

## LECTURE 2

### Modelo de Hubbard I

#### 3.1. Molécula de Hubbard

En la clase anterior vimos que la interacción Coulombiana combinada con el principio de exclusión de Fermi dan lugar a un acoplamiento *ferromagnético* entre electrones que ocupan diferentes orbitales de un mismo átomo. El propósito de esta sección es mostrar que el término de energía cinética o “tunnelling” entre orbitales de diferentes átomos da lugar a un acoplamiento *antiferromagnético*. Para ello consideraremos el caso de la molécula más simple:  $H_2$ . En una teoría de “bajas” energías (energías mucho menores que el gap entre los orbitales 1s y 2s), podemos quedarnos únicamente con los orbitales 1s de cada átomo a los que llamaremos  $\phi_j$  con  $j = 1, 2$ . Definimos  $c_{js}^\dagger$  como el operador que crea un electrón en el orbital  $\phi_j$  con espín  $s = \{\uparrow, \downarrow\}$ . En la molécula  $H_2$ , los dos átomos de hidrógeno están a una distancia lo suficientemente corta como para que haya un término de “tunnelling” entre los orbitales  $\phi_1$  y  $\phi_2$ . Dicho “tunnelling” es descrito por el Hamiltoniano de “hopping”:

$$(3.1) \quad \mathcal{H}_t = -t \sum_{s=\uparrow, \downarrow} (c_{1s}^\dagger c_{2s} + c_{2s}^\dagger c_{1s}).$$

Por otro lado, como ya vimos para el caso de un solo átomo, existe un término de repulsión Coulombiana  $U_{11} = U_{22} = U$  asociado con la doble ocupación de un orbital  $\phi_j$ :

$$(3.2) \quad \mathcal{H}_u = U \sum_{j=1,2} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}.$$

En principio también deberíamos incluir un término repulsivo entre diferentes orbitales,  $U_{12} n_1 n_2$ , pero lo omitiremos bajo la suposición de que no

es relevante para la describir la física del problema. Esta es la aproximación de Hubbard, y el Hamiltoniano resultante,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_u$ , se conoce como “molécula de Hubbard”. Como veremos más adelante, la extensión de este modelo a una red de átomos es lo que se conoce como “Hamiltoniano de Hubbard”.

Como primer paso para diagonalizar  $\mathcal{H}$ , eligiremos una base conveniente para describir todos los estados posibles de dos electrones. En particular, explotaremos una propiedad bien conocida de álgebra lineal: dos matrices que conmutan y son diagonalizables, son simultáneamente diagonalizables. Es evidente que  $\mathcal{H}$  es simétrico ante la permutación  $\mathcal{P}_{12}$  de los átomos 1 y 2, es decir,

$$(3.3) \quad [\mathcal{H}, \mathcal{P}_{12}] = 0.$$

Esto indica que es conveniente clasificar a los estados de la base en simétricos y antisimétricos respecto de dicha permutación:  $\mathcal{P}_{12}|\text{sim}\rangle = |\text{sim}\rangle$  y  $\mathcal{P}_{12}|\text{antisim}\rangle = -|\text{antisim}\rangle$ . Por otro lado, es simple verificar que  $\mathcal{H}$  es invariante ante una rotación global del espín, esto es:

$$(3.4) \quad [\mathcal{H}, \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2] = 0.$$

Esto último significa que es conveniente que los estados de nuestra base tengan espín total bien definido. Motivados por estas dos simetrías de  $\mathcal{H}$  elegimos la siguiente base de estados:

$$(3.5) \quad \begin{aligned} |t_1\rangle &= c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle, \\ |t_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger + c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger] |0\rangle, \\ |t_{\bar{1}}\rangle &= c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, \\ |s_a\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger - c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger] |0\rangle, \\ |s_{1s}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger] |0\rangle, \\ |s_{2s}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger + c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger] |0\rangle. \end{aligned}$$

