

MODELOS PARA SISTEMAS
FERMIONICOS ALTAMENTE
CORRELACIONADOS.

Tesis Doctoral.

Liliana Arrachea

Director: Angel Luis Plastino



FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS
BIBLIOTECA DEL DEPARTAMENTO
DE FISICA

Universidad Nacional de La Plata

Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas.

1995

¡ Que se vayan a lavar los platos!
Cavallo, Domingo Felipe,
Ministro de Economía.
(1994)

*En la Argentina, tenemos
científicos de primera.....*
Cavallo, Domingo Felipe,
Ministro de Economía.
(1995)

Agradecimientos.

- El primero y gran agradecimiento es para Armando Aligia y Eduardo Gagliano, con quienes compartí mi trabajo durante mi estadía en el Centro Atómico Bariloche y quienes me brindaron un importante apoyo en el desarrollo de esta tesis.
- Al Flaco, que no quiere que se lo agradezca públicamente, pero me soporta todos los días desde hace bastante tiempo.
- A Mariela Portesi, Patricia de La Presa, Daniel Gomez Dumm y Gerardo Goya, a quienes molesté hasta el hartazgo con mis trámites burocráticos durante mi estadía en Bariloche.
- A mis compañeros de trabajo, especialmente a María Elina Simón por la lectura crítica de parte de esta tesis.
- A Fabian Lema y Jorge Simonin, por encargarse del mantenimiento informático del grupo de teoría de sólidos del CAB. Especialmente a Fabian Lema, que siempre le soluciona los problemas a todo el mundo, y en particular, los que se me presentaron cuando quise imprimir esta tesis.
- A Roberto Deza, que me facilitó gran parte de la bibliografía básica para comenzar a estudiar el modelo de Hubbard.
- A Juan Martín Maldacena y Eduardo Andrés, por las charlas y la bibliografía suministrada sobre la teoría de campos conforme.
- A Huner Fanchiotti, que fue pionero en dictar un curso de postgrado de teoría de materia condensada.
- A Carlos Balseiro, por haber facilitado la interacción con el grupo de teoría de sólidos del CAB.
- Al Dr. Plastino, por el apoyo que me brindó como director.
- A la Comisión Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, por el financiamiento durante el desarrollo de esta tesis. Al Departamento de Física de la Universidad Nacional de La Plata y al Centro Atómico Bariloche.

La superconductividad de alta temperatura crítica, constituye en la actualidad una de las principales motivaciones para el estudio de diferentes modelos teóricos de fermiones altamente correlacionados. La carencia de *el modelo* para los materiales que exhiben este fenómeno, estimula la investigación de un número considerable de modelos, de los cuales se supone que "algo tienen que ver" con la física de estos materiales, ya sea con algunas propiedades del estado normal o en proporcionar el escenario adecuado para que se genere algún mecanismo de apareamiento. En particular, los cupratos superconductores son aisladores antiferromagnéticos en el estado normal. Este hecho hizo pensar en un primer momento en el modelo de Hubbard como candidato a describir estos compuestos, ya que contiene la esencia de la naturaleza aisladora inducida por efectos de las correlaciones antiferromagnéticas. A pesar de haber sido propuesto en los años '60, y estudiado desde entonces, el descubrimiento de la superconductividad de alta T_C sorprendió a los especialistas con un grado considerable de ignorancia respecto a muchas propiedades fundamentales de este modelo tan simple, y reflató con mayor énfasis problemas tales como la transición metal-aislante inducida por correlación en el marco de este modelo, así como la búsqueda de técnicas aproximadas confiables para la solución de estos sistemas.

En realidad, la naturaleza de los compuestos superconductores es más complicada e intervienen más de un orbital en los procesos físicos observados en los mismos. Por este motivo, existen distintas líneas de trabajo desde el punto de vista teórico, ya que parte de la investigación está dedicada a encontrar modelos efectivos sencillos a partir de reducir los modelos más realistas con varios orbitales, mientras que otra parte de la investigación está dedicada a estudiar esos modelos efectivos. La contrastación de estos últimos con las propiedades físicas que se pretende describir no es fácil. En general, los modelos efectivos, constituyen esencialmente extensiones del modelo de Hubbard y este último ha sido resuelto en forma exacta solamente en una dimensión. Por otro lado, el tratamiento aproximado de la alta correlación es complicado, y es usual encontrar predicciones diferentes respecto a la física de un dado modelo, dependiendo de la técnica elegida para su solución. En este contexto, las versiones unidimensionales de estos modelos constituyen una excepción, ya que algunos pueden ser resueltos por la técnica del Ansatz de Bethe, y en general pueden ser estudiados en el marco de la teoría de los líquidos de Luttinger y con la ayuda de la técnicas numéricas de diagonalización exacta. En particular, tanto la solución del Ansatz de Bethe como los estudios numéricos en el modelo de Hubbard unidimensional, han sido notablemente esclarecedores para establecer propiedades del modelo que exceden el alcance unidimensional. Los resultados de las versiones unidimensionales de estos modelos también tienen interés en sí mismos, ya que sirven de base para el estudio de sistemas genuinamente unidimensionales o cuasiunidimensionales como por ejemplo el poliacetileno y otros conductores orgánicos.

Este trabajo de tesis, consta de cuatro capítulos. El primer capítulo está dedicado a proponer una técnica variacional para resolver en forma aproximada el estado fundamental del modelo de Hubbard en sistemas finitos. El segundo capítulo está dedicado a una revisión de la teoría de líquidos de Luttinger y a detallar las técnicas numéricas utilizadas para estudiar los sistemas unidimensionales. Esta teoría está constituida por una conjunción de resultados de la teoría de campos con resultados exactos en los modelos de Tomonaga y Luttinger y del grupo de renormalización. Ha tomado la forma de una estructura conceptual bien definida hace relativamente poco tiempo y actualmente está siendo abundantemente empleada. Parte de este trabajo de tesis está basado en el marco interpretativo que provee esta teoría, y, por lo tanto, consideré importante dedicarle unas cuantas páginas de esta tesis al esclarecimiento de las hipótesis y propiedades que entran en juego en el concepto de líquido de Luttinger. El tercer capítulo está dedicado a estudiar un modelo efectivo para los cupratos superconductores, que corresponde a una generalización del modelo de Hubbard. Parte del estudio está basado en resultados numéricos y en la teoría de los líquidos de Luttinger. La otra parte está basada en resultados analíticos exactos para valores particulares de los parámetros. La solución analítica en este límite resulta particularmente esclarecedor respecto del rol de las correlaciones magnéticas en el modelo de Hubbard mismo, en particular, en los que concierne al desarrollo del carácter aislador del modelo de Hubbard. En este sentido, existían conjeturas al respecto, basados en resultados de aproximaciones variacionales y de campo medio, pero no resultados analíticos exactos, como la solución que se presenta en el capítulo 3. El análisis de la naturaleza de la transición metal-aislante en este límite y la conexión con el límite Hubbard se detalla en el capítulo 4. Este análisis se realiza en base a resultados de diagonalización numérica y de Monte Carlo cuántico.

En cuanto a la estructura de la tesis, cada capítulo tiene una introducción donde se provee una síntesis del estado de conocimiento actual del aspecto que se estudia, así como de las principales motivaciones para el estudio del mismo. Al final de algunos de los capítulos se incluyen apéndices, donde se resumen resultados a los que se hace referencia en los análisis o argumentaciones desarrollados, o bien se detalla alguna de las técnicas empleadas en esos capítulos. Finalmente, deseo aclarar que, a los efectos de una lectura más ágil, he optado por no traducir algunos términos técnicos, como por ejemplo "gap", "tight-binding", etc. Para no ofender a los puristas del idioma, están escritos entre comillas. La excepción es "spin", que está castellanizada como espín.



Contenidos

Capítulo 1. Aproximación de Gutzwiller Extendida para el Estado Fundamental del Modelo de Hubbard.

1.1 <i>Introducción.</i>	1
1.2 <i>La Función de onda y la aproximación de Gutzwiller.</i>	7
1.3 <i>Aproximación de Gutzwiller extendida.</i>	10
1.4 <i>Resultados.</i>	13
1.5 <i>Resumen y discusión.</i>	19
1.A <i>Apéndice A. Límite de acoplamiento fuerte del modelo de Hubbard.</i>	20
1.B <i>Apéndice B. Solución de Hartree-Fock antiferromagnética para el modelo de Hubbard.</i>	21

Capítulo 2. Teoría de Líquidos de Luttinger para Sistemas Fermiónicos Unidimensionales.

2.1 <i>Introducción.</i>	23
2.2 <i>g-ología. Modelo de Tomonaga y modelo de Luttinger.</i>	25
2.3 <i>Representación bosónica y solución exacta del modelo de Tomonaga-Luttinger.</i>	29
2.4 <i>Incorporación de $g_{1\perp}$ y g_3. La línea de Luther-Emery</i>	34
2.5 <i>Diagrama de fases completo.</i>	37
2.5.1 <i>Fuera de banda semillena.</i>	38
2.5.2 <i>Banda semillena.</i>	39
2.6 <i>Líquidos unidimensionales.</i>	40
2.7 <i>Estudios numéricos, resultados de la teoría de campos conforme y comportamiento de la funciones de correlación.</i>	41
2.A <i>Apéndice A. Cálculo de la función de Green en la representación bosónica.</i>	48
2.B <i>Apéndice B. Método de Diagonalización de Lanczos.</i>	50
2.C <i>Apéndice C. Invarianza conforme en $D = 1 + 1$. Transformación del tensor energía-impulso.</i>	51
2.D <i>Apéndice D. Efecto de un flujo magnético. El peso de Drude.</i>	54

Capítulo 3. Modelo de Hubbard Extendido con "Hopping" Correlacionado.

3.1 <i>Introducción.</i>	56
3.2 <i>Propiedades de simetría del modelo</i>	63
3.2.1 <i>Transformaciones partícula-hueco.</i>	63
3.2.2 <i>Simetrías continuas.</i>	64
3.2.3 <i>Conservación de N_d.</i>	65
3.3 <i>Estudio numérico del modelo en 1D.</i>	65
3.3.1 <i>Resultados para $t_3 = 0$.</i>	67
3.3.2 <i>El efecto de t_3.</i>	74
3.4 <i>Límite exactamente soluble.</i>	74
3.5 <i>Resumen y discusión.</i>	82

Capítulo 4. Desde el Modelo de Hubbard Extendido con “Hop- ping” Correlacionado hacia el Límite Hubbard.	
4.1 <i>Introducción.</i>	84
4.2 <i>Resultados exactos para el diagrama de fases en el límite $t_{AB} = 0$.</i>	87
4.3 <i>Estudio numérico de la evolución hacia el límite Hubbard puro.</i>	91
4.3.1 <i>Resultados en 2D.</i>	91
4.3.2 <i>Resultados en 1D.</i>	95
4.4 <i>El efecto de la repulsión coulombiana a primeros vecinos.</i>	100
4.5 <i>Resumen y discusión.</i>	102
4.A <i>Apéndice A. Método de Lanczos para las propiedades dinámicas.</i>	107
4.B <i>Apéndice B. Método de Monte Carlo de líneas de mundo.</i>	109
Capítulo 5. Resumen y conclusiones.	112
Bibliografía.	114.

Capítulo 1

Aproximación de Gutzwiller Extendida para el Estado Fundamental del Modelo de Hubbard.

1.1 Introducción

El modelo de Hubbard constituye actualmente un prototipo en el estudio de los sistemas fermiónicos con correlaciones fuertes. En 1963, 1964 Hubbard [69] lo propuso para estudiar el comportamiento electrónico en bandas angostas, en particular, para los metales de transición, que tienen electrones d de conducción. En este tipo de sólidos, los electrones están localizados en las posiciones atómicas y la energía cinética se debe a procesos de salto o “hopping” posibilitados por un pequeño solapamiento entre los orbitales de átomos vecinos. A este tipo de descripción se la denomina “tight-binding”. Si no se tiene en cuenta ningún efecto de interacción con la red o con algún campo externo y suponiendo que el sólido está compuesto por un solo tipo de átomos, un modelo para los electrones de los orbitales externos tiene como únicos ingredientes un término cinético y un término de interacción coulombiana entre los electrones. La base adecuada en una descripción “tight-binding” es la de las funciones de Wannier $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ que se caracterizan por estar localizadas en torno a las posiciones atómicas \mathbf{R}_i que conforman la red del sólido. Usando esta base, el término

cinético del hamiltoniano se escribe en segunda cuantificación:

$$H_t = \sum_{i,j\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \quad (1.1)$$

donde $\sigma = \uparrow, \downarrow$ denota el espín de los electrones, mientras que

$$t_{ij} = \int d^3r \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (1.2)$$

En principio, en la suma de (1.1) i, j barren todos los sitios de la red, pero teniendo en cuenta que las funciones de Wannier centradas en dos sitios distintos de la red tienen solapamientos despreciables si los dos sitios están a distancias superiores a un parámetro de red, sólo se retienen los términos con $j = i + \delta$, donde δ barre sobre todos los sitios vecinos al sitio i de la red. El término con $j = i$ sólo agrega una constante proporcional al número de partículas, si se considera un sistema con simetría de traslación. La interacción coulombiana entre electrones se escribe en segunda cuantificación como

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl, \sigma\sigma'} V_{ijkl} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} c_{k\sigma} \quad (1.3)$$

donde

$$V_{ijkl} = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \phi^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) \phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_k) \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \phi^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) \phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_l). \quad (1.4)$$

Las contribuciones más importantes son aquellas que involucran a lo sumo dos sitios vecinos. Los correspondientes elementos de matriz son

$$U \equiv V_{iiii}, \quad V \equiv V_{ijij}, \quad \Delta t \equiv V_{iiij}, \quad X \equiv V_{ijji} = V_{iijj}, \quad (1.5)$$

donde i, j son primeros vecinos. Según las estimaciones de Hubbard para los metales de transición $U \sim 20eV, V \sim 6eV, \Delta t \sim 0.5eV, X \sim 0.025eV$. Luego argumentó que V se reduce a valores entre 2 a $3eV$ por efectos del apantallamiento, justificando despreciar todos los términos de interacción excepto el de U . El hamiltoniano de Hubbard resulta, entonces

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1.6)$$

con $\langle ij \rangle$ denotando todos los pares de sitios vecinos cercanos de la red, $t_{ij} = -t$ y $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$. El hamiltoniano que contiene adicionalmente el término de V define el modelo de Hubbard extendido, mientras que el que contiene Δt define el modelo de Hubbard (o de Hubbard extendido) con interacción de carga enlace. En capítulos posteriores, se considerarán estas ampliaciones del modelo de Hubbard. Otras extensiones resultan de incluir más de un orbital atómico en la descripción "tight-binding". También en tratamientos de compuestos con distintos tipos de átomos surgen generalizaciones a más de una banda, en particular, en capítulos posteriores se considerará el hamiltoniano de Hubbard extendido de tres bandas para los planos de $Cu - O$ de los cupratos superconductores. El éxito de las descripciones basadas en estas extensiones más realistas depende fuertemente de la correcta comprensión de los ingredientes esenciales de la alta correlación, contenido por la versión más simple (1.6). Aunque

debe decirse que lamentablemente se ha progresado muy poco en este sentido. A pesar de haber sido propuesto hace más de treinta años, de su apariencia inofensiva y de la enorme cantidad de trabajos de investigación dedicados a su estudio, existen sólo unos pocos resultados exactos y muchos tratamientos y aproximaciones que frecuentemente conducen a resultados diferentes. A continuación se mencionarán algunos de los aspectos más importantes. Si bien no se pretende una revisión exhaustiva, vale la pena al menos mencionar el tipo de problemas de los sistemas fermiónicos altamente correlacionados con los que el modelo guarda una estrecha relación. Algunos de estos aspectos se han llegado a entender razonablemente bien, mientras que otros siguen constituyendo una fuente de motivación para el estudio del modelo.

Originalmente, las principales motivaciones para el estudio del modelo de Hubbard eran el estudio de la transición metal-aislante (transición de Mott) y del ordenamiento magnético, inducidos por correlaciones [69], [78], [53], [89]. Su relación con la transición metal-aislante se desprende de considerar los dos casos límites para el hamiltoniano (1.6). En el límite no interactuante ($U = 0$), tiene una forma diagonal en el espacio recíproco. Los operadores fermiónicos transformados son

$$c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i c_{i\sigma}^\dagger \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i), \quad (1.7)$$

donde L denota el número total de sitios de la red y \mathbf{k} son los vectores de la red recíproca. Para condiciones de contorno periódicas en 3D $\mathbf{k} \equiv (k_x, k_y, k_z)$, donde $k_\alpha = 2\pi n_\alpha / (a_\alpha L_\alpha)$, $\alpha = x, y, z$, siendo n_α un entero tal que $-L_\alpha \leq n_\alpha < L_\alpha$, y L_α la longitud de la red en la dirección α . H_t se escribe

$$H_t = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}\sigma} = -2t \sum_{\alpha=1}^D \cos(k_\alpha a_\alpha), \quad (1.8)$$

siendo D la dimensión de la red y a_α las distintas componentes del vector de red. En este límite se obtiene, entonces, una banda no correlacionada, que define un carácter metálico. Por otro lado, en el límite atómico del modelo ($t = 0$), el estado fundamental tiene las partículas localizadas, definiéndose un carácter aislante. Naturalmente, el régimen intermedio $t \sim U$ es el que despierta mayor interés, ya que contiene la competencia entre los efectos de banda y los de localización inducida por correlación. La solución exacta del modelo existe sólo en el caso unidimensional (1D). Fue hallada por Lieb y Wu en 1968 [89] mediante la técnica del "Ansatz" de Bethe [135], y encontraron que la transición metal-aislante tiene lugar para $U = 0$. El comportamiento magnético está íntimamente relacionado con la transición metal-aislante. En 1D, Lieb y Mattis mostraron que el estado fundamental contiene fuertes correlaciones antiferromagnéticas [90]. El carácter antiferromagnético es fácil de entender en el límite $U \gg t$. En el apéndice A se muestra que en el límite de acoplamiento fuerte, el hamiltoniano de Hubbard para banda semillena, se reduce al hamiltoniano de Heisenberg con interacción de intercambio antiferromagnética. Puede concluirse, entonces, que el estado fundamental corresponde a un aislante antiferromagnético para banda semillena en el límite de acoplamiento fuerte. La aproximación de campo medio de Hartree-Fock antiferromagnética [115] que se muestra en el apéndice B, concluye sobre la existencia de un "gap" de carga en la superficie de Fermi del sistema no interactuante en banda semillena, para valores de U arbitrariamente pequeños, como se muestra en la Fig. 1.1 para el caso de 1D. Para $D > 1$, la generalización es obvia. En una red bipartita, la imagen *simplificada* del estado de Neel perfecto provee una idea

es decir, con una partícula menos que banda semillena, tiene el máximo espín posible. Tal estado corresponde a un estado ferromagnético con un hueco que se desplaza por la red, ganando energía cinética y corresponde a un estado metálico determinado por la movilidad del hueco por la inexistencia de un “gap” de carga. A diferencia de lo ocurrido con la mayoría de los resultados exactos, este teorema es válido para $D > 1$. Para $D=1$ el estado fundamental es un singlete [92]. Más recientemente, Lieb propuso dos teoremas [91] que definen el valor del espín total para varios tipos de redes y densidad de partículas.

En relación con el problema de la transición metal-aislante y el orden antiferromagnético, el descubrimiento de los materiales superconductores de alta temperatura crítica renovó el interés por el modelo, a partir de que Anderson [5] lo propuso como candidato para explicar el mecanismo superconductor en los óxidos de cobre. En el capítulo 3 se profundizará más sobre las propiedades de los cupratos superconductores, pero la característica más sorprendente es que estos materiales tienen una fase normal aislante con fuertes correlaciones antiferromagnéticas. Considerando que la física importante para la superconductividad tiene lugar en los planos de $Cu - O$, Anderson propuso que el modelo apropiado para describir esta fase era el modelo de Hubbard bidimensional en banda semillena en el límite de acoplamiento fuerte, o equivalentemente, el modelo de Heisenberg con $J \sim t^2/U$, como se mostró en el apéndice A. Luego revivió la idea del estado de enlaces de valencia resonantes (RVB) [88] para aproximar el estado fundamental del modelo de Heisenberg, que había sido propuesto por él en 1973. El estado RVB consiste de singletes formados por pares de partículas con espines opuestos ubicadas en posiciones vecinas de la red. Para banda semillena este estado tiene un carácter aislante, ya que se supone U grande y doble ocupación nula en banda semillena, de manera que el agregado de una partícula supone un costo de energía de $\sim U$, y por lo tanto, la existencia de un “gap” de carga. Anderson mostró que el estado RVB tiene proyección no nula sobre un estado BCS. La fase superconductora se desarrolla en los cupratos cuando se introducen o extraen partículas en los planos $Cu - O$ por medio del “dopaje” del material. Para densidades inferiores a banda semillena, la existencia de sitios vacíos permite la movilidad de los singletes “enlazados”, mientras que la ruptura de los enlaces significaría una pérdida de energía de $\sim J$. Por otro lado, tal estado de tipo BCS y por lo tanto superconductor. A partir de ese momento, tanto el modelo de Hubbard como el modelo (1.A.5), también denominado modelo $t - J$, pasaron a ser las figuras estelares de las publicaciones científicas especializadas, aunque la validez de los mismos para la descripción del mecanismo superconductor resulta controvertida.

En los últimos años, el desarrollo de las técnicas numéricas han jugado un rol muy importante para dilucidar muchos de estos aspectos. En particular, en 1D existen una serie de resultados (que se detallarán en el próximo capítulo) que facilitan descripciones muy precisas sobre las propiedades físicas de los modelos de fermiones altamente correlacionados. Los sistemas bidimensionales no corren la misma suerte. Los cálculos numéricos se realizan en sistemas finitos, y la carencia de un marco interpretativo como el que se detallará en el próximo capítulo dificulta la posibilidad de extraer conclusiones precisas. En los estudios numéricos no se han encontrado evidencias a favor de la existencia de una fase superconductora para $U > 0$ en 1D ni en 2D [104], [60]. También se han realizado numerosos estudios del modelo de Hubbard con $U < 0$ [119]. Una interacción U atractiva da lugar a la conformación de pares locales y por lo tanto al surgimiento de correlaciones superconductoras. Para banda semillena tales correlaciones coexisten con la formación de una onda de densidad de

1.2 La Función de Onda y la Aproximación de Gutzwiller.

Para aproximar la función de onda del estado fundamental del hamiltoniano de Hubbard, Gutzwiller partió del estado fundamental $|\psi_0\rangle$ del hamiltoniano no interactuante H_t (1.1), (1.8) ¹. Se denota el número de partículas por $N = N_\uparrow + N_\downarrow$, siendo N_σ el número de partículas con espín σ , y por D al número de sitios doblemente ocupados. El estado $|\psi_0\rangle$ constituye el “mar de Fermi” compuesto por todos los niveles con energías ϵ_k menores que la energía de Fermi ϵ_F ocupados. Cuando se conecta la interacción, el número de sitios doblemente ocupados disminuye, ya que impone un costo de energía igual a UD . Para obtener un estado $|\psi\rangle$ para el sistema correlacionado a partir de $|\psi_0\rangle$, Gutzwiller propuso un proyector \mathcal{P} tal que $\mathcal{P}|\psi_0\rangle = |\psi\rangle$ tenga como efecto la reducción de la cantidad de sitios doblemente ocupados. Explícitamente

$$|\psi\rangle = \prod_i [1 - (1 - g)n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}]|\psi_0\rangle = g^D|\psi_0\rangle, \quad (1.14)$$

siendo g un parámetro variacional que se determina a partir de minimizar la energía dada por

$$E = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (1.15)$$

Para el límite no interactuante $U = 0$, se tiene $g = 1$, mientras que $g = 0$ conduce a $|\psi\rangle \neq 0$ sólo si $D = 0$, correspondiente al límite $U = \infty$. Por construcción, el término de interacción se trata exactamente con este método, a diferencia de los métodos perturbativos y de campo medio. En el espacio real, el estado no correlacionado $|\psi_0\rangle$ se escribe

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{L^N} \sum_{m,n} \text{Det}(e^{ik_j R_m})_\uparrow \text{Det}(e^{ik_l R_n})_\downarrow |m, n\rangle, \quad (1.16)$$

donde $|m, n\rangle$ es un estado del espacio real, caracterizado por un conjunto de índices n (m) que especifican las posiciones de las N_\uparrow (N_\downarrow) partículas con espín \uparrow (\downarrow) en la red, mientras que $\text{Det}(e^{ik_j R_m})_\uparrow$, $\text{Det}(e^{ik_l R_n})_\downarrow$ son determinantes de Slater correspondientes los N_σ vectores k con menor energía ϵ_k y a las posiciones de las N_σ partículas en el espacio real, que definen la configuración denotada por m, n . Estos determinantes constituyen un punto problemático en el tratamiento. Para evitar estos factores, Gutzwiller propuso la aproximación que lleva su nombre, que consiste en reemplazarlos por las probabilidades asociadas a tales configuraciones de partículas, suponiendo que cualquier configuración es *a priori* equiprobable, es decir, sin tomar en cuenta ningún efecto de correlación espacial. Las probabilidades para una dada configuración n de espines \uparrow y para una configuración m de espines \downarrow son

$$P(L, N_\sigma) = n_\sigma^{N_\sigma} (1 - n_\sigma)^{L - N_\sigma}, \quad (1.17)$$

donde $n_\sigma = N_\sigma/L$ son las densidades de partículas con espín σ . La evaluación de (1.15) se reduce a un mero problema combinatorio. Clasificando las configuraciones $|m, n\rangle$ por el número de sitios doblemente ocupados D , el número de configuraciones diferentes para un dado D resulta

$$N_D(L, N_\uparrow, N_\downarrow) = \frac{L!}{(N_\uparrow - D)!(N_\downarrow - D)!D!(L - N_\uparrow - N_\downarrow + D)!}. \quad (1.18)$$

¹En lo que sigue, se usará la notación correspondiente a 1D.

Para el cálculo de la energía cinética es conveniente realizar una descomposición similar a la del apéndice A. Pictóricamente, los diferentes procesos de “hopping” se esquematizan de la siguiente manera.

$$\begin{array}{ccccc}
 j & i & & j & i \\
 \uparrow & \circ & \Rightarrow & \circ & \uparrow \\
 \uparrow & \updownarrow & \Rightarrow & \updownarrow & \uparrow \\
 & & (a) & &
 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccc}
 \updownarrow & \circ & \Rightarrow & \downarrow & \uparrow \\
 \uparrow & \downarrow & \Rightarrow & \circ & \updownarrow \\
 & & (b) & &
 \end{array}$$

(1.19)

Los procesos (a) no modifican el número total de sitios doblemente ocupados, mientras que en los (b), este número cambia en uno. La norma de la función de onda, y los valores de expectación de H_t y H_{int} resultan, con esta aproximación

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_D g^{2D} N_D(L, N_\uparrow, N_\downarrow) P(L, N_\uparrow) P(L, N_\downarrow), \\
 \langle \psi | H_t | \psi \rangle &= \sum_{D\sigma} g^{2D} [N_D(L-2, N_\sigma-1, N_{-\sigma}) + g^2 N_D(L-2, N_\sigma-1, N_{-\sigma}-2) \\
 &\quad + 2g N_D(L-2, N_\sigma-1, N_{-\sigma}-1)] P(L-2, N_\sigma-1) P(L, N_{-\sigma}) \bar{\epsilon}_\sigma \\
 \langle \psi | H_{int} | \psi \rangle &= UL \sum_D g^{2D+2} N_D(L-2, N_\uparrow-1, N_\downarrow-1) P(L, N_\uparrow) P(L, N_\downarrow) \quad (1.20)
 \end{aligned}$$

donde $\bar{\epsilon}_\sigma = \langle \psi_0 | H_t | \psi_0 \rangle / L = (1/L) \sum_{|k| < k_F\sigma} \epsilon_k$, es la energía cinética por sitio de las partículas con espín σ en el sistema no interactuante. En el cálculo la energía cinética, las cuatro contribuciones corresponden a los cuatro procesos del esquema (1.19). El primero de los procesos (a), sólo involucra a un espín σ en los dos sitios i, j , de manera que el número de configuraciones para los restantes sitios es $N_D(L-2, N_\sigma-1, N_{-\sigma})$. En el segundo proceso hay un espín σ y dos espines $-\sigma$, de manera que el número de configuraciones en los restantes sitios es $N_D(L-2, N_\sigma-1, N_{-\sigma}-2)$. En forma similar, el número de configuraciones para los restantes sitios en los procesos (b) es $N_D(L-2, N_\sigma-1, N_{-\sigma}-1)$. Si en las configuraciones de los $L-2$ sitios restantes hay D sitios doblemente ocupados en la configuraciones inicial y final, corresponde incorporar un factor $g^D g^D = g^{2D}$, común a todos los procesos. En el segundo proceso (a), intervine un sitio doblemente ocupado en i, j tanto en el estado final como en el inicial, lo cual conduce a un factor adicional para este proceso de g^2 , mientras que los procesos (b) involucran un sitio doblemente ocupado en el estado inicial, pero no en el final o viceversa, lo cual conduce a un factor adicional g . Finalmente, la probabilidad de encontrar un espín σ entre los dos sitios i, j es $P(L-2, N_\sigma-1)$ y la de encontrar un espín $-\sigma$ es $P(L, N_{-\sigma})$, dado que sólo se mueve el espín σ .

En el límite termodinámico, $L, N_\uparrow, N_\downarrow \rightarrow \infty$, y las sumas de (1.20) se aproximan por los términos mayores, lo cual conduce a una relación entre D y g [53], [109]

$$g^2 = \frac{d(1 - n_\uparrow - n_\downarrow + d)}{(n_\uparrow - d)(n_\downarrow - d)}, \quad (1.21)$$

con $d = D/L$. La energía por sitio del estado fundamental resulta

$$\frac{E}{L} = \sum_\sigma q_\sigma(d, n_\uparrow, n_\downarrow) \bar{\epsilon}_\sigma + Ud, \quad (1.22)$$

con

$$q_{\sigma} = \frac{1}{n_{\sigma}(1-n_{\sigma})}(1-n_{\sigma}-n_{-\sigma}+d)(n_{\sigma}-d) + d(n_{-\sigma}-d) + 2\sqrt{d(1-n_{\sigma}-n_{-\sigma}+d)(n_{\sigma}-d)(n_{-\sigma}-d)} \quad (1.23)$$

resultando una función de d para la energía. Los parámetros q_{σ} definen las discontinuidades de los números de ocupación de una partícula $\langle c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \rangle$ en el nivel de Fermi.

Brinkman y Rice [22] se dieron cuenta que la aproximación de Gutzwiller predice una transición metal-aislante para banda semillena. En este caso $n = 1$ y considerando $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$, se encuentra $q_{\uparrow} = q_{\downarrow} \equiv q$ y $\bar{\epsilon}_{\uparrow} = \bar{\epsilon}_{\downarrow} \equiv \bar{\epsilon}_0/2$, siendo $\bar{\epsilon}_0$ la energía cinética total por sitio en el sistema no interactuante. Es fácil ver que

$$q = 8d(1-2d) \quad (1.24)$$

y minimizando la energía se obtiene

$$d = \frac{1}{4}\left(1 - \frac{U}{U_C}\right), \quad q = 1 - \left(\frac{U}{U_C}\right)^2, \quad \frac{E}{L} = -|\bar{\epsilon}_0|\left(1 - \frac{U}{U_C}\right)^2, \quad (1.25)$$

donde $U_C = 8|\bar{\epsilon}_0|$ es el valor crítico de la interacción para el cual $d = 0$, de manera que cada sitio de la red está ocupado por una sola partícula. Para este valor de U , las partículas se localizan. El valor de la energía cinética se anula (ver (1.24)), indicando una transición metal-aislante. Claramente, cerca de la transición el valor de la energía deja de ser correcto. Como se discutió en la sección anterior, en el límite de acoplamiento fuerte, los procesos de segundo orden de la forma (1.10) permiten una ganancia de energía de $\sim t^2/U$, mientras que la aproximación de Gutzwiller predice un valor nulo para la energía, obteniéndose un estado fundamental paramagnético y localizado. Esta deficiencia se debe al hecho de que el efecto de las correlaciones espaciales, en particular, las correlaciones antiferromagnéticas que son las que en este caso permiten esta ganancia de energía, no está tenido en cuenta en forma eficiente en la aproximación de Gutzwiller. En 1D, se ha mostrado [79], [103], que la energía del estado fundamental para banda semillena es $E = -\alpha t^2/U$ para la función de onda de Gutzwiller sin aproximación, obteniéndose el comportamiento correcto, si bien α es mucho menor que el correspondiente al resultado exacto [57], [103]. Los procesos cinéticos de tipo (b) en (1.19) son los responsables de estas correlaciones. En el límite de acoplamiento fuerte, en el que la doble ocupación es muy baja, la ganancia de energía cinética corre por cuenta de este tipo de procesos, y esto requiere que las configuraciones de la forma (1.9) tengan amplitudes importantes en el estado fundamental. Para comprender el origen del problema, debe aclararse que la aproximación de Gutzwiller consta, en realidad, de *dos* aproximaciones:

- 1. La sustitución de los determinantes de Slater por la probabilidad de cada configuración.
- 2. El cálculo de la energía cinética se realiza en un “cluster” de dos partículas sin tomar en cuenta las configuraciones de las restantes.

