

Transición metal-aislador en los planos CuO_2 de los materiales superconductores de alta T_c .

M.E.Torio, L.O.Manuel, C.J.Gazza
y H.A.Ceccatto

*Instituto de Física Rosario, CONICET-UNR, y Departamento de Física, FCEIA, UNR.
email:ceccatto@ifir.ifi.edu.ar*

Estudiamos el modelo de Hubbard de tres bandas como punto de partida para describir la estructura electrónica de los planos CuO_2 . Considerando a las interacciones que involucran a los orbitales de O dentro de la aproximación de Hartree-Fock, decimamos cuánticamente a dichos orbitales a fin de obtener un modelo efectivo para los orbitales de Cu. A posteriori, implementamos aproximaciones mediante la técnica de bosones esclavos para tratar la repulsión en los orbitales de Cu. En particular consideramos la transición metal-aislador que sufre este modelo, caracterizando los comportamientos correspondientes a aisladores de Mott y de transferencia de carga. La formulación que presentamos es original y permite el tratamiento de manera análoga a los estudios realizados en la literatura para el modelo de Hubbard de una banda.

We have studied the three band Hubbard model in order to describe the electronic structure of the CuO_2 planes. We considered the interactions involving O orbitals in the Hartree-Fock approximation, and obtained by quantum decimation an effective model for Cu orbitals. From then on, we used the slave bosons technique in the treatment of the repulsion term in the Cu orbitals. In particular, we have studied the metal-insulator transition of this model, considering the Mott insulator and charge transfer behaviors. This formulation is original and allows a treatment of the model similar to previous studies in the literature for the one band Hubbard model.

I. INTRODUCCIÓN

En este trabajo se estudian propiedades electrónicas de los compuestos superconductores de alta T_c , las cuales están básicamente determinadas por los planos CuO_2 presentes en la gran mayoría de los mismos. Debido a las altas correlaciones existentes en dichos planos, en general se utiliza el modelo de Hubbard de tres bandas como punto de partida para describir su estructura electrónica¹. En particular se consideró la transición metal-aislador que sufre este modelo, caracterizando los comportamientos correspondientes a aisladores de Mott y de transferencia de carga. Para dicho estudio se empleó una formulación basada en la integral funcional, implementándose aproximaciones mediante la técnica de bosones esclavos. Previo al uso de esta representación se obtuvo un modelo efectivo para los orbitales de Cu por decimación cuántica de los O, lo cual simplifica el cálculo posterior. Si bien el estudio del modelo de Hubbard de tres bandas mediante la técnica de bosones esclavos no es nuevo, la formulación que presentamos es original y permite el tratamiento de la fuerte repulsión en los orbitales de Cu de manera análoga a los estudios realizados en la literatura para el modelo de Hubbard de una banda. Los resultados finales se obtienen en forma numérica y se presentan al final del trabajo.

II. MODELO EFECTIVO

Las bandas de conducción en los planos CuO_2 se describen apropiadamente utilizando un modelo "tight-binding" compuesto por los orbitales p_σ de los oxígenos y $d_{x^2-y^2}$ de los cobres. Una vez incluidos los efectos de la repulsión coulombiana, el hamiltoni-

ano resultante es el modelo de Hubbard de tres bandas H_{3b} ⁶. Este hamiltoniano incluye los términos de energía de sitio en los cobres (ϵ_d^0) y oxígenos (ϵ_p^0), la repulsión coulombiana en el Cu (U_d), en los orbitales de O (U_p) y entre electrones ubicados en los Cu y O primeros vecinos (V). Se consideran además los saltos entre Cu y O (t_{pd}) y entre los O (t_{pp}).

La repulsión coulombiana en los orbitales de O y entre los orbitales de Cu y O primeros vecinos en H_{3b} no son consideradas demasiado importantes, por lo que se utilizó una aproximación de Hartree-Fock en la fase paramagnética para reducirlos a términos armónicos. En cambio, para la repulsión en los Cu usamos el método de bosones esclavos², que consiste en representar en cada sitio los cuatro estados posibles de los orbitales de Cu por medio de cuatro operadores bosónicos a, b_σ, e y dos fermiónicos c_σ , en lugar de los dos operadores fermiónicos originales d_σ . Esta representación es exacta siempre que se satisfagan las condiciones de ligadura $e^\dagger e + \sum_\sigma b_\sigma^\dagger b_\sigma + a^\dagger a - 1 = 0$ y $c^\dagger c + b_\sigma^\dagger b_\sigma + a^\dagger a = 0$ que garantizan el significado físico de los campos. Con esto se logra una simplificación del término de repulsión en el Cu al precio de tener un término de salto mucho más complejo. El efecto neto es reemplazar fermiones fuertemente interactuantes por fermiones libres con un ancho de banda renormalizado por la interacción⁴.

