

LECTURE 3

Modelo de Hubbard II

4.1. Temperatura finita

En la clase anterior derivamos las expresiones del gap y del parámetro de orden a temperatura zero para una onda de densidad de espín antiferromagnética:

$$(4.1) \quad \langle S_{\mathbf{r}}^z \rangle = m e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}.$$

En particular vimos que, bajo la aproximación de campo medio, el Hamiltoniano con interacciones se reduce a un problema de una partícula que se mueve en el campo efectivo que producen las demás. Los correspondientes autoestados de una partícula son

$$(4.2) \quad \lambda^{\pm}(\mathbf{k}) = -\tilde{\mu} + \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}.$$

También vimos que la energía por sitio, o densidad de energía, tiene una contribución constante que viene del término $U\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ y que es igual a $U(m^2 - n^2/4)$. A partir de aquí nos concentraremos únicamente en el caso de banda semillena $n = 1$. La teoría de temperatura finita se obtiene a partir de minimizar la densidad de energía libre:

$$(4.3) \quad \frac{1}{N}\Omega(T, \mu, \Delta) = -\frac{U}{4} + \frac{\Delta^2}{U} - \frac{k_B T}{N} \ln \left\{ \prod_{\mathbf{k}\sigma\nu} \left[1 + e^{-\frac{\lambda_{\sigma}^{\nu}(\mathbf{k})}{k_B T}} \right] \right\}$$

Dado que la densidad de estados $\rho(\epsilon)$ es simétrica alrededor de $\epsilon = 0$ (simetría electrón-hueco), el potencial químico se fija en $\tilde{\mu} = \mu - U/2 = 0$, y este valor no depende de la temperatura. Insertando la ecuación (4.2) en

(4.4) obtenemos la siguiente expresión de la densidad de energía libre:

$$(4.4) \quad \frac{1}{N} \Omega(T, \mu, \Delta) = -\frac{U}{4} + \frac{\Delta^2}{U} - \frac{k_B T}{N} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left\{ 4 \cosh^2 \frac{\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}}{2k_B T} \right\}$$

Minimizando la densidad de energía libre en función de Δ obtenemos la ecuación del gap a temperatura finita:

$$(4.5) \quad \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{U}{\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}}{2k_B T} = 1.$$

A $T = 0$ recobramos la ecuación (3.40). Por otro lado sabemos que el antiferromagnetismo debería desaparecer por encima de una temperatura crítica T_N . Es decir que tanto m como $\Delta = Um$ son zero para $T \geq T_N$. Veamos ahora como colapsa el gap cuando la temperatura se aproxima al valor crítico T_N . Suponiendo que la densidad de estados es constante obtenemos:

$$(4.6) \quad \frac{W}{U} = \int_0^{W/2} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}}{2k_B T}.$$

El valor de T_N se obtiene de esta ecuación haciendo $\Delta = 0$:

$$(4.7) \quad \begin{aligned} \frac{W}{U} &= \int_0^{W/2} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}}{2k_B T} \frac{d\epsilon}{\epsilon} = \int_0^{W/4k_B T_N} \tanh x \frac{dx}{x} \\ &= \ln(W/4k_B T_N) \tanh \frac{W}{4k_B T_N} - \int_0^{W/4k_B T_N} \frac{\ln x dx}{\cosh^2 x}. \end{aligned}$$

En el límite de acoplamiento débil, $U \ll |t|$, podemos suponer que $k_B T_N \ll W$. Por lo tanto $\tanh \frac{W}{4k_B T_N} \simeq 1$ y el límite superior de la integral del segundo término de puede extender hasta infinito. El resultado de esta integral es $-\ln 4\gamma/\pi$ con $\gamma = e^{\gamma_E}$ (γ_E es la constante de Euler). Por lo tanto:

$$(4.8) \quad k_B T_N = W \frac{\gamma}{\pi} e^{-W/U}.$$

La relación entre la temperatura crítica T_N y el gap a $T = 0$ es

$$(4.9) \quad 2\Delta(T = 0) \simeq 3.35 k_B T_N.$$

Esta relación es la misma que la que se obtiene en la teoría BCS que describe el estado superconductor (en lugar de antiferromagético) en el límite de acoplamiento débil.

Para estudiar la dependencia funcional del gap, $\Delta(T)$, cerca de T_N , expandimos la integral de la ec.(4.6) hasta el orden Δ^2 . El resultado es:

$$(4.10) \quad \ln \frac{T}{T_N} = \ln \left(1 - \frac{T_N - T}{T_N} \right) \simeq \frac{T - T_N}{T_N} = -A\Delta^2$$

con $A > 0$. Es decir que cerca del punto crítico Δ se va a zero como $\sqrt{T_N(T_N - T)}$:

$$(4.11) \quad \Delta(T) \simeq \sqrt{\frac{8\pi^2}{7\zeta(3)}} k_B T_N \sqrt{1 - \frac{T}{T_N}} \simeq 3.96 k_B \sqrt{T_N(T_N - T)}.$$

Este exponente crítico $1/2$ es el característico de transiciones fase descritas a nivel de campo medio.

