

Apareamiento electrónico en el hamiltoniano de Hubbard extendido

O. NAVARRO* Y CH. WANG

*Instituto de Investigaciones en Materiales
Universidad Nacional Autónoma de México
Apartado postal 70-360, 04510, México D.F.*

Recibido el 28 de octubre de 1991; aceptado el 24 de marzo de 1992

RESUMEN. En este artículo se reporta un nuevo método para encontrar la solución exacta del hamiltoniano de Hubbard extendido. El método consiste en mapear el problema original a un problema de amarre fuerte (*tight-binding*) en un espacio de mayor dimensión, el cual tiene solución exacta. Para sistemas de una y dos dimensiones con baja densidad electrónica, hemos calculado en forma exacta la energía de apareamiento electrónico y la distancia de correlación para los distintos regímenes de interacción. Este estudio puede extenderse para analizar la correlación electrónica en sistemas aperiódicos.

ABSTRACT. In this paper we report a novel method to find the exact solution of the extended Hubbard Hamiltonian. This method is based on mapping the original problem onto a tight-binding problem in a higher dimensional space, which has exact solution. For one- and two-dimensional systems with a low electronic density, we have calculated the electronic pairing energy and the coherence length for different interaction regimes. This study can be extended to analyze the electronic correlation in non-periodic systems.

PACS: 71.10.+x; 71.28.+d; 71.45.Nt

1. INTRODUCCIÓN

El reciente descubrimiento de los superconductores de alta temperatura de transición [1], ha dado lugar a una intensa investigación, tanto de los sistemas de baja dimensión como de la correlación electrónica en los sólidos. Los sistemas de baja dimensión se han estudiado históricamente por su simplicidad matemática y porque son útiles como límites analíticos de los sistemas tridimensionales. Estos sistemas han despertado, recientemente, el interés de muchos físicos debido a sus propiedades peculiares. En primer lugar, los sistemas de baja dimensión son inestables ante perturbaciones, ya que tienen un número reducido de primeros vecinos. Las propiedades de transporte son enteramente diferentes en dichos sistemas, debido a la localización de las excitaciones. Finalmente, se especula también que los nuevos cerámicos superconductores de alta T_c son producto de la bidimensionalidad del sistema.

Por otro lado, el comportamiento de los sistemas de muchos cuerpos fuertemente correlacionados sigue siendo un problema abierto y de sumo interés. En el pasado, muchas

*Dirección Permanente: Escuela de Ciencias Físico Matemáticas de la Universidad Autónoma de Sinaloa, Apartado Postal 1872, Culiacán, Sin., México

propiedades de los sólidos, tales como la ley de Ohm, el efecto Hall, entre otras, se han descrito simplemente por medio de la aproximación del electrón independiente. Asimismo, en base a esta aproximación la teoría de bandas ha podido explicar la gran diferencia en la conductividad eléctrica entre un metal, un semiconductor y un aislante. Sin embargo, existe una serie de nuevos fenómenos electrónicos que no puede explicarse mediante dicha aproximación, por ejemplo, la formación de las ondas de densidad de carga (CDW) [2], las ondas de densidad de espín (SDW) [3] y la superconductividad. Estas inestabilidades electrónicas muestran la importancia que tiene la interacción electrón-electrón. En general, la interacción entre las excitaciones elementales en los sólidos provoca una ruptura de simetría en estos sistemas, es decir, la formación de un nuevo estado base. Dicha ruptura de simetría constituye el tema de mayor importancia dentro del problema de muchos cuerpos.