Los tres primeros estados son tripletes,  $(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 |t_i\rangle = S(S+1) |t_i\rangle = 2 |t_i\rangle$ , con  $i = \{-1, 0, 1\}$ , mientras que los últimos tres son singletes:  $(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 |s_a\rangle = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 |s_{1s}\rangle = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 |s_{2s}\rangle = 0$ . Por otro lado  $(S_1^z + S_2^z) |t_i\rangle = i |t_i\rangle$ , es decir, el subíndice  $i$  indica la proyección del espín total sobre el eje  $z$  de los estados  $|t_i\rangle$ . Está claro que el estado  $|t_i\rangle$  es el único de los seis estados de la base que tiene espín total 1 y  $(S_1^z + S_2^z) = i$ . Esto

implica que los  $|t_i\rangle$  son autoestados de  $\mathcal{H}$ . De hecho es simple verificar que:

$$(3.6) \quad \mathcal{H}|t_i\rangle = 0,$$

es decir, los tres tripletes tienen autovalor de energía nulo. El otro autoestado que está unívocamente determinado por su simetría es  $|s_a\rangle$  ya que se trata del único singlete antisimétrico ( $\mathcal{P}_{12}|s_a\rangle = -|s_a\rangle$ ). Al aplicarle el Hamiltoniano obtenemos:

$$(3.7) \quad \mathcal{H}|s_a\rangle = U|s_a\rangle.$$

Por último los estados  $|s_{1s}\rangle$  y  $|s_{2s}\rangle$  dan lugar a una matriz de  $2 \times 2$  ya que ambos son singletes y simétricos. Al aplicar  $\mathcal{H}$  sobre estos dos estados obtenemos:

$$(3.8) \quad \begin{aligned} \mathcal{H}|s_{1s}\rangle &= -2t|s_{2s}\rangle, \\ \mathcal{H}|s_{2s}\rangle &= -2t|s_{1s}\rangle + U|s_{2s}\rangle. \end{aligned}$$

Diagonalizando la matriz de  $2 \times 2$  asociada con este subespacio obtenemos las siguientes autoenergías y correspondientes autoestados:

$$(3.9) \quad \epsilon^\pm = \frac{U}{2} \pm \sqrt{\frac{U^2}{4} + 4t^2},$$

$$(3.10) \quad \begin{aligned} |s_-\rangle &= \alpha|s_{1s}\rangle + \beta|s_{2s}\rangle, \\ |s_+\rangle &= \beta|s_{1s}\rangle - \alpha|s_{2s}\rangle, \end{aligned}$$

con

$$(3.11) \quad \begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{1}{(1 + 16t^2/U^2)}}, \\ \beta &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{1}{(1 + 16t^2/U^2)}}. \end{aligned}$$

Veamos ahora cómo se interpretan estos autoestados. En límite no interactuante,  $U = 0$ , los autoestados de  $\mathcal{H}$  corresponden a determinantes de Slater de autoestados de una partícula. Los autoestados de una partícula son los orbitales simétricos y antisimétricos,  $(\phi_1(\mathbf{x}) \pm \phi_2(\mathbf{x}))/\sqrt{2}$ , con energías  $\mp 2t$ , y los correspondientes operadores de creación son

$$(3.12) \quad c_{\pm s}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{1s}^\dagger \pm c_{2s}^\dagger).$$

La figura 1 muestra los seis autoestados de dos partículas en el límite  $U = 0$ . Como se indica en la figura, en este límite, los estados  $|s_-\rangle$  y  $|s_+\rangle$  corresponden a doble ocupar el orbital “bonding” (simétrico) y “antibonding” (antisimétrico), respectivamente. Claramente  $|s_-\rangle$  es el estado fundamental para cualquier valor de  $U$ . De acuerdo con la ecuación (3.9), la energía

## 18 CDB, MAGNETISMO CUÁNTICO Y ELECTRONES CORRELACIONADOS

de cohesión correspondiente,  $\epsilon^-$ , es igual a  $-4t$  para  $U = 0$ , y su valor absoluto aumenta con  $U$ .