Normalmente, suele entenderse que la aproximación de Gutzwiller consiste sólo del punto (1.), sin embargo la transición de Brinkman-Rice es una consecuencia de la aproximación (2.). A modo de ejemplo ilustrativo, considérense dos configuraciones

de partículas con igual número de sitios doblemente ocupados, iguales N_{\uparrow} y N_{\downarrow} , e iguales ocupaciones para los sitios i, j , primeros vecinos.

$$\begin{array}{cccccccc}
 & & & & & i & j & & & \\
 & & & & & \uparrow & \downarrow & \circ & \uparrow & \downarrow \\
 \uparrow \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & (\uparrow \downarrow) & \circ & \uparrow & \downarrow \\
 \uparrow & \downarrow & \uparrow \downarrow & \uparrow & \downarrow & (\uparrow \downarrow) & \uparrow & \downarrow & \circ
 \end{array} \quad (1.26)$$

Claramente, el segundo estado tiene un mayor número de elementos de matrices de H_t no nulos, y por lo tanto una mayor contribución a energía cinética total que el primero, mientras que en (1.20) se considera que proporcionan idéntica contribución.

Por otro lado, si se compara el valor de la energía dado por la aproximación de Gutzwiller para banda semillena en el límite de acoplamiento débil ($U \lesssim t$) con el correspondiente al de la solución de Hartree-Fock antiferromagnética [109], [144] se encuentra

$$\begin{aligned}
 \frac{E}{L}|_{Gutz} &= -|\bar{\epsilon}_0| + \frac{U}{4} - \frac{U^2}{64|\bar{\epsilon}_0|}, \\
 \frac{E}{L}|_{HF} &= -|\bar{\epsilon}_0| + \frac{U}{4} - O(e^{-|\bar{\epsilon}_0|/U}),
 \end{aligned} \quad (1.27)$$

obtebiéndose una mejor estimación para la energía del estado fundamental con la aproximación de Gutzwiller.

En la próxima sección se muestra una formulación alternativa para la aproximación de Gutzwiller. La idea básica es retener la aproximación 1. y descartar la 2.. Esto permite, por un lado, esclarecer respecto del efecto de ambas aproximaciones en la transición de Brinkman-Rice. Este punto estaba bastante oscuro en la literatura. Por otro lado, esta formulación es fácilmente generalizable permitiendo obtener versiones mejoradas de la aproximación de Gutzwiller, incluyendo mejor el efecto de las correlaciones espaciales.

1.3 Aproximación de Gutzwiller Extendida.

El "proyector" de Gutzwiller de (1.14) puede escribirse como

$$\mathcal{P} = \exp(-\lambda_D \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}), \quad (1.28)$$

con $\lambda_D = -\log(g)$. En una red de longitud L con números fijos N_{\uparrow} de partículas con espín \uparrow y N_{\downarrow} de partículas con espín \downarrow , la probabilidad asociada a una configuración $|m, n\rangle$ de partículas en el espacio real es $P(L, N_{\uparrow})P(L, N_{\downarrow})$, y tiene el mismo valor para cualquier $|m, n\rangle$. La función de onda de Gutzwiller, con la aproximación 1. incluida, puede escribirse como

$$|\psi_G\rangle = \sum_{(m,n)} a_{(m,n)} |m, n\rangle, \quad (1.29)$$

con

$$\begin{aligned}
 a_{(m,n)} &= \exp\left(-\frac{\lambda_0}{2} - \lambda_D D(m, n)\right), \quad D(m, n) = \sum_i \langle m, n | n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} | m, n \rangle, \\
 \lambda_0 &= \log(\langle \psi_G | \psi_G \rangle) = \log\left\{ \sum_{(m,n)} \exp(-\lambda_0 - 2\lambda_D D(m, n)) \right\}.
 \end{aligned} \quad (1.30)$$

Este planteo permite una descripción unificada para el modelo de Hubbard con $U > 0$ y $U < 0$. Mientras que en el primer caso, se espera $\lambda_D > 0$, que corresponde a una reducción en el número de sitios doblemente ocupados, en el segundo caso se espera un aumento de esta cantidad y, por lo tanto, $\lambda_D < 0$.

Esta construcción es formalmente equivalente a definir el operador densidad de la formulación de la mecánica estadística basada en la teoría de la información, $\hat{\rho}$, construido a partir del conocimiento de $D = \langle \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$, y de la condición de máxima entropía $S = -Tr(\hat{\rho} \log \hat{\rho})$. Escribiendo $\hat{\rho}$ en la base $|m, n\rangle$, se obtiene [75], [80] $\langle m', n' | \hat{\rho} | m, n \rangle = \delta_{(m', n'), (m, n)} |a_{(m, n)}|^2$, con $a_{(m, n)}$ dado en (1.30). Mientras que en la mecánica estadística λ_D es un multiplicador de Lagrange, cuyo valor se determina a partir de calcular $D = Tr\{\hat{\rho}(\sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow})\}$, en el tratamiento de Gutzwiller es un parámetro variacional que se determina a partir de minimizar la energía. Tomando como base esta analogía formal, en [26] se utilizaron funciones de ondas variacionales similares a (1.29) en otro tipo de problemas cuánticos de muchas partículas. Se adopta un punto de vista similar en las técnicas de Monte Carlo variacionales [93].

La función de onda de Gutzwiller aproximada de (1.29) contiene sólo el efecto de las correlaciones locales. El mecanismo natural para mejorarla es el de incluir variacionalmente el efecto de las correlaciones que involucran a más de un sitio. Las más importantes son las correlaciones espín-espín y carga-carga. Los valores de espectación

$$\begin{aligned} C_\delta^{SS} &= \sum_i \langle s_i^z s_{i+\delta}^z \rangle \\ C_\delta^{NN} &= \sum_i \langle n_i n_{i+\delta} \rangle, \end{aligned} \quad (1.31)$$

definen funciones de correlación espín-espín y carga-carga entre sitios separados en una distancia δ sobre la red, siendo $s_i^z = (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$ el doble de la componente z del operador de espín en el sitio i , y $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ el operador densidad de carga local. La extensión que hemos estudiado, consiste en incluir los operadores de correlación de (1.31) en la función de onda (1.29), con parámetros variacionales adicionales λ_δ^{SS} y λ_δ^{NN} . Estos operadores conmutan con el operador de correlación local y tienen una representación diagonal en el espacio real. Los nuevos coeficientes para la función de Gutzwiller aproximada y extendida resultan

$$\begin{aligned} a_{(m, n)} &= \exp\left\{-\frac{\lambda_0}{2} - \lambda_D D(m, n) - \sum_\delta (-\lambda_\delta^{SS} C_\delta^{SS}(m, n) - \lambda_\delta^{NN} C_\delta^{NN}(m, n))\right\}, \\ D(m, n) &= \sum_i \langle m, n | n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} | m, n \rangle, \quad C_\delta^{SS}(m, n) = \sum_i \langle m, n | s_i^z s_{i+\delta}^z | m, n \rangle, \\ C_\delta^{NN}(m, n) &= \sum_i \langle m, n | n_i n_{i+\delta} | m, n \rangle, \\ \lambda_0 &= -\log\{\langle \psi_G | \psi_G \rangle\} = \log\left\{\sum_{(m, n)} \exp(\lambda_0 - 2\lambda_D D(m, n) - 2\lambda_\delta^{SS} C_\delta^{SS}(m, n) - 2\lambda_\delta^{NN} C_\delta^{NN}(m, n))\right\}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Esta función de onda, tiene una forma similar a la función de onda de Jastrow para la representación bosónica del hamiltoniano de Heisenberg [74]. En general, δ adopta valores $1 \leq \delta \leq L/2$. En el caso de sistemas sin orden de largo alcance, como es generalmente el caso de los sistemas unidimensionales en los que las correlaciones decaen según una ley de potencias (ver capítulo 2.), es esperable que sea suficiente considerar

δ hasta valores de unos pocos parámetros de red. En particular, es esperable, que sea suficiente considerar solamente $\delta = 1$ para obtener una descripción razonable. Los resultados de la proxima sección corroboran esta especulación intuitiva. Los valores de los parámetros variacionales se determinan a partir de minimizar la energía, resultando el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \lambda_D} &= \sum_i \langle H n_{i|} n_{i|} + n_{i|} n_{i|} H \rangle - 2D \langle H \rangle = 0 \\ \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \lambda_\delta^{SS}} &= \sum_i \langle H s_i^z s_{i+\delta}^z + s_i^z s_{i+\delta}^z H \rangle - 2C_\delta^{SS} \langle H \rangle = 0; \quad \delta = 1, \dots, k \\ \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \lambda_\delta^{NN}} &= \sum_i \langle H n_i n_{i+\delta} + n_i n_{i+\delta} H \rangle - 2C_\delta^{NN} \langle H \rangle = 0; \quad \delta = 1, \dots, k, \quad (1.33)\end{aligned}$$

donde k denota la máxima distancia δ incluida en la aproximación. De esta manera, la función de onda propuesta depende, en general, de $2k+1$ parámetros variacionales. En este sistema de ecuaciones, los valores medios que involucran al término de interacción de H se calculan trivialmente, ya que corresponden a operadores que conmutan con todos los operadores de la exponencial en (1.32). Al igual que en la sección anterior, el problema consiste en calcular los valores de expectación que involucran al operador H_t . En este punto, podría plantearse la posibilidad de realizar la aproximación 2. de la sección anterior. En este caso, el mínimo "cluster" posible para el cálculo de H_t , debe contener a un sitio i y a sus vecinos hasta distancias δ de i . El efecto de las restantes partículas sería considerado como un "baño" para el "cluster" considerado, promediando sobre todas las configuraciones posibles como en la aproximación 2. de Gutzwiller. Un procedimiento muy similar fue realizado por Fazekas [39] en 1D, incluyendo correlaciones locales y entre primeros vecinos. Los resultados que se muestran en la próxima sección han sido realizados en cadenas de longitud finita, resolviendo numéricamente el sistema (1.33) en forma autoconsistente, sin realizar aproximaciones adicionales.

El uso de las propiedades de simetría del hamiltoniano de Hubbard permite calcular las propiedades del hamiltoniano con $U > 0$ y $U < 0$ simultáneamente, con este formalismo. La transformación de Shiba (1.13) deja invariante el término cinético del hamiltoniano, mientras que transforma $U \rightarrow -U$ en el término de interacción. El efecto sobre la función de onda variacional se obtiene a partir de las leyes de transformación de los operadores

$$\begin{aligned}\sum_i n_{i|} n_{i|} &\rightarrow -\sum_i n_{i|} n_{i|} + (L - N) \\ \sum_i s_i s_{i+\delta} &\rightarrow \sum_i n_i n_{i+\delta} + L - (1+z)N \\ \sum_i n_i n_{i+\delta} &\rightarrow \sum_i s_i s_{i+\delta} + L + (1+z)(N_\uparrow - N_\downarrow), \quad (1.34)\end{aligned}$$

siendo z el número de coordinación de la red. En el caso unidimensional, $z = 2$. Por lo tanto, la función de onda para $U < 0$ se obtiene de la correspondiente a $U > 0$, a partir de las transformaciones

$$\begin{aligned}\lambda_D &\rightarrow -\lambda_D \\ \lambda_\delta^{SS} &\rightarrow \lambda_\delta^{NN}, \quad \delta = 1, \dots, k \\ \lambda_\delta^{NN} &\rightarrow \lambda_\delta^{SS}, \quad \delta = 1, \dots, k.\end{aligned} \quad (1.35)$$

Entre los refinamientos de la función de onda de Gutzwiller para el caso de sistemas finitos puede citarse el de Stollhoff y Fulde, quienes utilizaron el proyector de Gutzwiller \mathcal{P} y el proyector extendido con operadores densidad-densidad sobre un estado de Hartree-Fock para aproximar el estado fundamental de moléculas [133]. También Oleś [110] utilizó el proyector de Gutzwiller sobre el estado de Hartree-Fock antiferromagnético. En la próxima sección se muestra que la extensión (más sencilla) que se acaba de presentar provee buenos resultados no sólo para la energía del estado fundamental del modelo de Hubbard, sino también para las funciones de correlación.

1.4 Resultados.

En la sección anterior se mostró el formalismo general para extender la función de onda aproximada de Gutzwiller, añadiendo el efecto de las correlaciones relevantes no locales. Esta ampliación requiere de la inclusión de nuevos parámetros variacionales respecto de los cuales se debe minimizar la energía. Obviamente, desde el punto de vista práctico, se busca incluir la menor cantidad posible de parámetros variacionales. En esta sección se muestran resultados para el estado fundamental del modelo de Hubbard a banda semillena en una cadena de $L = 6$ sitios con igual número de partículas con espines \uparrow y \downarrow [7]. Siguiendo los lineamientos de la sección anterior, el procedimiento llevado a cabo consiste en

- 1. Se propone una función de onda de prueba de la forma (1.29), con los coeficientes dados por la forma general (1.32), seleccionando valores nulos para los parámetros λ que no se desean incluir en la aproximación, y valores iniciales para los que se desean incluir.
- 1. Se realiza un proceso iterativo, resolviendo el sistema (1.33) con la función de onda propuesta, hasta obtener los valores de los parámetros λ para los cuales se logra la convergencia.

Se consideraron distintos niveles de aproximación:

- a. Incluyendo el efecto de las correlaciones locales solamente, que corresponde a $\lambda_D \neq 0$, y los restantes $\lambda = 0$. Esta función de onda variacional corresponde a la de Gutzwiller aproximada, definida en la sección anterior.
- b. Incluyendo el efecto de las correlaciones locales y las correlaciones carga-carga entre primeros vecinos, lo cual corresponde a $\lambda_D, \lambda_1^{NN} \neq 0$, y los restantes $\lambda = 0$.
- c. Incluyendo el efecto de las correlaciones locales y las correlaciones espín-espín entre primeros vecinos, lo cual corresponde a $\lambda_D, \lambda_1^{SS} \neq 0$, y los restantes $\lambda = 0$.
- d. Incluyendo el efecto de las correlaciones locales y las correlaciones carga-carga y espín-espín entre primeros vecinos, lo cual corresponde a $\lambda_D, \lambda_1^{NN}, \lambda_1^{SS} \neq 0$, y los restantes $\lambda = 0$.
- e. Incluyendo correlaciones entre otros vecinos las aproximaciones anteriores.

En todos los casos, se efectuaron comparaciones con los resultados de la aproximación de Gutzwiller usual y con los resultados exactos, obtenidos mediante la diagonalización numérica del hamiltoniano. Tanto en la diagonalización como en el cálculo

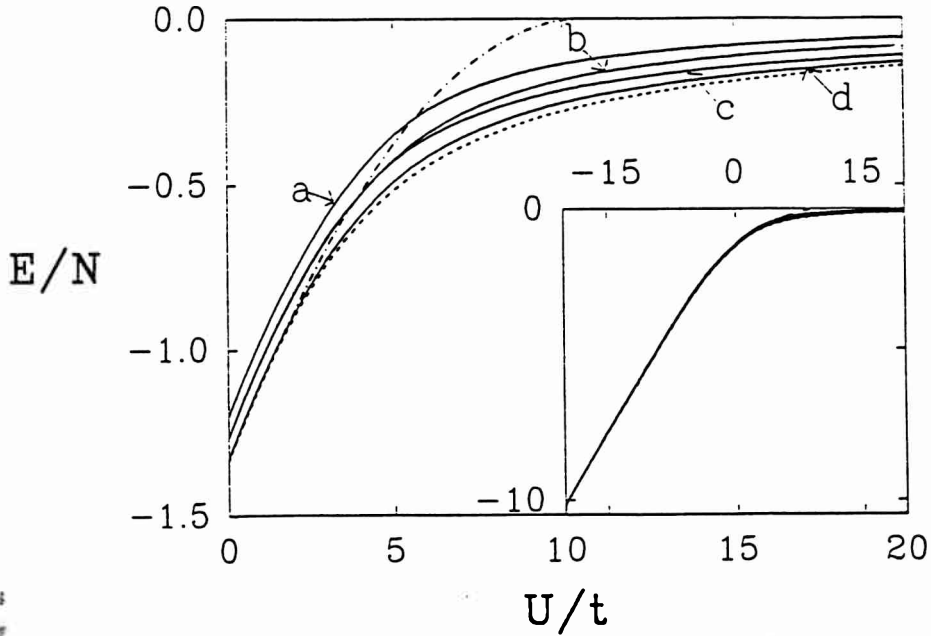


Figura 1.2: Energía por unidad de longitud del estado fundamental del modelo de Hubbard para banda semillena en una cadena de $L = 6$ sitios para valores positivos de la interacción. La figura insertada muestra el comportamiento global ($U > 0$ y $U < 0$). La línea de trazo y punto corresponde a la aproximación de Gutzwiller. La línea de trazos corresponde al valor exacto. Las curvas (a), (b), (c) y (d) corresponden a las diferentes aproximaciones, descritas en a., b., c., d. en el texto.

descrito en el ítem 2., se ha considerado un anillo cerrado, con condiciones de contorno periódicas, y se ha utilizado la simetría de traslación en el anillo, lo cual permite una reducción efectiva del espacio de Hilbert en un factor $\sim 1/L$. En principio, la dimensión del espacio de Hilbert es $d = \binom{L}{N_1} \binom{L}{N_2}$, correspondiente al número total de configuraciones de partículas con espín \uparrow , veces el número total de configuraciones de partículas con espín \downarrow . Además, usando la transformación de las distintas funciones de correlación frente a la transformación de Shiba, se estudiaron los casos $U > 0$ y $U < 0$.

En la Fig. 1.2. se muestran los resultados que resultan de los diferentes niveles de aproximación, para el caso de la energía en un amplio rango de valores de la interacción coulombiana local U , junto con el valor exacto. También se muestra el valor que se obtiene con la aproximación de Gutzwiller usual, para $U > 0$. Por construcción, esta aproximación reproduce el valor exacto de la energía por unidad de longitud para $U = 0$. A medida que U crece, se va apartando del valor exacto hasta la transición a un estado localizado a partir del valor crítico U_C , correspondiente a la transición de Brinkman-Rice. En este caso, $U_C = 10.67t$. Puede observarse que la función de onda de Gutzwiller aproximada (a.) no exhibe transición de Brinkman-Rice. Si bien cuantitativamente se aparta del valor exacto, tiene el comportamiento cualitativo correcto. Una mejor estimación para la energía, se obtiene si se incorporan los efectos de las correlaciones carga-carga o espín-espín entre primeros vecinos, correspondiente a los ítems b. y c., respectivamente. Para valores de $|U| \lesssim 4t$, puede observarse que se encuentra aproximadamente el mismo valor para la energía con cualquiera de estas dos extensiones, mientras que para $|U| \gtrsim 4t$, la extensión con las correlaciones entre espines (b.) provee una mejor estimación para el caso $U > 0$ mientras que la extensión

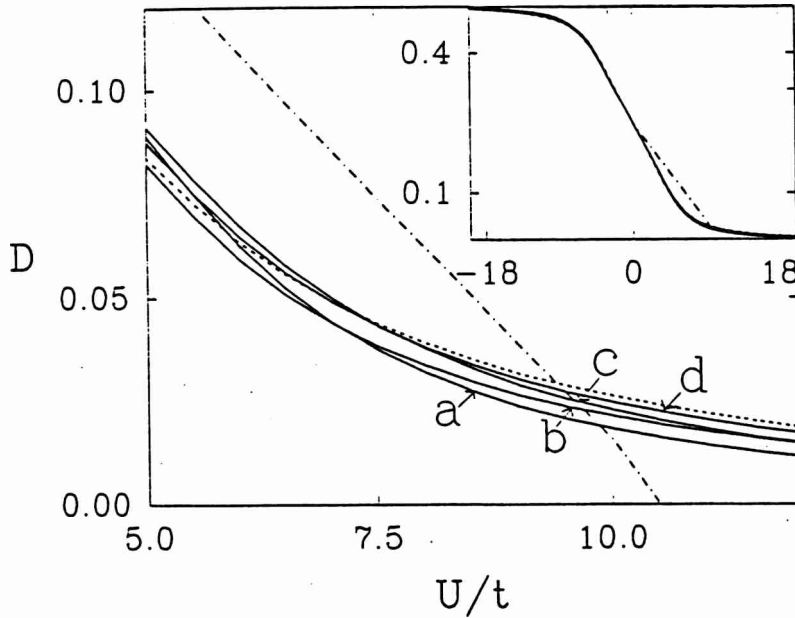


Figura 1.3: Densidad de sitios doblemente ocupados como función de U . La figura insertada muestra el comportamiento global ($U > 0$ y $U < 0$) para banda semillena en una cadena de $L = 6$ sitios. La línea de trazo y punto corresponde a la aproximación de Gutzwiller. La línea de trazos corresponde al valor exacto. Las curvas (a), (b), (c) y (d) corresponden a las diferentes aproximaciones, descritas en a., b., c., d. en el texto.

con las correlaciones de carga (c.) mejora el valor de la energía para $U < 0$. La extensión correspondiente a d., que incluye ambas correlaciones provee un valor para la energía muy cercano al valor exacto en todo el rango de valores de U estudiados. El comportamiento de la energía para las distintas aproximaciones es representativo del tipo de procesos físicos que dominan las regiones de parámetros estudiadas. Si bien las correlaciones que dominan el régimen $U > 0$ son las correlaciones entre espines, (aún para valores de U arbitrariamente pequeños). Los grados de libertad de carga se congelan por la existencia de un “gap”, como se discutió anteriormente, pero el valor del “gap” de carga es exponencialmente pequeño en el régimen de acoplamiento débil en el límite termodinámico. Por este motivo, no es sorprendente que en el régimen de acoplamiento débil no existan diferencias apreciables entre las aproximaciones b. y d., mientras que a medida que aumenta U , la estimación c., provea un valor para la energía muy cercano al valor correcto. Para el caso de $U < 0$ puede hacerse un análisis análogo para el caso de las correlaciones de carga, recurriendo a la transformación de Shiba.

La Fig. 1.3 muestra la densidad de sitios doblemente ocupados. Para esta magnitud la aproximación de Gutzwiller usual predice un comportamiento lineal, anulándose a partir de la transición de Brinkman-Rice. Al igual que para el caso de la energía, las cuatro aproximaciones a., b., c. y d. proporcionan el comportamiento cualitativo correcto y la aproximación d. predice un valor muy cercano al exacto. La extensión c., que incluye el efecto de la correlación espín-espín entre primeros vecinos además de las correlaciones locales exagera el favorecimiento del orden antiferromagnético para valores positivos de la interacción $U \gg t$, prediciendo valores de D inferiores a los exactos.

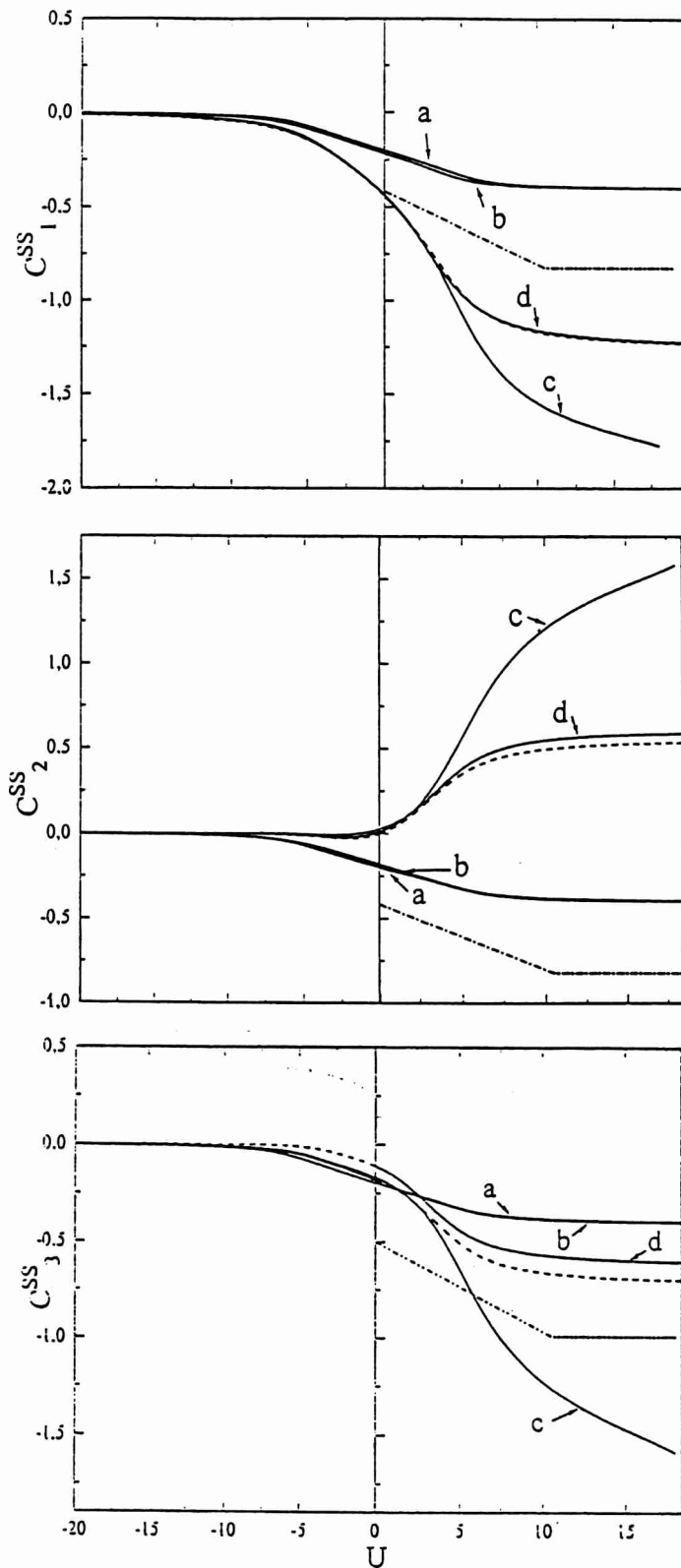


Figura 1.4: Funciones de correlación espín-espín entre primeros, segundos y terceros vecinos para banda semillena en una cadena de $L = 6$ sitios. La línea de trazo y punto corresponde a la aproximación de Gutzwiller. La línea de trazos corresponde al valor exacto. Las curvas (a), (b), (c) y (d) corresponden a las diferentes aproximaciones, descritas en a., b., c. y d. respectivamente.

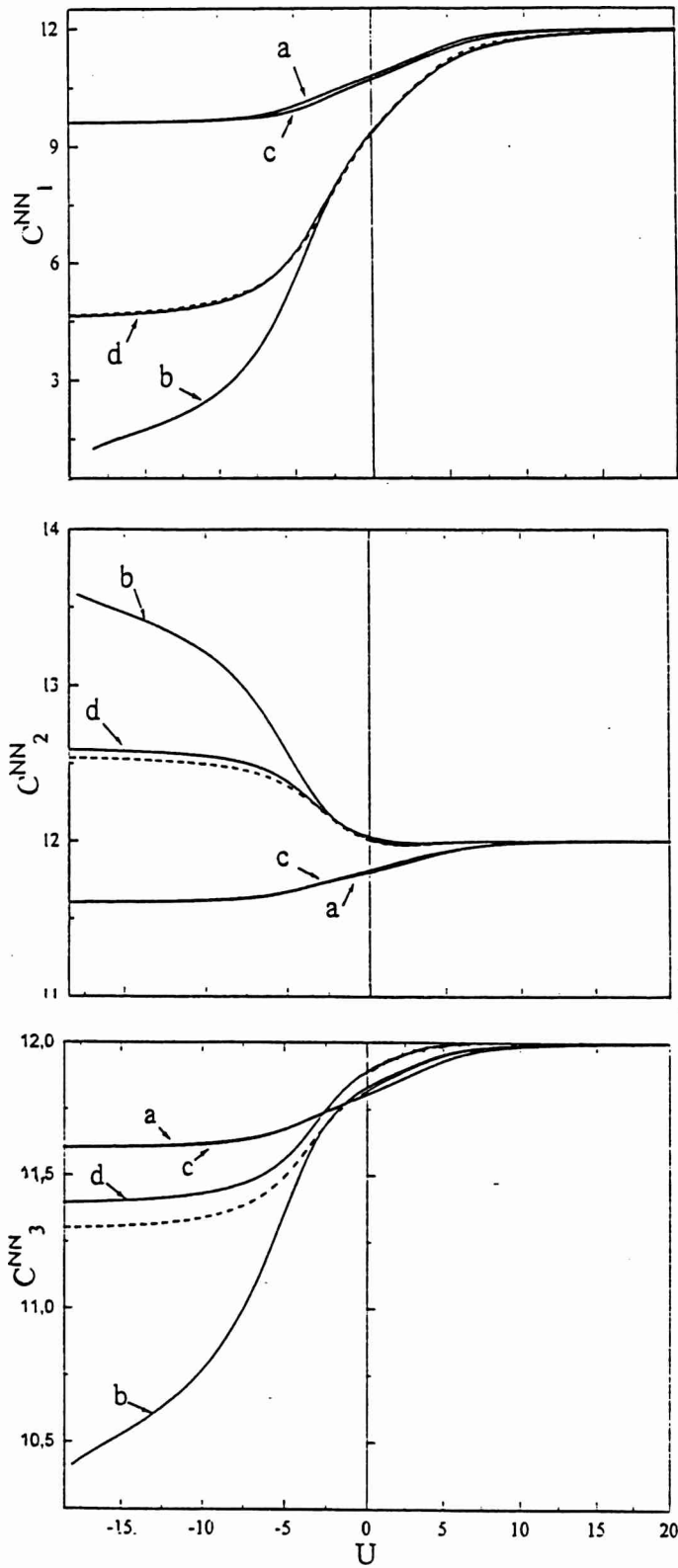


Figura 1.5: Funciones de correlación carga-carga entre primeros, segundos y terceros vecinos para banda semillena en una cadena de $L = 6$ sitios. La línea de trazos corresponde al valor exacto. Las curvas (a), (b), (c) y (d) corresponden a las diferentes aproximaciones, descritas en a., b., c. y d. respectivamente.

U	a	b	c	d
- 0.01	0.899999	0.952068	0.951902	0.995856
- 1.0	0.896400	0.958391	0.941660	0.995432
- 5.01	0.841124	0.947348	0.882148	0.987829
-10.0	0.836939	0.930614	0.860744	0.992648
-18.0	0.847035	0.895141	0.857409	0.996568
0.10	0.899999	0.951902	0.952068	0.995856
2.01	0.885665	0.927583	0.960400	0.993856
6.01	0.835656	0.873507	0.943157	0.988381
9.01	0.835367	0.862206	0.933600	0.991689
15.01	0.844193	0.857941	0.912897	0.995673

Tabla 1.1: Solapamiento de las diferentes funciones de onda variacionales consideradas con la función de onda exacta del estado fundamental en un anillo de $L = 6$ sitios. Las columnas (a), (b), (c) y (d) corresponden a las diferentes aproximaciones, descriptas en a., b., c. y d. respectivamente.

La mejor aproximación posible para la energía a partir de obtener el menor valor posible para la misma, está involucrado en la naturaleza variacional del tratamiento. Tampoco es sorprendente obtener buenos resultados para la densidad de sitios doblemente ocupados, ya que esta cantidad se trata exacta y además está incluida en el hamiltoniano mismo. Un programa más ambicioso que el cálculo aproximado de la energía y el número de sitios doblemente ocupados, a partir de tratamientos variacionales, consiste en lograr una buena aproximación para las funciones de correlación. En la Fig. 1.4 se muestran los resultados de las diferentes aproximaciones para las funciones de correlación espín- espín y carga-carga entre primeros, segundos y terceros vecinos (en la pequeña cadena considerada para este estudio, la máxima distancia de correlación es $\delta = 3$). Para el caso de las funciones de corelación espín-espín con $U > 0$, puede observarse que tanto la aproximación local a., como la que incluye el efecto de las correlaciones carga-carga entre primeros vecinos b., no proveen mejoras a los resultados obtenidos mediante la aproximación de Gutzwiller usual, a pesar de proporcionar estimaciones razonables para la energía y la densidad de sitios doblemente ocupados. Tampoco la aproximación c. da una buena estimación para las funciones de correlación entre espines para $U > 0$, ya que exagera el favorecimiento del orden antiferromagnético, aunque cualitativamente ofrece una mejor descripción que la aproximación b.. Finalmente, al igual que en las otras magnitudes, la aproximación d. provee una estimación muy cercana a la correcta. En cuanto a las funciones de correlación carga-carga para $U < 0$, pueden extraerse conclusiones similares, teniendo en cuenta la transformación de Shiba. Por lo tanto en este caso la aproximación b. exagera el favorecimiento de la onda de densidad de espín, mientras que la c. no establece mejoras respecto de la a. ni de la aproximación de Gutzwiller usual.

Para estudiar cuán buena resultan las diferentes aproximaciones para el cálculo de cualquier otra magnitud física no considerada en el estudio presentado en esta sección, se calculó el solapamiento definido como $\langle \psi_{ex} | \psi_{ap} \rangle$, siendo $|\psi_{ex}\rangle$ la función de onda exacta, que resulta de la diagonalización del hamiltoniano, y $|\psi_{ap}\rangle$ la función de onda aproximada. Los resultados se muestran en la tabla 1.1 y puede concluirse que la aproximación d. provee una muy buena descripción para el estado fundamental exacto para todos los valores de la interacción U .

Finalmente, resta decir que la inclusión de parámetros variacionales, incorporando el efecto de las correlaciones entre vecinos más alejados en cualquiera de las aproximaciones consideradas (item e.) no condujo a mejorar los resultados. Probablemente, esto se deba al pequeño tamaño de la cadena estudiada y esta posibilidad deba ser tenida en cuenta para el caso de d . en cadenas de mayor longitud.

