

Estudio del modelo $t - J$ -Holstein bidimensional en redes finitas

A. Dobry, A. Greco, S. Koval y J. Riera

*Instituto de Física Rosario (CONICET), Bv. 27 de Febrero 210 Bis, Rosario, Argentina
y Departamento de Física (UNR), Av. Pellegrini 250, Rosario, Argentina.*

Se estudia el modelo $t - J$ -Holstein bidimensional cerca de cuarto de llenado mediante diagonalización exacta, reteniendo solo algunos modos fonónicos en el espacio recíproco. Esto último permite incorporar la dinámica completa de los fonones. Se analiza el comportamiento de la energía cinética, el factor de estructura de carga y otras cantidades físicas relevantes. El análisis muestra la presencia de una transición hacia una fase condensada de fonones y localizada para los electrones a un valor finito de la constante de acoplamiento electrón-fonón. La interacción electrón-fonón conduce en general a una supresión de la susceptibilidad de apareamiento en cuarto de llenado.

We study by exact diagonalization the two-dimensional $t - J$ -Holstein model near quarter filling, retaining only a few phonon modes in momentum space. This truncation allow us to incorporate the full dynamics of the retained phonon modes. We analyze the behaviour of the kinetic energy, the charge structure factor and other relevant physical magnitudes. This analysis shows the presence of a transition to a condensed phase of phonons and a localized phase for the electrons at a finite value of the electron-phonon coupling constant. The electron-phonon interaction leads in general to a suppression of the pairing susceptibility at quarter filling.

Materia condensada: Superconductividad

El modelo $t - J$ es uno de los más simples modelos propuestos para entender la física de los sistemas de electrones fuertemente correlacionados¹. En particular, el modelo $t - J$ bidimensional ha sido extensamente estudiado en el contexto de la superconductividad de alta temperatura, ya que contiene lo esencial de la física de baja energía de los planos CuO_2 presentes en los cupratos. Muchas propiedades magnéticas, de transporte y superconductoras de estos materiales han sido descritas por este modelo². Sin embargo, dado que este modelo contiene solo los grados de libertad electrónicos, no puede dar cuenta por ejemplo del efecto isotópico, lo que requeriría de considerar el acoplamiento electrón-fonón (EF). La inclusión de grados de libertad fonónicos puede ser revelante también para describir propiedades electrónicas de transporte. Más aún, dada la naturaleza básica del modelo $t - J$, es de interés general estudiar los efectos del acoplamiento EF en el marco de modelos de electrones fuertemente correlacionados.

Nuestro punto inicial es el modelo $t - J$ bidimensional (2D). Estudios de diagonalización exacta de este modelo en redes cuadradas han mostrado la aparición de superconductividad $d_{x^2-y^2}$ a cuarto de llenado ($n = 0.5$)^{3,4} en la vecindad de la región de separación de fases.

El acoplamiento EF es incorporado en el Hamiltoniano mediante un término de "Holstein", en donde un fonón de frecuencia ω (aproximación de Einstein) es acoplado linealmente con la densidad electrónica local. El modelo de Holstein⁵, que describe electrones no correlacionados con este tipo de acoplamiento EF, ha sido estudiado para entender la relación entre superconductividad y la formación de ondas de densidad de carga (ODC). Simulaciones de Montecarlo cuántico han sido realizadas en una dimensión⁶ y más recientemente en dos dimensiones^{7,8}. En una dimensión, el

trabajo de Ref.⁶ muestra que en el modelo de Holstein se produce una transición a un estado ODC por encima de un valor crítico del acoplamiento EF en el caso de fermiones sin espín. Por otro lado, el estado ordenado aparece para un valor arbitrario del acoplamiento para el caso de fermiones de espín $\frac{1}{2}$.

El Hamiltoniano total incluyendo los grados de libertad electrónicos y los fonónicos es:

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\tilde{c}_{j\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i\sigma} + \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma}) \\
 & + J \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j) \\
 & + \omega \sum_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2}) \\
 & + \sum_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}) (b_{\mathbf{q}}^\dagger + b_{-\mathbf{q}}) \sum_j n_j e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (1)
 \end{aligned}$$

donde $\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger$ es un operador de creación de electrones en el sitio i con espín σ con la prohibición de la doble ocupación en el sitio. $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$ es el operador número de electrones, y $b_{\mathbf{q}}^\dagger$ es el operador de creación de fonones con momento \mathbf{q} . t es el parámetro de "hopping", que elegimos como escala de energía, J es la interacción de intercambio antiferromagnética, y $g(\mathbf{q})$ es el acoplamiento EF. De aquí en adelante adoptamos $\omega = 1.0$.