Veamos ahora qué ocurre en el límite  $U \gg |t|$ . En este límite, los autoestados se separan en dos subespacios con energías bien diferenciadas. Los estados  $|s_a\rangle$  y  $|s_+\rangle$  tienen autoenergías del orden de  $U$  mientras que los estados  $|t_1\rangle$ ,  $|t_0\rangle$ ,  $|t_{\bar{1}}\rangle$  y  $|s_-\rangle$ , tienen energías del orden de  $t$ . Nuevamente nos encontramos con un subespacio de baja energía generado por cuatro estados en que cada electrón está prácticamente localizado en uno de los átomos. Como ya vimos para el caso del ferromagnetismo atómico, para describir este subespacio de baja energía resulta conveniente introducir una base de estado puros de espín:

$$(3.13) \quad \{|s_1, s_2\rangle\}, \quad s_i = \uparrow, \downarrow.$$

El triplete de esta base se usa para representar a los estados  $|t_1\rangle$ ,  $|t_0\rangle$  y  $|t_{\bar{1}}\rangle$ , mientras que el singlete representa el estado  $|s_-\rangle$ :

$$(3.14) \quad \begin{aligned} |s_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |t_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |t_1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |t_{\bar{1}}\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Claramente, cualquier operador que actúa sobre los estados de la base (3.13) es una función de los operadores de espín  $\mathbf{S}_1$  y  $\mathbf{S}_2$ . Por otro lado, sabemos que la autoenergía del triplete es cero, mientras que la autoenergía del singlete  $|s_-\rangle$  es:

$$(3.15) \quad -4\frac{t^2}{U} + \mathcal{O}(t^4/U^3).$$

Esto implica que el Hamiltoniano efectivo de baja energía es:

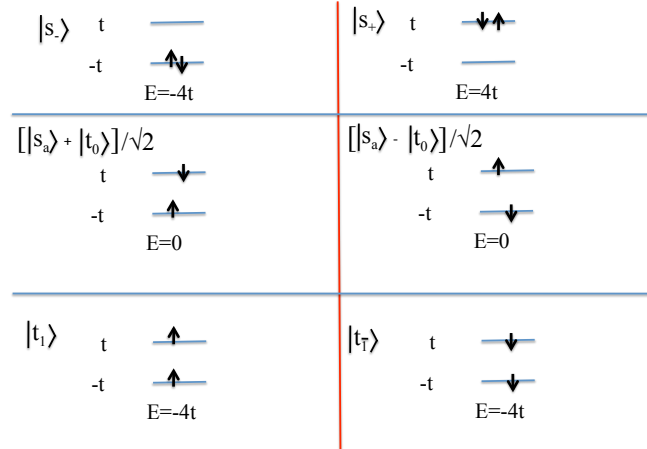
$$(3.16) \quad \tilde{\mathcal{H}} = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \frac{1}{4}),$$

con

$$(3.17) \quad J = 4\frac{t^2}{U} + \mathcal{O}(t^4/U^3).$$

Nuevamente hemos obtenido un Hamiltoniano efectivo de Heisenberg pero en este caso el acoplamiento inducido por el “hopping” entre orbitales atómicos es *antiferromagnético*. En este caso, el principio de exclusión de Pauli sólo permite que el singlete gane algo de energía cinética (3.15) ya que es el único estado de los cuatro en que los dos electrones pueden ocupar un mismo orbital atómico. A este acoplamiento antiferromagnético se lo suele llamar

de *superintercambio* para diferenciarlo del acoplamiento ferromagnético de intercambio que derivamos en la clase anterior.



**Figure 1.** Autoestados y autovalores de la molécula H<sub>2</sub> sin interacciones.

La interacción de superintercambio que acabamos de derivar es la que da origen al antiferromagnetismo que se observa en los cupratos superconductores y en muchísimos aislantes de Mott que existen en la naturaleza. Esto último lo veremos con mas detalle en las clases siguientes.