Para obtener un modelo efectivo se trabajó en la formulación integral funcional³, lo que da tanto una descripción física intuitiva del sistema como un punto de partida para hacer aproximaciones. La función de partición es una integral sobre variables complejas, que corresponden a los operadores bosónicos, y variables de Grassman que corresponden a los operadores fermiónicos. Se propuso la aproximación de punto de

ensilladura más simple, donde los campos bosónicos se consideran estáticos y uniformes. A continuación se realizó la integración respecto a las variables correspondientes a los orbitales de O, con lo que se obtuvo una función partición del modelo efectivo para los orbitales de Cu. En lugar de considerarse tres orbitales por celda unidad con sus energías de sitio, repulsiones coulombianas y saltos entre orbitales, se tiene así un propagador efectivo para los cobres donde ya está incluida la presencia de los oxígenos y sus interacciones.

A continuación se procedió a obtener las ecuaciones autoconsistentes para los campos bosónicos y valores medios involucrados en la aproximación de Hartree-Fock. Para ejemplificar la sencillez del procedimiento seguido, se realizó dicho cálculo en primer lugar para el caso del modelo de Hubbard de una banda como se describe a continuación, y luego los resultados fueron extendidos al modelo de tres bandas directamente reemplazando el propagador de fermiones libres por el propagador del modelo efectivo para los cobres.

Utilizando el tratamiento de bosones esclavos en aproximación de punto de ensilladura, la energía libre del modelo de Hubbard de una banda en la fase paramagnética resulta:

$$F_1 = -\frac{1}{N\beta} \text{Tr} [\ln G_1^{-1}] + U_d a^2 \quad (1)$$

donde a es el valor del campo bosónico que representa la doble ocupación y G_1 es el propagador del modelo de una banda

$$G_1^{-1}(k\omega\sigma) = \epsilon^0 - \mu - tq\Gamma(k) + i\omega \quad (2)$$

Hemos llamado b y e a los valores en el punto de ensilladura de los campos bosónicos asociados a estados con una y ninguna partícula en el orbital de Cu respectivamente. En la expresión (2) $q = z^2$, siendo $z = (1 - a^2 - b^2)^{-\frac{1}{2}}(eb + ba)(1 - e^2 - b^2)^{-\frac{1}{2}}$.

A la expresión de F_1 pueden incorporarse las dos ligaduras agregando términos mediante multiplicadores de Lagrange λ_1 y λ_2 . Derivando F_1 respecto a a , b , e , λ_1 y λ_2 se obtienen las ecuaciones de punto de ensilladura⁴.

Como puede verse fácilmente, para obtener dichas ecuaciones debe evaluarse la expresión $-\frac{1}{N\beta} \text{Tr} \left[G_1 \frac{\partial G_1^{-1}}{\partial \alpha} \right]$, siendo $\frac{\partial G_1^{-1}}{\partial \alpha} = \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial \alpha}$ para $\alpha = a, b, e, \lambda_1$ y λ_2 . Esta traza involucra una suma en frecuencias, una suma en k , que se calcula como una integral, y una suma en σ . Utilizando las ecuaciones de ligaduras (correspondientes a $\alpha = \lambda_1, \lambda_2$), se pueden expresar e, b, a y q en función de $x = a + e$ y $\delta = 1 - n$, donde n es la densidad de partículas. Para las restantes ecuaciones ($\alpha = a, b, e$) se requiere evaluar

$$-\frac{1}{N\beta} \text{Tr} \left[G_1 \frac{\partial G_1^{-1}}{\partial \alpha} \right] = \frac{\partial q}{\partial \alpha} |\epsilon| \quad (3)$$

con $|\epsilon| = -\frac{E_{tb}}{q}$, siendo E_{tb} la energía por sitio para electrones libres. Combinando las tres ecuaciones resultantes, se puede obtener una única ecuación trascendente para x

$$(1 - x^2) \frac{x^4}{x^4 - \delta^2} = \frac{U_d}{8|\epsilon|} \quad (4)$$

Una vez resuelta la misma se obtienen los valores de todos los parámetros para un dopaje δ arbitrario.