El modelo definido por Ec.(1) con $g(\mathbf{q}) = g$ independiente de \mathbf{q} es usualmente llamado modelo $t - J$ -Holstein. Este modelo y el modelo Hubbard-Holstein han sido estudiados mediante métodos numéricos y analíticos^{9,10}. La mayoría de los estudios de diagonalización exacta, han sido realizados con fonones estáticos en la llamada aproximación adiabática o de fonones congelados¹⁰. De esta manera, la dinámica de fonones se pierde en estos estudios.

El propósito de este trabajo es extender la técnica de diagonalización exacta Lanczos usada en el modelo $t - J$ puro al modelo $t - J - \text{Holstein}$, preservando la dinámica de los fonones. Debido a que el espacio de Hilbert es infinito para la parte bosónica, en general se propone como aproximación un truncamiento en el espacio real. Este esquema se usa en el trabajo de Ref.¹¹, aunque solo dos estados contribuyen para cada modo. Aunque esta elección en términos de estados coherentes es presumiblemente óptima, es extremadamente difícil chequear la validez del espacio variacional resultante. En este trabajo, proponemos un truncamiento de los fonones en el espacio de los momentos, reteniendo un número pequeño de estados. Esta aproximación nos permite tomar suficientes estados bosónicos para cada modo fonónico de tal manera que las magnitudes físicas converjan a sus valores exactos dentro de la región más interesante de parámetros¹³. Los resultados exactos así obtenidos para un restringido conjunto de modos fonónicos en el espacio de momentos, podría ser usado para chequear métodos aproximados como por ejemplo el propuesto en Ref.¹¹.

Un acoplamiento EF $g(\mathbf{q})$ dependiente del momento es más realista para muchos materiales que una magnitud constante g . En el caso de los cupratos, desde el modelo de Hubbard de tres bandas en presencia de un fonón en el plano de tipo "breathing", un acoplamiento EF efectivo fue derivado con la forma de la Eq. (1), donde $g(\mathbf{q})$ tiene su máximo en $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ ¹⁴. Los diferentes valores del acoplamiento EF para distintos modos fonónicos en el espacio de momentos, proveen una justificación de nuestro esquema de truncamiento. Solo tomamos en el espacio de Hilbert fonónico aquellos estados con acoplamiento EF más grande. De aquí en más por simplicidad, consideraremos g independiente del momento.

Consideremos el caso en el cual solo los estados fonónicos con momento $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ forman parte del espacio de Hilbert fonónico. El estado fundamental exacto para el Hamiltoniano (1) puede obtenerse fácilmente para un estado electrónico arbitrario $\{n_{i,\sigma}\}$, en el caso en que $J = t = 0$. La energía de este estado fundamental es mínima cuando todos los electrones se encuentran localizados en alguna de las dos subredes de la red cuadrada. Luego, para t y J finitos, se espera una ODC (π, π) para g suficientemente grande. En Fig. 1, mostramos la energía del estado fundamental vs el número de estados del fonón considerado para la red $\sqrt{10} \times \sqrt{10}$ con $n = 0.6$, $J = 1.0$, y varios valores de g . La convergencia al resultado exacto es rápida en el rango $0.00 < g < 0.55$. Entre $0.55 < g < 0.60$, ocurre la transición a la región de ODC mencionada.