1.5 Resumen y Discusión.

Se propuso un nuevo punto de vista para el planteo de la función de onda de Gutzwiller, aproximando solamente los determinantes de Slater. En el caso de sistemas de tamaño finito, considerados en este estudio, es posible efectuar el cálculo de la energía sin aproximaciones adicionales. Esto implica que se tiene en cuenta el valor de la energía cinética total en cada configuración, en vez del valor correspondiente a un “cluster” conformado por dos partículas vecinas en el “baño” generado por el promedio de las demás. Este procedimiento ha permitido separar los efectos de las dos aproximaciones involucradas en el procedimiento de Gutzwiller usual. Como consecuencia de no introducir aproximaciones adicionales en el cálculo de la energía cinética, se encuentra que esta función de onda de Gutzwiller aproximada, reproduce cualitativamente el comportamiento de la energía y del número de sitios doblemente ocupados, sin la predicción de la transición de Brinkman-Rice. Con este formalismo es fácil realizar extensiones, incluyendo nuevos parámetros variacionales, que incluyan el efecto de otras correlaciones. Se estudió, en particular, el efecto de las correlaciones espín-espín y carga-carga en la función de onda variacional propuesta y se analizó cuáles son las correlaciones *relevantes*, en el sentido de aportar un mejor nivel de aproximación a distintas cantidades físicas en los diferentes regímenes de parámetros estudiados. Se encontró que para el caso de las funciones de correlación, no es fácil lograr una buena aproximación y que es necesario introducir tres parámetros variacionales, incluyendo el efecto de las correlaciones locales, así como las de carga y de espín entre primeros vecinos. Este último caso parece representar correctamente a la función de onda misma del estado fundamental, como se ha podido verificar a partir del cálculo del solapamiento con la función de onda exacta.

A pesar de lo ventajoso (en cuanto a la calidad de la aproximación) de no realizar aproximaciones adicionales en el cálculo de la energía cinética, desde el punto de vista práctico, el tratamiento está restringido a resolver sistemas de tamaño pequeño, ya que implica el almacenamiento de toda la base del espacio de Hilbert, cuya dimensión es enorme para el modelo de Hubbard. Por otro lado, para el caso de sistemas finitos, el método de Lanczos que se considerará en el próximo capítulo permite obtener el estado fundamental exacto. Aunque desde el punto de vista computacional, este último método tiene un mayor requerimiento de memoria (como se expondrá en el próximo capítulo deben almacenarse como mínimo tres vectores del tamaño de la base), en 1D existe la posibilidad de hacer “escaleos” y utilizar otro tipo de tecnologías que se describen en el capítulo siguiente, que permiten extraer conclusiones muy precisas en el límite termodinámico. El esquema variacional propuesto en este capítulo, adecuadamente adaptado, puede ser de utilidad en el caso bidimensional, donde la enorme dimensión del espacio de Hilbert, dificulta enormemente la posibilidad de realizar “escaleos” con resultados de “clusters” de diferentes tamaños. También el tipo de funciones de onda propuestas resultan particularmente adecuadas para una formulación en términos de una integral funcional y tratamientos de Monte Carlo variacionales.

1.A Apéndice A. Límite de Acoplamiento Fuerte del Modelo de Hubbard.

A continuación se describe la derivación de un hamiltoniano efectivo para el modelo de Hubbard en el límite de acoplamiento fuerte a partir una transformación canónica [51]. Un procedimiento alternativo es el uso de la teoría de perturbaciones de Brillouin-Wigner [43], [4]. El término cinético del hamiltoniano de Hubbard (1.6) admite la siguiente descomposición $H_t = H_{t_{AA}} + H_{t_{BB}} + H_{t_{AB}}$, con

$$\begin{aligned}
 H_{t_{AA}} &= -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (1 - n_{i-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) + h.c. \\
 H_{t_{BB}} &= -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma} + h.c. \\
 H_{t_{AB}} &= -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) + h.c. \\
 &\quad -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (1 - n_{i-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma} + h.c., \tag{1.A.1}
 \end{aligned}$$

donde los primeros dos términos corresponden a intercambiar una partícula de espín σ con un hueco situado en un sitio vecino y una partícula de espín σ con un par local formado por dos partículas con espines opuestos situado en un sitio vecino, respectivamente. Estos dos términos no modifican el número total de sitios doblemente ocupados, mientras que el último término corresponde al “hopping” de una partícula de espín σ cuando un par local tiene un sitio vacío como primer vecino y el proceso inverso, modificando el número total de sitios doblemente ocupados. (Una descomposición análoga será considerada en el capítulo 3). Si se realiza una transformación unitaria de la forma

$$H_{ef} = \exp(iS) H \exp(-iS) = H + i[S, H] - \frac{1}{2}[S, [S, H]] + \dots, \tag{1.A.2}$$

eligiendo S tal que cancele $H_{t_{AB}}$ a primer orden, se encuentra que S debe satisfacer la condición $i[S, H_{t_{AA}} + H_{t_{BB}} + H_U] = -H_{t_{AB}}$, donde H_U denota el término de interacción de (1.6). Equivalentemente,

$$S = \sum_{n,m} |n\rangle \frac{\langle n | H_{t_{AB}} | m \rangle}{i(E_n - E_m)} \langle m|, \tag{1.A.3}$$

donde $|n\rangle, |m\rangle$ son autoestados de $H_{t_{AA}} + H_{t_{BB}} + H_U$ con autovalores E_n, E_m . Para $U \gg t$, $E_n - E_m = \pm U + O(t)$, de manera que

$$S = -\frac{it}{U} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) + \frac{it}{U} \sum_{\langle ij \rangle} (1 - n_{i-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma}. \tag{1.A.4}$$

Luego, H_{ef} en el límite de U grande está definido sobre el subespacio *sin sitios doblemente ocupados* y resulta

$$\begin{aligned}
 H_{ef} &= H_{t_{AA}} + i[S, H_{t_{AB}}] = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (1 - n_{i-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) \\
 &\quad + J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i \cdot S_j - \frac{1}{4} n_i n_j) + \frac{t^2}{U} \sum_{\langle ijkl \rangle} c_{k\sigma}^\dagger c_{j\sigma} n_{j-\sigma'} c_{j\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'}, \tag{1.A.5}
 \end{aligned}$$

con $J = 4t^2/U$ y S , operadores de espín $1/2$, $S_i^z = 1/2(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$, $S_i^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}$. El segundo término de (1.A.5) corresponde a un hamiltoniano de Heisenberg con constante de intercambio antiferromagnética J , mientras que el tercero corresponde a un término de "hopping" correlacionado, que no contribuye para banda semillena (igual número de partículas que de sitios). Para banda semillena tampoco contribuye el término cinético de (1.A.5), con lo que resulta el hamiltoniano de Heisenberg como modelo efectivo para el límite de acoplamiento fuerte del modelo de Hubbard a banda semillena.

1.B Apéndice B. Solución de Hartree-Fock Antiferromagnética para el Modelo de Hubbard.

La aproximación de Hartree Fock antiferromagnética corresponde al siguiente desacoplamiento del término de interacción

$$H_{int}^{HF} = U \sum_i (n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle). \quad (1.B.1)$$

Se supone que el orden magnético corresponde a un estado de Neel con una estructura de dos subredes como se muestra en (1.9), correspondiendo a una onda de densidad de espín con vector de onda $\mathbf{k} = (\pi, \pi, \pi) \equiv \pi$, en el caso de una red cúbica en 3D. El momento magnético m y la densidad n en el sitio i tienen la forma

$$\begin{aligned} \langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle &= \exp(i\pi \cdot \mathbf{R}_i) m \\ \langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle &= n, \end{aligned} \quad (1.B.2)$$

a partir de las cuales se definen las cantidades

$$\begin{aligned} A_{0\sigma} &= U \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad n = \frac{1}{LU} \sum_{\sigma} A_{0\sigma} \\ A_{\pi\sigma} &= U \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}+\pi\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad m = \frac{1}{LU} (A_{\pi\uparrow} - A_{\pi\downarrow}), \end{aligned} \quad (1.B.3)$$

siendo L el número de sitios de la red y $A_{0\uparrow} = A_{0\downarrow} = A_0$ y $A_{\pi\uparrow} = -A_{\pi\downarrow} = A_\pi$. El hamiltoniano de Hartree-Fock $H^{HF} = H_t + H_{int}^{HF}$ se diagonaliza en el espacio \mathbf{k} mediante la transformación

$$\gamma_{\mathbf{k}l,\pm} = u_{\pm} c_{\mathbf{k}l} + v_{\pm} c_{\mathbf{k}+\pi l}, \quad \gamma_{\mathbf{k}l,\pm} = -u_{\pm} c_{\mathbf{k}l} + v_{\pm} c_{\mathbf{k}+\pi l}, \quad (1.B.4)$$

donde

$$u_{\pm} = -\frac{A_\pi}{\sqrt{A_\pi^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}^{\pm})^2}}, \quad (1.B.5)$$

siendo los autovalores

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = A_0 + \frac{1}{2}(\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\pi}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\pi})^2 + A_\pi^2}, \quad (1.B.6)$$

con $\epsilon_{\mathbf{k}}$ dado en (1.8). Teniendo en cuenta que $\epsilon_{\mathbf{k}+\pi} = -\epsilon_{\mathbf{k}}$,

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = A_0 \pm \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + A_\pi^2}. \quad (1.B.7)$$

El hamiltoniano de Hartree-Fock diagonalizado resulta, entonces,

$$H^{HF} = \sum_{k\sigma} (E_k^+ \gamma_{k\sigma,+}^\dagger + \gamma_{k\sigma,+} + E_k^- \gamma_{k\sigma,-}^\dagger - \gamma_{k\sigma,-}), \quad (1.B.8)$$

con $-\pi/2 \leq k < \pi/2$, resultando una estructura de *dos bandas* como se muestra en la Fig. 1.1., mientras que el valor de "gap" A_π se obtiene resolviendo la ecuación autoconsistente, que en el límite termodinámico resulta

$$A_\pi = \pm A_\pi \frac{U}{N} \int^{\epsilon_F} d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{\sqrt{A_\pi^2 + \epsilon^2}}, \quad (1.B.9)$$

siendo $D(\epsilon)$ la densidad de estados con energía ϵ y ϵ_F la energía de Fermi.

Capítulo 2

Teoría de Líquidos de Luttinger para Sistemas Fermiónicos Unidimensionales

2.1 Introducción

El estudio teórico de los sistemas unidimensionales es interesante por motivos diversos. En primera instancia porque un buen número de resultados en esta área han proporcionado el marco interpretativo a experimentos en materiales cuasiunidimensionales. En particular, los conductores orgánicos, entre los cuales el TTF-TCNQ [77] [48], [21] es el más popular, constituyen realizaciones de fenómenos tales como la inestabilidad de Peierls [113] y de toda una gama de fenómenos cooperativos que comprenden desde ondas de densidad de espín hasta superconductividad. En segunda instancia, es bien sabido que la mayoría de los escasos resultados exactos de la física de los sistemas altamente correlacionados se restringen a 1D. En particular, la técnica del “Ansatz” de Bethe [135], permite calcular en forma exacta funciones de onda y energías en *algunos* modelos unidimensionales [89], [135], pero no las funciones de correlación, a pesar de que estas últimas contienen gran parte de la información sobre las propiedades físicas del sistema. Afortunadamente, para estudiar los sistemas unidimensionales existen, además, una serie de técnicas como la de bosonización, el grupo de renormalización y la teoría de campos conforme, que tienen un alcance de aplicabilidad más amplio que el “Ansatz” de Bethe y que permiten sacar conclusiones respecto del comportamiento de las funciones de correlación.

Los métodos numéricos como los de diagonalización exacta en sistemas finitos y las técnicas de simulación de Monte Carlo constituyen una poderosa herramienta para

el estudio de modelos de fermiones altamente correlacionados. La dificultad de hallar tratamientos aproximados confiables es inherente a éste tipo de sistemas. Los métodos numéricos permiten obtener resultados *exactos* en sistemas finitos y en algunos casos, habilitan la extracción de conclusiones sumamente precisas sobre el comportamiento del sistema en el límite termodinámico. Por este motivo, han ganado popularidad durante los últimos tiempos, motivada por la necesidad de contrastar la física contenida en los modelos efectivos propuestos para los cupratos superconductores con la que realmente acontece en los materiales que estos modelos pretenden describir [141], [138]. A pesar de la naturaleza bidimensional de los cupratos superconductores, es de esperar que la comprensión de versiones unidimensionales de los modelos que han emergido como candidatos a describir las propiedades relevantes de estos materiales, proporcione valiosa información sobre el rol de las correlaciones que tienen lugar en versiones de mayor dimensionalidad. El estudio de éstos modelos en 1D cuenta con la ventaja, respecto de las versiones bidimensionales, de una menor dimensión del espacio de Hilbert, lo cual permite la diagonalización de cadenas de diferentes longitudes con la consecuente posibilidad de realizar “escaleos” y extrapolaciones hacia el límite termodinámico. También en el caso de las simulaciones Monte Carlo existen métodos diseñados para 1D [68] que tienen la agradable cualidad de no exhibir los problemas de signo observados en la mayoría de los casos con los métodos de Monte Carlo cuánticos en 2D [19]. Pero fundamentalmente, el estudio de los modelos unidimensionales cuenta con la ventaja del marco comparativo generado por algunos límites exactamente solubles por el Ansatz de Bethe así como el marco interpretativo brindado por la estructura conceptual de los *líquidos de Luttinger* en el estudio de las propiedades de baja energía. Esta teoría está fundada en la descripción del gas de fermiones interactuantes en 1D, en base a la linealización de la relación de dispersión del sistema no interactuante en torno a los puntos de Fermi [136], [97]. La bosonización del problema, permite arribar a límites exactamente solubles [101], [95] en los cuales los grados de libertad de carga están dinámicamente desacoplados de los de espín. Los resultados del grupo de renormalización permiten delinear un diagrama de fases completo [130] y el complemento proporcionado por los resultados de la teoría de campos conforme [44] facilita la caracterización de las diferentes fases. La teoría de los líquidos de Luttinger, tal como se la entiende actualmente, es el resultado de contribuciones dispersas. En sentido estricto, el término *líquido de Luttinger*, difiere de la acepción que le dió Haldane [55], que fue quien lo propuso originalmente e incluso de la dada por Schulz [123], quien la generalizó; aunque el concepto preserva la esencia de la propuesta original [55]. Los apartamientos de las definiciones dadas por estos autores constituyen más bien agregados que fueron introducidos a medida que ésta teoría fue utilizada para el estudio numérico de modelos concretos [108], [141],[138],[8]. Estos consisten, en primer lugar, en la complementación con los resultados de la teoría de campos conforme, lo cual permite verificar en forma numérica si se cumplen las hipótesis básicas que definen el comportamiento de líquido de Luttinger en el caso particular del modelo en estudio; y en segundo lugar, en la introducción de la caracterización de *líquido de Luther-Emery*.

La alta correlación origina una rica variedad de fenómenos cooperativos, que dan lugar a transiciones de fase como transiciones metal-aillante y formación de ondas de densidad de espín y de carga. Si bien en la mayoría de los casos, el orden de largo alcance no puede desarrollarse totalmente en 1D [102] debido a que queda inhibido por las fluctuaciones cuánticas, un orden incipiente se pone de manifiesto en las divergencias de las funciones de correlación a bajas frecuencias y bajas temperaturas y el

verdadero orden de largo alcance puede llegar a realizarse al introducirse acoplamiento entre cadenas. Las funciones de correlación de los sistemas unidimensionales tienen un *decaimiento potencial*, con exponentes que dependen de los parámetros de interacción del modelo. Estos exponentes determinan varias propiedades físicas: la dependencia con temperatura del tiempo de relajación en experimentos de Resonancia Magnética Nuclear [21], o el efecto de impurezas [48]. La teoría de los líquidos de Luttinger está caracterizada por la relación existente entre estos exponentes y las energías del estado fundamental y de los estados excitados de más baja energía [55], [123]. Esto último es de fundamental importancia en los estudios numéricos, ya que permite obtener información altamente precisa sobre las correlaciones dominantes a bajas energías, sin necesidad de un cálculo explícito de las funciones de correlación involucradas.

Las secciones 2.2, 2.3 y 2.4 están dedicadas a la revisión de las hipótesis, aproximaciones y conceptos de la teoría del gas de fermiones interactuantes unidimensional. El objetivo perseguido es el de remarcar las propiedades fundamentales para la construcción de la estructura conceptual de los líquidos de Luttinger y a la vez unificar la notación usual de la teoría de muchos cuerpos utilizada en los tratamientos tradicionales con la notación de la teoría de campos utilizada en los tratamientos más modernos. En la sección 2.5 se explicitan las definiciones de líquidos de *Tomonaga-Luttinger* y de *Luther-Emery*, a los cuales se ha hecho referencia en párrafos anteriores con la denominación genérica de *líquidos de Luttinger*. En la sección 2.6 se describe la técnica de caracterización de un modelo fermiónico unidimensional en el marco de ésta teoría tomando como base resultados numéricos y los resultados de la teoría de campos conforme. En capítulos posteriores, en los que se estudiará un modelo efectivo para los cupratos superconductores, se empleará esta tecnología y se hará referencia a resultados de este capítulo.

2.2 g-ología. Modelo de Tomonaga y Modelo de Luttinger.

Uno de los aspectos esenciales que facilitan la obtención de resultados exactos en los sistemas unidimensionales es que en 1D la “superficie” de Fermi consiste en sólo dos puntos. Para estudiar la física que tiene lugar a bajas energías en un sistema fermiónico unidimensional arbitrario, la linealización del espectro del sistema libre resulta una buena aproximación. Las interacciones del sistema fermiónico son susceptibles de reformularse en el problema simplificado dando lugar a la denominada *g-ología*. Un gas de fermiones no interactuantes está descrito por el hamiltoniano

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}, \quad (2.1)$$

donde en el caso de la aproximación “tight-binding” con “hopping” a primeros vecinos, la relación de dispersión correspondiente en 1D está dada por

$$\epsilon_k = -2t \cos k, \quad (2.2)$$

En general, sólo los electrones con energías cercanas a la energía de Fermi juegan un rol importante en las propiedades físicas. La relación de dispersión (2.2) puede ser aproximada por rectas en torno a los puntos de Fermi $\pm k_F$, como se indica en la Fig. 2.1, resultando

$$\epsilon_k = v_F(|k| - k_F)$$

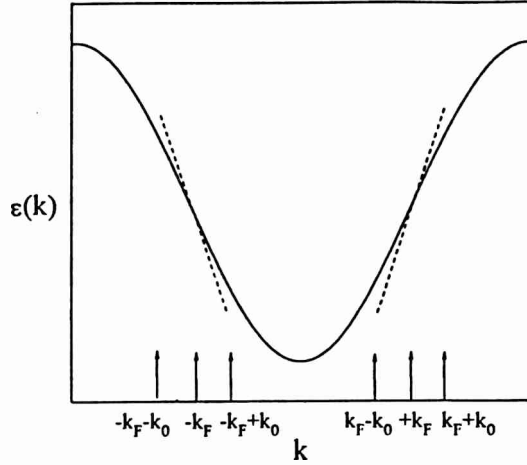


Figura 2.1: Relación de dispersión para el sistema “tight-binding” en 1D (línea de puntos) y su aproximación lineal en torno a los puntos de Fermi (línea llena).

$$v_F = \left| \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k} \Big|_{k=k_F} \right|, \quad (2.3)$$

con $k_F = \pi\rho/2$, siendo ρ la densidad de partículas, para el caso de fermiones con espín.

En principio, debe esperarse que esta aproximación sea razonable en una región finita alrededor de los puntos de Fermi, como se indica en la Fig. 2.1. El uso de una relación de dispersión lineal posee muchas ventajas desde el punto de vista del cálculo, pero resulta aún más ventajoso considerar una extensión de las ramas como la que se indica en la Fig. 2.2., que corresponde a no considerar “cut-off” en el ancho de banda. Si los estados alejados de los puntos de Fermi no contribuyen a las propiedades físicas (situación correspondiente al estudio de las excitaciones de baja energía) puede utilizarse esta relación de dispersión que corresponde a la considerada en el modelo de Tomonaga [136]. Es posible efectuar un tratamiento matemático más riguroso considerando que las dos ramas de la curva de dispersión se extienden desde $-\infty$ hasta $+\infty$ como se indica en la Fig. 2.2. , y que corresponde a la considerada en el modelo de Luttinger [97].

Denotando por $a_{+\sigma}^\dagger(k)$ ($a_{+\sigma}(k)$) a los operadores de creación (destrucción) de fermiones con espín σ en la rama que contiene a $+k_F$ y $a_{-\sigma}^\dagger(k)$ ($a_{-\sigma}(k)$) a los correspondientes a la rama que contiene a $-k_F$, la parte libre del hamiltoniano con la relación de dispersión linealizada en torno a $\pm k_F$ se escribe [130], [99], [32]:

$$H_0 = \sum_{k\sigma} v_F(k - k_F) a_{+\sigma}^\dagger(k) a_{+\sigma}(k) + \sum_{k\sigma} v_F(-k - k_F) a_{-\sigma}^\dagger(k) a_{-\sigma}(k). \quad (2.4)$$

Las sumas sobre k se extienden desde $-k_0$ hasta $+k_0$, desde 0 hasta $+\infty$ o desde $-\infty$ hasta $+\infty$, según se considere un “cut-off” en el ancho de banda, el modelo de Tomonaga o el de Luttinger respectivamente. En el caso de considerar un “cut-off” en el espectro, se puede pasar al continuo reemplazando $\sum_{k=-k_0}^{+k_0}$ por $1/(2\pi) \int_{-k_0}^{k_0} dx$ en (2.3) y calculando la transformada inversa de Fourier, puede comprobarse que H_0 en

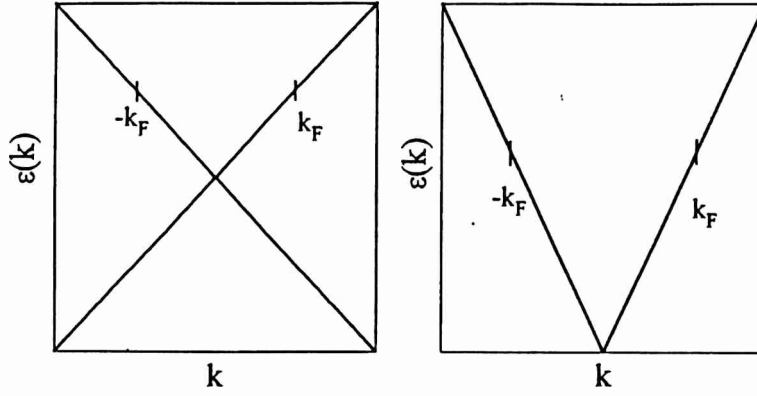


Figura 2.2: Relación de dispersión en los modelos de Tomonaga (derecha) y de Luttinger (izquierda) .

el espacio real se escribe

$$H_0 = i v_F \sum_{\sigma} \int_0^L dx [\Psi_{+\sigma}^{\dagger}(x) \frac{\partial \Psi_{+\sigma}(x)}{\partial x} - \Psi_{-\sigma}^{\dagger}(x) \frac{\partial \Psi_{-\sigma}(x)}{\partial x}], \quad (2.5)$$

siendo

$$\Psi_{\pm, \sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-k_0}^{k_0} dk \exp ikx a_{\pm, \sigma}(k \pm k_F) \quad (2.6)$$

los transformados inversos de Fourier correspondientes a $a_{+\sigma}(k)$ y $a_{-\sigma}(k)$ respectivamente. Nótese que en (2.5) se realizaron traslaciones de los puntos de Fermi $k = \pm k_F$ al origen $k = 0$. Es fácil ver a partir de (2.4) que los campos $\Psi_{+\sigma}(x)$ y $\Psi_{-\sigma}(x)$ obedecen a las siguientes ecuaciones de movimiento

$$\frac{\partial \Psi_{\pm, \sigma}}{\partial t} = \pm v_F \frac{\partial \Psi_{\pm, \sigma}}{\partial x}, \quad (2.7)$$

que corresponden a fermiones $\Psi_{+\sigma}$, ($\Psi_{-\sigma}$) moviéndose hacia la derecha (izquierda). Estas ecuaciones son análogas a las de Dirac correspondientes a partículas sin masa, identificando v_F con la velocidad de la luz. Es fácil comprobar, además, que en el límite $k_0 \rightarrow \infty$ (modelo de Luttinger) se satisfacen exactamente las relaciones de anticonmutación de los campos fermiónicos

$$\{\Psi_{\alpha}^{\dagger}(x), \Psi_{\beta}(x')\} = \delta_{\alpha\beta} \delta(x - x'), \quad (2.8)$$

donde $\alpha, \beta = \pm$.

En lo que concierne a los procesos de interacción, estos pueden clasificarse en cuatro tipos diferentes, como se indica en la Fig. 2.3. El hamiltoniano de interacción correspondiente resulta [130]:

$$\begin{aligned} H_{int} = & \frac{1}{L} \sum_{k_1 k_2 p \sigma \sigma'} (g_{1\parallel} \delta_{\sigma\sigma'} + g_{1\perp} \delta_{\sigma, -\sigma'}) \cdot \\ & a_{+\sigma}^{\dagger}(k_1) a_{-\sigma'}^{\dagger}(k_2) a_{+\sigma'}(k_2 + 2k_F + p) a_{-\sigma}(k_1 - 2k_F - p) \\ & + \frac{1}{L} \sum_{k_1 k_2 p \sigma \sigma'} (g_{2\parallel} \delta_{\sigma\sigma'} + g_{2\perp} \delta_{\sigma, -\sigma'}) \end{aligned}$$

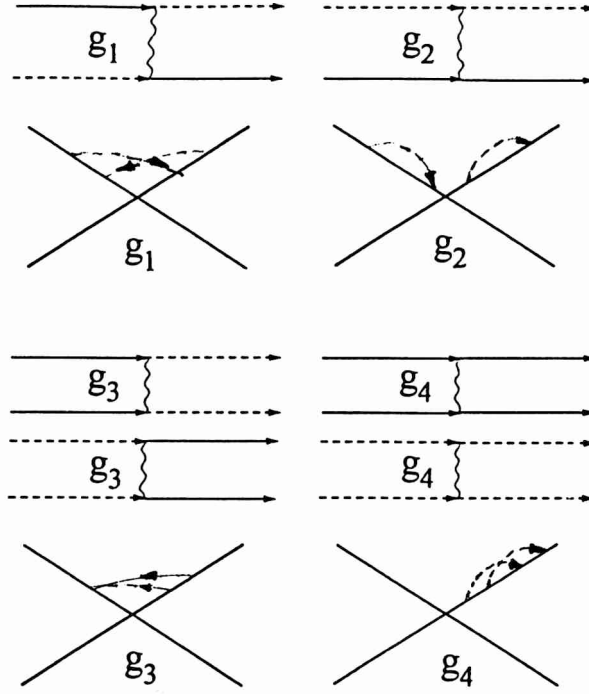


Figura 2.3: Procesos de dispersión de un gas electrónico unidimensional y esquemas de los correspondientes procesos de transferencia de partículas en las ramas. Las líneas llenas (de puntos) corresponden a partículas en la rama + (-). g_1 denota procesos de dispersión hacia atrás, g_2 corresponde a procesos de dispersión hacia adelante, g_3 denota procesos “Umklapp” y g_4 denota procesos de dispersión hacia adelante que tienen lugar en la misma rama.

$$\begin{aligned}
& a_{+\sigma}^\dagger(k_1) a_{-\sigma'}^\dagger(k_2) a_{-\sigma'}(k_2 + p) a_{+\sigma}(k_1 - p) \\
& + \frac{1}{2L} \sum_{k_1 k_2 p \sigma \sigma'} (g_{3\parallel} \delta_{\sigma, \sigma'} + g_{3\perp} \delta_{\sigma, -\sigma'}) \\
& (a_{+\sigma}^\dagger(k_1) a_{+\sigma'}^\dagger(k_2) a_{-\sigma'}(k_2 - 2k_F + p) a_{-\sigma}(k_1 + 2k_F - p - G) \\
& + a_{-\sigma}^\dagger(k_1) a_{-\sigma'}^\dagger(k_2) a_{+\sigma'}(k_2 + 2k_F + p) a_{+\sigma}(k_1 - 2k_F - p + G)) \\
& + \frac{1}{2L} \sum_{k_1 k_2 p \sigma \sigma'} (g_{4\parallel} \delta_{\sigma \sigma'} + g_{4\perp} \delta_{\sigma, \sigma'}) \\
& (a_{+\sigma}^\dagger(k_1) a_{+\sigma'}^\dagger(k_2) a_{+\sigma'}(k_2 + p) a_{+\sigma}(k_1 - p) \\
& + a_{-\sigma}^\dagger(k_1) a_{-\sigma'}^\dagger(k_2) a_{-\sigma'}(k_2 + p) a_{-\sigma}(k_1 - p)), \tag{2.9}
\end{aligned}$$

donde $G = 2\pi$ es un vector de la red recíproca. Los parámetros de acoplamiento g_i (que en general dependen de k) son los indicados en la Fig. 2.3. En cada caso \parallel corresponde a procesos que involucran partículas con igual espín y \perp con espines opuestos. El hamiltoniano (2.9) está escrito en la forma más general posible y define la denominada *g-ología* del modelo. Es fácil ver que cuando se trabaja con “cut-off” en el ancho de banda, $g_{1\parallel}$ y $g_{2\parallel}$ corresponden al mismo proceso con signos opuestos. En este caso tampoco contribuyen los procesos de $g_{3\parallel}$ y $g_{4\parallel}$ dado que cada uno de ellos contiene los términos correspondientes a los procesos directos y de intercambio que se cancelan exactamente. Estas simplificaciones no son válidas cuando se trabaja con “cut-off” en el momento transferido p , lo cual ocurre en el modelo de Tomonaga.

En los modelos de Tomonaga y Luttinger se desprecian los procesos con $g_{1\perp}$ y g_3 , los cuales corresponden a procesos de alto momento transferido. Ambos modelos difieren en la extensión de las ramas del término libre y en el tipo de “cut-off”, pero están definidos esencialmente por la misma g-ología. Por esto, en lo que sigue se empleará el término *modelo de Tomonaga-Luttinger* para esta g-ología particular, al igual que en la mayor parte de la literatura. En principio, éste modelo puede ser considerado como un límite meramente académico, ya que se desprecian procesos de interacción que en general son importantes. Sin embargo, resulta de considerable importancia e interés. Por un lado porque se puede resolver exactamente (considerando una relación de dispersión tipo Luttinger), siendo su solución *completa*, es decir, no sólo es diagonalizable, sino que también es posible el cálculo explícito de las funciones de Green. Por otro lado, como se verá más adelante, los resultados del grupo de renormalización indican que existen amplias regiones de parámetros de un modelo fermiónico unidimensional arbitrario en las que la descripción de la física de bajas energías está dada por un modelo efectivo de Tomonaga-Luttinger. Este modelo proporciona, por lo tanto, la base conceptual para la teoría de líquidos unidimensionales, por lo que se dedicará la próxima sección a una revisión de los resultados más relevantes del mismo. Existe, además, otra situación donde es posible obtener la solución exacta en caso más general en que incluyen los términos con $g_{1\perp}$ y $g_{3\perp}$. Esta solución exacta fue encontrada por Luther y Emery [95] y es válida para valores particulares de $g_{1\perp}$ y $g_{3\perp}$ que definen la denominada línea de Luther-Emery. Esta es de especial interés por los mismos motivos que el caso de Tomonaga-Luttinger. Los resultados más importantes se exponen en la sección 2.3.

2.3 Representación Bosónica y Solución Exacta del Modelo de Tomonaga-Luttinger.

Mattis y Lieb (1965) [101] mostraron que el hamiltoniano de Tomonaga-Luttinger puede escribirse en términos de operadores de bosones y que es posible su diagonalización mediante una transformación de Bogoliubov. La representación de H_{int} en términos de bosones surge naturalmente observando que los operadores de densidad

$$\begin{aligned}\rho_{\pm\sigma}(p) &= \sum_k a_{\pm\sigma}^\dagger(k+p) a_{\pm\sigma}(k), \quad p \neq 0 \\ \rho_{\pm\sigma}(p) &= N_{\pm\sigma} = \sum_k n_{\pm(k)\sigma} - \langle n_{\pm\sigma}(k) \rangle_0, \quad p = 0,\end{aligned}\quad (2.10)$$

satisfacen las reglas de conmutación:

$$\begin{aligned}[\rho_{+\sigma}(-p), \rho_{+\sigma'}(p')] &= [\rho_{-\sigma}(p), \rho_{-\sigma'}(-p')] = sg n(p) p \frac{L}{2\pi} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{p,p'} \\ [\rho_{+\sigma}(p), \rho_{-\sigma'}(p')] &= 0,\end{aligned}\quad (2.11)$$

las cuales son exactas sólo en el caso de una relación de dispersión tipo Luttinger. En (2.10), sustraer la densidad (infinita) $\langle n_{\pm\sigma} \rangle_0$ equivale a tomar los operadores de fermiones en orden normal [54]. A partir de (2.11) se ve que no hay ningún boson de modo $q = 0$. Es fácil ver que los operadores de densidad de carga y espín

$$\begin{aligned}\rho_{\pm}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\rho_{\pm 1}(p) + \rho_{\pm 1}(p)] \\ \sigma_{\pm}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\rho_{\pm 1}(p) - \rho_{\pm 1}(p)],\end{aligned}\quad (2.12)$$

satisfacen reglas de conmutación análogas. En términos de estos últimos

$$\begin{aligned}
H_{int} &= \frac{1}{L} \sum_p (g_{2\parallel} - g_{1\parallel} + g_{2\perp}) \rho_+(p) \rho_-(-p) \\
&+ \frac{1}{L} \sum_p (g_{2\parallel} - g_{1\parallel} - g_{2\perp}) \sigma_+(p) \sigma_-(-p) \\
&+ \sum_p (g_{4\parallel} + g_{4\perp}) [\rho_+(p) \rho_+(-p) + \rho_-(-p) \rho_-(p)] \\
&+ \frac{1}{2L} \sum_p (g_{4\parallel} - g_{4\perp}) [\sigma_+(p) \sigma_+(-p) + \sigma_-(-p) \sigma_-(p)]. \quad (2.13)
\end{aligned}$$

La representación del hamiltoniano libre H_0 en términos de operadores bosónicos se obtiene reemplazando H_0 dado en (2.4) por una forma bilineal en operadores bosónicos que satisfaga las mismas relaciones de conmutación que satisface H_0 con $\rho_{\pm\sigma}(p)$ y por lo tanto con H_{int} . (Una discusión detallada puede encontrarse en [99], [32]). La forma bilineal resulta:

$$\begin{aligned}
H_0 &= \frac{\pi v_F^\rho}{L} \sum_p [\rho_+(p) \rho_+(-p) + \rho_-(-p) \rho_-(p)] \\
&+ \frac{\pi v_F^\sigma}{L} \sum_p [\sigma_+(p) \sigma_+(-p) + \sigma_-(-p) \sigma_-(p)] \\
&- \frac{1}{2} v_F \sum_p |p|. \quad (2.14)
\end{aligned}$$

Los términos de (2.13) que contienen g_4 se incorporan en (2.14) ya que sólo contribuyen a renormalizar v_F como $v_F^\rho = v_F + g_{4\perp}$ y $v_F^\sigma = v_F - g_{4\perp}$.