Una de las formas más simple y general de estudiar la correlación electrónica, es a través del hamiltoniano de Hubbard [4], puesto que dicho hamiltoniano incluye implícitamente los efectos de todo tipo de interacciones electrónicas por medio de los parámetros del mismo. Cabe mencionar que dicho hamiltoniano considera sólo la interacción entre dos electrones que se encuentran en el mismo sitio, como una primera aproximación de la situación real del sistema. Desafortunadamente, aun para este modelo tan simple, no existe solución exacta en forma general. Este hamiltoniano usualmente se resuelve por medio de la aproximación de campo medio [5]. Se sabe que dicha aproximación reproduce razonablemente sólo el estado base del sistema, y no es suficiente para describir las fluctuaciones en la correlación electrónica. En este artículo reportamos un nuevo método para resolver el hamiltoniano de Hubbard, el cual consiste en mapear el problema de Hubbard a un problema de amarre fuerte (*tight-binding*). Para el caso de baja densidad electrónica, este mapeo permite encontrar la solución exacta del hamiltoniano, ya que el problema de amarre fuerte está resuelto.

Este artículo está compuesto de 5 secciones. En la Sec. 2 se explican el hamiltoniano de Hubbard extendido y los métodos usados para resolverlo. La Sec. 3 muestra el método del mapeo y en la Sec. 4 presentamos los resultados para sistemas de una y dos dimensiones. Finalmente, las conclusiones se discuten en la Sec. 5.

2. EL MODELO DE HUBBARD

El modelo de Hubbard propuesto en 1963 desprecia las interacciones interatómicas, ya que éstas son pequeñas comparadas con la interacción *intra*-atómica, según el artículo original de Hubbard [4]. Unos años más tarde, se demostró que el modelo de Hubbard es insuficiente para describir ciertos fenómenos cooperativos en sólidos, por ejemplo, las propiedades magnéticas del material *NMP-TCNQ* [6]. Una de las formas de completar el hamiltoniano es introducir un término adicional que toma en cuenta la interacción entre electrones de sitios vecinos. A este último se le denomina el hamiltoniano de Hubbard extendido, que puede escribirse como

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + V \sum_{i<j} n_i n_j \quad (1),$$

donde $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$, $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}$ y $c_{i,\sigma}^{\dagger} (c_{i,\sigma})$ es el operador de creación (aniquilación)

de un electrón con espín σ en el sitio i . En la Ec. (1), t_{ij} es la integral de transferencia (*hopping*) entre el sitio i y el sitio j , a primera aproximación se considera sólo la transferencia (t) entre vecinos más cercanos. U representa la interacción intra-atómica y V la interatómica entre los sitios i y j . Cabe enfatizar que el hamiltoniano de Hubbard no restringe los tipos de interacción que podrían existir entre los electrones, y los efectos resultantes se caracterizan por medio de los parámetros U y V .

En los últimos años, el hamiltoniano de Hubbard ha sido intensamente estudiado, utilizando diferentes aproximaciones. En primer lugar, la aproximación de campo medio ha sido ampliamente utilizada para todo tipo de problemas [7], puesto que aquí el problema de muchos cuerpos se reduce al de un cuerpo en un medio efectivo. Sin embargo, se sabe que esta aproximación es insuficiente para describir la correlación electrónica, debido a que no tiene en cuenta las fluctuaciones, como se comentó anteriormente. Recientemente, el método de los bosones esclavos [8] ha sido un avance importante, a pesar de que sigue perteneciendo al grupo del campo medio, excepto que el promedio se realiza en un espacio de Hilbert aumentado de operadores fermiónicos y bosónicos. Existe otro método estadístico que se conoce como la técnica de Monte Carlo [9], la cual es factible sólo para cúmulos pequeños de átomos. Cabe mencionar que también se ha empleado la idea del grupo de renormalización [10], que consiste en desprestigiar los estados lejanos al estado base, y por consiguiente muchas veces se aleja de la solución exacta, como en el caso de la solución exacta para una dimensión encontrada por Lieb y Wu [11]. Finalmente, la diagonalización exacta sigue siendo el método más deseado, aun cuando sólo se aplica a sistemas de pocos átomos [12].

A continuación presentaremos un nuevo método que permite encontrar la solución en forma exacta para redes infinitas.