En primer lugar, estudiamos distintas magnitudes físicas en una red $\sqrt{10} \times \sqrt{10}$ para $n = 0.6$ en función del acoplamiento EF g . En Fig. 2 se observa para distintas magnitudes, una transición a un cierto $g = g_c$ de una fase que es esencialmente la del modelo $t - J$ puro ($g = 0$) a otra radicalmente distinta que corres-

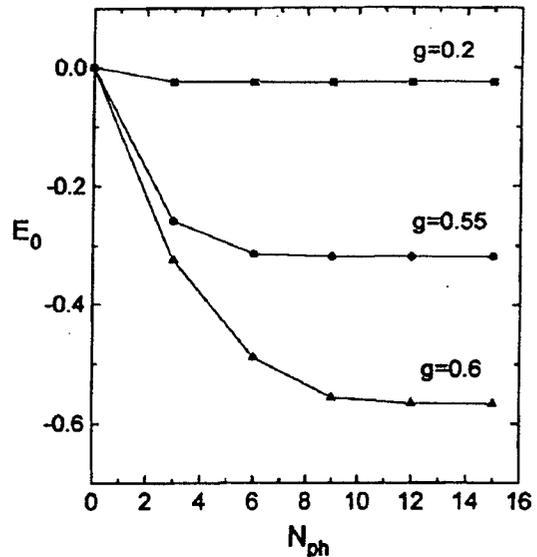


FIG. 1. Energía del estado fundamental E_0 en función del número de estados del fonón (π, π) para la red de $\sqrt{10} \times \sqrt{10}$ con $n = 0.6$, $J = t = \omega = 1.0$, y distintos valores de g .

ponde en esencia a la que se encuentra con $t = J = 0$. La primera fase es usualmente denominada fase "deslocalizada" mientras que la segunda corresponde a una fase "localizada". La energía cinética se muestra en la Fig. 2(a). Esta muestra un comportamiento suave para $0 < g < g_c$. Para $g > g_c$, la energía cinética decrece rápidamente a cero, indicando una fuerte localización electrónica. Más adelante discutiremos este comportamiento en detalle. La transición a la región localizada se ve claramente, por un lado, con el comportamiento del factor de estructura para una ODC (π, π) , definido como:

$$S_c(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle n_i n_j \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \quad (2)$$

con $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$, y por otro lado mediante el número de ocupación fonónico $n_{ph} = \langle b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \rangle$. Estas cantidades se muestran en las Figs. 2(b) y 2(c), respectivamente. La presencia de estas dos fases puede observarse en otras cantidades, como por ejemplo, en el factor de estructura de espín en (π, π) , tal como se muestra en Fig. 2(d).

La transición al estado de ODC es similar a la observada en el modelo de Holstein sin espines por Hirsch y Fradkin⁶. Estos autores derivaron, para describir esta transición, un modelo $\tilde{t} - V$ efectivo, donde V es la repulsión efectiva a primeros vecinos (pv). \tilde{t} es un "hopping" renormalizado ($\tilde{t} \ll t$) que contiene el efecto del incremento en las masas efectivas de los portadores de carga. El hecho de que en nuestros resultados la energía cinética vaya a cero inmediatamente después de la transición, es debido a que la mayoría de los electrones se localizan en una de las dos subredes, y este estado es de muy baja energía. Este comportamiento

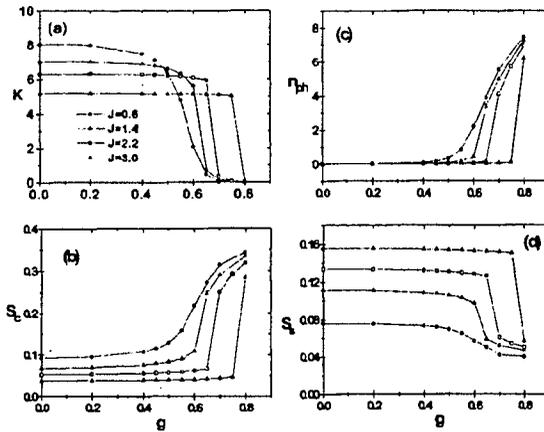


FIG. 2. (a) Energía cinética, (b) factor de estructura de carga $S_c(\pi, \pi)$, (c) ocupación fonónica, y (d) factor de estructura de espín $S_s(\pi, \pi)$, en función del acoplamiento EF, obtenido por diagonalización exacta para la red de $\sqrt{10} \times \sqrt{10}$ con $n = 0.6$, $t = \omega = 1.0$, y distintos valores de J . Los símbolos usados en (b), (c) y (d) son los mismos que en (a).