Se definen los campos [123],[48],[124], [43], [31], [143]

$$\begin{aligned}
\phi_\nu(x) &= -i \frac{\pi}{L} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{p} \exp(-\alpha |p| \frac{x}{2} - ipx) [\nu_+(p) + \nu_-(p)] - N_\nu \frac{\pi x}{L} \\
\Pi_\nu(x) &= \frac{1}{L} \sum_{p \neq 0} \exp(-\alpha |p| \frac{x}{2} - ipx) [\nu_+(p) - \nu_-(p)] + \frac{J_\nu}{L}, \quad (2.15)
\end{aligned}$$

donde α es un parámetro introducido para asegurar convergencia, que luego se hace tender a cero [54] y $\nu = \rho, \sigma$. Los campos $\phi_\nu(x)$ y $\Pi_\nu(x)$ son canónicos conjugados y satisfacen reglas de conmutación tipo bosónico $[\phi_\mu(x), \Pi_\nu(y)] = i \delta_{\mu,\nu} \delta(x-y)$. Los operadores $N_{\pm\sigma}$ corresponden al número total de partículas con espín σ en las ramas $+, -$ respectivamente en términos de los cuales se escriben los operadores número de carga y espín y los operadores corrientes de carga y espín:

$$\begin{aligned}
N_\nu &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(N_{+1} + N_{-1})_\pm (N_{+1} + N_{-1})], \\
J_\nu &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(N_{+1} - N_{-1})_\pm (N_{+1} - N_{-1})], \quad (2.16)
\end{aligned}$$

donde el signo superior corresponde a la carga y el inferior al espín.

Es fácil ver, después de un poco de álgebra, que el hamiltoniano bosonizado $H_0 + H_{int}$ se escribe

$$H = H_\rho + H_\sigma, \quad (2.17)$$

con

$$H_\nu = \frac{L}{2\pi} \int_0^L dx [u_\nu K_\nu (\pi \Pi_\nu)^2 + \frac{u_\nu}{K_\nu} (\partial_x \phi_\nu)^2], \quad (2.18)$$

donde

$$u_\nu = [(v_F^\nu)^2 - \frac{(g_\nu)^2}{4\pi^2}]^{1/2}; \quad K_\nu = [\frac{2\pi v_F^\nu + g_\nu}{2\pi v_F^\nu - g_\nu}]^{1/2}; \quad g_\rho, g_\sigma = g_{1\parallel} - g_{2\parallel} \mp g_{2\perp}. \quad (2.19)$$

La transformación de Bogoliubov [101], [130], [32] que diagonaliza el hamiltoniano $H + H_0 + H_{int}$ dados en (2.14) y (2.13) es equivalente a absorber los factores $(\pi K_\nu)^{\pm 1/2}$ en $\phi_\nu(x)$ y $\Pi_\nu(x)$ mediante la transformación canónica [31]

$$\begin{aligned} U^\dagger \phi_\nu(x) U &= \sqrt{\pi K_\nu} \phi_\nu(x) \\ U^\dagger \Pi_\nu(x) U &= \frac{1}{\sqrt{\pi K_\nu}} \Pi_\nu(x). \end{aligned} \quad (2.20)$$

El hamiltoniano transformado $\tilde{H} = \tilde{H}_\rho + \tilde{H}_\sigma$ corresponde a H_ν dado en (2.18) sustituyendo $K_\nu \rightarrow 1$. Puede verse [32] que \tilde{H}_ρ y \tilde{H}_σ corresponden a la representación bosónica de hamiltonianos de campos de fermiones libres no masivos sin espín de la forma (2.5) (eliminando el índice de espín), en los que se practicaron sendas representaciones de Mandelstam [58] en los campos fermiónicos.

En el espacio recíproco resulta [130], [32], [54]

$$\begin{aligned} \tilde{H}_\nu &= \frac{\pi u_\nu}{L} \sum_{p \neq 0} [\nu_+(p) \nu_+(-p) + \nu_-(-p) \nu_-(p)] \\ &+ \frac{\pi u_\nu}{2L} (N_\nu^2 + J_\nu^2) - \frac{1}{2} v_F \sum_p |p|, \end{aligned} \quad (2.21)$$

con u_ν dados en (2.19).

Normalizando convenientemente las densidades $\nu_\pm^\pm(p)$, se definen operadores de bosones

$$\alpha_{\pm\nu}^\pm(p) = \sqrt{\frac{2\pi}{pL}} \nu_\pm^\pm(p), \quad \alpha_{\pm\nu}^\pm = \sqrt{\frac{2\pi}{pL}} \nu_\pm^\pm(-p), \quad p > 0 \quad (2.22)$$

Escribiendo (2.21) en función de estos operadores, se pone de manifiesto que el hamiltoniano diagonalizado consiste en la suma de dos hamiltonianos de bosones libres que describen los grados de libertad de espín y de carga, siendo sus relaciones de dispersión lineales:

$$\epsilon_\nu(p) = u_\nu |p| \quad (2.23)$$

El hamiltoniano bosonizado permite calcular todas las cantidades físicas expresadas en términos de operadores densidad $\nu_\pm(p)$. Sin embargo, este no es el caso de las funciones de Green y de las funciones de correlación. Luther y Peschel [96] y Mattis [100] mostraron que es posible usar una identidad operatorial que permite calcular los elementos de matriz de los operadores fermiónicos en la representación bosónica. [32], [130], [99]

$$\begin{aligned} \psi_{\pm\sigma}^\pm(x) &= \frac{\exp(ik_F x)}{(2\pi\alpha)^{1/2}} \exp(i\xi_{\pm\sigma}) \exp(i\Phi_{\pm\sigma}(x)), \\ \Phi_{\pm\sigma}^\pm(x) &= \exp\left\{-\frac{2\pi}{L} i \sum_{p \neq 0} \frac{\exp(-\frac{\alpha}{2}|p| - ipx)}{p} \rho_{\pm\sigma}^\pm(p)\right\}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

donde el parámetro α se introduce para hacer la suma convergente, las fases $\xi_{\pm\sigma}$ [130] se introducen para que los campos $\Psi_{\pm\sigma}(x)$ satisfacen las buenas reglas de conmutación fermiónicas [130], [32]. La técnica de cálculo de las funciones de Green y de las funciones de correlación a partir de la representación (2.24) se ilustra en el apéndice A para el caso de la función de Green.

$$G_{\pm\sigma}(x, t) = iT \langle \Psi_{\pm\sigma}^\dagger(x, t) \Psi_{\pm\sigma}(0) \rangle \quad (2.25)$$

La expresión de su transformada de Fourier es complicada, obteniéndose [130], [96] la siguiente distribución de momentos

$$n(p) = \frac{1}{2} - ct c |p_{\pm}^- k_F|^{2\alpha_\sigma + 2\alpha_p} \text{sgn}(\pm p - k_F), \quad \alpha_\nu = \frac{1}{4u_\nu} (v_F^\nu - u_\nu). \quad (2.26)$$

Esta ley de potencias alrededor de los puntos de Fermi con pendiente infinita en $p = \pm k_F$ es una de las características de los líquidos unidimensionales. Es importante contrastar este comportamiento con el que exhibe un gas de Fermi usual débilmente interactuante. Como se demostró en [96], la función de Green $G(\omega, k)$ posee un corte en vez de la estructura de polos usual de los líquidos de Fermi, mientras que la función espectral $\text{Im}G(\omega, k)$ no posee el pico de cuasipartícula característico de estos líquidos. La ley (2.26) es una consecuencia del carácter colectivo de las excitaciones del modelo, hecho que se pone de manifiesto en la solución explícita (2.22) y (2.23) del hamiltoniano (2.21).

Otro aspecto característico de los líquidos unidimensionales es el comportamiento de las funciones respuesta a bajas frecuencias. La importancia de estudiar las funciones respuesta, o susceptibilidades generalizadas, reside en que sus inestabilidades son una indicación de la tendencia espontánea hacia algún tipo de ordenamiento que puede tener lugar en el sistema. Estas cantidades son las funciones respuesta de onda de densidad de carga (CDW), onda de densidad de espín (SDW), de singletes superconductores (SS) y de tripletes superconductores (TS). Son particularmente importantes las susceptibilidades con vector de onda igual a $2k_F$, ya que describen la respuesta del sistema a una perturbación que transfiere un electrón desde un entorno de un punto de Fermi al otro, y corresponden a procesos de baja energía. En el caso de la respuesta de carga este mecanismo da lugar al efecto Kohn de los líquidos de Fermi usuales [29]. La función respuesta de la onda de densidad de carga con momento $2k_F$ es

$$\chi_{CDW}^R(x, t) = -i\theta(t) \langle [O_{CDW}^\dagger(x, t), O_{CDW}(0)] \rangle, \quad (2.27)$$

con

$$O_{CDW}(x) = \sum_{r=\pm, \sigma} \Psi_{r\sigma}^\dagger(x) \Psi_{-r\sigma}(x). \quad (2.28)$$

La función respuesta de la onda de densidad de espín con momento $2k_F$ es $\chi_{SDW_{x,y,z}}^R$ y corresponde a reemplazar O_{CDW} en (2.27) por

$$\begin{aligned} O_{SDW_z}(x) &= \sum_{r=\pm, \sigma} \sigma \Psi_{r\sigma}^\dagger(x) \Psi_{-r\sigma}(x), \\ O_{SDW_x}(x) &= \sum_{r=\pm, \sigma} \Psi_{r\sigma}^\dagger(x) \Psi_{-r-\sigma}(x), \\ O_{SDW_y}(x) &= -i \sum_{r=\pm, \sigma} \sigma \Psi_{r\sigma}^\dagger(x) \Psi_{-r-\sigma}(x). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Análogamente, las funciones respuesta de singletes y tripletes superconductores χ_{SS}^R y $\chi_{TS_{-1,0,1}}^R$ corresponden a reemplazar O_{CDW} en (2.27) por

$$\begin{aligned} O_{SS}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma} \Psi_{-\sigma}^{\dagger}(x) \Psi_{+\sigma}^{\dagger}(x) \\ O_{TS_{-1}} &= \Psi_{+1}^{\dagger} \Psi_{-1}^{\dagger} \\ O_{TS_0}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{+1}^{\dagger}(x) \Psi_{-1}^{\dagger}(x) + \Psi_{-1}^{\dagger}(x) \Psi_{+1}^{\dagger}(x)) \\ O_{TS_1} &= \Psi_{+1}^{\dagger} \Psi_{-1}^{\dagger}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

respectivamente. El procedimiento para el cálculo de las funciones respuesta es esencialmente el mismo que el detallado en el apéndice A para la función de Green, resultando [130], [33]

$$\chi_{\lambda}^R(x, t) = \frac{\theta(t)}{\pi^2} \text{Im} [F(x - u_{\rho}t) F^{*}(x + u_{\rho}t)]^{\frac{K_{\rho} + 1}{2}} [F(x - u_{\sigma}t) F^{*}(x + u_{\sigma}t)]^{\frac{K_{\sigma} + 1}{2}} \quad (2.31)$$

donde la función $F(x, c, t)$, ($c = u_{\rho}, u_{\sigma}$) está dada en (2.A.10) y λ corresponde a CDW, SDW, SS y TS. Las formas asintóticas de las transformadas de Fourier cuando ω y $v_F(k - 2k_F)$ o $v_F k$ son pequeñas y del mismo orden de magnitud son [130], [143]

$$\begin{aligned} \chi_{CDW}(\omega \sim v_F(k - 2k_F)) &\sim \chi_{SDW_z}(\omega \sim v_F(k - 2k_F)) \sim \omega^{K_{\rho} + K_{\sigma} - 2} \\ \chi_{SDW_x}(\omega \sim v_F(k - 2k_F)) &\sim \chi_{SDW_y}(\omega \sim v_F(k - 2k_F)) \sim \omega^{K_{\rho} + \frac{1}{K_{\sigma}} - 2} \\ \chi_{SS}(\omega \sim v_F k) &\sim \chi_{TS_0}(\omega \sim v_F k) \sim \omega^{\frac{1}{K_{\rho}} + K_{\sigma} - 2} \\ \chi_{TS_1}(\omega \sim v_F k) &\sim \chi_{TS_{-1}}(\omega \sim v_F k) \sim \omega^{\frac{1}{K_{\rho}} + \frac{1}{K_{\sigma}} - 2} \end{aligned} \quad (2.32)$$

donde u_{ν} , K_{ν} son los dados por (2.19). Puede verse en (2.32) el comportamiento según leyes de potencias que exhiben las funciones respuesta y las posibles divergencias para ciertos valores de K_{ρ} y K_{σ} (determinados por los valores de los parámetros g correspondientes). Estas divergencias deben interpretarse físicamente como una tendencia hacia una inestabilidad que sólo puede hacerse efectiva cuando se introduce adecuadamente un acoplamiento entre cadenas ya que en 1D el orden de largo alcance queda inhibido por las fluctuaciones cuánticas cuando las excitaciones de baja energía no tienen "gap".

También el comportamiento asintótico de las funciones de correlación en el espacio real, exhibe características particulares. Las funciones de correlación se definen como

$$S_{\lambda}(x) = \langle O_{\lambda}(x) O_{\lambda}(0) \rangle, \quad (2.33)$$

donde O_{λ} corresponde a O_{CDW} , O_{SDW} , O_{SS} y O_{TS} dados en (2.28) a (2.30). Las funciones de correlación se obtienen directamente de (2.31) efectuando las modificaciones (obvias) que resultan de la no dependencia temporal. En este caso el comportamiento de $F(x, ct)$ dado en (2.A.10) a bajas temperaturas y largas distancias, define el comportamiento asintótico de $S_{\lambda}(x)$, resultando

$$\begin{aligned} S_{CDW}(x) &\sim S_{SDW_z}(x) \sim x^{-K_{\rho} - K_{\sigma}} \\ S_{SDW_x}(x) &\sim S_{SDW_y}(x) \sim x^{-K_{\rho} - \frac{1}{K_{\sigma}}} \\ S_{SS}(x) &\sim S_{TS_0}(x) \sim x^{-\frac{1}{K_{\rho}} - K_{\sigma}} \\ S_{TS_1}(x) &\sim S_{TS_{-1}}(x) \sim x^{-\frac{1}{K_{\rho}} - \frac{1}{K_{\sigma}}}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

donde nuevamente K_ρ , K_σ son los dados por (2.19). El decaimiento algebraico de las correlaciones inhibe la posibilidad de orden de largo alcance, ya que la definición de alguna longitud característica requeriría una ley de tipo exponencial. También pueden ser importantes las correlaciones con vector de onda $4k_F$. En este caso puede verse [130] que el comportamiento a grandes distancias depende sólo de K_ρ en la forma

$$S_\lambda \sim x^{-4K_\rho}. \quad (2.35)$$

Dada la dependencia (2.19) de los exponentes K_ν y las leyes (2.34) y (2.35), es posible definir regiones de parámetros donde algunas de las funciones de correlación dominen (en el sentido de decaer más lentamente a largas distancias) sobre las otras.

2.4 Incorporación de $g_{1\perp}$ y g_3 - La Línea de Luther y Emery.

El modelo de Tomonaga-Luttinger posee la agradable particularidad de ser exactamente soluble, sin embargo la factibilidad de su solución exacta es a expensas de haber despreciado procesos de interacción que pueden ser importantes. Es esperable que el término que acompaña a $g_{1\perp}$ en (2.9) juegue un rol importante en cualquier descripción realista de la física de bajas energías de los sistemas fermiónicos unidimensionales con espín, ya que los procesos de transferencia de fermiones con $|k| \sim k_F$ desde una rama a la otra, involucran un costo pequeño de energía. Esto último se argumentó para considerar particularmente relevantes las funciones respuesta con $2k_F$. Por otra parte, cuando se estudia al sistema en banda semillena (situación que corresponde a $k_F = \pi/2$), los procesos "Umklapp" conectados por g_3 también son importantes, ya que en este caso $4k_F = G$. Recordar que el término de $g_{3\parallel}$ es idénticamente nulo, de acuerdo con lo que se discutió en la sección 2.1, de manera que en lo que sigue $g_3 \equiv g_{3\perp}$ en (2.9).

Como se ve en (2.9) los términos con $g_{1\perp}$ y g_3 no admiten una representación inmediata en términos de los operadores bosónicos $\nu_\pm(p)$, de manera que la representación bosónica debe realizarse describiendo los términos en el espacio real, para luego utilizar la representación bosónica de los campos $\Psi_{\pm\sigma}(x)$. El término de $g_{1\perp}$ en el espacio real resulta

$$\sum_\sigma \int g_{1\perp}(x_1, x_2, x_3 - x_4) \Psi_{+\sigma}^\dagger(x_1 + x_3) \Psi_{-,-\sigma}^\dagger(x_2 + x_4) \Psi_{+,-\sigma}^\dagger(x_4) \Psi_{-\sigma}(x_3). \quad (2.36)$$

Los modelos que son de interés contienen generalmente interacciones de corto alcance, de manera que es razonable considerar una interacción local $g_{1\perp} \delta(x_1) \delta(x_2) \delta(x_3 - x_4)$. Se procede análogamente con el término de g_3 . Luego, utilizando la representación (2.24) para los campos fermiónicos, el hamiltoniano completo resulta

$$H = H_\rho + H_\sigma + \frac{2L}{(2\pi\alpha)^2} g_{1\perp} \int dx \cos(\sqrt{8} \phi_\sigma(x)) + \frac{2L}{(2\pi\alpha)^2} g_3 \int dx \cos(\sqrt{8} \phi_\rho(x)) \quad (2.37)$$

donde H_ρ y H_σ están dados por (2.18) con (2.19) mientras que los $\phi_\nu(x)$ están dados por (2.15). Estos dos últimos términos tienen la forma del hamiltoniano de Sine-Gordon [27]. Como se ve, sigue siendo válida una descomposición en grados de libertad

(bosónicos) de espín y de carga. Sin embargo, en este caso los dos últimos términos son altamente no lineales. El parámetro α de (2.37) debe ser interpretado en este caso como el espaciado de la red ¹. A pesar de la complejidad extra introducida por los nuevos términos, (2.37) puede resolverse exactamente para valores particulares de los parámetros $g_{1\perp}$ y g_3 .

En la sección 2.2 se demostró que H_σ se diagonaliza mediante la transformación canónica (2.20). Si se utiliza esta transformación canónica, el hamiltoniano de espín completo resulta:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_\sigma &= \frac{u_\sigma L}{2} \int_0^L dx (\Pi_\sigma)^2 + (\partial_x \phi_\sigma)^2 \\ &+ \frac{2L}{(2\pi\alpha)^2} g_{1\perp} \int dx \cos(\sqrt{8\pi K_\sigma} \phi_\sigma), \end{aligned} \quad (2.38)$$

donde u_σ y K_σ están definidos en (2.19), mientras que ϕ_σ y Π_σ están dados en (2.15). Como se mencionó en la sección 2.2, el primer término corresponde a la representación bosónica de campos fermiónicos sin espín de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \Psi_\pm^s(x) &= \frac{\exp(ik_F x)}{(2\pi\alpha)^{1/2}} \exp\left(\frac{i}{2} N_\pm^s\right) \exp(i\phi_\pm^s) \exp(i\Phi_\pm^s(x)), \\ \Phi_\pm^s(x) &= \exp\left\{-\frac{2\pi}{L} i \sum_{p \neq 0} \frac{\exp(-\frac{\alpha}{2}|p| - ipx)}{p} \sigma_\pm(p)\right\} \end{aligned} \quad (2.39)$$

donde los factores son análogos a los de (2.24), teniendo en cuenta que los campos fermiónicos $\Psi_\pm^s(x)$ no tienen espín. El índice s se introdujo sólo para indicar que es una representación asociada a grados de libertad de espín y no debe confundirse con el índice σ de (2.24) que fue utilizado para denotar la componente con espín σ de los campos fermiónicos con espín originales. En (2.38) puede verse que la transformación canónica (2.20) afecta de una manera muy simple al término no lineal. En particular, es fácil ver, comparando la expresión de $\phi_\sigma(x)$ dada por (2.15) con (2.39), que para el caso particular en que

$$\sqrt{8\pi K_\sigma} = 2 \quad (2.40)$$

el término no lineal no es otro que la representación bosónica de

$$\frac{2}{(2\pi\alpha)} g_{1\perp} \int_0^L dx [\exp(-2ik_F x) \Psi_+^{s\dagger}(x) \Psi_-^s(x) + \exp(2ik_F x) \Psi_-^{s\dagger}(x) \Psi_+^s(x)], \quad (2.41)$$

mientras que el primer término, como se dijo en la sección 2.2, corresponde a un término libre en los campos fermiónicos, es decir se escribe como

$$i u_\sigma \int_0^L dx (\Psi_+^{s\dagger}(x) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_+^s(x) - \Psi_-^{s\dagger}(x) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_-^s(x)). \quad (2.42)$$

Luther y Emery [95], formularon el problema en el espacio recíproco y lo resolvieron mediante una transformación de Bogoliubov [130]). La transformada de Fourier de

¹ Puede verse que espaciado de la red aparece naturalmente en vez de α en los términos asociados a procesos de "scattering" hacia adelante (término con $g_{1\perp}$ en (2.37), así como a procesos "Umklapp" (términos con g_3 en (2.37)), cuando se pasa de un modelo de fermiones discreto a su versión continua. Ver por ejemplo [31], [43].

(2.41) y (2.42) es

$$\begin{aligned}\tilde{H}_\sigma &= u_\sigma \sum_k k [s_+^\dagger(k) s_+(k) - s_-^\dagger(k) s_-(k)] \\ &+ \frac{g_{1\perp}}{2\pi\alpha} \sum_k [s_+^\dagger(k+k_F) s_-(k-k_F) + s_-^\dagger(k-k_F) s_+(k+k_F)]\end{aligned}\quad (2.43)$$

donde

$$\Psi_{\pm}^s(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k \exp(ikx) s_{\pm}^s(k). \quad (2.44)$$

Luego, definiendo la transformación (de Bogoliubov) [130].

$$\begin{aligned}s_+(k+k_F) &= \cos(\theta_k) \alpha_+(k+k_F) - \sin(\theta_k) \alpha_-(k-k_F) \\ s_-(k-k_F) &= \sin(\theta_k) \alpha_+(k+k_F) + \cos(\theta_k) \alpha_-(k-k_F)\end{aligned}\quad (2.45)$$

con

$$\tan(2\theta_k) = \frac{g_{1\perp}}{2\pi\alpha u_\sigma k}, \quad (2.46)$$

resultando el espectro:

$$\epsilon_{\pm}(k) = u_\sigma k_F \pm \operatorname{sgn}(k \mp k_F) \{u_\sigma^2 (k \mp k_F)^2 + \Delta_\sigma^2\}^{1/2}, \quad k \sim_{\pm}^+ k_F, \quad \Delta_\sigma = \frac{|g_{1\perp}|}{2\pi\alpha}. \quad (2.47)$$

En resumen, fuera de banda semillena (situación en la que los procesos “Umklapp” son despreciables en una descripción de bajas energías), el problema es exactamente soluble para valores de los parámetros g que satisfacen (2.39). Un aspecto importante para remarcar es que, al menos para estos valores particulares de los parámetros, el efecto de $g_{1\perp}$ es el de abrir un “gap” en el espectro de excitaciones, como se ve en (2.47). En el caso de banda semillena, cuando se incluyen los términos “Umklapp”, puede realizarse un procedimiento idéntico al que se acaba de describir para la parte de carga del hamiltoniano (2.37), ya que tiene la misma forma que el de espín. En este caso la condición equivalente a (2.39) resulta

$$\sqrt{8\pi K_\rho} = 2, \quad (2.48)$$

mientras que el “gap” en el espectro de las excitaciones de carga está dado por:

$$\Delta_\rho = \frac{|g_3|}{2\pi\alpha} \quad (2.49)$$

la existencia de un “gap” tiene consecuencias importantes en el comportamiento de las funciones respuesta y funciones de correlación.

Definiendo las funciones de Green

$$R_\lambda(x, t) = -iT \langle O_\lambda^\dagger(x, t) O_\lambda(0) \rangle, \quad (2.50)$$

con $\lambda = CDW, SDW, SS$ y TS y O_λ dados en (2.28) a (2.30). Puede verse que en la representación bosónica de los operadores $O_\lambda(x, t)$ las respuestas se escriben [130]

$$\begin{aligned}R_{CDW}(x, t) &= -i \frac{\exp(2ik_F x)}{(2\pi\alpha)^2} S_\rho^+(x, t) S_\sigma^+(x, t) \\ R_{SDW_{x,y}}(x, t) &= -i \frac{\exp(2ik_F x)}{(2\pi\alpha)^2} S_\rho^+(x, t) S_\sigma^-(x, t) \\ R_{SS}(x, t) &= -i \frac{1}{(2\pi\alpha)^2} S_\rho^-(x, t) S_\sigma^+(x, t) \\ R_{TS_0}(x, t) &= -i \frac{1}{(2\pi\alpha)^2} S_\rho^-(x, t) S_\sigma^-(x, t),\end{aligned}\quad (2.51)$$

donde

$$S_\nu^+ = \langle T \exp(itH_\nu) \exp\left\{\frac{2\pi}{L} \sum_p \frac{\exp(-\frac{\alpha}{2}|p| - ipx)}{\sqrt{2p}} (\nu_+(p)_-^\dagger \nu_-(p))\right\} \exp(-itH_\nu) \exp\left\{-\frac{2\pi}{L} \sum_p \frac{\exp(-\frac{\alpha}{2}|p|)}{\sqrt{2p}} (\nu_+(p)_-^\dagger \nu_-(p))\right\} \rangle_\nu. \quad (2.52)$$

Si $g_3 = 0$, la contribución de los grados de libertad de carga a las funciones $R_\lambda(x, t)$, colectados en $S_\rho^+(x, t)$ es idéntica al caso de Tomonaga-Luttinger discutido en la sección anterior, es decir:

$$S_\rho^+(x, t) = [F(x - u_\rho t) F^*(x + u_\rho t)]^{\frac{K_\rho^+}{2}}, \quad (2.53)$$

con $F(x - u_\rho t)$ dado an (2.A.10) Para el caso particular de Luther y Emery la aplicación de la transformación canónica en los grados de libertad de espín, en cambio, conducen a una representación de S_σ^+ en términos de fermiones sin espín de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} S_\sigma^+(x, t) &= 2\pi\alpha \langle T \{ [\Psi_+^s(x, t) \Psi_-^{s\dagger}(x, t) \exp(-2ik_F)]^{1/2} [\Psi_-^s(0) \Psi_+^{s\dagger}(0)]^{1/2} \} \rangle_\sigma \\ S_\sigma^-(x, t) &= (2\pi\alpha)^2 \langle T \{ \Psi_+^s(x, t) \Psi_-^{s\dagger}(x, t) \Psi_-^s(0) \Psi_+^{s\dagger}(0) \} \rangle_\sigma. \end{aligned} \quad (2.54)$$

El comportamiento a bajas frecuencias de las funciones respuesta está determinando por el comportamiento de S_σ^+ a grandes valores de x y de t . La diferencia más importante entre S_σ^+ y S_σ^- proviene del hecho de que S_σ^+ corresponde a la propagación de un par partícula-agujero en la representación de fermiones sin espín, mientras que S_σ^- describe la propagación de un par de partículas. En el límite $(x, t) \rightarrow \infty$, cuando $\langle A(x, t) B(0) \rangle \sim \langle A(x, t) \rangle \langle B(0) \rangle$, $S_\sigma^+(x, t)$ se hace constante mientras que $S_\sigma^-(x, t)$ se anula, puesto que $\langle [\Psi_-^s(0), \Psi_+^{s\dagger}(0)]^{1/2} \rangle \neq 0$, mientras que $\langle \Psi_-^{s\dagger}(0) \Psi_+^s(0) \rangle = 0$. De esta manera el comportamiento a bajas frecuencias de las funciones respuesta de densidad de carga y de singletes superconductores está dado por

$$\begin{aligned} R_{CDW}(\omega), \quad \chi_{CDW}(\omega) &\sim \omega^{K_\rho-2} \\ R_{SS}(\omega), \quad \chi_{SS}(\omega) &\sim \omega^{K_\rho^{-1}-2} \end{aligned} \quad (2.55)$$

Al igual que en el caso del modelo de Tomonaga-Luttinger, las funciones respuesta pueden ser divergentes, dependiendo de los valores que tome K_ρ . El comportamiento de las respuestas de densidad de espín y de tripletes superconductores es muy diferente, ya que $S_\sigma^-(x, t)$ es una función rápidamente oscilante de t que se anula cuando $(x, t) \rightarrow \infty$. En la representación de Fourier, $S_\sigma^-(k, \omega)$ tiene componentes sólo para $|\omega| > 2\Delta_\sigma$, correspondiendo a que la mínima energía para excitar un par de fermiones sin espín es $2\Delta_\sigma$. Debido a la existencia de un "gap" en $S_\sigma^-(k, \omega)$, las divergencias de $S_\rho^+(k, \omega)$ quedan inhibidas y no hay divergencias en las funciones respuesta $\chi_{SDW}(\omega)$ y $\chi_{TS}(\omega)$. Para un modelo a banda semillena, donde debe incluirse g_3 , se puede hacer un análisis similar con S_ρ^+ .

2.5 Diagrama de Fases Completo

Es esperable que un sistema de fermiones en 1D en el cual se aproxima la relación de dispersión de la parte libre como se describió en la sección 2.1, contenga en general to-

	Comportamiento Bajas Energías	Gap Espín	Gap Carga	Parámetros Exponentes
(I) $ g_{1\perp} \leq g_{1c}$	Tomonaga-Luttinger	No	No	K_ρ^*, K_σ^*
(II) $ g_{1\perp} > g_{1c}$	Luther-Emery	Si	No	K_ρ^*

Tabla 2.1: Regímenes de un sistema fermiónico unidimensional fuera de banda semillena.

dos los términos del hamiltoniano (2.9). Sin embargo el problema es exactamente soluble sólo en dos casos particulares: el de Tomonaga-Luttinger discutido en la sección 2 ($g_{1\perp} = g_3 = 0$) y el de Luther-Emery descrito en la sección 3 ($g_3 = 0$ y $\sqrt{8\pi K_\sigma} = 2$; $g_{1\perp} = 0$ y $\sqrt{8\pi K_\rho} = 2$). La solución para valores arbitrarios de los parámetros de acoplamiento requiere de tratamientos aproximados. Existe en la literatura una cantidad considerable de contribuciones destinadas a la exploración de las propiedades físicas de (2.9) en base a métodos de grupos de renormalización. La idea básica de este tipo de tratamientos es que se puede encontrar un conjunto de problemas equivalentes, los cuales están descritos por hamiltonianos que tienen una forma similar al original. Los parámetros de acoplamiento de los hamiltonianos equivalentes pueden ser diferentes, pero exhiben el mismo comportamiento físico. De esta manera, si dentro de los modelos equivalentes se encuentra alguno que sea exactamente soluble, entonces también se habrá encontrado la solución del problema original. Existen varios tratamientos dentro del contexto del grupo de renormalización [130], [31], [48], [143]. Todos coinciden cualitativamente en los distintos regímenes del modelo, sin embargo, existen diferencias en cuanto a los valores de los parámetros que definen las fronteras entre los diferentes regímenes. A continuación se provee una descripción resumida de estos regímenes, sin entrar en detalle respecto de los valores de los parámetros g_{1c} y g_{3c} que definen las fronteras.

2.5.1 Fuera de Banda Semillena ($g_3 = 0$)

Los resultados se resumen en la tabla I.