La simplificación del cálculo para el modelo de tres bandas radica en que se logró expresar el propagador efectivo como una combinación lineal de tres propagadores de fermiones libres, es decir

$$G_3(k\omega\sigma) = \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i(k)}{\beta_i(k) + i\omega} \quad (5)$$

Los coeficientes $\alpha_i(k)$ y $\beta_i(k)$ se obtienen como las raíces de una ecuación cúbica y tienen una expresión compleja que no se reproduce aquí (detalles pueden hallarse en⁶). Este resultado permite extender de una manera muy simple todos los resultados obtenidos para el modelo de una banda al caso de tres bandas, simplemente reemplazando un propagador por el otro. De esta manera, es necesario evaluar $-\frac{1}{N\beta} \text{Tr} \left[G_3 \frac{\partial G_3^{-1}}{\partial \alpha} \right]$, siendo $\frac{\partial G_3^{-1}}{\partial \alpha} = K(k) \frac{\partial q}{\partial \alpha}$. La expresión de $K(k)$ no se presenta aquí por ser compleja y no agregar a la discusión, pero fue descompuesta en fracciones simples de la forma

$$K(k) = \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i(k)}{\beta_i(k) + i\omega} \quad (6)$$

para simplificar el cálculo de la traza, obteniéndose

$$-\frac{1}{N\beta} \text{Tr} \left[G_3 \frac{\partial G_3^{-1}}{\partial \alpha} \right] = \frac{\partial q}{\partial \alpha} \Lambda \quad (7)$$

Como puede verse esta expresión es idéntica a (3) si se reemplaza $|\epsilon|$ por Λ . Esto mismo ocurre con la ecuación trascendente para x (4).

Por lo tanto, la extensión de los resultados del modelo de una banda al de tres bandas consiste simplemente en reemplazar $|\epsilon|$ por Λ en todos los resultados. Esto plantea la necesidad de evaluar la expresión

$$\Lambda = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \sum_{lm} \alpha_l \eta_m \left[\frac{n_F(\zeta_m) - n_F(\beta_l)}{\beta_l - \zeta_m} \right] \quad (8)$$

donde n_F es el número de Fermi. Como puede verse, este procedimiento no es complejo y el método resulta en una simplificación importante de los cálculos.

III. TRANSICIÓN METAL-AISLADOR

Si se tiene una red cuadrada con N átomos de Cu, y se considera un dopaje de una partícula por celda unidad, las partículas se alojarán en los Cus, por ser $\epsilon_d^0 < \epsilon_p^0$. Si se agrega una nueva partícula, ésta se alojará en un orbital de Cu o de O dependiendo de la relación entre U_d y $\Delta = \epsilon_p^0 + 2V$. En el caso $U_d < \Delta$ se tiene un *aislador de Mott* y si es $U_d > \Delta$ un *aislador de transferencia de carga*. Estas dos situaciones aparentemente idénticas salvo por el valor del 'gap', tienen como diferencia fundamental el origen de dicho 'gap', que en el primer caso se debe a la repulsión

coulombiana que se opone a la doble ocupación de los orbitales de Cu, mientras que en el segundo las partículas se desplazan en la banda generada por los orbitales de O, para lo que debe suministrarse al sistema una energía $\simeq \Delta$. En caso de tenerse valores de t_{pd} comparables con U_d y Δ , las bandas se solapan y se tiene siempre un conductor.

Para obtener el diagrama de fases metal-aislante se procedió a buscar los puntos que corresponden a la doble ocupación nula de los orbitales de Cu en el plano (U_d, Δ) , siendo Δ la energía de transferencia entre orbitales.

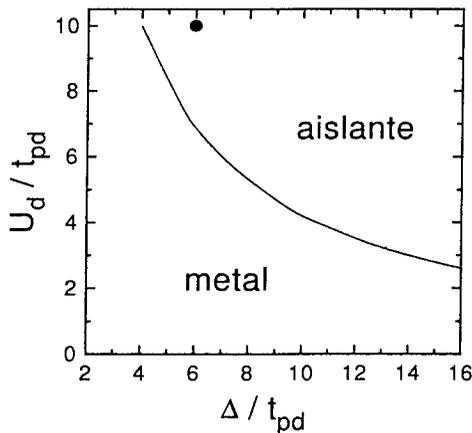


FIG. 1. Diagrama de fases metal-aislante en el espacio de parámetros (U_d, Δ)

IV. RESULTADOS

Las soluciones de las ecuaciones autoconsistentes se obtuvieron en forma numérica con un programa que trabaja en forma iterativa. En la Fig. 2 se muestra el diagrama de fases metal-aislante a $T = 0$ en el espacio (U_d, Δ) , para el caso de una partícula por celda unitaria.