desaparecería si otros modos fonónicos con distinto momento fueran incluidos en el espacio de Hilbert. Para chequear esta afirmación, hemos realizado otros cálculos para la misma red y llenado, tomando tres modos fonónicos en el espacio de momentos. Estos tres modos son los correspondientes a los momentos (π, π) , $(4\pi/5, 2\pi/5)$ y $(-4\pi/5, -2\pi/5)$. Estos dos últimos están cercanos a (π, π) en el espacio de momentos. Para este caso obtenemos una convergencia de 4 dígitos en la energía cinética con cuatro estados por modo fonónico para $g \leq 0.3$, y cinco estados por modo fonónico para $0.4 \leq g \leq 0.6$. Los resultados de la energía cinética para varios valores de J se muestran en la Fig. 3(a). Hemos incluido también con el efecto de comparar, las curvas para $J = 1.0$ y $J = 3.0$ obtenidas solo con el fonón (π, π) . Debido a que el espacio de Hilbert fonónico es más grande respecto al anterior que tenía un solo fonón, la energía del sistema en la región donde los fonones dominan es de menor magnitud. De acuerdo con lo dicho, un argumento variacional simple explica porque la transición ocurre a un acoplamiento crítico g_c más pequeño. Como es esperado, la energía cinética luego de la transición decrece más suavemente que en el caso anterior. La transición es más suave y la influencia del acoplamiento EF es visible para un valor de g más pequeño. Para un valor fijo de J y g , la energía cinética es más pequeña que el correspondiente valor obtenido en el caso de un solo modo fonónico, indicando un aumento de la masa efectiva de los portadores de carga. En Fig. 3(b) se observa que el factor de estructura de carga en $\mathbf{q} = (3\pi/5, -\pi/5)$, que es el más grande para $g = 0$ en la región de parámetros donde los portadores se ligan ($J \geq 2.0$), se anula a medida que g crece. Contrariamente, el factor de estructura en $\mathbf{q} = (4\pi/5, 2\pi/5)$ aumenta y se hace dominante para $g > g_c$. De esta forma, la región correspondiente a la fase "localizada", tiene un orden de ODC incommensurado.

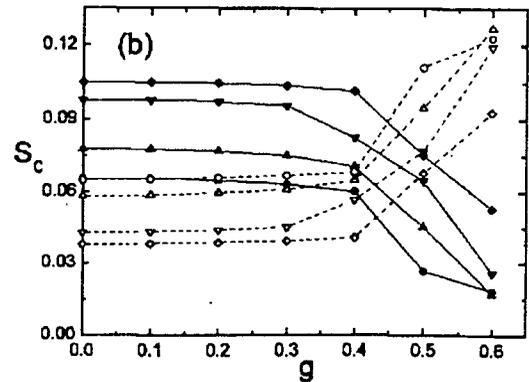
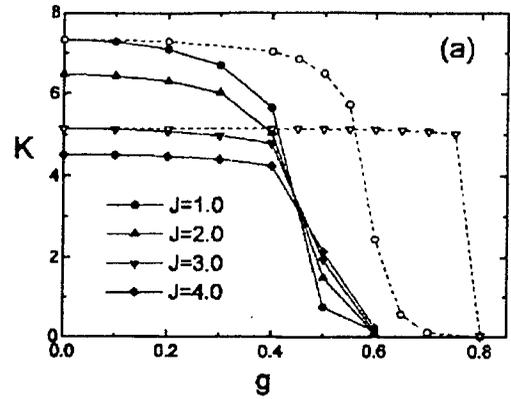


FIG. 3. (a) Energía cinética en función de g para la red de $\sqrt{10} \times \sqrt{10}$ con $n = 0.6$, $t = \omega = 1.0$, y distintos valores de J . Las líneas continuas corresponden al conjunto de fonones (π, π) , $(4\pi/5, 2\pi/5)$ y $(-4\pi/5, -2\pi/5)$. Resultados para el fonón (π, π) solamente (líneas a trazos), son incluidas por comparación (b) El factor de estructura de ODC en $(3\pi/5, -\pi/5)$ (líneas continuas) y en $(4\pi/5, 2\pi/5)$ (líneas a trazos) en función de g . Las constantes de acoplamiento son las mismas que en (a).

Como en Ref.⁶, es razonable asumir que nuestro modelo EF puede ser descrito por un modelo efectivo $t - J - V$ puramente electrónico. En este modelo, la repulsión efectiva entre pv V , actúa en contra de la ligadura de agujeros en sitios vecinos de forma que suprime el apareamiento pero también previene la separación de fases (SF). Las consecuencias de estos efectos competitivos resultan difícil de predecir. Por otro lado, cálculos numéricos han indicado un aumento de las correlaciones de apareamiento¹⁵.

