

LECTURE 4

Modelo de Hubbard III

5.1. Acoplamiento Fuerte: Teoría de Perturbaciones Degeneradas

En las secciones anteriores hemos considerado una aproximación de campo medio que describe correctamente la onda de densidad de espín que emerge en el estado fundamental del modelo de Hubbard a banda semillena cuando la red es cuadrada. Esta misma teoría se puede aplicar al caso general de cualquier red hipercúbica sin que hayan cambios cualitativos en los resultados. Como ya hemos visto, la aproximación de campo medio se aplica al término de interacción. Por lo tanto no esperamos que esta aproximación funcione bien cuando dicho término pasa a ser dominante, es decir, en el límite de acoplamiento fuerte $U \gg |t|$. En este límite es conveniente usar una estrategia totalmente diferente para abordar el problema y ese será el tema central de esta clase.

Dado que queremos analizar el caso $U \gg |t|$ comenzaremos suponiendo que $t = 0$. En este límite los autoestados de \mathcal{H}_u son determinantes de Slater en el espacio real con autovalores $n_d U$, donde n_d es el número de átomos doblemente ocupados en el autoestado correspondiente. Sin pérdida de generalidad vamos a suponer que el número total de electrones, N_e , es menor o igual que el número total de átomos en la red N . Como primer paso vamos a descomponer el espacio de Hilbert en suma directa de dos subespacios. El subespacio $\tilde{\mathcal{S}}$ generado por los autoestados, $|\tilde{\psi}_\nu\rangle$, de \mathcal{H}_u con *autovalor nulo* (sin doble ocupación) y el subespacio ortogonal, $\tilde{\mathcal{S}}^\perp$, generado por todos los autoestados $|\tilde{\phi}_\nu\rangle$ de \mathcal{H}_u con autovalor no nulo (al menos un sitio doblemente ocupado). Claramente la dimensión de $\tilde{\mathcal{S}}$ o degeneración del estado fundamental de \mathcal{H}_u aumenta exponencialmente en el tamaño del sistema.

Supongamos ahora que incluimos el término \mathcal{H}_t como una perturbación, bajo la suposición de que $|t| \ll U$. Es de esperar que \mathcal{H}_t remueva la degeneración exponencial que encontramos para $t = 0$. Lo que nos dice la teoría de perturbaciones degeneradas es que el primer paso para calcular cómo se remueve la degeneración es proyectar la perturbación, \mathcal{H}_t , en el subespacio de estados degenerados $\tilde{\mathcal{S}}$. Sin embargo, la situación se complica un poco más si intentamos ir por el siguiente orden (t^2/U) en la expansión perturbativa. Para tal efecto introduciremos el formalismo conocido como *transformación canónica*.

La idea es introducir una transformación unitaria, e^{-S} , tal que aplicada sobre los autoestados no perturbados, $|\tilde{\psi}_\nu\rangle$, nos da los autoestados $|\psi_\nu\rangle$ que incluyen la corrección de orden t/U :

$$(5.1) \quad |\psi_j\rangle = e^{-S}|\tilde{\psi}_j\rangle$$

con

$$(5.2) \quad |\psi_j\rangle = |\tilde{\psi}_j\rangle - \sum_l \frac{\langle \tilde{\phi}_l | \mathcal{H}_t | \tilde{\psi}_j \rangle}{U} |\tilde{\phi}_l\rangle + \mathcal{O}(t^2/U^2).$$

S es un operador antihermítico que genera la transformación canónica. Notemos que $|\psi_j\rangle$ es el estado que se obtiene a partir de aplicar la fórmula de teoría de perturbaciones de primer orden pero restringiéndonos a los elementos de matriz que conectan $\tilde{\mathcal{S}}$ con $\tilde{\mathcal{S}}^\perp$. Como la perturbación aplicada una vez sobre un estado $|\tilde{\psi}_j\rangle$ no puede generar más que un sitio doblemente ocupado, el denominador es siempre igual a $-U$ cuando el elemento de matriz $\langle \tilde{\phi}_l | \mathcal{H}_t | \tilde{\psi}_j \rangle$ es no nulo.