### 3.2. Modelo de Hubbard y Magnetismo Itinerante

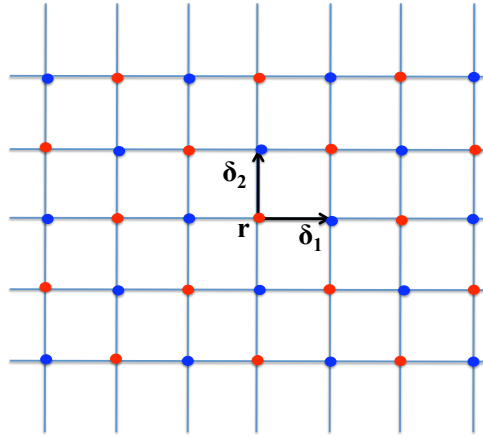
Habiendo analizado el caso de una molécula de H<sub>2</sub> correlacionada, es hora de pasar a la red. Un cristal es un arreglo periódico de infinitos átomos. Esto complica el problema significativamente respecto del ejemplo que acabamos de estudiar, ya que ahora el número de orbitales atómicos  $\{\phi_r\}$  es infinito. Al igual que en el caso de la molécula, para construir una teoría de bajas energías nos quedaremos con un único orbital  $\phi$  por átomo. Esto es una aproximación realista para muchos compuestos aunque hay también otros en que es necesario retener más de un orbital por átomo. El índice  $r$  denota la coordenada de cada átomo en la red cristalina de modo que el orbital atómico  $\phi_r$  tiene su centro en  $r$ :  $\phi_r(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x} - \mathbf{r})$ . La extensión natural de la molécula de Hubbard a la red da lugar al Hamiltoniano conocido como modelo de Hubbard:

$$(3.18) \quad \mathcal{H}_{\text{Hubb}} = \mathcal{H}_k + \mathcal{H}_u$$

$$(3.19) \quad \mathcal{H}_k = -t \sum_{\mathbf{r}, \delta, s} (c_{\mathbf{r}s}^\dagger c_{\mathbf{r}+\delta s} + c_{\mathbf{r}+\delta s}^\dagger c_{\mathbf{r}s}) - \mu \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}},$$

$$(3.20) \quad \mathcal{H}_u = U \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}s} n_{\mathbf{r}s},$$

donde  $\mu$  es el potencial químico que fija la densidad de electrones en valor medio,  $n_{\mathbf{r}s} = c_{\mathbf{r}s}^\dagger c_{\mathbf{r}s}$ , y  $n_{\mathbf{r}} = \sum_s c_{\mathbf{r}s}^\dagger c_{\mathbf{r}s}$ . Finalmente,  $\delta$  denota los vectores relativos que conectan un átomo dado de la red con sus primeros vecinos. La Fig.2 muestra el ejemplo de la red cuadrada.



**Figure 2.** Red cuadrada. Los círculos rojos y azules indican las subredes A y B.

Como primer paso veremos cómo se diagonaliza el problema en ausencia de interacciones ( $U = 0$ ). En tal caso sabemos que los autoestados de varias partículas son simplemente determinantes de Slater de autoestados de una partícula. Por otro lado, dada la simetría de translación de  $\mathcal{H}$ , los autoestados de una partícula son también autoestados del operador de translaciones, es decir, tienen cuasi-momento bien definido. Los correspondientes operadores de creación se obtienen a partir de una transformada de Fourier en la red de los operadores  $c_{\mathbf{r}s}^\dagger$ :

$$(3.21) \quad c_{\mathbf{k}s}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}s}^\dagger.$$

donde  $N$  es el número total de átomos en la red y hemos impuesto condiciones periódicas de contorno. El momento  $\mathbf{k}$  pertenece a la primera zona de Brillouin. De aquí en más supondremos que la red periódica de átomos es cuadrada y de tamaño  $2L \times 2L$ . Esto implica que  $\mathbf{k} = (n_x/L\pi, n_y/L\pi)$

con  $n_x$  y  $n_y$  enteros y  $-L < n_x, n_y \leq L$ . Dado que se trata de una transformación unitaria, la inversa viene dada por la siguiente expresión:

$$(3.22) \quad c_{\mathbf{r}s}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger.$$