En el modelo $t - J$ -Holstein, tenemos un efecto competitivo adicional, por ejemplo, la renormalización de la masa de los portadores. Para determinar el resultado de estos efectos, hemos calculado la energía cinética y la susceptibilidad de apareamiento para la red de 4×4 a cuarto de llenado. La susceptibilidad de apareamiento estática es definida como:

$$\chi_{SC} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \Delta_i^\dagger \Delta_j \rangle \quad (3)$$

donde

$$\Delta_i = \sum_{\mu} g_{\mu} c_{i\uparrow} c_{i+\mu\downarrow} \quad (4)$$

donde la suma se extiende sobre los pv del sitio i y g_{μ} son los factores de forma que determinan la simetría de apareamiento. En este trabajo, mostramos los resultados para las simetrías de apareamiento $d_{x^2-y^2}$ y s-extendida.

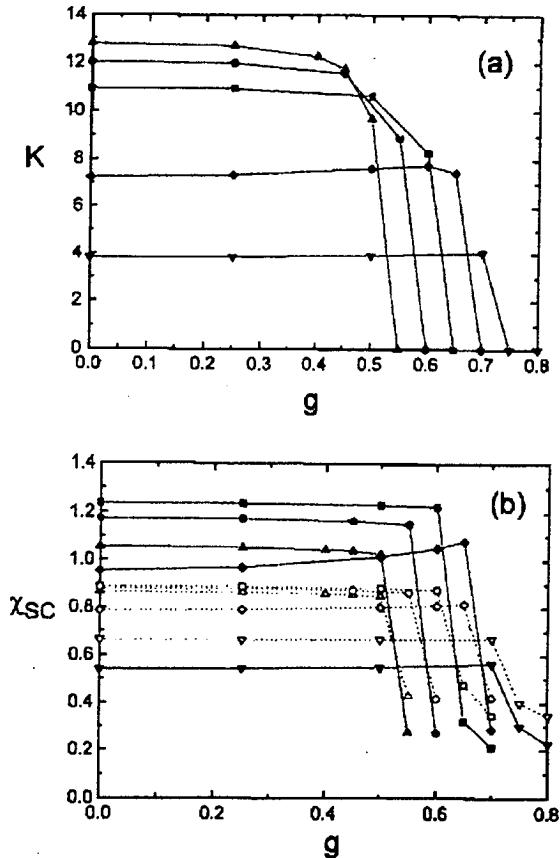


FIG. 4. (a) Energía cinética, y (b) susceptibilidad de apareamiento para las simetrías $d_{x^2-y^2}$ (símbolos llenos) y s-extendida (símbolos abiertos), para la red de 4×4 a cuarto de llenado y $J = 2.0$ (triángulos arriba), $J = 2.5$ (círculos), $J = 3.0$ (cuadrados), $J = 3.5$ (diamantes) y $J = 4.0$ (triángulos abajo).

Hemos considerado solo el fonón (π, π) en el cálculo. La diagonalización exacta de la red de 4×4 para $n = 0.5$, fue realizada con momento $(0,0)$ y simetría rotacional de la función de onda d. La simetría de "spin reversal" fue también introducida para reducir la dimensión del espacio de Hilbert electrónico. La energía converge con aproximadamente 20 estados fonónicos. Examinemos primero los resultados para la energía cinética, que se muestran en Fig. 4(a). El comportamiento general es similar al encontrado para la red de $\sqrt{10} \times \sqrt{10}$. Sin embargo, puede verse un suave deslizamiento hacia arriba en las curvas de la energía cinética para $J = 3.5$ y $J = 4$, a valores grandes de g . En el modelo $t - J$ puro, $J = 3.5$ está precisamente en la frontera de la región de SF³. La influencia

de la interacción repulsiva efectiva es por lo tanto correr la frontera de la región de SF hacia valores más grandes de J .