El diagrama de fases consta de dos regiones:

(I). Régimen de acoplamiento débil ($|g_{1\perp}| \leq g_{1c}$). El modelo se comporta a bajas energías como un modelo de Tomonaga-Luttinger con parámetros renormalizados g^* , que conducen a valores renormalizados para los parámetros de los exponentes de las funciones de correlación K_σ^* y K_ρ^* . Notar que la dependencia de las distintas componentes de las funciones de correlación de espín y de pares de tripletes con estos parámetros (ve las expresiones (2.34)) implica que en un modelo invariante frente a rotaciones de espín K_σ^* debe ser = 1. En general, los tratamientos del grupo de renormalización [48], [143] proveen también correcciones logarítmicas en el comportamiento asintótico de las funciones de correlación. El comportamiento asintótico dado en [48] es

$$\begin{aligned}
S_{SDW_x} = S_{SDW_y} = S_{SDW_z} &\sim A_\lambda \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{1+K_\rho^*} \ln^{1/2}(r/\alpha), \\
S_{CDW} &\sim A_{CDW} \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{1+K_\rho^*} \ln^{-3/2}(r/\alpha), \\
S_{TS_{-1}} = S_{TS_0} = S_{TS_1} &\sim B_\lambda \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{1+\frac{1}{K_\rho^*}} \ln^{1/2}(r/\alpha),
\end{aligned}$$

	Comportamiento Bajas Energías	Gap Espín	Gap Carga	Parámetros Exponentes
(I) $ g_{1\perp} \leq g_{1c}$, $ g_3 \leq g_{3c}$	Tomonaga-Luttinger	No	No	K_ρ^*, K_σ^*
(II) $ g_{1\perp} > g_{1c}$ $ g_3 \leq g_{3c}$	Luther-Emery	Si	No	K_ρ^*
(III) $ g_{1\perp} \leq g_{1c}$ $ g_3 > g_{3c}$	Luther-Emery	No	Si	K_σ^*
(IV) $ g_{1\perp} > g_{1c}$ $ g_3 > g_{3c}$	Luther-Emery	Si	Si	?

Tabla 2.2: Regímenes de un sistema fermiónico unidimensional en banda semillena

$$S_{SS} \sim B_{SS} \left(\frac{\alpha}{r}\right)^{1+\frac{1}{K_\rho^*}} \ln^{-3/2}(r/\alpha), \quad (2.56)$$

con $\lambda \equiv SDW_{x,y,z}, TS_{1,0,-1}$, según corresponda.

(II). El comportamiento de bajas energías en el régimen de acoplamiento fuerte ($|g_{1\perp}| > g_{1c}$) se describe por el modelo de Luther-Emery con “gap” en el espectro de las excitaciones de espín, mientras que el espectro de las excitaciones de carga es lineal. Sólo las funciones de correlación de carga y de singletes superconductores obedecen leyes de potencias gobernadas por el valor del parámetro renormalizado K_ρ^* . Sólo las respuestas de carga o de singletes superconductores pueden ser divergentes en este régimen, dependiendo del valor de K_ρ^* . En la transición entre (I) y (II) [143], se tiene $K_\sigma^* \rightarrow 0$, lo cual implica que las componentes x, y de las funciones de correlación de SDW tienden a decaer exponencialmente. La invarianza frente a rotaciones de espín requiere, en este caso, que los prefactores $A_{SDW_z}, B_{TS_0} \rightarrow 0$ simultáneamente.

2.5.2 Banda Semillena ($g_3 \neq 0$)

Las cuatro regiones posibles se muestran en la tabla II.

(I). Régimen de acoplamiento débil para los grados de libertad de carga y fuerte para los grados de libertad de espín. Puede describirse en términos de un modelo de Tomonaga-Luttinger con parámetros renormalizados K_ρ^* y K_σ^* , con $K_\sigma^* = 1$, excepto, eventualmente en alguna región de transición hacia los regímenes II o IV, en la que $K_\sigma^* \rightarrow 0$, con $A_{SDW_z}, B_{TS_0} \rightarrow 0$ simultáneamente.

(II). Régimen de acoplamiento débil para los grados de libertad de carga y fuerte para los de espín. El comportamiento a bajas energías está descrito por un modelo de Luther-Emery con “gap” en el espectro de excitaciones de espín. Sólo las respuestas de carga y de singletes superconductores pueden ser divergentes en este régimen, dependiendo del valor que tome K_ρ^* .

(III). Régimen de acoplamiento débil para los grados de libertad de espín y fuerte para los de carga. El comportamiento a bajas energías está descrito por un modelo de Luther-Emery con “gap” de carga. Sólo las respuestas de espín pueden ser divergentes.

(IV). Régimen de acoplamiento fuerte tanto para los grados de libertad de carga como los de espín. Hay “gap” de carga y “gap” de espín. En este caso, puede existir un orden de carga de largo alcance, aún en 1D [143].

2.6 Líquidos Unidimensionales.

El concepto de líquido de Fermi está basado esencialmente en el comportamiento de la función de Green de un gas tridimensional de fermiones débilmente interactuantes

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega) + i\delta}, \quad (2.57)$$

donde $\epsilon_{\mathbf{k}}$ es la energía de los fermiones libres, μ la energía de Fermi y $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ la autoenergía. Las excitaciones de baja energía tienen $Re\Sigma(\mathbf{k}, \omega) \sim \omega$, mientras que $Im\Sigma(\mathbf{k}, \omega) \sim \omega^2$ cuando $\omega \rightarrow 0$ [1], de manera que el efecto de la interacción consiste en producir un corrimiento de los polos de la función de Green a valores $\epsilon'_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} + Re[\Sigma(\mathbf{k}, \omega)]$. Esta renormalización de las energías de las partículas no interactuantes da lugar al concepto de cuasipartículas, en términos de las cuales se puede describir al sistema de partículas interactuantes original. Como se discutió en la sección 2.2 (aceptando que la linealización de la relación de dispersión del sistema libre es una buena aproximación para una descripción de bajas energías) el concepto de líquido de Fermi se rompe en 1D. La función de Green posee en este caso un corte en vez de una estructura de polos debido al carácter *colectivo* de las excitaciones, perdiéndose la imagen de las cuasipartículas “vestidas” por efectos de la interacción.

El concepto análogo al de líquido de Fermi para los sistemas unidimensionales es de relativamente corta data. Fue propuesto por Haldane [55], [56], [54], originalmente para sistemas fermiónicos sin espín. En [55] se lee textualmente: “Las funciones de correlación a $T = 0$ de un modelo de Luttinger de fermiones sin espín están caracterizadas por leyes de potencias cuyos exponentes dependen de las constantes de acoplamiento del modelo y, dada la estructura del modelo, esto significa que están determinadas por un sólo parámetro”. Argumenta que la relación entre el espectro y los exponentes de las funciones de correlación son características de una clase de universalidad más amplia, que incluye la mayoría, y probablemente todos, los sistemas fermiónicos unidimensionales con un espectro de excitaciones lineales sin “gap”. Luego propone el nombre de *líquidos de Luttinger* para tales sistemas.

Más recientemente (1990) Schulz generaliza estos argumentos para el caso de fermiones con espín 1/2 [123], [124], proponiendo una forma operativa para obtener información precisa de los exponentes de las funciones de correlación a partir de cálculos de energías estrictamente, es decir, sin necesidad de efectuar un cálculo explícito de las funciones de correlación. La metodología propuesta por Schulz fue complementada con resultados de la teoría de campos conforme por Frahm y Korepin [44], constituyendo una poderosa “tecnología” para el estudio de sistemas unidimensionales mediante técnicas numéricas. (Los detalles se proporcionan en la próxima sección). En un buen número de trabajos se ha empleado esta metodología para el estudio de distintos modelos de fermiones altamente correlacionados, entre otros [108], [138], [141], el que se expondrá en el próximo capítulo [8] y que constituye parte de este trabajo de tesis. En estos trabajos surgió la necesidad de introducir adicionalmente el término *líquido de Luther-Emery*. Esta última caracterización se hace en el mismo espíritu de la de *líquido de Luttinger* (o de *Tomonaga-Luttinger*) en el sentido de relacionar los exponentes de las funciones de correlación con el espectro de bajas energías, pero en este último caso se hace referencia a modelos que poseen “gap” en el espectro de excitaciones de espín.

Finalmente, resta decir que las ideas de líquidos de Tomonaga-Luttinger y de Luther-Emery surgen naturalmente de las observaciones que se enuncian a continuación, las cuales no son otra cosa que un resumen de resultados expuestos en las

secciones anteriores:

- **a.** La descripción de bajas energías de un sistema fermiónico en 1D está definida por un hamiltoniano de la forma general (2.9), el cual admite una representación bosónica como la expresada en (2.37), con parámetros g dependientes de las constantes de acoplamiento del modelo específico considerado.
- **b.** Los resultados del grupo de renormalización en el espacio real dados en la sección 2.4 indican que para valores cualesquiera de los parámetros g , las propiedades de baja energía se describen ya sea por el modelo de Tomonaga-Luttinger o bien por el de Luther-Emery, dependiendo de los valores de g . Considerando el régimen de acoplamiento débil para los procesos “Umklapp”, el primer caso corresponde a valores de parámetros de acoplamiento para los cuales no existe “gap” en el espectro de excitaciones de carga ni en el de espín, mientras que el segundo corresponde a la existencia de “gap” en las excitaciones de espín, pero no en las de carga.
- **c.** Tanto en el modelo de Tomonaga-Luttinger como en el de Luther-Emery, el comportamiento de las funciones de correlación queda completamente determinado por los valores de sus exponentes, parametrizados por K_ρ y K_σ dados en (2.19), (en general, por los valores de K_ρ^* y K_σ^*), para correlaciones con vector de onda $2k_F$ y por K_ρ (o K_ρ^*) para correlaciones con $4k_F$. En un modelo invariante frente a $SU(2)$ de espín, $K_\sigma = 1$ (en general, $K_\sigma^* = 1$). En el régimen de acoplamiento débil para los procesos “Umklapp”, para el caso de Luther-Emery, sólo las funciones de correlación de carga y de tripletes superconductores decaen con una ley de potencias definida por el valor de K_ρ .
- **d.** En las observaciones de **b.** y **c.** se omitió el efecto de los procesos “Umklapp”. En el régimen de acoplamiento fuerte estos inducen la formación de un “gap” de carga y el consecuente desarrollo de una fase aislante, por lo que no se contempla esta posibilidad en las definiciones de líquidos de Tomonaga-Luttinger y de Luther-Emery, utilizadas para la caracterización de fases metálicas.

En base a estos puntos, se define como *líquido de Tomonaga-Luttinger* a aquel régimen de parámetros de un sistema fermiónico unidimensional con espectros de excitaciones de baja energía de carga y de espín lineales y sin “gap”, y como *líquido de Luther-Emery* al régimen con “gap” en el espectro de excitaciones de espín y con espectro de excitaciones de baja energía de carga lineal y sin “gap”.

La metodología para definir estas fases, así como para calcular los exponentes de las funciones de correlación se expone en la sección siguiente.

2.7 Estudios Numéricos, Resultados de la Teoría de Campos Conforme y Comportamiento de las Funciones de Correlación.

De acuerdo con lo expuesto en las secciones anteriores, dado un modelo de fermiones en 1D con interacciones de corto rango, es condición necesaria para que sea un líquido de

Tomonaga-Luttinger que el espectro de las excitaciones de carga y de espín no exhiban “gap”, mientras que es condición necesaria para que sea un líquido de Luther-Emery que posea un “gap” en el espectro de las excitaciones de espín, pero no en las de carga. El empleo de técnicas numéricas de diagonalización exacta como la de Lanczos [112], [28] que se describe en el apéndice B resultan particularmente adecuadas para la exploración de las regiones de parámetros en las que el modelo presenta uno u otro comportamiento, a partir del cálculo directo de las energías correspondientes. Estas técnicas son aplicables en sistemas finitos, por lo que se requiere un tratamiento cuidadoso en lo que concierne a las conclusiones que se sacan a partir de ellos. El espacio de Hilbert de los modelos estudiados usualmente mediante estas técnicas es enorme, típicamente consta de $d = \binom{L}{N_1} \binom{L}{N_2}$ estados para una cadena de longitud L con $N = N_1 + N_2$ partículas, en un modelo sin vínculos en la ocupación. El uso de simetrías reduce el número de estados que deben considerarse en el proceso de diagonalización; por ejemplo, el uso de la simetría de traslación permite reducir d en un factor $\sim 1/L$. Concretamente, resulta muy difícil, aún en las computadoras más potentes que existen en la actualidad y con los programas Lanczos más eficientes, realizar diagonalizaciones que involucren cadenas de longitudes superiores a los 16 sitios, en cuyo caso particular el espacio de Hilbert tiene $\sim 10^7$ estados, usando simetrías!. Afortunadamente, el cálculo numérico en el estudio de sistemas unidimensionales ha devenido en popularidad en los últimos años y existen un gran número de técnicas y “trucos” para obtener información altamente precisa del límite termodinámico, aún en sistemas con un número de sitios tan pequeño como 16 y/o menor aún.

Obviamente, a partir del cálculo directo de las energías del estado fundamental y de los estados excitados de más baja energía de carga y de espín en una cadena con $L \leq 16$ sitios, sería absurdo sacar conclusiones inmediatas respecto a la existencia o no existencia de un “gap”, dado que en un sistema finito los niveles de energía nunca forman un continuo y por lo tanto siempre hay un “gap”. Sin embargo, pueden sí sacarse conclusiones a partir de estudiar la dependencia de estas energías como función del tamaño de las cadenas y realizar ajustes numéricos y extrapolaciones [41]. El empleo adecuado de diferentes condiciones de contorno también facilita la posibilidad de extrapolaciones. Esto último puede ilustrarse fácilmente en el caso de un sistema “tight-binding” no interactuante descrito por

$$H_0 = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i, \sigma}^\dagger c_{j, \sigma} = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k c_{k, \sigma}^\dagger c_{k, \sigma}, \quad (2.58)$$

donde $\langle ij \rangle$ denota un par de sitios vecinos y $\epsilon_k = -2t \cos(k)$. En la Fig. 2.4 pueden observarse las configuraciones de partículas en el espacio k para banda semillena en dos cadenas de diferente longitud con condiciones de contorno periódicas y antiperiódicas. En el caso de cadenas con longitudes de la forma $L = 2l + 2$, con l entero, se ve fácilmente que la configuración de “capa cerrada” que se muestra en la Fig. 2.4a corresponde a condiciones de contorno periódicas y provee una subestimación del valor de la energía por unidad de longitud en el límite termodinámico.

Por otro lado, en este mismo caso, las condiciones de contorno antiperiódicas que corresponden a configuraciones (degeneradas) de “capa abierta” como se muestra en la Fig. 2.4b, proporcionan una sobreestimación del valor de la energía por unidad de longitud en el límite termodinámico. En el caso de cadenas con longitud $L = 4l$, con l entero, la situación es a la inversa: la configuración de capa cerrada corresponde a las condiciones de contorno antiperiódicas, mientras que la de capa abierta a las periódicas. Para una densidad arbitraria N/L de partículas, con N par

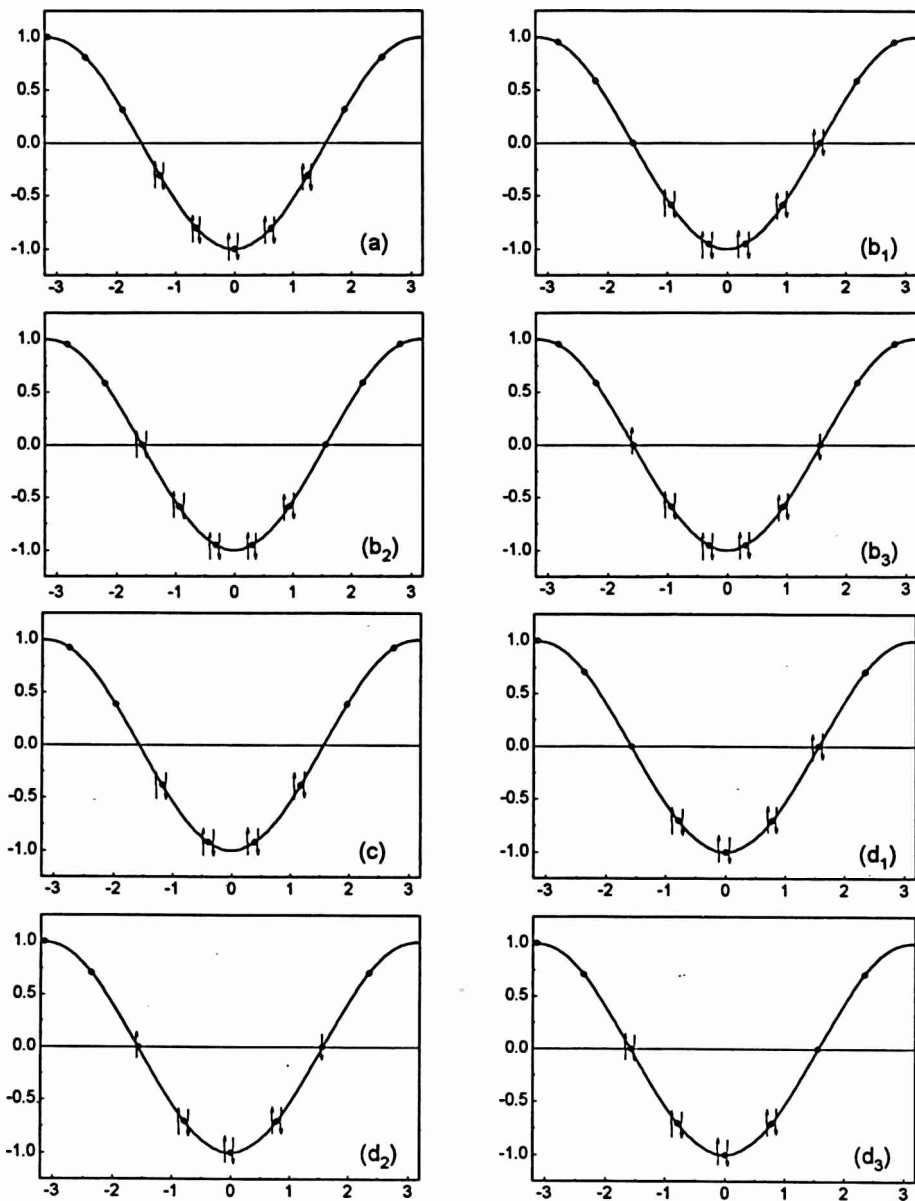


Figura 2.4: Configuraciones para banda semillena en el límite no interactuante. (a) Corresponde a condiciones de contorno periódicas y (b) a antiperiódicas en cadenas con $N = 2l + 2$ partículas, mientras que (c) a condiciones de contorno antiperiódicas y (d) a periódicas en cadenas con $N = 4l$ partículas.

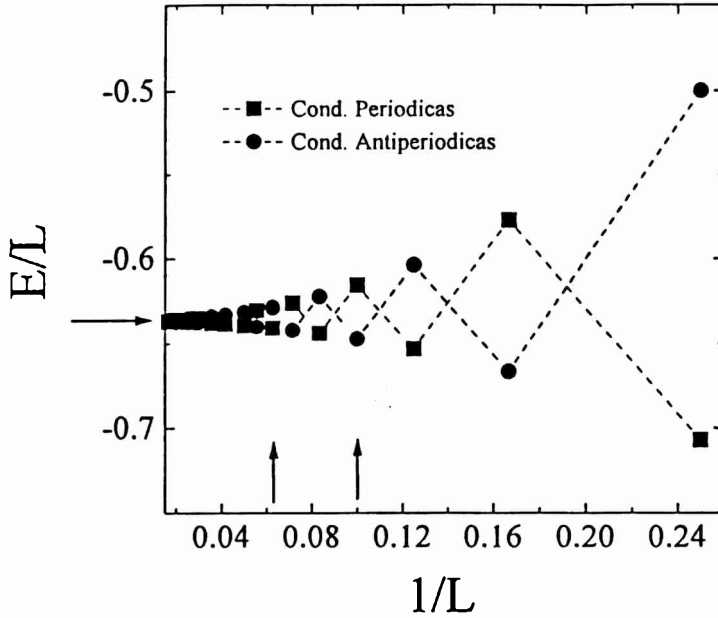


Figura 2.5: Energía del estado fundamental por unidad de longitud en el límite no interactuante como función de $1/L$ para varias longitudes L de cadena y diferentes condiciones de contorno. La flecha en el eje vertical indica el valor de la densidad de energía en el límite termodinámico. Las flechas en el eje horizontal indican dos longitudes de cadena particulares $L = 10$ (derecha) y $L = 16$ (izquierda).

y $N_1 = N_1 = N/2$, la configuración de capa cerrada corresponde a condiciones de contorno periódicas para N de la forma $N = 2l + 2$ y antiperiódicas para $N = 4l$, con l entero. También en el caso de las Figs. 2.4c y 2.4d, la configuración de capa cerrada provee una cota inferior para la energía por unidad de longitud en el límite termodinámico, mientras que la de capa abierta, una superior. Es obvio que a medida que se aumenta la longitud de la cadena, ambas estimaciones tienden a coincidir con el valor correspondiente al límite termodinámico, pero de todas maneras se ilustra este comportamiento en la Fig. 2.5 a los efectos de hacer notar que para longitudes de cadenas del orden típico aceptable para cálculos de diagonalización numérica, el promedio de las energías correspondientes a distintas condiciones de contorno, resulta una buena estimación del valor de la energía del estado fundamental. Generalmente, se observa un comportamiento similar cuando se conecta una interacción, aunque pueden presentarse también situaciones patológicas por efectos de alta correlación [87] [10].

Los valores de los “gaps” de carga y espín respectivamente para cadenas finitas, corresponden a las siguientes diferencias de energía:

$$\Delta^{\rho}(L) = E_0(N+1) + E_0(N-1) - 2E_0(N), \quad (2.59)$$

$$\Delta^{\sigma}(L) = E_0(S=1, k=0) - E_0(S=0, k=0), \quad (2.60)$$

donde $E_0(S=0, k=0)$ es la energía del estado fundamental, la cual en los modelos que se estudiarán en próximas secciones (en general hay que verificarlo) corresponden al subespacio con espín total $S=0$ y perteneciente a la representación irreducible con $k=0$ del grupo de traslaciones en el anillo; $E_0(N+1)$, $E_0(N-1)$ y $E_0(N)$ son las energías del estado fundamental de la cadena de longitud L , con $N+1$, $N-1$ y N

partículas respectivamente; mientras que $E_0(S = 1, k = 0)$ es la excitación de espín de más baja energía y pertenece al subespacio con espín total $S = 1$. En todos los casos, debe verificarse que la selección de números cuánticos en (2.60) sea la correcta. Esto se comprueba fácilmente en el límite no interactuante dado por (2.58) pero en general debe comprobarse en forma numérica, dada la escasez de teoremas aún para el caso del estado fundamental. La metodología a seguir consiste en un estudio del comportamiento de $\Delta^\rho(L)$ y $\Delta^\sigma(L)$ a medida que L aumenta. Un buen criterio de extrapolación (que se complementa con el uso adecuado de distintas condiciones de contorno) permite concluir respecto del valor finito o nulo de los “gaps” de las excitaciones de carga y de espín, permitiendo reconocer las regiones de parámetros en las que el modelo podría ser un líquido de Tomonaga-Luttinger o de Luther-Emery. Sin embargo, la no existencia o existencia de “gap”, dependiendo del caso, no es una condición suficiente para que lo sea, ya que en el régimen de Tomonaga-Luttinger debe verificarse, además, que los espectros de excitaciones de carga y de espín sean lineales a baja energía, mientras que en el de Luther-Emery deberá verificarse la linealidad en el espectro de las excitaciones de carga de baja energía. La comprobación numérica directa de esta hipótesis es prácticamente imposible, pero es factible si se utilizan resultados de la teoría de campos conforme [72],[44] [15],[49],[20]. Como se vió en las secciones 2.2 y 2.3, las excitaciones sin “gap”, ya sea de carga o de espín admiten en los modelos de Tomonaga-Luttinger y de Luther-Emery, una representación en términos de campos bosónicos no interactuantes con masa nula, descritos por una densidades lagrangianas de la forma

$$\mathcal{L}_\nu = \frac{1}{2}(\partial_\mu \phi_\nu)^2, \quad (2.61)$$

donde $\nu = \rho, \sigma$ se usa para denotar carga y espín y no debe confundirse con el índice covariante $\mu = 0, 1$; las unidades son tales que u_ν dados en (2.19 son iguales a 1) y ϕ_ν son los campos transformados según (2.20) de (2.15). La teoría definida por (2.61) constituye el ejemplo más sencillo de teoría invariante frente al grupo conforme. En el apéndice C se muestra que a partir de la ley de transformación del tensor energía-impulso de la teoría cuántica frente al grupo conforme, puede obtenerse la siguiente relación entre el valor de la energía en el límite termodinámico y el correspondiente a una cadena finita de longitud L

$$E_0(L) = L c_0(\infty) - \frac{\pi}{6L} c(u_\rho + u_\sigma) \quad (2.62)$$

$$E_0(L) = L c_0(\infty) - \frac{\pi}{6L} c u_\rho, \quad (2.63)$$

donde la primera ecuación corresponde al caso de Tomonaga-Luttinger, mientras que la segunda al de Luther-Emery; $c_0(\infty)$ es la energía por unidad de longitud del estado fundamental en el límite termodinámico, $E_0(L)$ es la energía del estado fundamental de un anillo de longitud L , u_ρ y u_σ son las velocidades de las excitaciones de carga y espín respectivamente y están definidas en (2.19), mientras que c es la carga central de la teoría. Los factores adicionales u_ν respecto de (2.C.24) aparecen debido al cambio de unidades en el tensor energía impulso en (2.C.9) cuando se considera $u_\nu \neq 1$. Para el caso del campo escalar con masa nula $c = 1$. La expresión (2.62), válida para el caso en que coexistan dos tipos de excitaciones sin “gap”, fue comprobada por Frahm y Korepin [44] en el modelo de Hubbard para el cual es posible una solución analítica exacta por medio del “Ansatz” de Bethe [89]. El resultado (2.63), que en otro contexto provee una explicación del efecto Casimir, es muy útil en el estudio numérico

de los modelos unidimensionales. Considerando la energía del estado fundamental por unidad de longitud en cadenas con distinta longitud como función de $(1/L)^2$, es posible verificar si los valores correspondientes pueden ser ajustados por una recta con ordenada al origen igual a $\epsilon_0(\infty)$ (este valor puede ser calculado independientemente a partir de cálculos con diferentes condiciones de contorno y extrapolaciones, como se discutió anteriormente). La pendiente de la recta es proporcional a la carga central. El factor de proporcionalidad depende de las velocidades de las excitaciones sin “gap”. Estas no son otra cosa que

$$u_\nu = \left. \frac{\partial E_\nu}{\partial k} \right|_{k=k_F}, \quad (2.64)$$

por lo tanto son susceptibles de ser calculadas mediante diagonalización numérica. En los sistemas finitos, se utilizan las versiones discretas de (2.64):

$$\begin{aligned} u_\rho &= \frac{E_0(S=0, k=2\pi/L) - E_0(S=0, k=0)}{(2\pi/L)} \\ u_\sigma &= \frac{E_0(S=1, k=2\pi/L) - E_0(S=0, k=0)}{(2\pi/L)}, \end{aligned} \quad (2.65)$$

donde $E_0(S=0, k=2\pi/L)$ ($E_0(S=1, k=2\pi/L)$) es la energía más baja para las excitaciones de carga (espín) y pertenece generalmente al subespacio con espín total $S=0$ ($S=1$) y a la representación irreducible con $k=2\pi/L$ del grupo de traslaciones del anillo. (Como se mencionó anteriormente, debe controlarse que la selección de números cuánticos en (2.65) sea la correcta). La extrapolación de las velocidades obtenidas según (2.65), obviamente tiene sentido siempre que no existan “gaps”. Dados los valores de u_ν , es posible, entonces, calcular el valor de la carga central y verificar si el mismo es consistente con una descripción efectiva en términos de campos escalares libres con masa nula para las excitaciones sin gap. La obtención del valor $c=1$ en alguna región de parámetros equivaldría a medir mediante experimentos numéricos que el modelo unidimensional estudiado se comporta a bajas energías como un líquido de Tomonaga-Luttinger o de Luther-Emery, dependiendo del caso, en esa región de parámetros.

Delimitadas las regiones en las que el modelo es un líquido de Tomonaga-Luttinger o de Luther-Emery es sabido, de acuerdo con las discusiones de secciones previas, que el comportamiento a grandes distancias de las funciones de correlación queda determinado por los parámetros K_ρ y K_σ^2 , dados en (2.19). En la sección anterior se mencionó la metodología propuesta en [123] para determinar estos parámetros a partir de cálculos de energía. Veamos en que consiste. Es fácil ver a partir del hamiltoniano (2.18), con $\phi_\nu(x)$ y $\Pi_\nu(x)$ dados en (2.15) y N_ν y J_ν dados en (2.16) que el coeficiente u_ρ/K_ρ puede relacionarse con derivadas de la energía del estado fundamental respecto del número de partículas, obteniéndose

$$\frac{1}{n^2\kappa} = \frac{1}{L} \frac{\partial^2 E_0}{\partial n^2} = \frac{\pi u_\rho}{2 K_\rho}, \quad (2.66)$$

siendo $n = N/L$, la densidad de partículas. De esta manera queda definida una relación entre el coeficiente u_ρ/K_ρ y la compresibilidad del sistema κ , siendo esta última una cantidad macroscópica. En los regímenes de Tomonaga-Luttinger o de Luther-Emery κ adopta valores finitos, mientras que $\kappa \rightarrow \infty$ indica que el sistema

²En general, el comportamiento de las funciones de correlación depende de los parámetros renormalizados K_ρ^* y K_σ^* . La notación sin * es por simplicidad.

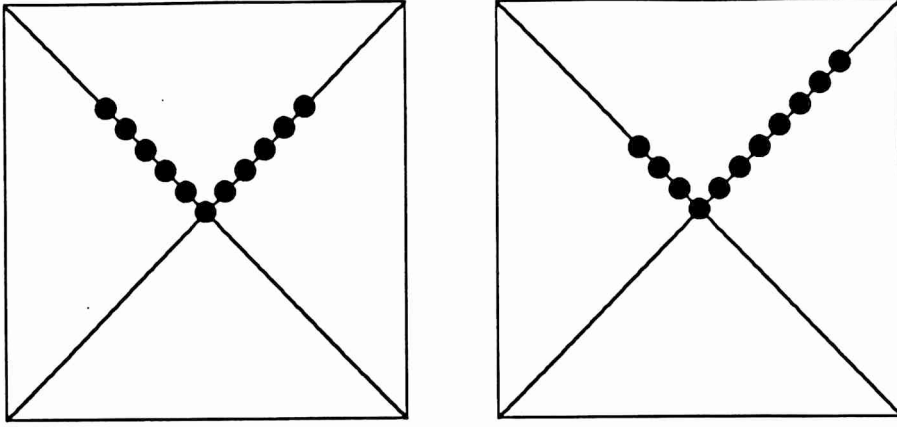


Figura 2.6: Configuración de corriente nula (izquierda) y configuración con corriente (derecha) en el modelo de Tomonaga-Luttinger. Los círculos negros corresponden a estados físicos ocupados.

es inestable respecto de la segregación de fases, que consiste en una separación del sistema en una fase rica en partículas y otra rica en huecos.

Por otro lado, considérese el efecto de una redistribución de partículas de la rama $-$ a la rama $+$ a partir de un estado con corriente J_ρ nula como se indica en la Fig. 2.6. Esta redistribución de partículas tiene asociado los siguientes corrimientos en los puntos de Fermi del sistema sin corriente $k_F^\pm = \pm k_F$:

$$k_F'^\pm = \pm k_F \mp \frac{\Phi}{L}. \quad (2.67)$$

Dado que el número de partículas en las distintas ramas está dado por $N_\pm = (L/\pi)k_F'^\pm$,

$$\frac{2\Phi}{L} = \frac{\pi}{L}\sqrt{2}J_\rho. \quad (2.68)$$

Resulta fácil comprobar, entonces, que la variación de la energía del estado fundamental respecto de Φ , dado en (2.67) es proporcional a $u_\rho K_\rho$, obteniéndose

$$\frac{D}{2\pi} = \frac{L}{2} \frac{\partial^2 E_0}{\partial \Phi^2} = \frac{1}{\pi} u_\rho K_\rho, \quad (2.69)$$

donde D es el peso de Drude, que también es una cantidad macroscópica. La relación con el peso de Drude es evidente si se considera el efecto de un flujo magnético externo sobre las partículas cargadas confinadas en un anillo de longitud L que rodea la superficie atravesada por el campo magnético con flujo Φ . En el apéndice D se muestra que el peso de Drude corresponde a la intensidad del pico de frecuencia cero de la conductividad óptica,

$$\sigma(\omega) = D\delta(\omega) + \sigma'(\omega). \quad (2.70)$$

Las relaciones (2.66) y (2.69) permiten tres estimaciones independientes de K_ρ , conociendo los valores de u_ρ, κ y D . Estos valores pueden obtenerse a partir de cálculos de energía mediante métodos de diagonalización numérica. El cálculo de u_ρ ya se discutió en párrafos anteriores. El cálculo de la compresibilidad requiere de la discretización de la derivada segunda de la energía respecto del número de partículas

$$\frac{\partial^2 E_0}{\partial N^2} \sim \frac{E_0(N+2) + E_0(N-2) - 2E_0(N)}{4}, \quad (2.71)$$

donde $E_0(M)$ es la energía del estado fundamental del anillo con longitud L y M partículas. Los incrementos se efectúan de a dos partículas para poder realizar cálculos en cadenas con el mismo valor del espín total. Además, en los regímenes con correlaciones superconductoras dominantes, las configuraciones con un número impar de partículas tienen un apareamiento frustrado y son, por lo tanto, energéticamente desfavorables y poco representativas del comportamiento del sistema en el límite termodinámico.

Para el cálculo del peso de Drude se utiliza

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \Phi^2} \sim \frac{2(E_0(\Phi) - E_0)}{\Phi^2}, \quad (2.72)$$

donde $\Phi/L \sim 0.01$, $E_0(\Phi)$ es la energía de la cadena con un "campo" Φ y E_0 es la energía del estado fundamental del sistema sin corriente (notar que esto último requiere de configuraciones de capa cerrada para el cálculo de la energía).