Este diagrama tiene el mismo comportamiento cualitativo respecto a trabajos anteriores⁵. El círculo lleno en la figura corresponde a los valores de U_d , ϵ_p^0 y V estimados mediante cálculos de estructuras de bandas, basados en la aproximación de densidad local. Como puede observarse, este punto corresponde a la fase aislante de transferencia de carga y se halla próximo a la curva de transición metal-aislador.

La variación de la energía total del sistema E con U_d y Δ se presenta en las Figs. 3a y 3b respectivamente. Como era de esperar, el valor absoluto de E decrece al aumentar U_d y tiende a cero para valores muy grandes de la repulsión en el Cu, ya que para $U_d \rightarrow \infty$ el número de orbitales doblemente ocupados tiende a cero, y los huecos quedan localizados uno en cada sitio de Cu. Se observa que para valores de $\Delta \geq 10t_{pd}$ la energía comienza a acercarse asintóticamente a cero.

V. CONCLUSIONES

En este trabajo se propuso una metodología sencilla para tratar el modelo de Hubbard correspondiente a los planos CuO_2 , mediante la cual se pueden extender fácilmente resultados conocidos para el modelo de una banda al caso de tres bandas. La sencillez radica fundamentalmente en la forma de expresar el propagador lo que abre la posibilidad de tratar varios problemas no estudiados hasta ahora en profundidad debido a la complejidad que presenta el hamiltoniano H_{3b} . La técnica descrita en los párrafos anteriores puede aplicarse, por ejemplo, al estudio de otras fases magnéticas. El tratamiento de la fase antiferromagnética es bastante más complejo que el de la fase paramagnética, y está siendo estudiado como continuación de este trabajo.

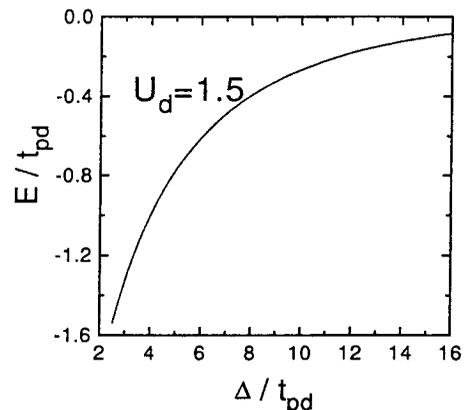
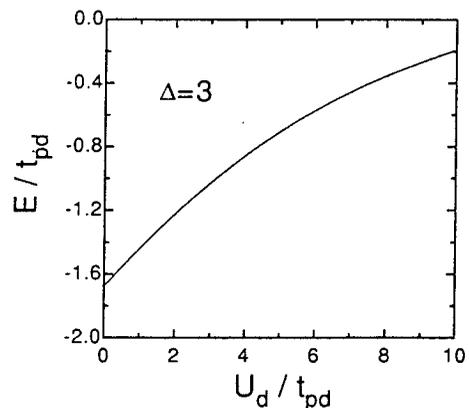


FIG. 2. Panel superior: Energía total del sistema vs. U_d . Panel inferior: Energía total vs. Δ .

¹ Superconductivity. Lecture Notes of the International Centre of Theoretical Physics Spring College in Condensed Matter. ICTP, Trieste, Italia (1992).

² G.Kotliar y A.Ruckenstein. Phys. Rev. Letters. **57**, 1362 (1986).

³ J.Negele y H.Orland. Quantum Many Particle Systems. Addison Wesley Publishing Company (1988).

⁴ M.Lavagna. Phys. Rev. **B41**, 142 (1990).

⁵ C.A.Balseiro *et.al.*, Phys. Rev. Letters. **62**, 2624 (1989). (Erratum **63**, 696 (1989)).

⁶ M.E.Torio. Tesis de Licenciatura, FCEIA, UNR. Marzo de 1997.