3. ESPACIO DISCRETO DE ESTADOS

Por claridad, explicaremos primeramente el método para un sistema de una dimensión. Consideremos dos electrones con espines opuestos en una red de N sitios ($N = 2, 3, 4, \dots$). Para $N = 2$, los posibles estados de configuración son

$$|1\rangle = |\pm 0\rangle, \quad |2\rangle = |+-\rangle, \quad |3\rangle = |0\pm\rangle, \quad |4\rangle = |-+\rangle, \quad (2)$$

donde $+$ ($-$) representa un sitio ocupado por un electrón con espín hacia arriba (espín hacia abajo) y 0 representa un sitio vacío. De esta forma, \pm indica un sitio doblemente ocupado. Para tres sitios, el número de estados es nueve. En general, el número de estados está dado por N^2 .

Para el caso de cuatro sitios, los estados pueden ordenarse como

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |\pm 000\rangle, & |5\rangle &= |0+0-\rangle, & |9\rangle &= |-0+0\rangle, & |13\rangle &= |000\pm\rangle, \\ |2\rangle &= |+-00\rangle, & |6\rangle &= |0+-0\rangle, & |10\rangle &= |0-+0\rangle, & |14\rangle &= |00-+\rangle, \\ |3\rangle &= |+0-0\rangle, & |7\rangle &= |0\pm 00\rangle, & |11\rangle &= |00\pm 0\rangle, & |15\rangle &= |0-0+\rangle, \\ |4\rangle &= |+00-\rangle, & |8\rangle &= |-+00\rangle, & |12\rangle &= |00+-\rangle, & |16\rangle &= |-00+\rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

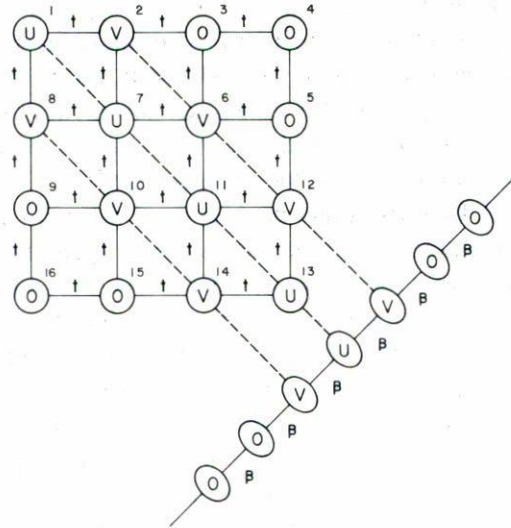


FIGURA 1. Red de estados para un sistema unidimensional compuesto por dos electrones con espín opuesto y cuatro sitios, la numeración de los estados corresponde a la de la Ec. (3). Dicha red se mapea a una cadena lineal con impurezas en la que el parámetro de *hopping* efectivo está dado por $\beta = 2t \cos(Ka/\sqrt{2})$.

La Fig. 1 muestra una representación geométrica de los 16 estados anteriores, donde los números que aparecen en esta figura indican el orden de los estados. Dentro del hamiltoniano de Hubbard extendido, la existencia de un estado con un sitio ocupado por dos electrones requiere una energía U , tal es el caso de los estados 1, 7, 11 y 13. Asimismo, un estado cuyos dos electrones se encuentran en sitios vecinos más próximos, demanda una energía V . Por ejemplo, en la Ec. (3) los estados 2, 6, 8, 10, 12 y 14 tienen una auto-energía V . En cambio, un estado con dos electrones situados en sitios lejanos no exige ninguna energía, dentro del hamiltoniano de Hubbard extendido (Ec. (1)). La amplitud de la probabilidad de transición entre los estados vecinos de la Fig. 1 es precisamente la t , ya que la diferencia entre estos dos estados es simplemente el salto (*hopping*) de un electrón (véase Ec. (3)). Por lo tanto, nuestro problema original del hamiltoniano de Hubbard extendido en una red de d dimensiones es equivalente al problema de amarre fuerte de una red con impurezas de $2d$ dimensiones, es decir, nuestro arreglo de estados (Fig. 1) puede describirse por medio de un hamiltoniano de amarre fuerte. La auto-energía de los estados con un sitio doblemente ocupado es U , los que contienen sitios vecinos simplemente ocupados tienen una auto-energía V , 0 para los demás estados y la integral de transferencia es t .