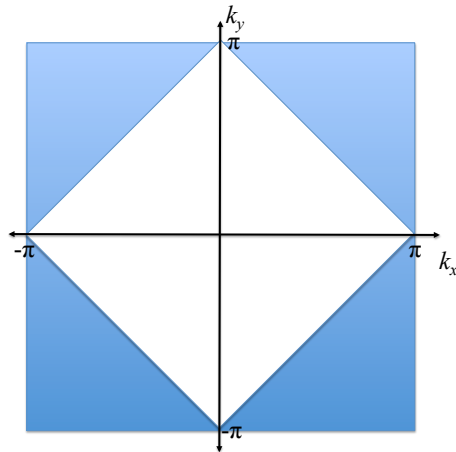
Reemplazando esta expresión en  $\mathcal{H}_k$  obtenemos su forma diagonal:

$$(3.23) \quad \mathcal{H}_k = \sum_{\mathbf{k}s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s},$$

con

$$(3.24) \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y).$$

Supongamos por un momento que el valor de  $\mu$  tal que la banda esta semillena, es decir, que en promedio hay un electrón por átomo. Este llenado de banda es especial por el siguiente motivo. Si hacemos  $U/|t|$  lo suficientemente grande, el sistema sufrirá una transición de metal a aislante ya que cada electrón se localizara alrededor de una átomo tal como vimos para el caso de la molécula. A esta transición metal-aislante se la conoce como transición de Mott. Como veremos más abajo, en el caso de la red cuadrada con hopping a primeros vecinos, la transición de Mott ocurre para  $U_c/|t| = 0$ . Es decir, un valor infinitesimal de  $U$  es suficiente para abrir un gap de carga en el espectro. La figura 3 muestra que la superficie de Fermi asociada con la relación de dispersión (3.24) es un cuadrado perfecto para el caso de banda semillena. Como veremos en la sección siguiente, esta propiedad de la superficie de Fermi da lugar a un ordenamiento antiferromagnético para valores de  $U/|t|$  arbitrariamente chicos.



**Figure 3.** Superficie de Fermi de una red cuadrada para banda semillena.

### 3.3. Onda de densidad de Espín

Aunque el modelo de Hubbard fue originalmente introducido para explicar el ferromagnetismo itinerante, el orden más robusto que aparece en el diagrama de fases de este modelo es el antiferromagnético. En particular, este ordenamiento predomina para el caso de un electrón por átomo. Esto es algo de esperar si pensamos en el acoplamiento antiferromagnético (superintercambio) que derivamos para la molécula de  $H_2$  en el límite  $U/|t| \gg 1$ . Motivados por esta observación propondremos la existencia de una “onda de espín” antiferromagnética

$$(3.25) \quad \langle n_{\mathbf{r}s} \rangle = \frac{n}{2} + \eta(s)e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}},$$

con  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ ,  $n = \langle n_{\mathbf{r}} \rangle$ , y  $\eta(s) = 1$  ( $\eta(s) = -1$ ) para  $s = \uparrow$  ( $s = \downarrow$ ). Esto da lugar a polarizaciones de espín opuestas en las subredes A y B indicadas en la figura 2:

$$(3.26) \quad \langle S_{\mathbf{r}}^z \rangle = me^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} = \begin{cases} m & \text{if } \mathbf{r} \in A \\ -m & \text{if } \mathbf{r} \in B \end{cases}$$

Un argumento de continuidad nos indica que la modulación de espín  $m$  debe ser pequeña para valores chicos de  $U/|t|$ . Esta es la razón por la que en el régimen de acoplamiento débil,  $U/|t| \ll 1$ , se habla de onda de espín. Sólo los electrones que están muy cerca del nivel de Fermi contribuyen a la onda de magnetización.