El cambio de la densidad de energía libre cerca de T_N se puede aproximar por:

$$(4.12) \quad \begin{aligned} \Omega(\Delta) - \Omega(\Delta = 0) &\simeq \frac{\Delta^2}{U} - \frac{2\Delta^2}{W} \int_0^{W/2} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T_N}\right) \frac{d\epsilon}{\epsilon} \\ &= \Delta^2 \left(\frac{1}{U} - \frac{2}{W} \ln \frac{\gamma W}{\pi k_B T} \right) \\ &= \Delta^2 \left[\frac{1}{U} - \frac{2}{W} \ln \frac{\gamma W}{\pi k_B T_N} - \frac{2}{W} \frac{(T_N - T)}{T_N} \right] \\ &= -\frac{2\Delta^2}{W} \frac{(T_N - T)}{T_N} = -\frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} \frac{k_B^2}{W} (T_N - T)^2. \end{aligned}$$

La onda de densidad de espín genera una contribución finita al calor específico, $C_v = -T(\partial^2 \Omega / \partial T^2)$, a $0 < T \leq T_N$. Esta contribución desaparece por encima de la temperatura crítica T_N dando lugar a un escalón o discontinuidad. La forma de esta anomalía del calor específico es un sello de la teoría de campo medio en el límite de acoplamiento débil. La magnitud de la discontinuidad que aparece a $T = T_N$ es:

$$(4.13) \quad C_v(T = T_N - 0) - C_v(T = T_N + 0) = \frac{16\pi^2}{7\zeta(3)} k_B^2 \rho(\epsilon_F) T_N,$$

donde recordamos que $1/W$ corresponde a $\rho(\epsilon_F)$. Dado que en la aproximación de campo medio el calor específico para $T > T_N$ tiene que coincidir con el de la teoría no interactuante,

$$(4.14) \quad C_v(T = T_N + 0) = \frac{2\pi^2}{3} k_B^2 \rho(\epsilon_F) T_N,$$

deducimos que el cociente universal asociado con el salto del calor específico en el límite de acoplamiento débil es:

$$(4.15) \quad \frac{C_v(T = T_N - 0) - C_v(T = T_N + 0)}{C_v(T = T_N + 0)} = \frac{12}{7\zeta(3)} \simeq 1.43.$$

4.2. U Negativo y Simetrías del Modelo de Hubbard

En esta sección veremos que el modelo de Hubbard con hopping a primeros vecinos y banda semillena contiene algunas simetrías adicionales si la red es bipartita. Una red es bipartita si y sólo si se puede separar en dos subredes, A y B , y los primeros vecinos de una sitio en una subred dada pertenecen a la otra subred. Ejemplos de redes bipartitas son la cadena lineal, la red cuadrada, la red panal de abejas (“honeycomb”), la red cúbica, etc. Supongamos entonces que tenemos un modelo de Hubbard con hopping a primeros vecinos sobre una red bipartita:

$$(4.16) \quad \mathcal{H}_{\text{Hubb}} = -t \sum_{\mathbf{r}, \delta} (c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}+\delta} + c_{\mathbf{r}+\delta}^{\dagger} c_{\mathbf{r}}) - U \sum_{\mathbf{r}} (n_{\mathbf{r}\uparrow} - 1/2)(n_{\mathbf{r}\downarrow} - 1/2) - \mu \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}}.$$

Ya sabemos que $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$ es invariante ante una rotación global del espín. En particular, la expresión local de esta invariancia se manifiesta del siguiente modo:

$$(4.17) \quad [\mathcal{H}_{\text{Hubb}}, \mathbf{S}_T] = 0,$$

donde

$$(4.18) \quad \mathbf{S}_T = \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}}.$$

Recordemos el operador de rotación en un ángulo φ alrededor del versor $\hat{\mathbf{n}}$ es:

$$(4.19) \quad \mathcal{U}_{\varphi} = e^{i\varphi \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_T}.$$

En particular, la ecuación (4.17) se obtiene expandiendo la ecuación de invariancia de $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$ ante rotaciones finitas,

$$(4.20) \quad e^{i\varphi \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_T} \mathcal{H}_{\text{Hubb}} e^{-i\varphi \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}_T} = \mathcal{H}_{\text{Hubb}},$$

hasta el orden lineal en φ .