Para el caso de dos electrones en una cadena periódica de infinitos sitios, la red de estados tiene la forma de un arreglo cuadrático bidimensional infinito con un número infinito de impurezas, las cuales se localizan en las cadenas diagonales (véase Fig. 1). Esta red de estados tiene solución exacta, puesto que el hamiltoniano de dicha red es el de amarre fuerte. Una manera simple de encontrar la solución consiste en aprovechar la simetría traslacional de las impurezas y mapear la red bidimensional a una cadena lineal [13], como se muestra en la Fig. 1, donde $\beta = 2t \cos(Ka/\sqrt{2})$, siendo $a = 1$ la

distancia de la red de estados y K el vector de onda en la dirección de la proyección. En otras palabras, estamos tratando la red bidimensional en un espacio combinado, una dirección en el espacio real y la otra en el espacio recíproco. Para cada K dada, tenemos una red unidimensional que puede resolverse por medio de la técnica de la matriz de transferencia [13]. El resultado de una dimensión se tiene que integrar con respecto a K sobre la primera zona de Brillouin.

Para el caso de n electrones en un cristal de d dimensiones, la estructura geométrica del conjunto de estados corresponde a una red de nd -dimensiones, donde el principio de exclusión de Pauli determina la estructura de dicha red. Cuando $n = 2$ y $d = 2$, es decir, una red cuadrática bidimensional con dos electrones e infinitos sitios, los estados forman una red hiper-cúbica en un espacio de cuatro dimensiones. La manera de encontrar la solución es similar al caso unidimensional. Primeramente, se realiza un mapeo del arreglo de estados de cuatro dimensiones a una red de dos dimensiones, solamente que ahora se tienen $\beta_x = 2t \cos(K_x a / \sqrt{2})$ y $\beta_y = 2t \cos(K_y a / \sqrt{2})$, donde K_x y K_y son los vectores de onda en el plano de proyección xy . Para cada par (K_x, K_y) se tiene una red cuadrática bidimensional de estados con una impureza cuya auto-energía es U , rodeada por cuatro estados cuya auto-energía es V y los demás estados con auto-energía igual a cero. Dicha red se resuelve dentro del hamiltoniano de amarre fuerte, el resultado bidimensional se integra con respecto a K_x y a K_y sobre toda la primera zona de Brillouin.

4. RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados de la energía de apareamiento (*gap*), la longitud de coherencia (ξ) y el diagrama de fases entre el estado normal y el estado apareado. Los cálculos se realizan aplicando el método descrito en la sección anterior para el problema de dos electrones con espines opuestos, en una cadena infinita y en una red cuadrática infinita. Después de la proyección en el espacio K , los cálculos numéricos se realizan en una red unidimensional de 301 estados (1D) y en una red cuadrática bidimensional de 2401 estados (2D), para los sistemas originales de una y dos dimensiones, respectivamente.

En la Fig. 2 se muestran las variaciones de la energía de apareamiento como función del parámetro de las interacciones intra-atómicas U , para redes de 1D y de 2D. Dicha energía se calcula a partir de la energía del estado apareado de dos electrones, cuando existe una interacción atractiva entre éstos ($U < 0$). Hay un estado apareado para cada K , por lo tanto, estos estados forman una pequeña banda. Los resultados presentados en la Fig. 2 son las diferencias de energía entre el estado apareado con $K = 0$ y el estado de mínima energía (el borde inferior de la banda), cuando no se consideran las interacciones entre electrones. En la Fig. 2 los valores de los parámetros del hamiltoniano fueron $V = 0$ y $t = -1$.