El siguiente paso es hacer una aproximación de campo medio sobre el término  $\mathcal{H}_u$ . La tratamiento de campo medio consiste en aproximar el término de interacción (cuártico en los fermiones) por un término cuadrático:

$$(3.27) \quad n_{\mathbf{r}\uparrow}n_{\mathbf{r}\downarrow} \simeq \langle n_{\mathbf{r}\uparrow} \rangle n_{\mathbf{r}\downarrow} + n_{\mathbf{r}\uparrow} \langle n_{\mathbf{r}\downarrow} \rangle - \langle n_{\mathbf{r}\uparrow} \rangle \langle n_{\mathbf{r}\downarrow} \rangle.$$

Reemplazando esta expresión en  $\mathcal{H}_u$  obtenemos:

$$(3.28) \quad \mathcal{H}_u \simeq U \sum_{\mathbf{r}s} n_{\mathbf{r}s} \langle n_{\mathbf{r}\bar{s}} \rangle - U \sum_{\mathbf{r}} \langle n_{\mathbf{r}\uparrow} \rangle \langle n_{\mathbf{r}\downarrow} \rangle$$

Si ahora escribimos  $\mathcal{H}_u$  en la misma base con momento definido [(3.22)] que usamos para diagonalizar  $\mathcal{H}_k$ , obtenemos

$$(3.29) \quad U \sum_{\mathbf{r}s} n_{\mathbf{r}s} \langle n_{\mathbf{r}\bar{s}} \rangle = \frac{Un}{2} \sum_{\mathbf{r}s} n_{\mathbf{k}s} - Um \sum_{\mathbf{k}s} \eta(s) (c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s})$$

En lo que sigue omitiremos el término constante que aparece en la ecuación (3.28) ya que no contribuye a los autoestados del Hamiltoniano. De este



modo, el Hamiltoniano en la aproximación de campo medio es:

$$(3.30) \quad \mathcal{H}_{sdw} = \sum_{\mathbf{k} \in \text{ZBR}_s} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s} - Um\eta(s) (c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s}),$$

con

$$(3.31) \quad \begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} &= \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu, \\ \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} &= \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu. \end{aligned}$$

donde hemos renormalizado el potencial químico  $\tilde{\mu} = \mu - Un/2$ . Con ZBR indicamos la “zona de Brillouin reducida”. El orden antiferromagnético incrementa el tamaño de la celda unidad y esto a su vez reduce la zona de Brillouin. En particular, la ZBR para el caso considerado corresponde a la región blanca de la figura 3 ya que coincide con el volumen de Fermi. Correspondientemente con este incremento de la celda unidad, o ruptura de la simetría de translación, aparece un nuevo canal de scattering que conecta  $\mathbf{k}$  con  $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$  (dos vectores de onda que son equivalentes para el nuevo grupo de translaciones asociado con la red antiferromagnética). Dado que  $2\mathbf{Q} = \mathbf{O}$  ( $\mathbf{k} + 2\mathbf{Q} = \mathbf{k}$ ), este scattering conecta vectores de onda de a pares y  $\mathcal{H}_{sdw}$  se puede escribir como una suma de  $N/2$  términos desacoplados:

$$(3.32) \quad \mathcal{H}_{sdw} = \sum_{\mathbf{k} \in \text{ZBR}_s} \mathcal{H}_{\mathbf{k}s},$$

con

$$(3.33) \quad \mathcal{H}_{\mathbf{k}s} = \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s} - Um\eta(s) (c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s}).$$

De modo que lo único que hace falta para diagonalizar  $\mathcal{H}_{\mathbf{k}s}$  es diagonalizar las matrices de  $2 \times 2$

$$(3.34) \quad \begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} & -Um\eta(s) \\ -Um\eta(s) & \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix}$$