Para el cálculo de K_σ nótese que el hamiltoniano de los grados de libertad de espín, H_σ en (2.18), tiene la misma forma que H_ρ . Considerando variaciones de la energía del estado fundamental respecto a cambios en el espín total S en vez de respecto de la carga se obtiene la ecuación análoga a (2.66), resultando

$$L \frac{\partial^2 E_0}{\partial S^2} = \frac{\pi u_\sigma}{2 K_\sigma}. \quad (2.73)$$

La ecuación análoga a (2.69) se obtiene induciendo corrientes de espín por medio de un "flujo" Φ tal que

$$k_{F,\sigma}^{\uparrow\downarrow} = \pm k_F \mp s \frac{\Phi}{L}, \quad (2.74)$$

donde $s = +, -1$ para espín \uparrow, \downarrow , respectivamente. Resulta

$$\frac{L}{2} \frac{\partial^2 E_0}{\partial \Phi^2} = \frac{1}{\pi} u_\sigma K_\sigma. \quad (2.75)$$

De este modo, también es posible estimar K_σ a partir de cálculos de energía por medio de métodos de diagonalización numérica.

Concluyendo, a partir de cálculos en cadenas finitas es posible obtener un detalle minucioso del comportamiento de un modelo unidimensional en forma autoconsistente. Primero calculando la existencia de "gaps" de energía, luego calculando el valor de la carga central y constatando el carácter de líquido de Tomonaga-Luttinger o de Luther-Emery. Finalmente, calculando los parámetros de los exponentes de las funciones de correlación en las regiones de parámetros donde se verifique este comportamiento. Las tres maneras independientes de estimar K_ρ y K_σ ofrecen un control de autoconsistencia adicional. El conocimiento de estos parámetros permite determinar cuales son las correlaciones dominantes del modelo estudiado, considerando la dependencia explícita con los mismos en los exponentes de las funciones de correlación y respuesta como se indica en (2.32), (2.34), (2.35) y (2.56).

2.A Apéndice A. Cálculo de la Función de Green en la Representación Bosónica.

La función de Green retardada de una partícula es

$$G_{\pm,\sigma}^R(x,t) = -i\theta(t)\langle[\Psi_{\pm}(x,t), \Psi_{\pm}^\dagger(0,0)]_+\rangle, \quad (2.A.1)$$

donde $\sigma = |, |$. Definiendo la función de correlación $C_{i,\sigma}(x, t) = \langle \Psi_{\pm}(x, t) \Psi_{\pm}^{\dagger}(0, 0) \rangle$ con $i = +, -$ y usando la representación bosónica (2.24) para los campos fermiónicos,

$$C_{i,\sigma}(x, t) = \frac{1}{2\pi\alpha} \langle \exp(i\Phi_{i,\sigma}(x, t)) \exp(-i\Phi_{i,\sigma}(0)) \rangle. \quad (2.A.2)$$

Los operadores densidad $\rho_{i,\sigma}(p)$ se escriben en términos de

$$\nu_i(p) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\rho_{i,|}(p)_{\pm}^{\pm} \rho_{i,|}(p)), \quad (2.A.3)$$

donde $+$ corresponde a $\nu_i \equiv \rho_i$ y $-$ a $\nu_i \equiv \sigma_i$. Escribiendo la transformación de Bogoliubov equivalente a (2.20) [130]

$$\exp(iS)\nu_{\pm}(p)\exp(iS) = \nu_{\pm}(p)\cosh(\psi_{\nu}(p)) + \sinh(\psi_{\nu}(p)), \quad (2.A.4)$$

con

$$\tanh(2\psi_{\nu}(p)) = \frac{g_{\nu}}{2\pi v_F^{\nu}} \exp(-rp), \quad (2.A.5)$$

donde g_{ν} están dados en (2.19) y r se introduce por razones de convergencia [32]. Resulta entonces

$$\begin{aligned} \exp(iS)\Phi_{i,\sigma}(x)\exp(-iS) &= \\ &= e^{iS} \exp\left\{ \frac{2\pi}{\sqrt{2}L} i \sum_{p \neq 0} \frac{\exp(-\alpha/2|p| - ipx)}{p} (\rho_i(p) + s\sigma_i(p)) \right\} e^{-iS}, \end{aligned} \quad (2.A.6)$$

donde $s = +, -$ para $\sigma = |, |$ respectivamente. Luego de un poco de álgebra y haciendo uso de

$$\exp(A + B) = \exp(A)\exp(B)\exp(-[A, B]/2), \quad (2.A.7)$$

con $[A, B]$ que conmuta con A y B , y

$$\langle \exp(f) \rangle = \exp\left(\frac{\langle f^2 \rangle}{2}\right), \quad (2.A.8)$$

(válida para f lineal en operadores de creación y destrucción de bosones), puede escribirse [96], [130], [32]

$$\begin{aligned} G_{+}^R(x, t) &= -i \frac{\theta(t)}{\pi} \text{Re}\{ [F_{\rho}(x - u_{\rho}t, 0) F_{\sigma}(x - u_{\sigma}t, 0)]^{1/2} \\ & [r^2 F_{\rho}(x - u_{\rho}t, r) F_{\rho}^{*}(x - u_{\rho}t, r)]^{\alpha_{\rho}} [r^2 F_{\sigma}(x - u_{\sigma}t, r) F_{\sigma}^{*}(x - u_{\sigma}t, r)]^{\alpha_{\sigma}} \} \end{aligned} \quad (2.A.9)$$

con α_{ν} dados en (2.15) y

$$F_{\nu}(y, r) = \frac{i}{y + ir} \frac{|\Gamma(1 - iy/(\beta v_F^{\nu}) + r/(\beta v_F^{\nu})|^2}{\Gamma^2(1 + r/(\beta v_F^{\nu}))}. \quad (2.A.10)$$

El procedimiento para calcular $G_{\pm}^R(x, t)$ es análogo. Puede verse [32], [96] que a $T = 0$

$$\begin{aligned} G_{+}^R(x, t) &\xrightarrow{T \rightarrow 0} i\theta(t) \text{Im}\left\{ \left[\frac{1}{(x - u_{\rho}t + i0)(x - u_{\sigma}t + i0)} \right]^{1/2} \right. \\ & \left. \left[\frac{r^2}{(x - u_{\rho}t + ir)(x + u_{\rho}t - ir)} \right]^{\alpha_{\rho}} \left[\frac{r^2}{(x - u_{\sigma}t + ir)(x + u_{\sigma}t - ir)} \right]^{\alpha_{\sigma}} \right\} \end{aligned} \quad (2.A.11)$$

Este mismo resultado fue obtenido perturbativamente por Dzyaloshinsky y Larkin [30], [130]. La expresión analítica de la función de Green en (ω, k) es complicada. La característica interesante es que posee un corte en vez de la estructura de polos de los líquidos de Fermi, mientras que el comportamiento de la función espectral $\text{Im}G(\omega, k_F)$ para $\omega \rightarrow 0$ no presenta pico de cuasipartícula [96].

2.B Apéndice B. Método de Diagonalización de Lanczos.

La idea básica del método de Lanczos [112] consiste en construir una base especial en la cual el hamiltoniano a diagonalizar tenga una representación tridiagonal. Se parte de un estado arbitrario $|\phi_0\rangle$ del espacio de Hilbert del modelo estudiado. Si se quiere obtener el estado fundamental $|\psi_0\rangle$, el estado inicial $|\phi_0\rangle$ debe tener una componente no nula sobre $|\psi_0\rangle$. En caso de no contarse con información “a-priori” respecto de este último, se elige $|\phi_0\rangle$ con componentes al azar sobre todos los estados del espacio de Hilbert. Luego, se inicia un proceso iterativo que comienza con la construcción de un segundo estado $|\phi_1\rangle$, ortogonal a $|\phi_0\rangle$, mediante la aplicación del hamiltoniano sobre $|\phi_0\rangle$, sustrayendo la proyección del nuevo estado sobre el inicial, es decir

$$|\phi_1\rangle = H|\phi_0\rangle - a_0|\phi_0\rangle, \quad (2.B.1)$$

donde $a_0 = \langle\phi_0|H|\phi_0\rangle/\langle\phi_0|\phi_0\rangle$. El proceso se generaliza para obtener los estados de la base tridiagonal, resultando la siguiente expresión para el $(n + 1)$ -ésimo estado:

$$|\phi_{n+1}\rangle = H|\phi_n\rangle - a_n|\phi_n\rangle - b_n^2|\phi_{n-1}\rangle, \quad (2.B.2)$$

donde $a_n = \langle\phi_n|H|\phi_n\rangle/\langle\phi_n|\phi_n\rangle$ y $b_n^2 = \langle\phi_n|\phi_n\rangle/\langle\phi_{n-1}|\phi_{n-1}\rangle$. En la base $\{|\phi_n\rangle, n = 1, \dots, M\}$ así generada, la matriz del hamiltoniano tiene elementos a_n en la diagonal y b_n en las subdiagonales principales superior e inferior. La diagonalización exacta de la matriz hamiltoniana equivale a tomar un número M de estados igual a la dimensión del espacio de Hilbert del modelo estudiado. Sin embargo, la ventaja del método consiste en que se puede obtener una buena información del estado fundamental con un número relativamente pequeño (típicamente del orden de 100) de estados [112]. El procedimiento que se sigue en la práctica consiste, entonces, en diagonalizar paso a paso la matriz tridiagonal, haciendo uso de rutinas especiales para este tipo de matrices disponibles en las bibliotecas matemáticas, incluyendo iterativamente más estados hasta que el proceso converge. El criterio de convergencia se define a partir de estimar el autovalor más bajo con la precisión deseada (típicamente del orden de 10^{-8}), definiendo el error como el valor absoluto de la diferencia entre las estimaciones de dos iteraciones consecutivas. Desde el punto de vista de la programación, en cada iteración el método requiere el almacenamiento de los coeficientes de los tres vectores $|\phi_{n+1}\rangle, |\phi_n\rangle, |\phi_{n-1}\rangle$ en la base completa del espacio de Hilbert además de los elementos no nulos de la matriz del hamiltoniano, cuyo número aumenta en cada iteración. En algunos casos, la demanda de memoria hace imposible la utilización del método.

Un algoritmo alternativo para calcular el autovalor más bajo y el autovector correspondiente es el de Lanczos modificado [28]. Partiendo de un estado inicial normalizado $|\phi_0\rangle$ como en el método de Lanczos tradicional, se aplica el hamiltoniano obteniéndose

$$\begin{aligned} H|\phi_0\rangle &= \langle H \rangle_0 |\phi_0\rangle + b|\phi_1\rangle \\ |\phi_1\rangle &= \frac{1}{b} H|\phi_0\rangle - \langle H \rangle_0 |\phi_0\rangle \end{aligned} \quad (2.B.3)$$

con $\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1$ y $\langle\phi_1|\phi_0\rangle = 0$ y

$$b = [(\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)]^{1/2} \quad (2.B.4)$$

La matriz de H en la base $\{|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle\}$ es de 2×2 . El autovalor de más baja energía de la misma es

$$E_0^{(1)} = \langle H \rangle + b\alpha, \quad (2.B.5)$$

siendo

$$\alpha = \beta - \sqrt{\beta^2 + 1}, \quad \beta = \frac{\langle (H - \langle H \rangle)^3 \rangle}{2\langle (H - \langle H \rangle)^3 \rangle^{3/2}}, \quad (2.B.6)$$

y el autovector correspondiente

$$|\phi_0^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} (|\phi_0\rangle + \alpha|\phi_1\rangle). \quad (2.B.7)$$

Los pasos descritos en las ecuaciones (2.B.3) a (2.B.6) se repiten a partir de $|\phi_0^{(1)}\rangle$ en vez de $|\phi_0\rangle$, quedando así definido el proceso iterativo que se repite hasta lograr convergencia. Este algoritmo requiere sólo del almacenamiento de los tres vectores $|\phi_0^{(n)}\rangle, H|\phi_0^{(n)}\rangle, H^2|\phi_0^{(n)}\rangle$ en cada paso y permite el cálculo directo del estado fundamental, pero posee la desventaja de converger más lentamente que el algoritmo de Lanczos tradicional.

2.C Apéndice C. Invarianza Conforme en $D=1+1$. Transformación del Tensor Energía-Impulso.

El grupo conforme global, tanto para $D = 2$ como para $D > 2$, está constituido por el grupo de Poincaré al que se le unen las dilataciones y las transformaciones conformes especiales [49]. En $D=2$ es usual trabajar con las combinaciones complejas $z = x + iy$ y $\bar{z} = x - iy$, en vez de las coordenadas reales x, y . En las nuevas coordenadas

$$\begin{aligned} ds^2 &= g_{zz}dz^2 + (g_{z\bar{z}} + g_{\bar{z}z})dzd\bar{z} + g_{\bar{z}\bar{z}}d\bar{z}^2 = dzd\bar{z}, \\ \partial_z &= (\partial_x - i\partial_y)/2; \quad \partial_{\bar{z}} = (\partial_x + i\partial_y)/2, \end{aligned} \quad (2.C.1)$$

siendo las componentes del tensor métrico en la nueva base

$$g_{zz} = g^{\bar{z}\bar{z}} = g_{\bar{z}\bar{z}} = g^{zz} = 0; \quad g_{z\bar{z}} = g_{\bar{z}z} = \frac{1}{2}; \quad g^{z\bar{z}} = g^{\bar{z}z} = 2. \quad (2.C.2)$$

El tensor energía-impulso debe ser simétrico y de traza nula para que la teoría sea invariante frente al grupo global [49] y en la nueva base se escribe

$$T_{zz} = (T_{11} - iT_{12})/2; \quad T_{\bar{z}\bar{z}} = (T_{11} + iT_{12})/2; \quad T_{z\bar{z}} = T_{\bar{z}z} = 0, \quad (2.C.3)$$

En $D=2$ el grupo conforme local se denota por $\mathcal{G} = \Gamma \otimes \bar{\Gamma}$, donde $\Gamma, (\bar{\Gamma})$ es el grupo de las sustituciones analíticas de $z, (\bar{z})$. Las transformaciones infinitesimales de Γ son

$$z \rightarrow z + \epsilon(z); \quad \epsilon(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \epsilon_n z^{n+1}, \quad (2.C.4)$$

siendo este último el desarrollo de Laurent de $\epsilon(z)$.

Dada una función de correlación arbitraria de la forma

$$\langle X \rangle = \langle A_1(\xi_1) \dots A_N(\xi_N) \rangle, \quad (2.C.5)$$

donde $A_i(\xi_i)$ son campos locales, si se considera una transformación de coordenadas de la forma $\xi^a \rightarrow \xi^a + \epsilon^a(\xi)$, es válida la siguiente relación [72], [49]

$$\sum_{k=1}^N \langle A_1(\xi_1) \dots A_{k-1} \delta_\epsilon A_k(\xi_k) A_{k+1}(\xi_{k+1}) \dots A_N(\xi_N) \rangle + \int d^2\xi \partial^a \epsilon^b(\xi) \langle T_{ab}(\xi) X \rangle = 0, \quad (2.C.6)$$

la cual es conocida como identidad de Ward. Debido a la localidad de los campos, las variaciones de los mismos $\delta_\epsilon A_k$ son combinaciones lineales de un número finito de derivadas de $\epsilon(\xi)$ tomadas en el punto $\xi = \xi_k$, siendo los coeficientes ciertos campos locales y puede verse de (2.C.6) y del hecho de que la función $\langle TX \rangle$ sea analítica que [15]

$$\partial_{\bar{z}} \langle T_{zz}(z, \bar{z}) X \rangle = 0; \quad \partial_z \langle T_{\bar{z}\bar{z}}(z, \bar{z}) X \rangle = 0, \quad (2.C.7)$$

por lo tanto $T_{zz}(z, \bar{z}) \equiv T(z)$ depende sólo de z y $T_{\bar{z}\bar{z}}(z, \bar{z}) \equiv \bar{T}(\bar{z})$ depende sólo de \bar{z} . Luego, puede verse que a partir de (2.C.6) puede escribirse la identidad [49]

$$\delta_\epsilon A_k(z, \bar{z}) = \oint_{\mathcal{C}} d\xi \epsilon(\xi) T(\xi) A_k(z, \bar{z}), \quad (2.C.8)$$

donde \mathcal{C} rodea al punto z . Tomando en cuenta la naturaleza tensorial del campo $T(z)$ y la condición de localidad, su variación en la teoría cuántica frente a un cambio infinitesimal de coordenadas se escribe [15]

$$\delta_\epsilon T(z) = \epsilon(z) \partial_z T(z) + 2 \partial_z \epsilon(z) T(z) + \frac{1}{12} c \partial_z^3 \epsilon(z), \quad (2.C.9)$$

donde el último término es un término de Schwinger que resulta de la naturaleza cuántica de la teoría y c es la carga central [72], [15]. Se satisface una relación análoga para $\bar{T}(\bar{z})$.

Introduciendo las coordenadas reales $z = \exp \tau + i\sigma$; $\bar{z} = \exp \tau - i\sigma$, con $0 < \sigma \leq \pi$, pueden representarse las funciones de correlación como

$$\langle X \rangle = \langle \mathcal{T}[A_1(\sigma_1, \tau_1) \dots A_N(\sigma_N, \tau_N)] \rangle, \quad (2.C.10)$$

donde \mathcal{T} denota orden cronológico respecto de τ . En el formalismo operatorial [49], [15]

$$\delta_\epsilon A_j(\sigma, \tau) = [T_\epsilon, A_j(\sigma, \tau)], \quad (2.C.11)$$

donde

$$T_\epsilon = \oint_{\log|z|=\tau} dz \epsilon(z) T(z). \quad (2.C.12)$$

En particular $\delta_\epsilon T(z) = [T_\epsilon, T(z)]$, con $\delta_\epsilon T(z)$ dado por 2.C.9. Como consecuencia, considerando los desarrollos de Laurent

$$T(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{L_n}{z^{n+2}}; \quad \bar{T}(\bar{z}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\bar{L}_n}{\bar{z}^{n+2}}, \quad (2.C.13)$$

se ve que

$$[L_n, L_m] = (n - m) L_{n+m} + \frac{1}{12} c (n^3 - n) \delta_{n+m,0}, \quad (2.C.14)$$

satisfaciéndose relaciones análogas para los \bar{L}_n , y además $[L_n, \bar{L}_m] = 0$. Los operadores L_n son los generadores del álgebra de Virasoro (2.C.14) [142], mientras que

L_{+1} , L_0 generan la subálgebra $sl(2, C)$ asociada al grupo global. En particular, L_{-1} y \bar{L}_{-1} generan las traslaciones, mientras que L_0 y \bar{L}_0 generan las dilataciones infinitesimales en z , \bar{z} . En el sistema de coordenadas σ, τ , el operador

$$H = L_0 + \bar{L}_0 \quad (2.C.15)$$

es el generador de cambios en el tiempo y por lo tanto el hamiltoniano. Si $|0\rangle$ es el estado fundamental de H , debe satisfacerse

$$L_n|0\rangle = 0, \quad n \geq -1; \quad \langle 0|L_n = 0, \quad n \leq 1. \quad (2.C.16)$$

para que $T(z)$ sea regular en $z = 0$ ($\tau \rightarrow -\infty$) y $z = \infty$ ($\tau \rightarrow \infty$), de manera que $\langle 0|T(z)|0\rangle = 0$.

Si se efectúa la transformación conforme

$$z = \exp\left(\frac{2i\pi u}{L}\right); \quad u = \frac{L}{2i\pi} \log z, \quad (2.C.17)$$

que mapea el plano complejo en una banda periódica de ancho L y longitud infinita [72], de (2.C.9) resulta

$$T_{banda}(u) = -\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 [T_{plano}(z)z^2 - \frac{1}{24}c], \quad (2.C.18)$$

y dado que $\langle T_{plano}(u) \rangle = 0$ se encuentra

$$\langle T_{banda}(u) \rangle = \frac{1}{24} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 c. \quad (2.C.19)$$

Este resultado es la base de la comprensión del efecto Casimir.

Notando que la variación de la energía libre obedece una relación análoga a (2.C.6) [20]

$$\delta \ln Z = - \int_{\mathcal{D}} \frac{d^2 u}{2\pi} \langle T_{ab}(u, \bar{u}) \rangle \partial^a \epsilon^b, \quad (2.C.20)$$

siendo el dominio de integración \mathcal{D} la banda infinita de ancho L . Puede considerarse una dilatación en el ancho de la banda $\delta\epsilon^1 = u_1$, $\delta\epsilon^2 = 0$. El único término no nulo en (2.C.20) es el de $T_{11} = T(u) + \bar{T}(\bar{u})$. Usando el resultado (2.C.19) y definiendo la energía libre por unidad de longitud de la banda

$$F(L) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \ln Z(L, M), \quad (2.C.21)$$

donde la distancia M se toma en la dirección longitudinal de la banda. Resulta

$$\delta F(L) = \delta\epsilon L \frac{dF(L)}{dL} = -\frac{1}{12} \left(\frac{2\pi}{L}\right) c \delta\epsilon, \quad (2.C.22)$$

de manera que

$$F(L) = L f_0(\infty) + \frac{\pi}{6L} c \quad (2.C.23)$$

donde $f_0(\infty)$ es la energía libre por unidad de área de la banda. si se considera la inversa de la temperatura en la dirección de la longitud de la banda, se obtiene la siguiente relación en el límite $\beta \rightarrow \infty$

$$L\epsilon_0(\infty) = E(L) - \frac{\pi}{6L} c, \quad (2.C.24)$$

donde $\epsilon_0(\infty)$ es la energía por unidad de ancho del estado fundamental en la banda de ancho ∞ y $E(L)$ la correspondiente a la banda de ancho finito L .

2.D Apéndice D. Efecto de un Flujo Magnético. El Peso de Drude.

Considérese un sistema fermiónico en una red unidimensional en forma de anillo en la descripción “tight-binding” dada por un hamiltoniano de la forma $H = H_0 + H_{int}$, con H_0 dado en (2.58). Si se aplica un campo magnético constante atravesando el área rodeada por el anillo, el flujo magnético correspondiente es

$$\Phi = \int \int dS \cdot \mathbf{B} = \oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}. \quad (2.D.1)$$

El hamiltoniano perturbado por efectos del campo magnético constante se obtiene mediante la sustitución de Peierls [82],

$$t \equiv t_{ij} \rightarrow t_{ij} \exp(i\phi) = t_{ij} \left(1 + i\phi - \frac{1}{2}\phi^2 + \dots\right)$$

$$\phi = -\frac{e}{\hbar c} \int_{x_i}^{x_j} dx A_x = -\frac{e A_x (x_j - x_i)}{\hbar c}, \quad (2.D.2)$$

donde A_x es la componente del potencial vector a lo largo del anillo. Para un modelo con “hopping” a primeros vecinos, $|x_i - x_j| = a$, siendo a la constante de red, de manera que

$$H_0 \rightarrow -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\exp(i\phi) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \exp(-i\phi) c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \quad (2.D.3)$$

donde $\langle ij \rangle$ denota un par de sitios primeros vecinos. Es fácil ver, calculando la transformada de Fourier, que los factores $\exp(\pm i\phi)$ trasladan los vectores de la red recíproca en $k \rightarrow k + \phi$ y pueden ser por lo tanto asimilados por las condiciones de contorno. También puede verse a partir de la expansión de (2.D.2), reteniendo términos hasta de segundo orden, que el hamiltoniano total puede escribirse

$$H = H_0 + H_{int} - \frac{A_x}{c} j_p - \frac{1}{2} \left(\frac{e A_x}{\hbar c}\right)^2 K, \quad (2.D.4)$$

donde

$$K = -t(a)^2 \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \quad (2.D.5)$$

El operador corriente total $J = -c\partial H/\partial A_x$ tiene una contribución paramagnética y otra diamagnética, $J = j_p + j_d$, con

$$j_p = \frac{icta}{\hbar} \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \quad j_d = \left(\frac{e}{\hbar}\right)^2 \frac{A_x}{c} K. \quad (2.D.6)$$

Luego, usando teoría de perturbaciones usual, el cambio en la energía por efectos de la interacción con el campo externo *estático* es

$$E(\Phi) - E(0) = -\frac{1}{2} \left(\frac{e A_x}{\hbar c}\right)^2 \langle 0|K|0 \rangle - \left(\frac{A_x}{c}\right)^2 \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle 0|j|m \rangle|^2}{E_m - E_0}, \quad (2.D.7)$$

donde $|0\rangle$ es el estado fundamental del $H_0 + H_{int}$ y $|m\rangle$ son autoestados de $H_0 + H_{int}$.

Por otro lado [29], [121], puede verse que la conductividad óptica en la teoría de la respuesta lineal se escribe como

$$\sigma(\omega) = D\delta(\omega) + \sigma'(\omega), \quad (2.D.8)$$

donde

$$\sigma'(\omega) = \frac{2\pi}{L} \sum_{m \neq 0} \frac{|\langle \Psi_0 | j | \Psi_m \rangle|^2}{E_m - E_0} \delta(\omega + E_0 - E_m), \quad (2.D.9)$$

y se satisface la regla de suma [11]

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\omega \sigma(\omega) = -\langle H_0 \rangle. \quad (2.D.10)$$

Comparando con (2.D.7), se ve fácilmente que el peso de Drude resulta

$$D = \pi L \frac{\partial^2 E}{\partial \phi^2}. \quad (2.D.11)$$

De esta manera, se establece una relación entre la intensidad del pico de frecuencia cero de la conductividad óptica y la derivada segunda de la energía del estado fundamental respecto de un campo externo de intensidad pequeña, que modifica la configuración inicial de corriente nula del estado fundamental.

Capítulo 3

Modelo de Hubbard Extendido con “Hopping” Correlacionado.

3.1 Introducción

A partir del descubrimiento de la superconductividad de alta temperatura crítica [14] se ha dedicado un enorme esfuerzo tanto desde el punto de vista teórico como experimental para estudiar el tipo de materiales en los cuales se observa este fenómeno [116]. Sin embargo, a pesar de los avances logrados en la determinación de la estructura electrónica y química de estos compuestos, resulta aún ignoto el mecanismo que origina la superconductividad de alta T_C . Los superconductores de alta T_C más estudiados son los cupratos, y en particular, aquellos en base a La_2CuO_4 ($T_C = 30K$) y a $YBa_2Cu_3O_6$ ($T_C = 90K$). Estos compuestos son aisladores en el estado estequiométrico, mientras que los compuestos “dopados” $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ y $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ tienen una fase superconductora. El diagrama de fases se esquematiza en la Fig. 3.1. Actualmente existe un amplio consenso en el hecho de que el elemento estructural básico, común a todos los cupratos superconductores, es el plano de CuO_2 .

En el compuesto sin dopar, cada celda unidad contiene un hueco, situado preferentemente en el orbital $d_{x^2-y^2}$ del ión cobre en el plano CuO_2 , el cual está considerablemente hibridizado con los orbitales $p\sigma$ de los oxígenos vecinos (Ver Fig. 3.2). En este caso, que corresponde al estado normal, los datos de espectroscopía electrónica indican que son aisladores de transferencia de carga. Los electrones agregados por dopaje “n” ocupan orbitales de carácter predominantemente de cobre, mientras que los huecos agregados por dopaje “p” se ubican en estados con grandes amplitudes en los oxígenos de los planos [86], [107]. Esta es la evidencia más directa de la alta correlación inducida por la fuerte repulsión coulombiana ($U = 8 - 10eV$) entre dos huecos situados en un mismo sitio de cobre. Este aspecto constituye uno de los mayores obstáculos en el tratamiento teórico. En particular, las correlaciones fuertes son las responsables del poco éxito que han tenido los resultados de cálculos de bandas [70], [98], [50] en la obtención del carácter aislante de la fase normal (no “dopada”). Dada la complejidad del problema, es deseable plantear un modelo teórico lo más simple posible pero sin desprestigiar ningún ingrediente que pueda ser fundamental en el mecanismo de la superconductividad. Para esto es importante notar que la escala de energía relevante para este mecanismo es relativamente pequeña (Ver Fig. 3.3). Tomando en cuenta las distintas escalas de energía, los ingredientes mínimos en la construcción de un modelo para los planos de CuO_2 son la energía de transferencia de carga ($\Delta = \text{energía del estado } (Cu3d^{10}, O2p^5) - \text{energía del estado } (Cu3d^9, O2p^6)$),

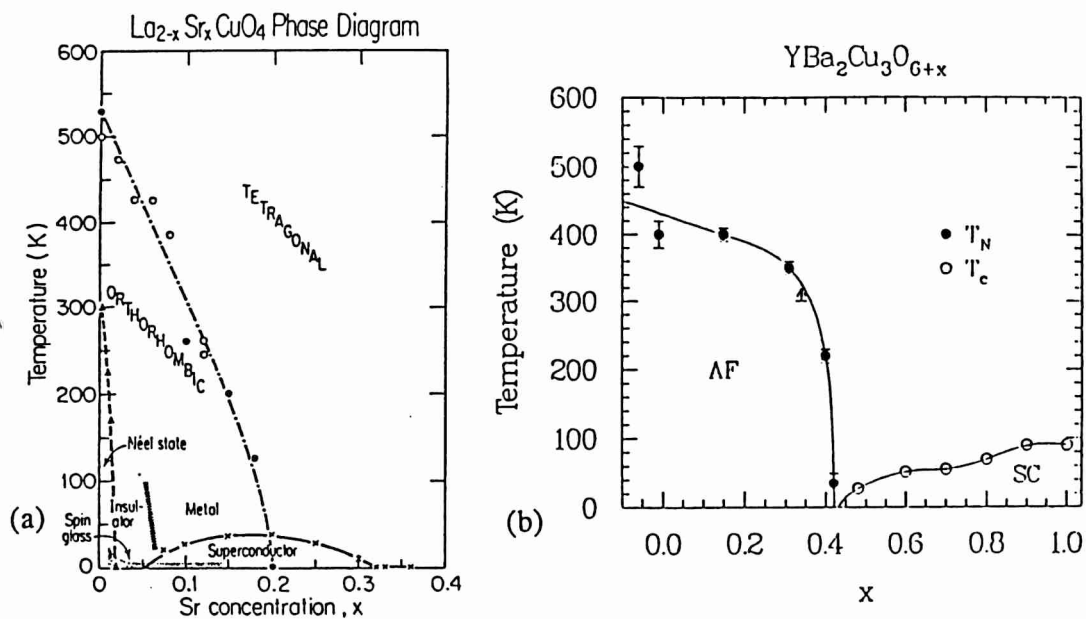


Figura 3.1: Diagrama de fases de los cupratos superconductores. (a) [Birgeneau y Shirane (1989)], (b) [Tranquada (1988)].

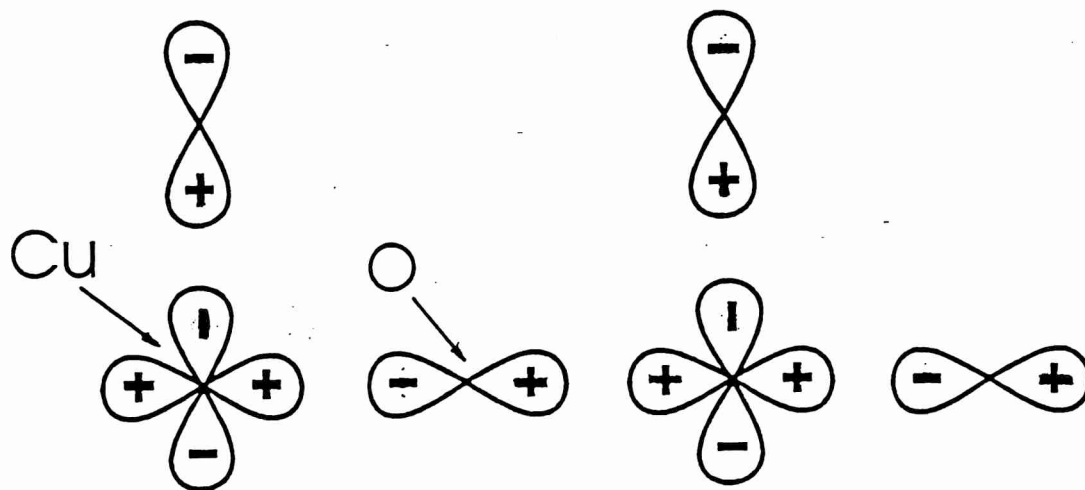


Figura 3.2: Representación esquemática de los orbitales relevantes de cobres y oxígenos en los planos de CuO₂. Los signos indican las fases de las funciones de onda.