Para el caso de una dimensión, existe solución analítica de la energía de apareamiento cuando $V = 0$. Esta solución puede obtenerse fácilmente utilizando la técnica de la función de Green [14] para el hamiltoniano de amarre fuerte en una cadena con una impureza, ya que el problema de Hubbard lo hemos mapeado a este problema de amarre fuerte, como se discutió en la sección anterior. Para una cadena periódica con el parámetro de *hopping* $\beta = 2t \cos(Ka/\sqrt{2})$, se analiza sólo el caso de $K = 0$ con el fin de estimar exclusivamente

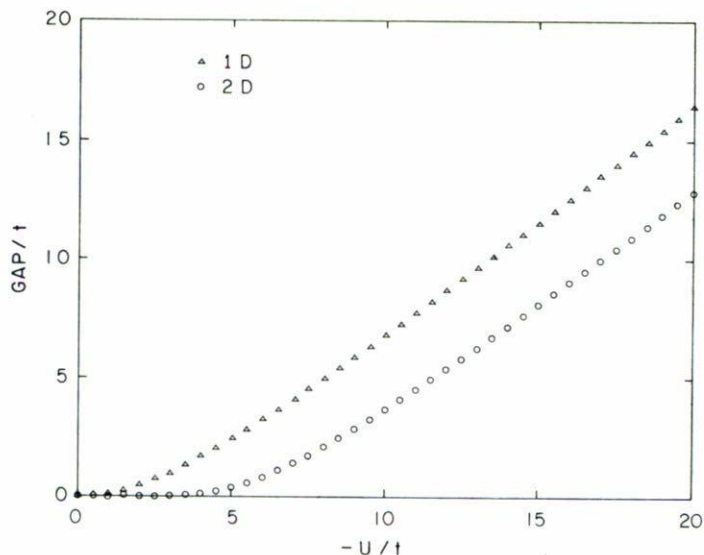


FIGURA 2. Energía de apareamiento electrónico bajo la atracción intra-atómica ($U < 0$) y la interatómica $V = 0$, para los sistemas periódicos de una (1D) y dos dimensiones (2D). Las cantidades se expresan en unidad de t sin considerar su signo. Para el caso de 2D el cálculo se realizó en una red cuadrática.

la energía de apareamiento. En dicha cadena, la función de Green está dada por [14]

$$G_0(n, l; E) = \frac{1}{\sqrt{E^2 - B^2}} \left(\frac{E}{B} - \sqrt{\left(\frac{E}{B}\right)^2 - 1} \right)^{|l-n|}, \tag{4}$$

donde $B = |2zt|$ es el ancho de la banda en la aproximación de una sola partícula, siendo z el número de coordinación. Cabría mencionar que el ancho de banda de la red de estados de dos dimensiones es $2B$. Por otro lado, para una cadena que contiene una impureza situada en el sitio 0 y con auto-energía U , la función de Green evaluada en la energía del estado apareado o de la impureza (E_{imp}) es [14]

$$G_0(0, 0; E_{\text{imp}}) = \frac{1}{U}. \tag{5}$$

Por lo tanto, la energía de apareamiento $\Delta \equiv |E_{\text{imp}}| - B$ está dada por

$$\Delta = B \left(\sqrt{1 + \left(\frac{U}{B}\right)^2} - 1 \right). \tag{6}$$

La Fig. 3 muestra la energía de apareamiento como función de V , con $U = 0$, $t = -1$ y para sistemas de 1D y 2D. Estos resultados se obtienen de forma similar al caso en que