La transformación canónica transforma el subespacio $\tilde{\mathcal{S}}$ en un nuevo subespacio de bajas energías \mathcal{S} generado por los estados $|\psi_j\rangle$. Por otro lado está claro que es siempre más conveniente trabajar en la base de estados no perturbados $|\tilde{\psi}_j\rangle$ ya que se pueden expresar más simplemente en términos de los operadores fermiónicos. Veamos entonces qué ocurre si restringimos el operador $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$ al subespacio \mathcal{S} . Los elementos de matriz del operador restringido son:

$$(5.3) \quad \langle \psi_j | \mathcal{H}_{\text{Hubb}} | \psi_k \rangle = \langle \tilde{\psi}_j | e^S \mathcal{H}_{\text{Hubb}} e^{-S} | \tilde{\psi}_k \rangle = \langle \tilde{\psi}_j | \tilde{\mathcal{H}} | \tilde{\psi}_k \rangle$$

En otras palabras, el “Hamiltoniano efectivo”

$$(5.4) \quad \tilde{\mathcal{H}} = \tilde{\mathcal{P}} e^S \mathcal{H}_{\text{Hubb}} e^{-S} \tilde{\mathcal{P}}$$

opera sobre la base de estados $\{|\tilde{\psi}_j\rangle\}$ y reproduce el espectro del Hamiltoniano original restringido al subespacio \mathcal{S} . Como veremos en un momento, $\tilde{\mathcal{H}}$ reproduce a orden t^2/U las autoenergías del conjunto de autoestados de $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$ que se conectan adiabáticamente con el subespacio $\tilde{\mathcal{S}}$ cuando $t \rightarrow 0$.

A este conjunto de autoestados lo llamaremos “espectro de bajas energías de $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$ ”.

Para lograr nuestro objetivo simplemente debemos expandir las exponenciales que aparecen en (5.4):

$$(5.5) \quad e^S \mathcal{H}_{\text{Hubb}} e^{-S} = \mathcal{H}_u + \mathcal{H}_t + [S, \mathcal{H}_u + \mathcal{H}_t] + \frac{1}{2} [S[S, \mathcal{H}_u + \mathcal{H}_t]] + \mathcal{O}(t^3/U^3) \mathcal{H}_{\text{Hubb}}.$$

Es simple verificar a partir de la ecuación (1) que S se ha elegido de forma tal que se cumpla la siguiente relación:

$$(5.6) \quad \langle \tilde{\phi}_k | \mathcal{H}_t + [S, \mathcal{H}_u] | \tilde{\psi}_l \rangle = 0$$

para k y l arbitrarios. Es decir que la transformación canónica elimina la contribución de orden t a los elementos de matriz que conectan $\tilde{\mathcal{S}}$ y $\tilde{\mathcal{S}}^\perp$. De acuerdo con (5.5), los elementos de matriz que conectan $\tilde{\mathcal{S}}$ y $\tilde{\mathcal{S}}^\perp$ son de orden t^2/U . Esto implica que $\tilde{\mathcal{H}}$ reproduce el espectro de bajas energías de $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$ a orden t^2/U . Sólo nos resta determinar la forma del operador $\tilde{\mathcal{H}}$. Para ello es útil notar las siguientes relaciones:

$$(5.7) \quad \begin{aligned} \langle \tilde{\psi}_k | \mathcal{H}_u | \tilde{\psi}_l \rangle &= 0 \\ \langle \tilde{\psi}_k | [S, \mathcal{H}_u] | \tilde{\psi}_l \rangle &= 0 \\ \langle \tilde{\psi}_k | [S[S, \mathcal{H}_u]] | \tilde{\psi}_l \rangle &= -\langle \tilde{\psi}_k | [S, \mathcal{H}_t] | \tilde{\psi}_l \rangle \end{aligned}$$