Veamos que ocurre cuando realizamos la siguiente transformación electrón-hueco en uno de los canales de espín:

$$(4.21) \quad \begin{aligned} \tilde{c}_{\mathbf{r}\uparrow} &= c_{\mathbf{r}\uparrow}, \\ \tilde{c}_{\mathbf{r}\downarrow} &= e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{r}\downarrow}^{\dagger}. \end{aligned}$$

Esta es una transformación canónica ya que conserva las relaciones de anticonmutación. Usando la transformación (4.21) podemos reescribir el Hamiltoniano de Hubbard en función de los nuevos operadores fermiónicos:

$$(4.22) \quad \mathcal{H}_{\text{Hubb}} = -t \sum_{\mathbf{r}, \delta} (c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}+\delta} + c_{\mathbf{r}+\delta}^{\dagger} c_{\mathbf{r}}) - U \sum_{\mathbf{r}} (n_{\mathbf{r}\uparrow} - 1/2)(n_{\mathbf{r}\downarrow} - 1/2) - h \sum_{\mathbf{r}} \tilde{S}_{\mathbf{r}}^z.$$

Para derivar esta expresión hemos usando que $\tilde{n}_{rs}^2 = \tilde{n}_{rs}$. Notemos que el modelo obtenido en los nuevos operadores fermiónicos sólo difiere del original en dos aspectos. El primero es que el signo de U ha cambiado, es decir, la interacción local repulsiva se a vuelto *atractiva*. El segundo aspecto es que el término de potencial químico se ha convertido en un campo magnético efectivo a lo largo del eje z :

$$(4.23) \quad \mathbf{h} = h\hat{\mathbf{z}} = 2\mu\hat{\mathbf{z}}.$$

En otras palabras, el último término de la ec.(4.22) se puede interpretar como una interacción de Zeeman entre el campo \mathbf{h} y la “magnetización” total $\tilde{\mathbf{S}}_T$: $\mathbf{h} \cdot \tilde{\mathbf{S}}_T$. El caso de banda semillena se obtiene para $\mu = h = 0$. En este caso, la expresión (4.22) se vuelve explícitamente invariante ante las rotaciones generadas por

$$(4.24) \quad \tilde{\mathbf{S}}_T = \sum_{\mathbf{r}} \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}}.$$

Es decir,

$$(4.25) \quad [\mathcal{H}_{\text{Hubb}}, \tilde{\mathbf{S}}_T] = 0.$$

Es simple verificar que las componentes de $\tilde{\mathbf{S}}_T$ transforman como las componentes de un momento angular, es decir, cierran un álgebra $\text{su}(2)$:

$$(4.26) \quad [\tilde{S}^\mu, \tilde{S}^\nu] = i\epsilon^{\mu\nu\gamma} \tilde{S}^\gamma.$$

La ec.(4.25) complementa la ec.(4.17) y nos dice que, en el límite de banda semillena y para una red bipartita, el grupo de simetrías de $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$ se expande a $\text{SO}(4)=\text{SU}(2)\otimes\text{SU}(2)$. Los generadores la nueva álgebra $\text{su}(2)$ son:

$$(4.27) \quad \begin{aligned} \tilde{S}_T^z &= \sum_{\mathbf{r}} \tilde{S}_{\mathbf{r}}^z = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} (n_{\mathbf{r}\uparrow} + n_{\mathbf{r}\downarrow} - 1), \\ \tilde{S}_T^y &= \sum_{\mathbf{r}} \tilde{S}_{\mathbf{r}}^y = \frac{1}{2i} \sum_{\mathbf{r}} (c_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger - c_{\mathbf{r}\downarrow} c_{\mathbf{r}\uparrow}), \\ \tilde{S}_T^x &= \sum_{\mathbf{r}} \tilde{S}_{\mathbf{r}}^x = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} (c_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger + c_{\mathbf{r}\downarrow} c_{\mathbf{r}\uparrow}). \end{aligned}$$

Esta nueva simetría $\text{SU}(2)$ afecta al canal de carga y, como veremos en la siguiente sección, tiene consecuencias interesantes para fases ordenadas del modelo de Hubbard con U atractivo. Por otro lado, la transformación canónica (4.21) permite mapear las soluciones del modelo de Hubbard con $U > 0$ en soluciones del modelo de Hubbard con $U < 0$. Dado que esta transformación intercambia los canales de carga y de espín (los generadores del álgebra $\text{su}(2)$ de espín se mapean en los generadores del álgebra $\text{su}(2)$

de carga y viceversa), es interesante preguntarnos en qué fase se mapea la onda de densidad de espín que encontramos para el caso de $U > 0$.