Los autovalores de esta matriz son

$$(3.35) \quad \lambda^\pm(\mathbf{k}) = -\tilde{\mu} \pm \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + U^2 m^2},$$

donde hemos usado que  $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}$ .  $\lambda^+(\mathbf{k})$  y  $\lambda^-(\mathbf{k})$  son las dos nuevas bandas que se forman a partir de la hibridización efectiva generada por el orden antiferromagnético. Notemos que, aunque la matriz depende del índice de esín  $s$ , los autovalores son independientes de  $s$  (aunque los autovectores por supuesto dependen de  $s$ ). Esto simplemente refleja el hecho de que los estados  $\uparrow$  y  $\downarrow$  juegan in rol simétrico en la formación del estado antiferromagnético. Por otro lado, implica que los estados de las bandas  $\lambda^+(\mathbf{k})$  y  $\lambda^-(\mathbf{k})$  siguen teniendo degeneración dos aunque en este caso la operación de simetría que los conecta es el producto de la inversión temporal y una

translación en un parámetro de red (nótese que esta transformación deja el estado antiferromagnético invariante).

La energía por sitio del estado fundamental corresponde a ocupar los  $N_e$  niveles de más baja energía:

$$(3.36) \quad e_g(m) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu=\pm, T=0} f_{\mathbf{k}\nu}(T=0) \lambda^\nu(\mathbf{k}) - U \left( \frac{n^2}{4} - m^2 \right)$$

Donde  $f_{\mathbf{k}\nu}(T)$  es la función de Fermi:

$$(3.37) \quad f_{\mathbf{k}\nu}(T) = \frac{1}{e^{-\lambda^\nu(\mathbf{k})/k_B T} + 1},$$

y el potencial químico se ajusta para fijar la densidad media de electrones:

$$(3.38) \quad \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\nu} = n.$$

### 3.4. Ecuación del gap

Para obtener el valor de  $m$  consideramos que es un parámetro variacional y simplemente requerimos que

$$(3.39) \quad \frac{\partial e_g}{\partial m} = 0.$$

A partir de aquí supondremos que  $n < 1$  y por lo tanto sólo la banda  $\lambda^-(\mathbf{k})$  está ocupada a  $T = 0$ . Esta suposición no resta generalidad debido a que el modelo tiene simetría partícula-hueco. En general, existen dos soluciones para la ecuación (3.39):  $m = 0$  (estado paramagnético) o  $m$  determinado por la ecuación

$$(3.40) \quad 1 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{U f_{\mathbf{k}-}(T=0)}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}},$$

donde hemos introducido la notación

$$(3.41) \quad \Delta = U m.$$

Aunque la solución  $m = 0$  existe siempre, no siempre corresponde al mínimo global de energía. Naturalmente estamos interesados en caso en que mínimo global corresponde a la solución con  $m \neq 0$ . Como ya hemos visto, el borde de la ZBR coincide con la superficie de Fermi para el caso de banda semillena. Dada la simetría electron-hueco del problema,  $\epsilon_{\mathbf{k}} = -\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ , el borde de la ZBR está definido por la condición:  $\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$ . Esto implica que sobre el borde de la RBZ tenemos:

$$(3.42) \quad \lambda^\pm = -\tilde{\mu} \pm \Delta$$

En otras palabras, las nuevas bandas  $\lambda^\pm$  generadas por la onda de densidad de espín están separadas por un gap  $2\Delta$ . Para densidad electrónica  $n = 1$  (un electrón por átomo), la banda inferior esta llena mientras que la banda superior esta vacía. Esto implica que la onda de densidad de espín induce una transición de un estado metálico a otro aislante.