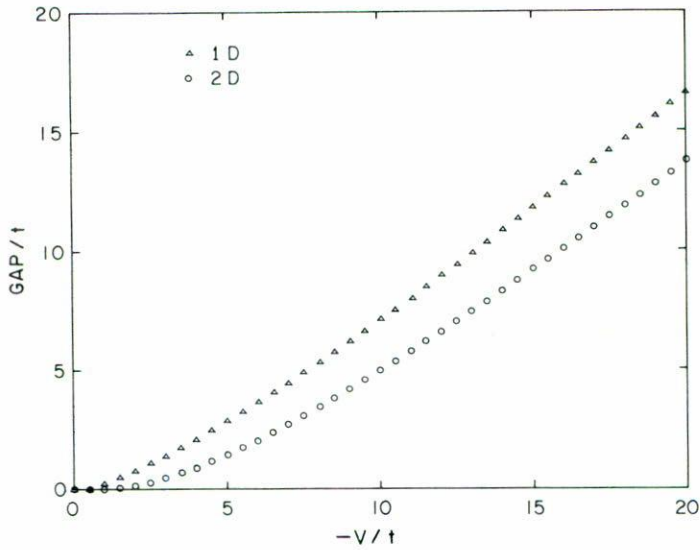


FIGURA 3. Energía de apareamiento calculada bajo condiciones similares a la Fig. 2, excepto que ahora $V < 0$ y $U = 0$.

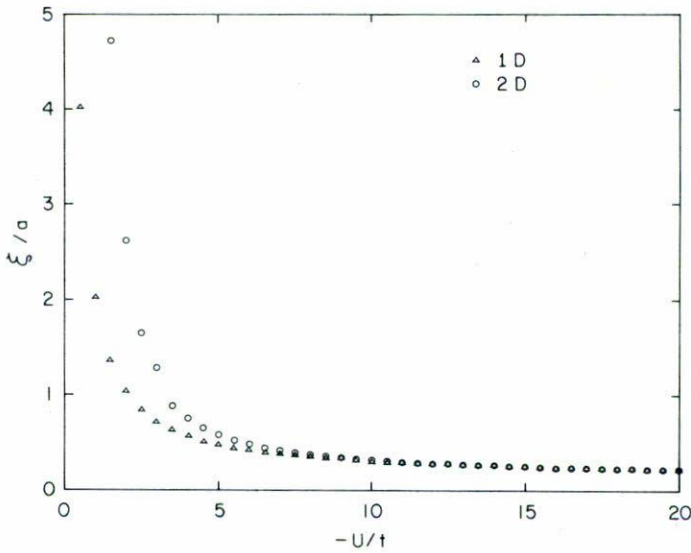


FIGURA 4. Longitud de coherencia calculada bajo las mismas condiciones de la Fig. 2.

$V = 0$ y $U < 0$ (Fig. 2). Es importante mencionar que los resultados de la energía de apareamiento coinciden con los reportados por Micnas *et al.* [7], esto nos brinda confianza en nuestro método.

La longitud de coherencia ξ constituye otra cantidad importante para caracterizar el estado apareado y se calcula, a partir de la extensión espacial de la función de probabilidad $|\psi(r)|^2$ del par de electrones. Es decir, ξ es la separación entre los dos electrones cuando la $|\psi(\xi)|^2$ tiene el valor $1/e$ del valor máximo de $|\psi(r)|^2$. Las variaciones de la longitud

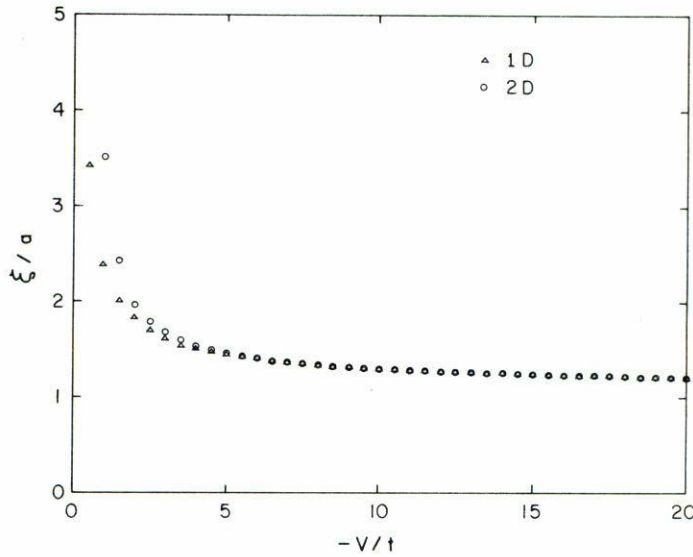


FIGURA 5. Longitud de coherencia calculada bajo las mismas condiciones de la Fig. 3.