Finalmente, en Fig. 4(b) mostramos los resultados para la susceptibilidad de apareamiento. Para el modelo $t - J$ puro, como se muestra en Ref.³, el apareamiento de simetría $d_{x^2-y^2}$ domina sobre el s-extendido y el máximo ocurre a $J = 3$, justo antes de la frontera con la región de SF. El efecto de la interacción EF es en general el de suprimir el apareamiento. Solo para $J = 3.5$, $J = 4$ y g grande, en acuerdo con el comportamiento de la energía cinética, un aumento de la susceptibilidad de apareamiento es observado. Si se añaden más modos fonónicos al sistema, tomando en cuenta resultados previamente discutidos, se espera que la repulsión efectiva entre pv se haga más débil que en el caso de un fonón. Además, la renormalización de la masa de los portadores es más grande. Luego, el efecto resultante sería una total supresión de las correlaciones y de la susceptibilidad de apareamiento.

Aunque no hemos explorado exhaustivamente la dependencia de nuestros resultados con ω , hemos obtenido comportamientos cualitativos similares para valores más pequeños de ω . En estos casos, el cruce entre las diferentes fases ocurre a valores más pequeños de g , lo que no es sorprendente ya que en el modelo de Holstein puro, la escala relevante es g^2/ω . Podemos concluir que estos cruces ocurren cuando g^2/ω es lo suficientemente grande como para que la escala de energía EF comience a competir con la escala J/t .

Concluyendo, hemos estudiado usando diagonalización exacta en 2D el modelo $t - J$ -Holstein, reteniendo solo algunos modos fonónicos en el espacio de momentos. Cerca de cuarto de llenado, el comportamiento de la energía cinética, el factor de estructura de carga y otras cantidades físicas, muestran la presencia de una transición de una fase deslocalizada a otra localizada a un valor finito del acoplamiento g_c . Este valor de g_c decrece cuando el número de modos fonónicos se incrementa. Hemos también dado algunas indicaciones de que el acoplamiento EF conduce en general a la supresión de la susceptibilidad de apareamiento a cuarto de llenado. Estas conclusiones están entre los primeros resultados obtenidos para un modelo EF en 2D que incorpora la dinámica completa del campo fonónico, lo que podría ser relevante en situaciones físicas realistas.

¹ Ver, por ej.: *Correlated electron systems*, editado por V. J. Emery (World Scientific, Singapore, 1993).

² E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).

³ E. Dagotto y J. Riera, Phys. Rev. Lett. **70**, 682 (1993).

⁴ Y.Ohta, T.Shimozato, R. Eder y S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. **73**, 324 (1994).

⁵ T. Holstein, Ann. Phys. (NY) **8**, 325 (1959).

⁶ J. E. Hirsch y E. Fradkin, Phys. Rev. B **27**, 4302 (1983).

- ⁷ R. Scalettar, N. Bickers y D. Scalapino, Phys. Rev. B **40**, 197 (1989); R. Noack y D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **47**, 305 (1993).
- ⁸ R. Noack, D. Scalapino y R. Scalettar, Phys. Rev. Lett. **66**, 778 (1991); M. Vekić, R. M. Noack y S. R. White, Phys. Rev. B **46**, 271 (1992).
- ⁹ U. Trappér et al., Z. Phys. B **93**, 465 (1994).
- ¹⁰ J. Zhong y H. B. Schuttler, Phys. Rev. Lett. **69**, 1600 (1992); H. Röder, H. Fehske y H. Buttner, Phys. Rev. B **47**, 12420 (1993).
- ¹¹ R. Fehrenbacher, Phys. Rev. B **49**, 12230 (1994); R. Fehrenbacher, aún no publicado.
- ¹² Este espacio variacional ha sido también usado para estudiar fluctuaciones cuánticas de la red por H. Zheng, D. Feinberg y M. Avignon, Phys. Rev. B **39**, 9405 (1989). Ver también, H. Zheng, M. Avignon y K. H. Bennemann, Phys. Rev. B **49**, 9763 (1994).
- ¹³ Resultados exactos fueron obtenidos tomando 40 estados por cada uno de los dos modos fonónicos relevantes en una red de tres sitios por J. Mustre de Leon et al., Phys. Rev. Lett. **68**, 3236 (1992).
- ¹⁴ K. von Szczepanski y K. Becker, Z. Phys. B **89**, 327 (1992).
- ¹⁵ E. Dagotto y J. Riera, Phys. Rev. B **46**, 12084 (1992).

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