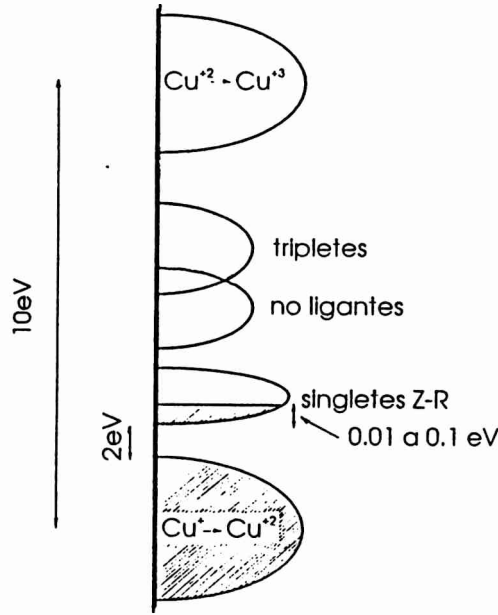


Figura 3.3: Representación esquemática de las distintas escalas de energía asociadas a diferentes interacciones de los óxidos de cobre.

el “hopping” entre cobres y oxígenos (t_{pd}), las repulsiones coulombianas en los cobres (U_d), en los oxígenos (U_p) y entre cobres y oxígenos vecinos (U_{pd}). El modelo así construido es el hamiltoniano de Hubbard extendido de tres bandas y contiene las correlaciones locales fuertes a la vez que la fuerte hibridización entre cobres y oxígenos vecinos existentes en los planos. El hamiltoniano se lee [94], [34]

$$\begin{aligned}
 H = & \epsilon_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \epsilon_p \sum_{j\sigma} p_{j\sigma}^\dagger p_{j\sigma} + t_{pd} \sum_{i\delta\sigma} (p_{i+\delta\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + h.c.) \\
 & + U_d \sum_i d_{i1}^\dagger d_{i1} d_{i1}^\dagger d_{i1} + U_p \sum_j p_{j1}^\dagger p_{j1} p_{j1}^\dagger p_{j1} \\
 & + U_{pd} \sum_{i\delta\sigma\sigma'} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} p_{i+\delta\sigma'}^\dagger p_{i+\delta\sigma'} \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

H está escrito en la representación de huecos en la cual el vacío está dado por las configuraciones $3d^{10}$ para el cobre y $2p^6$ para el oxígeno. $d_{i\sigma}^\dagger$ crea un hueco en el orbital $3d_{x^2-y^2}$ de un cobre en el sitio i , $p_{j\sigma}^\dagger$ crea un hueco en los orbitales $2p_x$ o $2p_y$ de un oxígeno situado en el sitio j . δ denota los cuatro vectores $\pm a\hat{x}/2, \pm a\hat{y}/2$, mientras que $i+\delta$ denota las posiciones de los cuatro oxígenos vecinos más próximos al cobre situado en el sitio i . El “gap” de transferencia de carga desnudo (para $t_{pd} = 0$) está dado por $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d$, siendo ϵ_d y ϵ_p los niveles atómicos. En el marco de esta descripción existen diferentes vertientes de interpretación del mecanismo de apareamiento responsable de la superconductividad de alta T_C . Por un lado el superintercambio mediado por los oxígenos habilita el antiferromagnetismo entre los cobres, lo cual apoya la idea de un mecanismo de apareamiento de origen magnético propuesta originalmente por Anderson [5]. Por otro lado, una repulsión coulombiana entre primeros vecinos U_{pd} lo suficientemente fuerte da lugar a excitaciones de transferencia de carga, lo cual se ha propuesto como un mecanismo alternativo [13], [140].

En relación con la discusión respecto del mecanismo que da lugar a la superconductividad, existe otra discusión en torno del aspecto más elemental que concierne a

la reducción o ampliación del modelo definido por (3.1). La propuesta de Anderson ([5]) está basada en una descripción efectiva en términos de un modelo de Hubbard de *una banda* en el límite de alta correlación. En este límite, este modelo puede reducirse a su vez en el modelo $t - J$. Los pioneros en obtener la reducción al modelo $t - J$ a partir del modelo de tres bandas fueron Zhang y Rice [148], quienes señalaron que como consecuencia de la hibridización, un hueco situado en uno de los cuadrados definidos por los oxígenos se liga al hueco del Cu^{+2} central para formar un singlete. Luego, el singlete puede propagarse por la red de los iones Cu^{+2} , dado que el hueco de los oxígenos puede formar un nuevo singlete con el Cu^{+2} de una de las celdas vecinas. De esta manera, el singlete adquiere energía cinética en un manera similar a la de un hueco en un hamiltoniano efectivo de una banda. Para derivar el hamiltoniano efectivo de una banda, Zhang y Rice utilizaron una representación de funciones orbitales de Wannier de la forma

$$\begin{aligned}\phi_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\mathbf{k}} P_{\mathbf{k}\sigma} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i), \\ P_{\mathbf{k}\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_S}} \beta_{\mathbf{k}} \sum_i P_{i\sigma}^{(S)} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i),\end{aligned}\quad (3.2)$$

siendo N_S el número de cuadrados, mientras que

$$P_{i\sigma}^{(S)} = \frac{1}{2} \sum_{l_i=1}^4 p_{l_i\sigma}, \quad (3.3)$$

es la combinación simétrica de estados de cuatro oxígenos que forman el cuadrado en torno al i -ésimo ión de cobre y el factor de normalización es

$$\beta_{\mathbf{k}} = [1 - \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y)]^{-1/2}. \quad (3.4)$$

A partir de un tratamiento perturbativo sobre el hamiltoniano (3.1), con $U_p = U_{pd} = 0$, estos autores derivaron el famoso modelo $t - J$

$$H = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} (1 - n_{i,-\sigma}) d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3.5)$$

donde t_{ij} puede despreciarse para $ij \neq \langle ij \rangle$, con $\langle ij \rangle$ denotando pares de vecinos cercanos, \mathbf{S}_i son operadores de espín 1/2 de huecos de cobre. El término cinético describe el proceso de creación de un hueco en el sitio i del cobre asociado con la destrucción de un singlete en ese sitio, mientras que el término de interacción antiferromagnético conectado por J es un término de superintercambio. La correlación antiferromagnética descrita por este término es consistente con las evidencias experimentales del La_2CuO_4 no dopado [139], [131]. Estudios más detallados muestran que los singletes de Zhang y Rice son suficientemente estables para parámetros realistas [36], [37], [132], [3]. Sin embargo, también se ha argumentado que el espín del oxígeno constituye otro grado de libertad relevante [35], de manera que la reducción a una descripción en términos de una banda es incorrecta. Tal discusión persiste hasta el presente [116], aunque diferentes tratamientos más cuidadosos del modelo de tres bandas [3] [127], [128] y aún tomando en cuenta los orbitales de los oxígenos apicales [40], convergen a una descripción en términos de modelos efectivos de tipo $t - J$ (incluyendo eventualmente términos adicionales). De esta manera, se acumula cada vez

más evidencia a favor de una descripción efectiva en términos de un modelo de una banda.

El modelo que se estudia en este trabajo de tesis fue derivado en forma independiente en [126] y [127] a partir del modelo de tres bandas. El hamiltoniano (3.1) se escribe en la base de estados de Wannier centrados en los cobres (3.2), despreciando, al igual que en el caso de Zhang y Rice, los términos de “hopping” que involucran distancias superiores a la de sitios primeros vecinos. Luego se diagonaliza en forma exacta un solo sitio de cobre y se desprecian las proyecciones fuera del subespacio de más baja energía. Este subespacio está generado por estados que pueden mapearse a los cuatro estados posibles de un sitio en un modelo de una banda ($|i0\rangle, |i\uparrow\rangle, |i\downarrow\rangle, |i\uparrow\downarrow\rangle$) resultando el hamiltoniano efectivo

$$\begin{aligned}
H = & U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}) \{ t_{AA} (1 - n_{i-\sigma}) (1 - n_{j-\sigma}) \\
& + t_{AB} [n_{i-\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) + n_{j-\sigma} (1 - n_{i-\sigma})] + t_{BB} n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \} \\
& + \sum_{(ij)} n_{i\sigma} n_{j\sigma} \{ V_{AA} (1 - n_{i-\sigma}) (1 - n_{j-\sigma}) + 4V_{BB} n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \\
& + 2V_{AB} [(1 - n_{i-\sigma}) n_{j-\sigma} + n_{i-\sigma} (1 - n_{j-\sigma})] \}, \tag{3.6}
\end{aligned}$$

el cual se reduce al hamiltoniano de Hubbard usual para $t_{AA} = t_{AB} = t_{BB}$, con $V_{AA} = V_{AB} = V_{BB} = 0$ y al de Hubbard extendido para $t_{AA} = t_{AB} = t_{BB}$, con $V_{AA} = V_{AB} = V_{BB} \neq 0$. A diferencia de los modelos de Hubbard y de Hubbard extendido, los términos de “hopping” y de repulsión coulombiana a primeros vecinos en (3.6), adoptan distintos valores, dependiendo de cual sea la ocupación de los sitios involucrados en el proceso correspondiente. Los parámetros de (3.6) están relacionados con todos los parámetros del modelo original (3.1) [127], [128], [76], [16]. Para valores “realistas” [71], [126] $\Delta \sim 3cV, U_d \sim 9.6cV, U_p \sim 4.5cV, U_{pd} \sim 1.2cV, t_{pd} \sim 1.2cV, t_{pp} \sim 0.6eV$, se obtiene $t_{AA} \sim 0.30cV, t_{AB} \sim 0.38cV, t_{BB} \sim 0.37cV, U = 2.8eV, V_{AA} = 0.11cV, V_{AB} = 0.16cV, V_{BB} = 0.17eV$. Las diferencias relativas entre los distintos parámetros de “hopping” no excede el 20%; lo mismo puede decirse respecto de los parámetros de repulsión coulombiana a primeros vecinos. Por otro lado, despreciando los términos de repulsión a primeros vecinos, el valor de la repulsión coulombiana local es lo suficientemente grande como para justificar una posterior reducción del hamiltoniano efectivo (3.6) a un hamiltoniano de tipo $t - J$, siguiendo el procedimiento expuesto en el capítulo 1. En general, puede obtenerse una reducción al modelo $t - J$ con términos adicionales [3]. En este capítulo se considerará $V_{AA} = V_{AB} = V_{BB} = 0$. El efecto de la repulsión coulombiana a primeros vecinos se estudiará en el próximo capítulo.

El modelo descrito por (3.6) tiene una segunda conexión con la superconductividad de alta temperatura crítica ya que en el caso particular en que $t_{AA} + t_{BB} - 2t_{AB} = 0$ (3.6) se reduce al hamiltoniano propuesto por Hirsch en su teoría de la superconductividad de huecos [61], [62]. Esta última posee un enfoque diferente a la de Zhang y Rice, sugiriendo un mecanismo de apareamiento no magnético, partiendo de una descripción centrada en los oxígenos del plano. Los cobres no juegan ningún rol fundamental en esta teoría, sustentada esencialmente en el efecto producido por los huecos agregados por dopaje en las configuraciones electrónicas de los iones O^{2-} . Este punto de vista contiene la ventaja de incluir en sus fundamentos la asimetría observada cuando se dopa con electrones o con huecos [59], a la vez que provee una descripción unificada para los superconductores que contienen cobre y para el $Ba_{1-x}K_xBiO_3$. Sin embargo también posee el inconveniente de no proveer una descripción para el caso del $Nd_{2-x}C_xCuO_4$ que superconduce por dopaje con electrones. Con el tiempo, se

ha ido acordando que el mecanismo en el caso del $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ tiene una naturaleza diferente a la de los cupratos y la teoría de Hirsch ha ido perdiendo popularidad, pero vale la pena mencionar algunos aspectos de la derivación del hamiltoniano propuesto por Hirsch, ya que la estructura del mismo puede tener interés en la modelación de otro tipo de sistemas electrónicos altamente correlacionados como es el caso de algunas moléculas [63], [134], [81], [12], [47], y probablemente el de los compuestos orgánicos. Dicha derivación puede efectuarse llevando a cabo un tratamiento idéntico al realizado por Hubbard en la derivación de su famoso modelo [69], el cual ha sido previamente descrito en el capítulo 1 de este trabajo de tesis. La estimación de los elementos de matriz del término de interacción realizada por Hubbard para el caso de los metales de transición justifican despreciar todos los términos de interacción excepto el de repulsión coulombiana local U , sin embargo para el caso del benceno se estima $U = 17eV, V = 9eV, \Delta t = 3.3eV, X = 0.9eV$ [81], [12], [47] en vez de los valores mencionados en el capítulo 1 para el caso de los metales de transición. Hirsch despreció la contribución del término de X , pero retuvo los otros tres, resultando el siguiente hamiltoniano

$$\begin{aligned}
H = & -t \sum_{(ij)\sigma} (c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}) + \Delta t (c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma})(n_{i-\sigma} + n_{j-\sigma}) \\
& + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{(ij)} n_i n_j.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Los términos de interacción escritos en el segundo renglón describen procesos de repulsión coulombiana en un mismo sitio y entre dos sitios vecinos, mientras que el término de Δt , denominado término de *interacción carga-enlace*, puede interpretarse como un término cinético en el cual el parámetro de “hopping” efectivo está determinado por la ocupación de los dos sitios involucrados en este proceso. En la próxima sección se dará un análisis detallado de todas las propiedades de simetrías de este hamiltoniano así como (3.6), pero por el momento vale la pena hacer notar que el término con Δt no es simétrico frente a una transformación partícula - hueco. Esta falta de simetría también se pone de manifiesto notando que el signo del término de Δt depende de las fases de la función de onda. En el fondo de la banda ($k = 0$) la interacción es repulsiva, mientras que en el techo de la banda ($k = \pi$) la interacción es atractiva (en secciones posteriores se hará un análisis más detallado sobre la incidencia de este aspecto en la superconductividad). Como consecuencia, el término con Δt constituye una repulsión para electrones, mientras que una atracción para huecos la cual fue propuesta por Hirsch [61] como mecanismo de apareamiento en los cupratos.

Es inmediato mostrar que (3.7) con $V = V_{AA} = V_{BB} = V_{AB}$ constituye un caso particular de (3.6), ya que este último puede escribirse como

$$\begin{aligned}
H = & - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}) \{t_1 + t_2(n_{i-\sigma} + n_{j-\sigma}) + t_3 n_{i-\sigma} n_{j-\sigma}\} \\
& + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j
\end{aligned} \tag{3.8}$$

donde

$$t_1 = t_{AA}, \quad t_2 = t_{AB} - t_{AA}, \quad t_3 = t_{AA} + t_{BB} - 2t_{AB}, \tag{3.9}$$

haciendo las identificaciones $t_1 \rightarrow t$, $t_2 \rightarrow \Delta t$ de (3.7), y eligiendo los parámetros de “hopping” de manera que $t_3 = 0$. En la sección 3.3. se analizan las posibles fases de (3.6) en su versión unidimensional para $V_{AA} = V_{BB} = V_{AB} = 0$, sobre la base de

estudios numéricos en sistemas finitos [8], empleando la teoría de líquidos de Luttinger dada en el capítulo anterior.

El caso particular de $t = -\Delta t$ en (3.7) fue analizado por Strack y Vollhardt [134]. En [134] encontraron que el estado fundamental en banda semillena (igual número de sitios que de partículas) en dos regiones: (a) Para $U - (4t + V)z \geq 0$, siendo z el número de coordinación y L el número de sitios de la red, corresponde a un aislador paramagnético con una partícula localizada con espín arbitrario en cada sitio. (b) Para $U + (4t - V)z \leq 0$ en redes bipartitas, corresponde a una onda de densidad de carga en la que todos los sitios de una subred están ocupados por un par de partículas de espines opuestos y todos los de la otra están vacíos. En [2] hemos delimitado con mayor precisión estas regiones, extendiendo resultados obtenidos por Ovchinnikov [111]. (En el próximo capítulo se presentarán los resultados en detalle). En la sección 3.4 se analiza el límite estudiado por Strack y Vollhardt para $V = 0$ en una dimensión y se muestra la solución analítica exacta que hallamos [9] para todo el rango de densidades de partículas y de valores del parámetro U . Esta solución exacta es igualmente válida para $t = +\Delta t$ y es fácil ver a partir de la traducción (3.9) que corresponde a considerar $t_{AA} = \pm t_{BB}, t_{AB} = 0$. Es interesante notar que en el modelo de Hubbard usual (para el cual los tres parámetros de hopping tienen el mismo valor), el parámetro t_{AB} es el que induce las correlaciones antiferromagnéticas. En particular, para U grande, el modelo toma una forma similar a la de (3.5), con $J = t_{AB}^2/U$. Este aspecto se analizará con más detalle más adelante, pero vale la pena remarcar que el orden antiferromagnético en el modelo de Hubbard usual es el responsable de la existencia de un “gap” de carga (y por lo tanto de la naturaleza aisladora) a banda semillena para valores de positivos U *arbitrariamente pequeños*. La transición metal-aislante pura (transición de Mott [105]) en el modelo de Hubbard, para valores de $U > 0$ finitos, enmascarada por las correlaciones antiferromagnéticas, ha sido motivo de numerosos análisis. En particular, esta transición ha sido informada en estudios realizados sobre el modelo de Hubbard en condiciones inhibitorias de este tipo de correlaciones, como por ejemplo en el caso de redes no bipartitas [85]. También es observada cuando se impone un carácter paramagnético a un estado fundamental aproximado, como en el caso de la transición de Brinkman-Rice en la aproximación de Gutzwiller, mencionada en el capítulo 1 o en el de soluciones paramagnéticas de bosones esclavos [84], así como en el límite de número de coordinación infinito [118]. El límite exactamente soluble que se estudia en la sección 3.4 corresponde a inhibir las correlaciones antiferromagnéticas a partir de anular explícitamente el término de t_{AB} . A pesar de que la solución exacta [9] es válida sólo en 1D y de que este límite exhibe ciertas patologías que se analizarán posteriormente, puede concluirse sobre la existencia de una transición de Mott para $D > 1$. Esto último se corrobora con estudios numéricos realizados sobre sistemas bidimensionales [45] que se muestran en la sección 3.4 y con los resultados analíticos que se expondrán en el próximo capítulo. Otro punto de interés es el comportamiento del modelo cuando se conecta el término de t_{AB} , en particular, la evolución del magnetismo hacia el límite Hubbard puro que se analizará en el próximo capítulo.

Resumiendo, este capítulo está dedicado al estudio del hamiltoniano (3.6) con $V_{AA} = V_{BB} = V_{AB} = 0$ o su equivalente (3.8) con $V = 0$. En la sección 3.2 se detallan las propiedades de simetría que hemos tenido en cuenta para el estudio numérico en 1D [8] que se detalla en la sección 3.3 y en la solución analítica exacta [9] para $t_{AB} = 0$ que se detalla en la sección 3.4. En la sección 3.4 se analiza la transición de Mott para el límite $t_{AB} = 0$. Finalmente, la sección 3.5 contiene un resumen y discusión

del capítulo.

3.2 Propiedades de Simetría del Modelo.

En lo que sigue, se considerará el hamiltoniano escrito en las dos maneras equivalentes dadas en (3.6) y (3.8), con las traducciones (3.9), adoptando una u otra según resulte conveniente. La notación (3.6) pone énfasis en los distintos pesos que tiene los procesos de transferencia de partículas que se esquematizan a continuación:

$$\begin{array}{cccc}
 j & i & & j & i \\
 \uparrow & \circ & \xrightarrow{t_{AA}} & \circ & \uparrow \\
 \uparrow & \uparrow\uparrow & \xrightarrow{t_{BB}} & \uparrow\uparrow & \uparrow \\
 \uparrow\uparrow & \circ & \xrightarrow{t_{AB}} & \uparrow & \uparrow \\
 \uparrow & \downarrow & \xrightarrow{t_{AB}} & \circ & \uparrow\uparrow
 \end{array}
 \tag{3.10}$$

donde se indican las modificaciones en la configuración de dos sitios vecinos debido al “hopping”. $\sigma = \uparrow, \downarrow$ indica la ocupación del sitio por una partícula con espín σ , mientras que \circ ($\uparrow\uparrow$) indica que el sitio está vacío (doblemente ocupado) respectivamente. Como puede apreciarse, el proceso de t_{AA} corresponde a intercambiar las posiciones de una partícula y de un hueco situados en sitios vecinos, mientras que el de t_{BB} corresponde a hacer lo propio con una partícula y un par local formado por partículas de espines opuestos. El proceso de t_{AB} , en cambio corresponde a la destrucción de un par de partículas con distinto espín ubicadas en sitios vecinos para luego crear un hueco y un par local. En todos los casos, también existe el proceso inverso al indicado en (3.10), que corresponde al término hermítico conjugado. Esta lectura del hamiltoniano es transparente al rol que juegan los diferentes procesos, y por lo tanto resulta particularmente útil para el estudio que se hace en las secciones 3.4 y 3.5.

Por otro lado, la notación utilizada en (3.8) pone de manifiesto que el hamiltoniano con “hopping” correlacionado contiene en general términos de un cuerpo (t_1), de dos cuerpos (t_2) y de tres cuerpos (t_3). Esta forma del hamiltoniano resulta útil para estudiar los efectos del término de t_2 (equivalente al Δt de (3.7)) respecto del límite Hubbard y particularmente las propiedades superconductoras del modelo propuesto por Hirsch. Nótese que un desacoplamiento pedestre de campo medio, que corresponde a reemplazar $n_{i\sigma}n_{j\sigma} \rightarrow \langle n_{i\sigma} \rangle n_{j\sigma} + \langle n_{j\sigma} \rangle n_{i\sigma}$ en el término de t_3 , conduce a una renormalización del término de t_2 .

Las propiedades de simetría [8] se analizan a continuación.

3.2.1 Transformaciones Partícula-hueco.

La transformación partícula-hueco definida por

$$\tilde{c}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger,
 \tag{3.11}$$

donde \sim denota las cantidades transformadas, intercambia t_{AA} con t_{BB} , a la vez que cambia el signo de los tres parámetros de “hopping”. El cambio de signo simultáneo de todos los parámetros de “hopping”

$$\tilde{c}_{i\sigma} = (-1)^i c_{i\sigma}
 \tag{3.12}$$

es una simetría del modelo en el caso en que esté definido sobre una red bipartita, como es el caso de la red unidimensional. La transformación combinada

$$\tilde{c}_{i\sigma} = (-1)^i c_{i\sigma}^\dagger \quad (3.13)$$

equivale a realizar las siguientes transformaciones en los parámetros:

$$\tilde{t}_{AA} = t_{BB}, \quad \tilde{t}_{BB} = t_{AA}, \quad (3.14)$$

o en la notación de (3.8):

$$\tilde{t}_1 = t_1 + 2t_2 + t_3, \quad \tilde{t}_2 = -t_2 - t_3, \quad \tilde{t}_3 = t_3, \quad (3.15)$$

mientras que el término de U permanece invariante a menos de la constante $U(L-N)$, siendo L el número de sitios y N el número de partículas. En (3.15) se pone de manifiesto el argumento que inspiró a Hirsch en su teoría: si se considera $t_3 = 0$, como resulta de la derivación de (3.7), es evidente que el término de $t_2 > 0$ en una descripción para los electrones, resulta negativo para los huecos.

También puede verse que si $t_2 \neq 0$ y $t_3 \neq 0$ puede definirse la transformación

$$\tilde{c}_{i\sigma} = (1 - 2n_{i-\sigma}) c_{i\sigma}, \quad (3.16)$$

la cual equivale a cambiar las fases $c_{i1}^\dagger c_{i1}^\dagger | 0 \rangle$ en un factor -1 . El efecto de esta transformación sobre los parámetros es

$$\tilde{t}_{AB} = -t_{AB}, \quad (3.17)$$

dejando invariante los demás, o en la notación de (3.8),

$$\tilde{t}_2 = t_2 - 2(t_1 + t_2), \quad \tilde{t}_3 = t_3 + 4(t_1 + t_2) \quad (3.18)$$

Es fácil ver, a partir de las leyes de transformación de los parámetros dadas por (3.14, 3.15) y (3.17, 3.18), que el modelo es invariante frente a la transformación (3.11) combinada adecuadamente con (3.12) y (3.16) sólo en el caso en que $t_{AA} = \pm t_{BB}$, con t_{AB} arbitrario. En particular, tanto el límite Hubbard puro $t_{AA} = t_{AB} = t_{BB}$ (equivalente a $t_2 = t_3 = 0$), como en el límite exactamente soluble $t_{AA} = \pm, -t_{BB}$ (equivalente a $t_2 = -t_1, t_3 = 2, 0t_1$ respectivamente) que se analizará en la sección 3.4, son simétricos frente a una transformación partícula-hueco.

3.2.2 Simetrías Continuas del Modelo.

Es fácil comprobar que el hamiltoniano es invariante frente a una rotación en el espacio de espín así como frente a una transformación de $U(1)$ correspondiente a un cambio de fase global de $c_{i\sigma}$.

En adición a la simetría $SU(2)$ asociada al spin total, existe otra transformación del grupo $SU(2)$ de pseudoespín [9], [8], [45], cuya álgebra de Lie está generada por

$$\eta^- = \sum_i (-1)^{\alpha_i} c_{i1}^\dagger c_{i1}^\dagger, \quad \eta^+ = (\eta^-)^\dagger, \quad \eta^z = \frac{1}{2} \sum_i (1 - n_i). \quad (3.19)$$

El parámetro α puede definirse como $\alpha = 0$ o $\alpha = 1$. Puede comprobarse que (3.6) exhibe esta simetría $SU(2)$ en dos casos:

- a. $t_{AB} = 0, t_{AA} = -t_{BB}$ con $\alpha = 0$.
- b. $t_{AA} = t_{BB}, t_{AB}$ arbitrario, con $\alpha = 1$.

Este último caso incluye al modelo de Hubbard, en cuyo caso la simetría $SU(2)$ ha sido previamente informada en la literatura [149]. También en el caso b., la transformación de Shiba [120]

$$\begin{aligned}\tilde{c}_{i\uparrow}^\dagger &= (-1)^i c_{i\uparrow} \\ \tilde{c}_{i\downarrow}^\dagger &= c_{i\downarrow}^\dagger,\end{aligned}\tag{3.20}$$

que deja invariante el término cinético del hamiltoniano a la vez que transforma $U \rightarrow -U$, intercambia los generadores (3.19) con los generadores

$$S^- = \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}, \quad S^+ = (S^-)^\dagger, \quad S^z = \frac{1}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}),\tag{3.21}$$

del álgebra del espín total ordinario.

3.2.3 Conservación de N_d .

En la representación esquemática dada en (3.10) puede verse que solamente el proceso de t_{AB} modifica el número de sitios doblemente ocupados

$$N_d = \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.\tag{3.22}$$

Es fácil ver que esta cantidad conmuta con el hamiltoniano cuando $t_{AB} = 0$, de manera sus autovalores son buenos números cuánticos en este caso.

3.3 Estudio Numérico del Modelo en 1D.

Los resultados que se exponen en esta sección [8] están basados en cálculos de diagonalización numérica con la técnica de Lanczos descrita en el capítulo anterior en cadenas con L sitios, con L variando entre 8 y 12. Este estudio está principalmente orientado a estudiar las propiedades superconductoras en la versión unidimensional del modelo.

Para este fin se han desarrollado diferentes estrategias. El valor de la energía de ligadura de un par de partículas (electrones o huecos, según corresponda) definida por

$$E_B = (E(N+2) - E(N+1)) - (E(N+1) - E(N)) = E(N+2) + E(N) - 2E(N+1),\tag{3.23}$$

donde $E(M)$ indica la energía del estado fundamental del sistema de M partículas puede tomarse como criterio para localizar las regiones de parámetros favorables a la superconductividad, ya que un valor negativo de la misma constituye una indicación de que la formación de pares es favorable energéticamente, aunque esto no implica necesariamente la existencia de una fase superconductora. Como se mencionó en el capítulo anterior, los resultados para la energía en el sistema finito, tienen generalmente sentido en la medida en que se utilice algún criterio para extraer información del sistema en el límite termodinámico. En este caso, se utilizó la metodología de

extrapolación basada en la modificación de las condiciones de contorno que se detalló en el capítulo anterior, realizándose verificaciones con el criterio de extrapolación utilizada en [41].

Otra forma de estudiar la propensión al apareamiento de partículas es analizar la dependencia de la energía del estado fundamental como función de un flujo magnético externo $E(\Phi)$. Considerando una geometría anular para el sistema de L sitios, un flujo magnético Φ a través del área confinada por el anillo corresponde a la aplicación de un potencial vector constante de magnitud $A = (\hbar c/e)\Phi/L$ a lo largo de la circunferencia. El efecto de A se incorpora mediante una transformación de calibre [82] (tomando $\hbar c/e = 1$), $c_{m\sigma} \rightarrow c_{m\sigma} \exp(iR_m\Phi/L)$, donde $R_m = ma$ denota la posición del m -ésimo sitio de la red y se considera el valor $a = 1$ para la constante de red; Φ se mide en unidades de 2π . Como se discutió en el apéndice D del capítulo anterior, desde el punto de vista operativo, esta transformación de calibre puede asimilarse en las condiciones de contorno del anillo. A partir del comportamiento de $E(\Phi)$ puede obtenerse información respecto de la cuantización del flujo y del eventual apareamiento de partículas: En un anillo unidimensional normal, la energía es una función periódica par del Φ con un período $\Phi_0 = hc/e$, de manera que si el flujo Φ se mide en unidades del cuanto de flujo Φ_0 , se tiene $E(\Phi) = E(\Phi + n)$; $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Por lo tanto, en una fase metálica normal, se encuentran fases estables para valores particulares del flujo, $\Phi = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, que corresponden a los mínimos de $E(\Phi)$ y que equivalen a la cuantización del flujo en unidades de hc/e [23], [145], [82]. En un estado superconductor, se tiene $E(\Phi) = E(\Phi + n/2)$, de manera que aparecen nuevos estados estables para $\Phi = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$ en adición a los del estado metálico normal, correspondiendo a una cuantización del flujo en unidades de $\Phi_0/2 = hc/2e$ a la cual se hace referencia en la literatura con el nombre de cuantización anómala [23], [145]. Este último análisis, referido al estado superconductor, es válido para el caso de un anillo de ancho mayor que la longitud de penetración λ del campo magnético, en cuyo interior el efecto Meisner es perfecto [23], [145], o en el caso de un anillo unidimensional con correlaciones superconductoras de largo alcance en el límite termodinámico [147]. Como se discutió en el capítulo anterior, en un sistema metálico estrictamente unidimensional sin "gap", las correlaciones tienen un comportamiento algebraico (decaen según leyes de potencias) y el orden de largo alcance resulta inhibido por las fluctuaciones cuánticas. En cadenas de pequeña longitud, como las que se estudiarán en la próxima sección, puede esperarse que si existen correlaciones superconductoras dominantes, éstas decaigan a valores despreciables para distancias que superen la longitud de la cadena. En este caso, la modificación de las condiciones de contorno por efecto de un flujo magnético externo puede dar lugar a la observación de una tendencia hacia la cuantización anómala [147]. Tanto en el estudio de E_B como de $E(\Phi)$, podría llegar a observarse una tendencia hacia el apareamiento en el caso de una segregación de fases, que corresponde a una separación del sistema en una fase rica en partículas y otra rica en sitios vacíos. Semejante fase es aisladora y se caracteriza por $\partial^2 E(N)/\partial N^2 < 0$, siendo N el número de partículas. Se han realizado, por lo tanto, cálculos de compresibilidad para examinar esta inestabilidad.

Finalmente, empleando la metodología descrita en el capítulo anterior, se han delimitado las regiones de parámetros donde el modelo exhibe un comportamiento de líquido de Tomonaga-Luttinger o de Luther-Emery. Como se mostró detalladamente en el capítulo anterior, dentro de estos regímenes, el exponente de las funciones de correlación depende del parámetro K_ρ , y el valor del mismo puede obtenerse a partir de cálculos de energía (ver (2.65) a (2.72)). Un valor $K_\rho > 1$ es una indicación de que

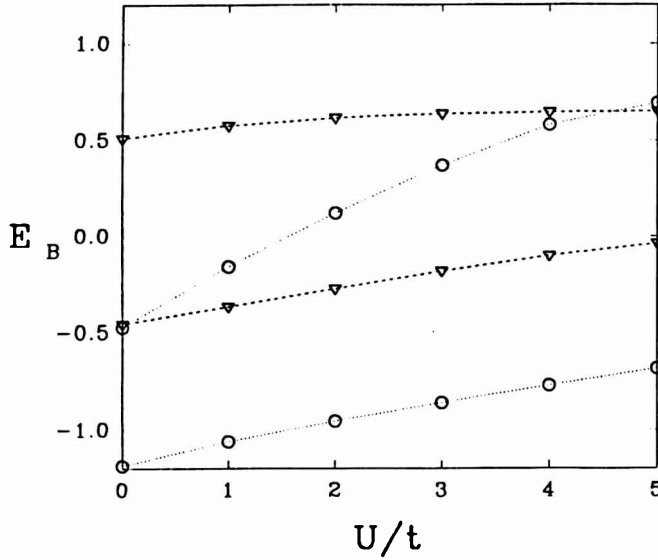


Figura 3.4: Cotas inferiores y superiores para la energía de ligadura E_B como función de U para $L = 12$ sitios y $N = 8$ partículas. ∇ : $t_1 = 1, t_2 = t_3 = 0$ (modelo de Hubbard). o : $t_1 = t_2 = 1, t_3 = 0$.

dominan las correlaciones superconductoras, mientras que $K_\rho < 1$ indica un régimen dominado por las correlaciones de carga y/o espín (ver expresiones (2.56)).

3.3.1 Resultados para $t_3 = 0$.

En este caso, el apartamiento respecto del límite Hubbard puro está dado por el término de t_2 en (3.8), y el hamiltoniano tiene la forma del propuesto por Hirsch (3.7). El efecto del término de t_2 es más transparente cuando se escribe el hamiltoniano en el espacio de Fourier. En dimensión D resulta

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{kk'q} V_{kk'q} c_{k+q}^\dagger c_{k'-q}^\dagger c_{k'} c_k \quad (3.24)$$

con

$$\begin{aligned} \epsilon_k &= -2t_1 \sum_{i=1}^D \cos k_i a \\ V_{kk'q} &= \frac{1}{N} \left[U + \frac{t_2}{t_1} (\epsilon_k + \epsilon'_k + \epsilon_{k+q} + \epsilon_{k'-q}) \right], \end{aligned} \quad (3.25)$$

donde se muestra explícitamente que la interacción es atractiva para valores de U inferiores a algún valor crítico U_c , (a) para valores de $t_1 t_2 > 0$ con densidades de partículas $n = N/L < 1$ y (b) para $t_1 t_2 < 0$ con $n > 1$. La descripción de Hirsch para los huecos agregados por dopaje en los oxígenos corresponde al caso (a). También puede observarse que (3.24) contiene una contribución de la forma $1/N \sum_{kk'} V_{kk'} c_{k_1}^\dagger c_{-k_1}^\dagger c_{-k'} c_{k'}$, que corresponde a una interacción de pares de Cooper y que por lo tanto admite un tratamiento similar al de la teoría BCS [61].