de coherencia, para 1D y 2D, como función de U y V se muestran en las Figs. 4 y 5, respectivamente. Obsérvese que para las interacciones fuertes las longitudes de coherencia de los sistemas de 1D y 2D coinciden. Esto se debe a que cuando la atracción entre los dos electrones es mucho mayor que el parámetro de *hopping*, los grados de libertad del sistema dejan de ser una característica importante. En el otro extremo, interacciones débiles, las longitudes de coherencia crecen exponencialmente, lo cual corresponde al límite tratado por la teoría de BCS [15]. Particularmente, la ξ de 2D es siempre mayor que la ξ correspondiente a 1D, en el régimen de interacciones débiles.

Nótese también que para el régimen de interacciones fuertes, la longitud de coherencia para una V dada es mayor en un parámetro de la red que la correspondiente al mismo valor de U . Esto se debe a que V es el parámetro de las interacciones interatómicas y consecuentemente, la máxima probabilidad de encontrar el par se obtiene cuando el par tiene una separación de un parámetro de la red. Por lo tanto, la extensión característica superior del par de electrones, bajo la atracción de $V < 0$, es siempre mayor que el parámetro de la red.

En el caso particular de una dimensión con $V = 0$, existe también la solución analítica para la longitud de coherencia ξ . Partimos del hecho de que las funciones de Wannier ($|n\rangle$) constituyen una base para el espacio de Hilbert, es decir, las eigenfunciones ($|\psi\rangle$) del hamiltoniano pueden escribirse como

$$|\psi\rangle = \sum_n b_n |n\rangle, \tag{7}$$

donde, para una impureza situada en el sitio 0, b_n está dada por [14]

$$b_n = \frac{G_0(n, 0; E_{\text{imp}})}{\sqrt{-G'_0(0, 0; E_{\text{imp}})}}, \tag{8}$$

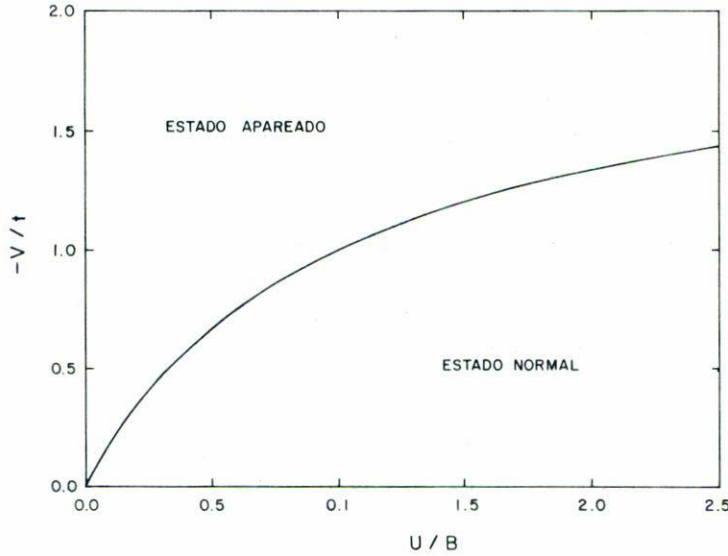


FIGURA 6. Diagrama de fases que indica las condiciones de la formación local de pares de electrones. Para 1D y 2D las curvas coinciden.

siendo $G'_0(0, 0; E_{imp})$ la derivada de la función de Green con respecto a la energía, evaluada en $E = E_{imp}$. De la definición de ξ , es decir, $|b_\xi|^2 = |b_0|^2/e$ y teniendo en cuenta las Ecs. (4) y (8), se obtiene una expresión para la longitud de coherencia

$$\xi = \frac{-1}{2 \ln \left(\sqrt{1 + \left(\frac{U}{B}\right)^2} - \left|\frac{U}{B}\right| \right)}. \tag{9}$$

