B* **55**, 1173 (1997).
  - <sup>14</sup> M. Nakamura, cond-mat/9909277