Usando estas relaciones y despreciando términos de orden t^3/U^2 y más alto encontramos una ecuación simple para los elementos de matriz de $\tilde{\mathcal{H}}$:

$$(5.8) \quad \langle \tilde{\psi}_k | \tilde{\mathcal{H}} | \tilde{\psi}_l \rangle = \langle \tilde{\psi}_k | \mathcal{H}_t | \tilde{\psi}_l \rangle + \frac{1}{2} \langle \tilde{\psi}_k | [S, \mathcal{H}_t] | \tilde{\psi}_l \rangle$$

5.2. Modelos de Heisenberg y t-J

Como muestra la ec.(5.4), la construcción del operador $\tilde{\mathcal{H}}$ incluye una proyección sobre el subespacio $\tilde{\mathcal{S}}$ de estados sin doble ocupación. Una forma práctica de implementar esta proyección es introducir los siguientes operadores fermiónicos:

$$(5.9) \quad \begin{aligned} \bar{c}_{\mathbf{r}s}^\dagger &= \bar{c}_{\mathbf{r}s}^\dagger (1 - n_{\mathbf{r}\bar{s}}), \\ \bar{c}_{\mathbf{r}s} &= (1 - n_{\mathbf{r}\bar{s}}) \bar{c}_{\mathbf{r}s}. \end{aligned}$$

Estos operadores crean o destruyen fermiones con espín s sin permitir que haya doble ocupación:

$$(5.10) \quad \bar{c}_{\mathbf{r}\uparrow}^\dagger \bar{c}_{\mathbf{r}\downarrow}^\dagger = 0.$$

Es por ello que se los llama operadores de creación o destrucción de “fermiones constreñidos”. Es importante notar que estos operadores no obedecen relaciones de conmutación canónicas. Los estados del subespacio $\tilde{\mathcal{S}}$ se generan aplicando los operadores de creación sobre el vacío. Claramente si

expresamos \tilde{H} en función de estos operadores no hay necesidad de incluir explícitamente el proyector $\tilde{\mathcal{P}}$ que aparece en la ec.(5.4), dado que tal proyección ya ha sido incorporada en los operadores creación y destrucción \bar{c}_{rs}^\dagger y \bar{c}_{rs} .

El siguiente paso es expresar el Hamiltoniano efectivo $\tilde{\mathcal{H}}$ como un operador que es una función de los operadores \bar{c}_{rs}^\dagger y \bar{c}_{rs} . Dicha función debe ser tal que sus elementos de matriz estén dados por la ec.(5.8). Está claro que el primer término de la ec.(5.8) es simplemente un hopping a primeros vecinos:

$$(5.11) \quad \tilde{\mathcal{H}}_t = -t \sum_{\mathbf{r}\delta s} (\bar{c}_{rs}^\dagger \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta s} + \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta s}^\dagger \bar{c}_{rs})$$

Notemos que el segundo término contiene al operador S que sólo conecta un estado de \tilde{S} con estados de \tilde{S}^\perp , es decir, estados sin doble ocupación con estados donde un sitio está doblemente ocupado. Por otro lado, el término es de segundo orden en t ya que aparece el producto $S\mathcal{H}_t$. Esto implica que tal término contiene los dos tipos de contribuciones ilustradas en la Fig.1. La primera genera la interacción de superintercambio que ya habíamos derivado en el límite de $U/|t| \gg 1$ para la molécula de Hubbard:

$$(5.12) \quad \tilde{\mathcal{H}}_J = J \sum_{\mathbf{r}\delta} (\mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\delta} + \frac{\bar{n}_{\mathbf{r}}\bar{n}_{\mathbf{r}+\delta}}{4}),$$

con $J = 4t^2/U$. La segunda contribución da lugar a un término de hopping correlacionado:

$$(5.13) \quad \tilde{\mathcal{H}}_{hc} = \frac{J}{4} \sum_{\mathbf{r}\delta \neq \delta'} \left[\sum_s \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta's}^\dagger \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta s} \bar{n}_{\mathbf{r}} - 2 \sum_{ss'} \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta}^\dagger \sigma_{ss'} \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta'} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \right].$$

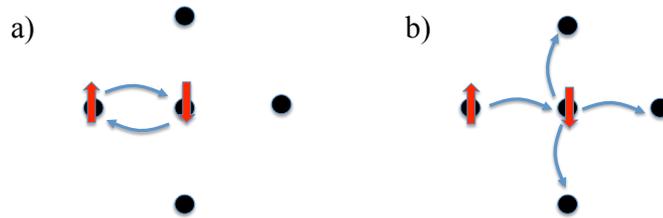


Figure 1. Dos tipos de procesos de segundo orden en t que contribuyen a $\tilde{\mathcal{H}}$.