4.3. Magnetismo y Superconductividad

En las secciones anteriores vimos que el modelo de Hubbard de $U > 0$ tiene un estado fundamental que incluye una onda de densidad de espín. Aunque consideramos el caso de una onda de spines polarizados a lo largo del eje z ,

$$(4.28) \quad \langle S_{\mathbf{r}}^z \rangle = m_z e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}},$$

esta claro que, dada la simetría de rotación de $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$, existen también las soluciones en que los espines están polarizados a lo largo de un eje arbitrario $\hat{\mathbf{n}}$. En general, cualquiera de estos casos corresponde a una combinación lineal de las tres componentes de la magnetización local o parámetro de orden antiferromagnético. La primera está dada por la ec.(4.28), mientras que las otras dos son:

$$(4.29) \quad \begin{aligned} \langle S_{\mathbf{r}}^x \rangle &= m_x e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}, \\ \langle S_{\mathbf{r}}^y \rangle &= m_y e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned}$$

Estas dos componentes se pueden combinar del siguiente modo:

$$(4.30) \quad \begin{aligned} \langle S_{\mathbf{r}}^+ \rangle &= \langle S_{\mathbf{r}}^x \rangle + i\langle S_{\mathbf{r}}^y \rangle = m_+ e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}, \\ \langle S_{\mathbf{r}}^- \rangle &= \langle S_{\mathbf{r}}^x \rangle - i\langle S_{\mathbf{r}}^y \rangle = m_- e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned}$$

con $m_{\pm} = m_x \pm im_y$. Sabemos que, si la red es bipartita y la banda semilena, la transformación canónica (4.21) mapea U en $-U$. Por lo tanto, para saber cuáles son la componentes del parámetro de orden que caracteriza el estado fundamental correspondiente al caso $U < 0$ simplemente tenemos que aplicar la transformación canónica a las tres componentes (4.28) y (4.30). La componente z se mapea en una onda de densidad de carga:

$$(4.31) \quad \langle S_{\mathbf{r}}^z \rangle = \left\langle \frac{1 - \tilde{n}_{\mathbf{r}}}{2} \right\rangle = m_z e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}},$$

mientras que las componentes $+$ y $-$ se mapean en un parámetro de orden superconductor singlete (tipo s) y su conjugado:

$$(4.32) \quad \begin{aligned} \langle \tilde{c}_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger \rangle &= e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \langle S_{\mathbf{r}}^+ \rangle = m_+ e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}, \\ \langle \tilde{c}_{\mathbf{r}\downarrow} \tilde{c}_{\mathbf{r}\uparrow} \rangle &= e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \langle S_{\mathbf{r}}^- \rangle = m_+^* e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned}$$

Esta simple observación explica el origen de la similaridad que encontramos entre la teoría de ondas de densidad de espín y la teoría BCS. La transformación canónica (4.21) mapea la componente z de la onda de densidad de espín en una onda de densidad de carga y las componentes x e y en una fase superconductor singlete tipo s . La simetría $SU(2)$ de carga que encontramos en la sección anterior permite rotar la onda de densidad

de carga en un estado superconductor y viceversa. Este es el motivo por el que ambos estados están degenerados para banda semillena. Es fácil convencerse de que la inclusión de un potencial químico finito (sistema fuera de la condición de banda semillena) estabiliza la fase superconductor respecto de la onda de densidad de carga.

Exercise 11. Demuestre explícitamente que las componentes del vector $\tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}}$ tienen las mismas relaciones de conmutación que las componentes de un momento angular, es decir, cierran un álgebra $\mathfrak{su}(2)$.

Exercise 12. Demuestre explícitamente que el Hamiltoniano de Hubbard es invariante ante rotaciones globales de espín. En otras palabras, demuestre que $[\mathcal{H}_{\text{Hubb}}, \mathbf{S}_T] = 0$.

Exercise 13. Suponga que al Hamiltoniano de Hubbard con $U > 0$ (repulsivo) le sumamos una interacción de Zeeman de la forma: $B \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^z$. Cómo se transforma este término ante la transformación canónica (4.21)? El término de Zeeman favorece una fase antiferromagnética canteda con una componente uniforme de la magnetización a lo largo del eje z y una componente antiferromagnética en el plano xy . Cuál es la fase correspondiente para el caso de $U < 0$?

Exercise 14. Suponga ahora que al Hamiltoniano de Hubbard con $U > 0$ (repulsivo) le sumamos una interacción de Ising de la forma

$$(4.33) \quad J_z \sum_{\mathbf{r}\delta} S_{\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{r}+\delta}^z,$$

con $J_z > 0$ (interacción antiferromagnética). Cómo se transforma este término ante la transformación canónica (4.21)? Está claro que el término de Ising estabiliza el estado fundamental antiferromagnético con los espines polarizados a lo largo del eje z respecto del antiferromagnetismo en el plano xy . Cuál es la contrapartida de este fenómeno en el caso de $U < 0$?

34 CDB, MAGNETISMO CUÁNTICO Y ELECTRONES CORRELACIONADOS

Exercise 15. Demuestre que la ecuación variacional (3.39) es equivalente a la ecuación de autoconsistencia que se obtiene al calcular $\langle S^z(\mathbf{r}) \rangle$.