Veamos ahora cómo es el comportamiento de  $\Delta$  en el límite de acoplamiento débil  $U/|t| \ll 1$  y para  $n = 1$ . Usando la simetría de la densidad de estados  $\rho(\epsilon)$  alrededor del centro de la banda,  $\rho(\epsilon) = \rho(-\epsilon)$ , podemos reescribir la ec.(3.40) como

$$(3.43) \quad 1 = U \int_0^{W/2} \frac{\rho(\epsilon)d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}},$$

donde  $W$  es el ancho de banda. Dividiendo la integral en dos partes obtenemos:

$$(3.44) \quad 1 \simeq U \int_0^\Delta \frac{d\epsilon\rho(0)}{\Delta} + U \int_\Delta^{W/2} \frac{d\epsilon\rho(\epsilon)}{\epsilon} \simeq U\rho(0)[1 + \ln(W/2\Delta)]$$

El segundo término claramente domina para  $\Delta$  suficientemente chico dando

$$(3.45) \quad \Delta \simeq \frac{W}{2} e^{-U/\rho(0)} \simeq t e^{-t/U}.$$

Es interesante notar que el gap tiene una dependencia no analítica en  $U$  lo cual indica que el radio de convergencia de una expansión perturbativa en  $U/|t|$  es igual a zero. En otras palabras, el problema no es perturbativo en el parámetro chico  $U/|t|$ . Otro punto importante es que la divergencia logarítmica de la integral (3.43) da lugar a la estabilización de una onda de densidad de espín para  $U$  arbitrariamente chico. En particular, la esta observación sumada a las ecs.(3.41) y (3.42), implica que la transición de Mott ocurre para  $U_c = 0$ . Por último notemos que la divergencia logarítmica de la integral (3.43) tiene su origen en la propiedad de “nesting” de la superficie de Fermi a banda semillena:  $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$  sobre una *línea* de puntos de la superficie de Fermi. Esto hace que el integrando de la ec.(3.40) tenga una línea de polos que da lugar a una divergencia logarítmica en dimensión  $d = 2$ .

En realidad, el caso de la red cuadrada que hemos estado considerando es un poco diferente porque porque la densidad de estados tiene una divergencia logarítmica para  $\epsilon \rightarrow 0$ . El resultado correcto es:

$$(3.46) \quad 1 \simeq U \int_0^\Delta \frac{d\epsilon}{t\Delta} \ln t/\epsilon + U \int_\Delta^t \frac{d\epsilon}{\epsilon t} \ln t/\epsilon \simeq \frac{U}{t} \ln \frac{t}{\Delta} + \frac{U}{t} \ln^2 \frac{t}{\Delta},$$

que da lugar a la expresión final del gap

$$(3.47) \quad \Delta \simeq t e^{-\sqrt{t/U}}.$$

**Exercise 6.** Resolver exactamente el problema de la molécula de  $H_2$  en presencia de un término de repulsión Coulombiana  $U_{12}n_1n_2$  con  $U_{12} < U$ . Cuál es la expresión de la constante de superintercambio para  $U - U_{12} \gg |t|$ ?

**Exercise 7.** Use la aproximación de campo medio que usamos en la red para resolver el problema de la molécula de Hubbard con dos electrones. Compare la solución de campo medio con la exacta. Compare con la solución de campo medio en la red infinita.

**Exercise 8.** Suponga que la densidad de estados es uniforme dentro de una banda de energía de ancho  $W$ :

$$(3.48) \quad \rho(\epsilon) = \begin{cases} 1/W & \text{if } -\frac{W}{2} \leq \epsilon \leq \frac{W}{2} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Calcule  $\Delta$ ,  $m$  y  $e_g(U)$ .

**Exercise 9.** En ausencia de nesting, la onda de densidad de espín aparece para un valor crítico finito  $U_{cr}$ . Derive la expresión del gap en función de  $U$  y  $U_{cr}$  suponiendo que  $U - U_{cr} \ll |t|$ .

**Exercise 10.** Derive la expresión de los operadores de creación de quasipartículas en presencia de la onda de densidad de espín. Esto es los operadores que diagonalizan el  $\mathcal{H}_{sdw}$ .