Sumando la contribución (5.11) de primer orden en t a las contribuciones de segundo orden (5.12) y (5.13) obtenemos la expresión final de lo

que se conoce como modelo “ $t - J$ ”:

$$(5.14) \quad \begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} = & -t \sum_{\mathbf{r}\delta s} (\bar{c}_{\mathbf{r}s}^\dagger \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta s} + \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta s}^\dagger \bar{c}_{\mathbf{r}s}) + J \sum_{\mathbf{r}\delta} (\mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\delta} + \frac{\bar{n}_{\mathbf{r}} \bar{n}_{\mathbf{r}+\delta}}{4}) \\ & + \frac{J}{4} \sum_{\mathbf{r}\delta \neq \delta'} \left[\sum_s \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta's}^\dagger \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta s} \bar{n}_{\mathbf{r}} - 2 \sum_{ss'} \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \bar{c}_{\mathbf{r}+\delta'} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \right]. \end{aligned}$$

En particular, para banda semillena o un electrón por sitio, los términos de hopping se anulan ya que los electrones no se pueden mover. En tal caso el modelo $t - J$ se reduce simplemente a un modelo de Heisenberg:

$$(5.15) \quad \mathcal{H}_{\text{Heis}} = J \sum_{\mathbf{r}\delta} (\mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\delta} + \frac{\bar{n}_{\mathbf{r}} \bar{n}_{\mathbf{r}+\delta}}{4})$$

5.3. Operadores Efectivos

Tal como indica la ec.(5.4), la transformación canónica e^{-S} es simplemente un cambio de base que nos permite expresar la proyección de $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$ sobre su subespacio de bajas energías en una base más conveniente. Naturalmente, dicha transformación se debe aplicar a cualquier otro operador \mathcal{O} si queremos expresar todas las cantidades físicas en la misma base. La regla de transformación nuevamente se obtiene de pedir que el valor de cualquier elemento de matriz \mathcal{O} entre dos funciones de onda no debe depender de la base en que expresemos el operador:

$$(5.16) \quad \langle \psi_j | \mathcal{O} | \psi_k \rangle = \langle \tilde{\psi}_j | e^S \mathcal{O} e^{-S} | \tilde{\psi}_k \rangle = \langle \tilde{\psi}_j | \tilde{\mathcal{O}} | \tilde{\psi}_k \rangle.$$

para cualquier par de estados j y k . Esto implica que

$$(5.17) \quad \tilde{\mathcal{O}} = \tilde{\mathcal{P}} e^S \mathcal{O} e^{-S} \tilde{\mathcal{P}}.$$

De la misma manera que $\tilde{\mathcal{H}}$ es el Hamiltoniano efectivo de bajas energías de $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$, $\tilde{\mathcal{O}}$ es el operador efectivo asociado con \mathcal{O} . Es interesante notar que en la caso de banda semillena (un electrón por sitio) los estados de $\tilde{\mathcal{S}}$ están completamente caracterizados por el grado de libertad de espín. Dado que $\tilde{\mathcal{S}}$ es el espacio de Hilbert en el que actúa cualquier operador efectivo $\tilde{\mathcal{O}}$, está claro que para banda semillena $\tilde{\mathcal{O}}$ es simplemente una función de los operadores de espín.