Finalmente, en la Fig. 6 se muestra el diagrama de fases entre el estado de electrones apareados y el de no apareados. Particularmente, cuando se grafica el diagrama de fases en unidades $-V/t$ y U/B , los casos de una y dos dimensiones coinciden, como se reportó en la Ref. [7]. Obsérvese la competencia entre una interacción repulsiva intra-atómica y la otra atractiva interatómica. Para una U finita existe un valor crítico (V_c) para V , y los estados electrónicos apareados se presentan sólo cuando $|V| > |V_c|$.

5. CONCLUSIONES

Hemos presentado una nueva manera de calcular la energía de apareamiento y la longitud de coherencia en el hamiltoniano de Hubbard extendido. Este método tiene la virtud de ser simple y general, puesto que poder mapear el problema original a uno de amarre fuerte nos permite encontrar la *solución exacta* para sistemas con n electrones y d dimensiones, en algunos casos se tienen inclusive soluciones analíticas. Asimismo, se puede resolver el problema de amarre fuerte en nd dimensiones sin la necesidad de emplear el espacio recíproco. Consecuentemente, se pueden estudiar también las correlaciones electrónicas en sistemas aperiódicos utilizando este mapeo; estudio que actualmente se está llevando a cabo.

Como resultados nuevos, hemos calculado —por vez primera— en forma exacta la longitud de coherencia del apareamiento electrónico en el hamiltoniano de Hubbard extendido, a partir directamente de la definición. Esto es posible ya que el mapeo permite obtener la función de onda de dos electrones expresada en la base de los estados de configuración.

La existencia de la banda de los estados apareados caracterizados por el vector de onda en el plano de proyección \mathbf{K} indica que los pares de electrones son móviles y la movilidad de estos pares está directamente relacionada con el ancho de dicha banda.

Cabe mencionar que en este reporte hemos estudiado sólo el apareamiento de dos electrones. El estado superconductor requiere la condensación de Bose-Einstein de tales pares de electrones. Los resultados obtenidos aquí, son válidos exclusivamente para sistemas con baja densidad electrónica, donde correlaciones de tres electrones no son importantes. Para sistemas que contienen muchos electrones, el presente estudio podría considerarse como la aproximación de campo medio a segundo orden, puesto que el efecto de los demás electrones se tiene en cuenta en forma promedio dentro de los parámetros U y V .

AGRADECIMIENTOS

Deseamos manifestar nuestro agradecimiento al Ing. J. Camacho por los apoyos técnicos que nos ha brindado. El presente trabajo fue financiado parcialmente por la DGAPA de la UNAM, bajo el contrato IN-100-289-UNAM.

REFERENCIAS

1. W. E. Pickett, *Rev. Mod. Phys.* **61** (1989) 433.
2. G. Grüner, *Rev. Mod. Phys.* **60** (1988) 1129.
3. E. Fawcett, *Rev. Mod. Phys.* **60** (1988) 209.
4. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276** (1963) 238.
5. R. A. Barrio, C. Wang, J. Tagüeña-Martínez, D. Rios-Jara, T. Akachi y R. Escudero, *Mat. Res. Soc. Symp.* **99** (1988) 801.
6. D. Cabib y T.A. Kaplan, *AIP Conf. Proc.* **10** (1973) 1504.
7. R. Micnas, J. Ranninger y S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.* **62** (1990) 113.
8. M. Lavagna, *Inter. J. Mod. Phys.* **5** (1991) 885.
9. S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar y N. E. Bickers, *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989) 1523.
10. J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **20** (1980) 5259.
11. E. H. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20** (1968) 1445.
12. H. Q. Lin, J. E. Hirsch and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **37** (1988) 7359.
13. L.M. Falicov y F. Yndurain, *J. Phys. C* **8** (1975) 147.
14. E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 7, 2nd Ed. (1983).
15. J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108** (1957) 1175.