Para fijar ideas consideremos los operadores de densidad de carga y corriente:

$$(5.18) \quad \begin{aligned} \rho_{\mathbf{r}} &= en_{\mathbf{r}} \\ \mathbf{I}_{\mathbf{r},\delta} &= \frac{iet\delta}{|\delta|} \sum_s (c_{\mathbf{r}s}^\dagger c_{\mathbf{r}+\delta s} - c_{\mathbf{r}+\delta s}^\dagger c_{\mathbf{r}s}) \end{aligned}$$

donde e es la carga del electrón. Usando el Hamiltoniano de Hubbard $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$ y la representación de Heisenberg es sencillo verificar que estos dos operadores satisfacen una ecuación de continuidad en la red,

$$(5.19) \quad \frac{\partial n_{\mathbf{r}}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{I}(\mathbf{r}) = 0.$$

con

$$(5.20) \quad \nabla \cdot \mathbf{I}(\mathbf{r}) \equiv \sum_{\delta} \mathbf{I}_{\mathbf{r},\eta} \cdot \boldsymbol{\eta}$$

donde el vector $\boldsymbol{\eta}$ varía sobre *todos* los primeros vecinos del sitio \mathbf{r} . Por ejemplo $\boldsymbol{\eta} = \{\pm a\hat{x}, \pm a\hat{y}\}$ para el caso de una red cuadrada. La ecuación (5.19) existe simplemente porque la carga total es una cantidad conservada de $\mathcal{H}_{\text{Hubb}}$.

Los operadores efectivos de densidad de carga y corriente, $\tilde{\rho}_{\mathbf{r}}$ y $\tilde{\mathbf{I}}_{\mathbf{r},\delta}$, se obtienen a partir de la ec.(5.17). En particular, en el caso de un modelo de Hubbard sobre una red cuadrada y con banda semillena se puede demostrar que estos operadores efectivos son simplemente:

$$(5.21) \quad \begin{aligned} \tilde{\rho}_{\mathbf{r}} &= 1, \\ \tilde{\mathbf{I}}_{\mathbf{r},\delta} &= 0. \end{aligned}$$

Sin embargo, algo más interesante aparece si consideramos un modelo de Hubbard con un electrón por sitio y definido sobre un triángulo de 3 átomos j, k, l :

$$(5.22) \quad \begin{aligned} \tilde{\rho}_j &= 1 + 8 \frac{t^3}{U^3} [\mathbf{S}_j \cdot (\mathbf{S}_l + \mathbf{S}_k) - \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_k], \\ \tilde{\mathbf{I}}_{j,k,l} &= 24 \frac{t^3}{U^2} \frac{i\mathbf{e}\mathbf{r}_{jk}}{|\mathbf{r}_{jk}|} \mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l. \end{aligned}$$

Para obtener estas expresiones es necesario extender la teoría de perturbaciones degeneradas que hasta el orden t^3 (en la sección anterior derivamos la teoría de perturbaciones hasta orden t^2). Para ver una derivación detallada de las ecuaciones (5.22) se pueden remitir al apéndice del trabajo publicado en Phys. Rev. B **78**, 024402 (2008). De todos modos, lo que nos interesa resaltar de las expresiones (5.22) es que si bien todos los observables de bajas energías están caracterizados por los grados de libertad de espín, *los grados de libertad de carga no están congelados a bajas energías*. Más aun, las ecuaciones (5.22) nos dicen que ciertos ordenamientos de los espines que dan lugar a bonds no equivalentes producen una onda de densidad de carga como “efecto secundario”. Por otro lado, un orden quiral escalar de espín, $\langle \mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l \rangle \neq 0$, da lugar a “loops” de corrientes eléctricas (momentos magnéticos orbitales). Estos efectos magnetoléctricos pueden ser muy interesantes para aplicaciones.

Exercise 16. Calcule las relaciones de conmutación de los operadores fermiónicos constreñidos.

Exercise 17. Usando la ecuación de Heisenberg,

$$(5.23) \quad \frac{d\mathcal{O}}{dt} = i[\mathcal{H}_{\text{Hubb}}, \mathcal{O}] + \frac{\partial \mathcal{O}}{\partial t}$$

derive la ecuación de continuidad (5.19) (estamos usando unidades tales que $\hbar = 1$).

Exercise 18. Derive las igualdades (5.6) y (5.7).