En la Fig. 3.4 se muestra el comportamiento de la energía de ligadura definida en (3.23) como función de U , correspondiente a una cadena de $L = 12$ sitios con

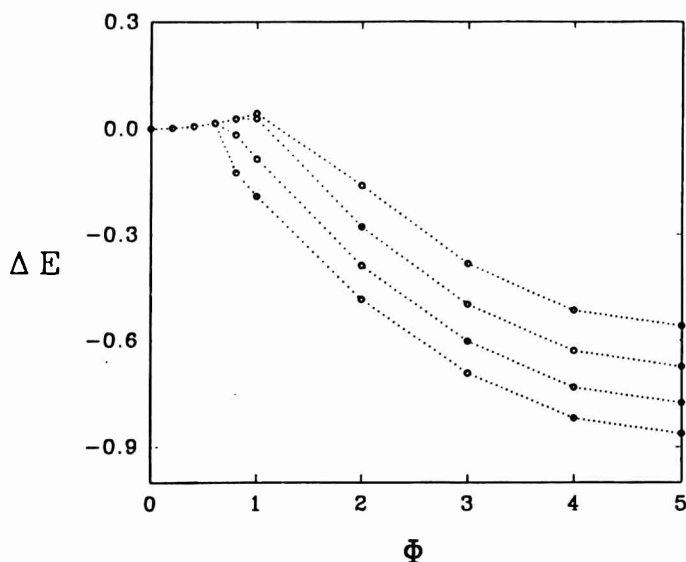


Figura 3.5: Energía $\Delta E = E(\Phi) - E(0)$ en función del flujo magnético $\Phi/2\pi$, medida respecto de la energía del estado fundamental con corriente nula $E(0)$, para un anillo de $L = 10$ sitios y $N = 8$ partículas, con $t_2 = t_1 = 1, t_3 = 0$ y $U = 0$ (menor ΔE) a $U = 3$ (mayor ΔE).

$N = 8$ partículas ($n = 2/3$) para $t_2 = t_1$ y se compara con el límite Hubbard puro ($t_2 = 0$). Como se mencionó al comienzo de esta sección, se han realizado estimaciones utilizando diferentes condiciones de contorno para poder extraer conclusiones respecto del valor de E_B lo menos distorsionadas posible por efectos del tamaño finito del sistema estudiado. De acuerdo con lo discutido en el capítulo anterior, deben tomarse condiciones de contorno correspondientes a configuraciones de capa cerrada en las cadenas con un número par de partículas para obtener una cota inferior del valor de la energía en el límite termodinámico, y de capa cerrada para obtener una cota superior. En el caso de las cadenas con un número impar de partículas, no es obvio que criterio adoptar, de manera que se han realizado cálculos con condiciones de contorno periódicas y antiperiódicas y se ha elegido en cada caso la que posee una energía menor. En la figura se muestran las cotas inferiores y superiores correspondientes a E_B en cada caso y puede observarse que mientras que en el modelo de Hubbard el valor medio entre ambas cotas es aproximadamente nulo, en el caso del modelo estudiado existe un región de valores de U para los cuales el valor medio de E_B es negativo.

En forma consistente con este resultado, también se observa para $t_2 = t_1$ y $n < 1$ que el comportamiento de la energía como función de un flujo magnético externo presenta una estructura que sugiere una tendencia hacia la cuantización anómala del flujo. En la Fig. 3.5 se muestran resultados para el caso de un anillo de $L = 10$ sitios con $N = 8$ partículas. No se han encontrado indicaciones de separación de fases en esta región de parámetros. En la Fig. 3.6 puede observarse que la energía como función del número de partículas es siempre cóncava hacia arriba, y por lo tanto la compresibilidad es siempre finita y positiva (ver (2.66) y (2.71)).

En las Figs. 3.7 a 3.9 se muestran los resultados del cálculo de K_ρ como función de U también para el caso $t_1 = t_2 = 1$, con $n = 0.4, 0.5, 0.6$, respectivamente usando las expresiones (2.65) a (2.72) dadas en el capítulo anterior. Como se discutió en

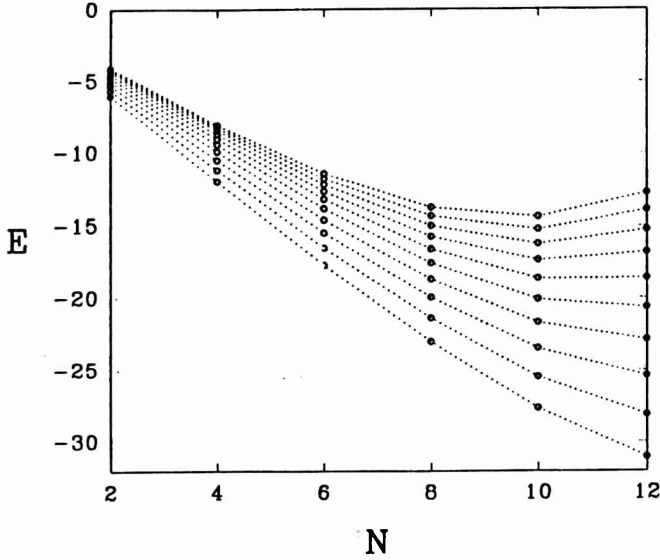


Figura 3.6: Energía en función del número de partículas N para $L = 12$ sitios, con $t_1 = t_2 = 1, t_3 = 0$ y $U = 0$ (menor E) a $U = 9$ (mayor E).

ese capítulo, es posible efectuar tres estimaciones independientes del parámetro K_ρ , posibilitando un análisis de consistencia con una descripción en términos de un líquido de Tomonaga-Luttinger o de Luther-Emery. En cada caso, se indica en la figura las ecuaciones utilizadas para el cálculo y puede verse que son coincidentes dentro de un 10% de error (considerado aceptable). En el caso de $n = 1/2$, que se muestra en la Fig. 3.8, los resultados sugieren que las correlaciones superconductoras son dominantes ($K_\rho > 1$) para valores de $U < U_c$, con $U_c \sim 8t_2$. Los resultados indican que esta región se expande para límites más diluidos (Fig. 3.7), mientras que se estrecha para $n \rightarrow 1$ (Fig. 3.9), obteniéndose un comportamiento *cuantitativo* similar al encontrado en tratamientos en el límite de acoplamiento débil ([73]):

$$U_c = -4t_2 \cos\left(\frac{\pi n}{2}\right) \quad (3.26)$$

También se realizaron cálculos para en caso $L = 10, n = 0.8, t_1 = 1$ y $t_2 = 0.5$, encontrando $U_c \sim 1.6 = 3.2t_2$.

Para definir si el sistema es un líquido de Tomonaga-Luttinger o de Luther-Emery se realizaron cálculos del "gap" de espín definido en (2.60) y de la carga central c definida en (2.63), con las velocidades de carga u_ρ y de espín u_σ dadas en (2.65) y el valor de la de energía en el límite termodinámico calculado a partir de extrapolaciones con la técnica de [41] y a partir de promediar sobre valores de energía en cadenas con condiciones de contorno periódicas y antiperiódicas, obteniéndose un muy buen acuerdo entre ambas estimaciones. En el caso de $n = 1/2$ los resultados que se muestran en la Fig. 3.10 sugieren la existencia de un gap de espín dentro de la fase de $K_\rho > 1$. También el cálculo de la carga central conduce a $c < 1$ para estos valores cuando se realiza un ajuste sobre la base de excitaciones de carga y espín con "gap" nulo. Esta fase corresponde, por lo tanto a un líquido de Luther-Emery con correlaciones dominantes de singletes superconductores.

El caso de banda semillena ($n = 1$) es particularmente interesante. Los resultados de la Fig. 3.11 muestran el comportamiento del "gap" de espín para varios valores de

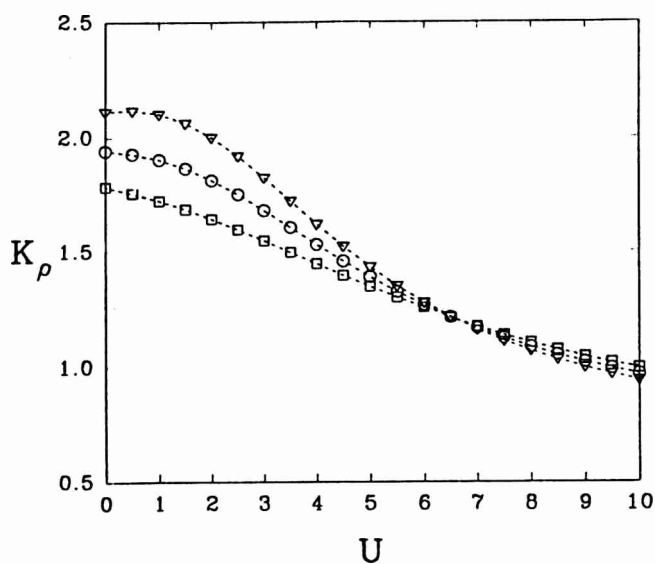


Figura 3.7: Distintas estimaciones del parámetro K_ρ para una cadena de $L = 10$ sitios y una densidad de partículas $n = 0.4$ para $t_1 = t_2 = 1, t_3 = 0$. \circ : Ecs. (2.66), (2.69), (2.71) y (2.72). \square : Ecs. (2.66), (2.71) y (2.65). ∇ : Ecs. (2.69), (2.72) y (2.65).

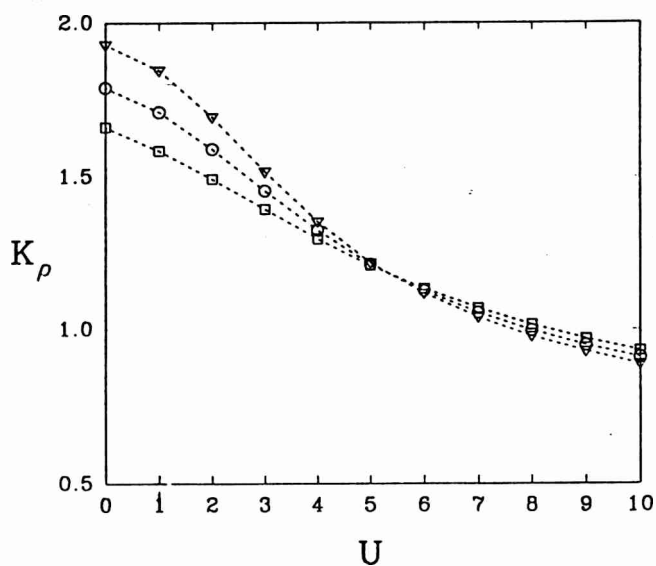


Figura 3.8: Distintas estimaciones del parámetro K_ρ para una cadena de $L = 12$ sitios y una densidad de partículas $n = 0.5$ para $t_1 = t_2 = 1, t_3 = 0$. Los detalles son idénticos a los de la Fig. anterior.

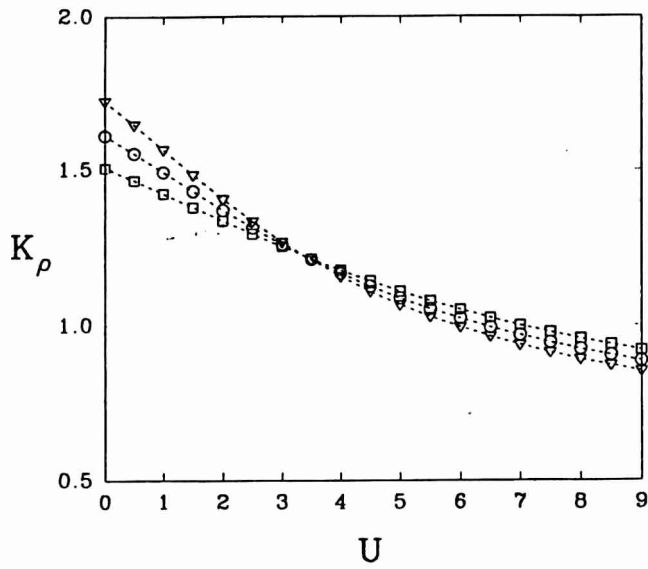


Figura 3.9: Distintas estimaciones del parámetro K_ρ para una cadena de $L = 10$ sitios y una densidad de partículas $n = 0.6$ para $t_1 = t_2 = 1, t_3 = 0$. \circ : Ecs. (2.66), (2.69), (2.71) y (2.72). \square : Ecs. (2.66), (2.71) y (2.65). ∇ : Ecs. (2.69), (2.72) y (2.65).

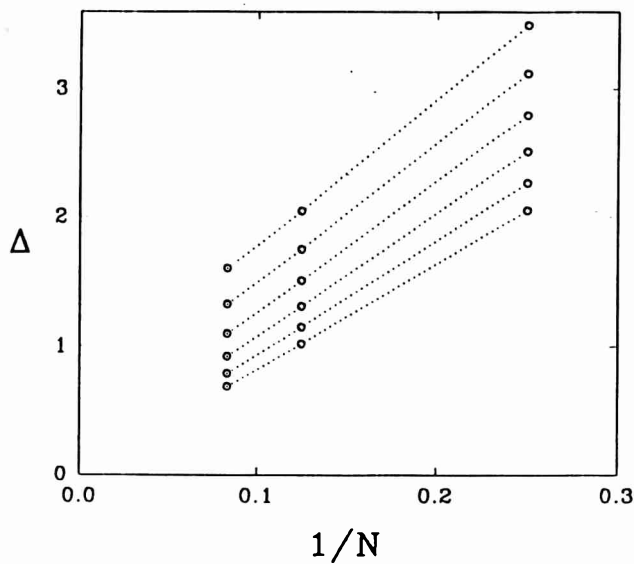


Figura 3.10: "Gap" de espín, como función de la inversa de longitud $1/L$ para $t_1 = t_2 = 1, t_3 = 0$ y densidad $n = 1/2$, y $U = 0$ (mayor valor de Δ) a $U = 5$ (menor valor de Δ).

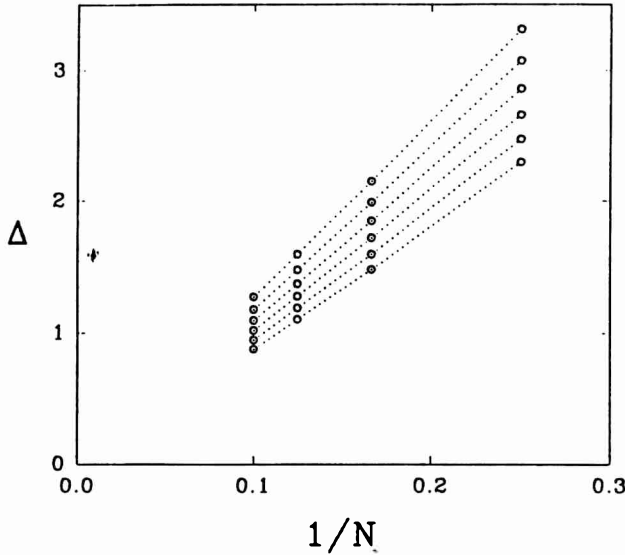


Figura 3.11: “Gap” de espín, como función de la inversa de longitud $1/L$ para $t_1 = t_2 = 1, t_3 = 0$ y densidad $n = 1$, y $U = 0$ (mayor valor de Δ) a $U = 5$ (menor valor de Δ).

U . Las extrapolaciones basadas en la técnica ([41]) conducen a un valor $\Delta \lesssim 0.2$. Los cálculos de la carga central que se muestran en la Fig. 3.12 indican un apartamiento del valor $c = 1$ considerablemente superior al error numérico ($\sim 10\%$ del promedio entre diferentes estimaciones) para valores de $U \gtrsim t_2$, cuando se realiza un ajuste sobre la base de una descripción efectiva en términos de un modelo de Tomonaga-Luttinger (excitaciones de carga y espín sin gap). Comparando este resultado con el correspondiente a $n = 1/2$, puede esperarse una disminución del valor del “gap” de espín a medida que $n \rightarrow 1$. En el caso de banda semillena, los procesos “Umklapp” inducen la formación de un “gap” de carga, de acuerdo con lo discutido en el capítulo anterior. En el caso de este modelo, el “gap” de carga para $n = 1$ se genera debido a las correlaciones antiferromagnéticas (con $J \sim t_{AB}^2/U$), en forma análoga al modelo de Hubbard. La existencia de un régimen metálico ($c = 1$) para valores de U finitos a banda semillena constituye un aspecto novedoso, ya que no se predice a partir de tratamientos en el límite de acoplamiento débil [73] (ver (3.26)). También la interacción efectiva de pares $V_{kk'q}$ se anula para $n = 1$, sin embargo las correcciones de segundo orden son negativas [99].

• Los cálculos de K_ρ que se muestran en la Fig. 3.13 indican que la fase metálica es dominada por correlaciones superconductoras. También puede observarse en esta figura que las diferentes estimaciones de K_ρ difieren numéricamente en cantidades importantes a partir de valores de $U \sim t_2$, en forma consistente con las conclusiones basadas en el comportamiento de c . El mismo comportamiento se observa en la Fig. 3.14, considerando un valor de $t_2 = 2t_1$ para magnificar el efecto. Una transición metal-aislante con estas características, es decir, con la fase metálica dominada por correlaciones superconductoras, no había sido informada previamente en la literatura [8].

De acuerdo con el análisis expuesto en el comienzo de esta sección, para valores negativos de t_2 no se esperan indicios de superconductividad para $n < 1$. Esto es

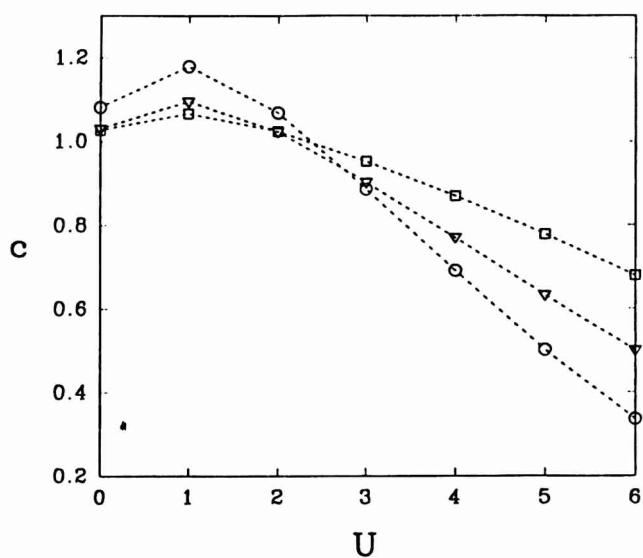


Figura 3.12: Carga central como función de U para cadenas de diferentes longitudes L , con $t_1 = t_2 = 1, t_3 = 0$ y densidad de partículas $n = 1$. □: $L = 10$. ▽: $L = 8$. ○: $L = 6$.

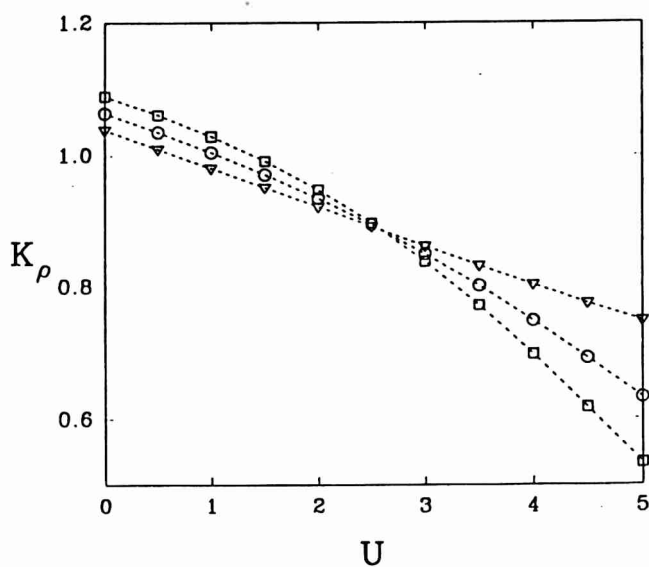


Figura 3.13: Distintas estimaciones del parámetro K_ρ para una cadena de $L = 10$ sitios y una densidad de partículas $n = 1$ para $t_1 = t_2 = 1, t_3 = 0$. ○: Ecs. (2.66), (2.69), (2.71) y (2.72). □: Ecs. (2.66), (2.71) y (2.65). ▽: Ecs. (2.69), (2.72) y (2.65).

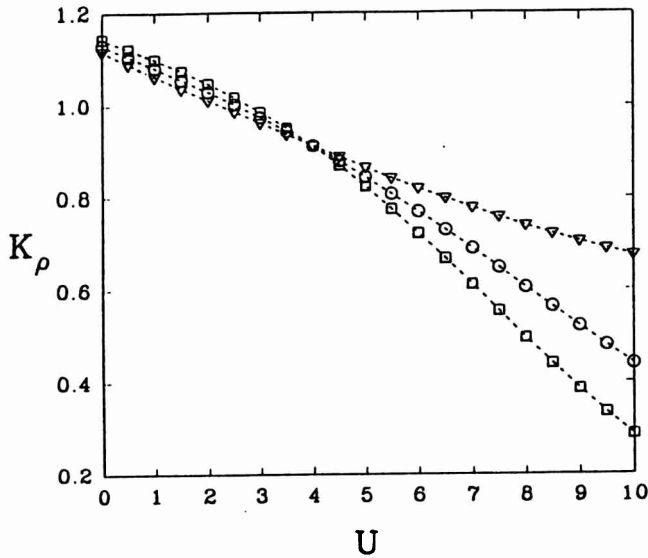


Figura 3.14: Distintas estimaciones del parámetro K_ρ para una cadena de $L = 10$ sitios y una densidad de partículas $n = 1$ para $t_2 = 2t_1, t_3 = 0$. \circ : Ecs. (2.66), (2.69), (2.71) y (2.72). \square : Ecs. (2.66), (2.71) y (2.65). ∇ : Ecs. (2.69), (2.72) y (2.65).

confirmado por los resultados numéricos de la Fig. 3.15. Los parámetros usados $t_1 = 3, t_2 = -1, n < 1$, equivalen (usando la transformación partícula-hueco dada en (3.18)) a $t_1 = t_2 = 1, n > 1$.

3.3.2 El Efecto de t_3 .

En la Fig. 3.16 se muestra la dependencia de K_ρ con U para valores de $t_3 \gg t_2$. Como sugiere el desacoplamiento pedestre de campo medio mencionado al comienzo de esta sección, el efecto de aumentar t_3 en una cantidad δ es aproximadamente equivalente al de aumentar t_2 en un $f\delta$, con $f \sim n/2$. El mismo efecto se observa para valores de parámetros $|t_{AB}| \gg |t_{AA}|, |t_{BB}|$, que corresponde a pequeños valores de t_{pd} en el modelo de tres bandas [127]. Esta situación se analizó tomando valores exagerados de los parámetros $t_{AA} = t_{BB} = 1, t_{AB} = 3$ ($t_1 = 1, t_2 = 2, t_3 = -4$). Los resultados se muestran en la Fig. 3.17, donde se ve que no hay evidencia de correlaciones superconductoras fuertes. Un comportamiento similar, que se muestra en la Fig. 3.18, se observa para una relación de los parámetros similar al caso “realista” [126] [127]. En este caso también se exageró la diferencia $t_{AB} - t_{AA}$, tomando $t_{AA} = 1, t_{BB} = t_{AB} = 2$, sin encontrar indicios a favor de una fase superconductor.

3.4 Límite Exactamente Soluble.

En esta sección se considerará el límite $t_{AB} = |t_{AA}| - |t_{BB}| = 0$ y se describirá la solución exacta [9]. La posibilidad de obtener esta solución en 1D en el caso de una cadena con condiciones de contorno abiertas está enormemente facilitada por la rica estructura de simetría que posee este límite (ver Sección 3.2).

Es conveniente emplear la representación de bosones esclavos, que corresponde a representar los cuatro estados posibles de un sitio i : $|0\rangle, c_{i\sigma}^\dagger|0\rangle, c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger|0\rangle$, por $e_i^\dagger|0\rangle$,

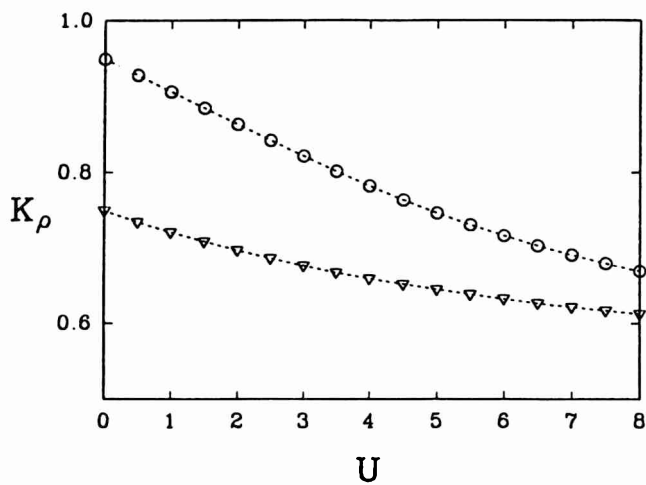


Figura 3.15: Valor promedio entre las diferentes estimaciones del parámetro K_ρ para $t_1 = 3, t_2 = -1, t_3 = 0$ y distintas densidades de partículas n . \circ : $n = 0.8$. ∇ : $n = 0.4$.

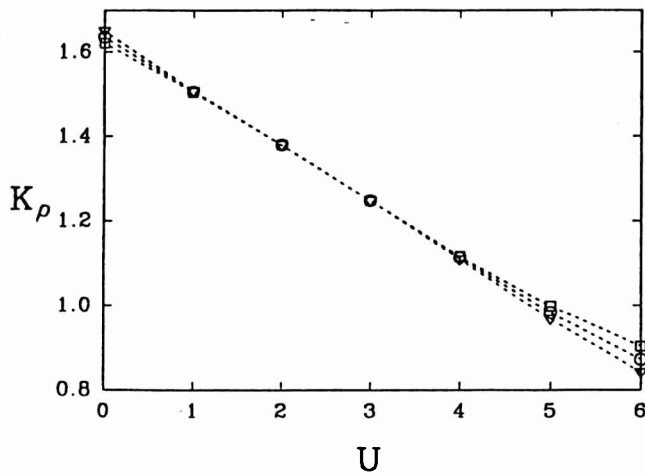


Figura 3.16: Distintas estimaciones del parámetro K_ρ para una cadena de $L = 10$ sitios y una densidad de partículas $n = 0.8$ para $t_1 = 1, t_2 = 0.2, t_3 = 2.8$. \circ : Ecs. (2.66), (2.69), (2.71) y (2.72). \square : Ecs. (2.66), (2.71) y (2.65). ∇ : Ecs. (2.69), (2.72) y (2.65)

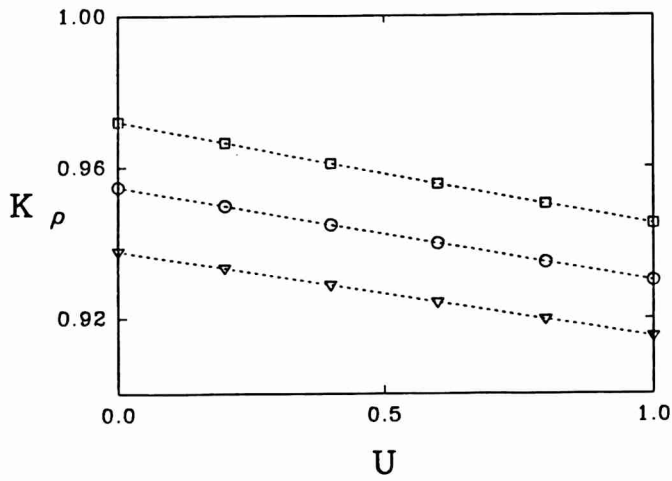


Figura 3.17: Distintas estimaciones del parámetro K_ρ para una cadena de $L = 10$ sitios y una densidad de partículas $n = 0.8$ para $t_1 = 1, t_2 = 2, t_3 = -4$. \circ : Ecs. (2.66), (2.69), (2.71) y (2.72). \square : Ecs. (2.66), (2.71) y (2.65). ∇ : Ecs. (2.69), (2.72) y (2.65).

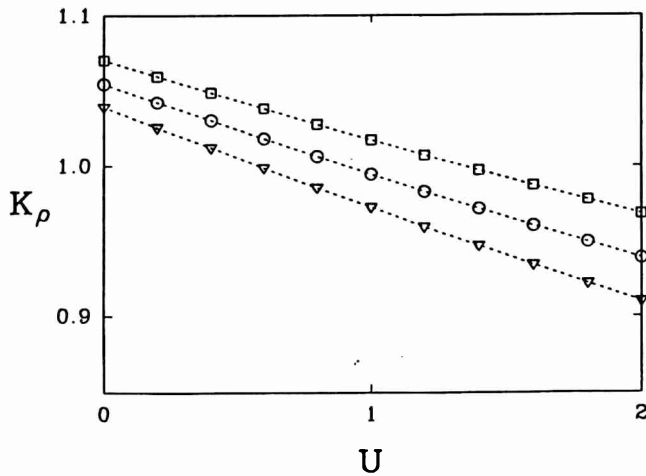


Figura 3.18: Parámetro de los exponentes de las funciones de correlación K_ρ para una cadena de $L = 10$ sitios y una densidad de partículas $n = 0.8$ para $t_1 = 1, t_2 = 1, t_3 = -1$. Los detalles son idénticos a los de la Fig. anterior.

$f_{i\sigma}^\dagger|0\rangle, d_i^\dagger|0\rangle$, para los cuales se adopta la representación pictórica: $\circ, \uparrow, \downarrow, \bullet$ respectivamente. \circ y \bullet son bosones que representan el sitio vacío y doblemente ocupado respectivamente, y serán denominados *holón* y *doblón* respectivamente, mientras que \uparrow y \downarrow denotan la ocupación del sitio por una sola partícula con spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ y debe satisfacerse la siguiente condición de vínculo:

$$c_i^\dagger c_i + d_i^\dagger d_i + \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = 1. \quad (3.27)$$

En esta representación, el hamiltoniano (3.6) se escribe

$$\begin{aligned} H = & U \sum_i d_i^\dagger d_i - t_{AA} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} c_i^\dagger c_j + t_{BB} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} d_i^\dagger d_j \\ & - t_{AB} \sum_{\langle ij \rangle} [f_{j\uparrow}^\dagger f_{i\uparrow}^\dagger (c_i d_j + c_j d_i) + h.c.]. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Además de la conservación de $N_d = \sum_i d_i^\dagger d_i$, que se verifica para $t_{AB} = 0$, también se verifica la conservación de $N_e = \sum_i c_i^\dagger c_i$ y de $N_f = \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$, como consecuencia de la condición de vínculo (3.27) y de la conservación del número total de partículas $N = N_f + 2N_d$. Eligiendo arbitrariamente el signo de t_{AA} , el término cinético del hamiltoniano adopta la forma

$$H_t = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} [f_{j\sigma}^\dagger f_{i\sigma} (c_i^\dagger c_j + (-1)^\alpha d_i^\dagger d_j) + h.c.], \quad (3.29)$$

donde $t = |t_{AA}| = |t_{BB}|$, y $\alpha = 0, 1$ para $t_{AA} = -t_{BB}, +t_{BB}$, respectivamente. En una cadena con condiciones de contorno abiertas, también el *orden* de los bosones y de los fermiones se conserva en forma separada: H_t permuta un fermión con un bosón ubicados en sitios vecinos, pero no permuta dos fermiones o dos bosones entre sí. Para un dado número de fermiones $N_f = N_\uparrow + N_\downarrow$ y de bosones $N_b = N_e + N_d = L - N_f$, siendo L el número de sitios de la cadena, es posible enumerar los sitios, los fermiones y los bosones en una secuencia similar (de izquierda a derecha, por ejemplo) con índices i, j y m respectivamente. Entonces, un estado cualquiera con un número definido de partículas puede escribirse como

$$|\psi_l\rangle = \prod_{m=1}^{N_b} \{B(m)c_{i(m)}^\dagger + [1-B(m)]d_{i(m)}^\dagger\} \prod_{j=1}^{N_f} \{F(j)f_{i(j)\uparrow}^\dagger + [1-F(j)]f_{i(j)\downarrow}^\dagger\} |0\rangle, \quad (3.30)$$

Las “amplitudes” pueden escribirse como

$$B(m) = \frac{1}{2} + \eta_{i(m)}^z, \quad F(j) = \frac{1}{2} + S_{i(j)}^z, \quad (3.31)$$

donde $\eta_{i(m)}^z, S_{i(j)}^z$ son los valores de la componente z de pseudoespín del bosón m y de espín del fermión j , con las definiciones (3.21) y (3.19), respectivamente. De esta manera, $B(m) = 1$ si el m -ésimo bosón es \circ y $B(m) = 0$ si es \bullet , mientras que $F(j) = 1, 0$ si el j -ésimo fermión es \uparrow, \downarrow , respectivamente. Por ejemplo, el estado $|\psi_l\rangle = \circ \uparrow \downarrow \circ \bullet \uparrow \downarrow \bullet \dots$ tiene $B(1) = B(2) = 1, B(3) = B(4) = 0, F(1) = F(3) = F(4) = 1, F(2) = F(5) = 0$, y debido a las propiedades de simetría, lo mismo puede decirse respecto de cualquier otro estado $|\psi_{l'}\rangle$, tal que $\langle \psi_{l'} | H_t | \psi_l \rangle \neq 0$.

En la cadena con condiciones de contorno abiertas, además de las simetrías $SU(2)$ globales definidas en (3.19) y (3.21), el modelo tiene $2L$ simetrías $SU(2)$, constituidas

por las versiones *locales* de (3.19) y (3.11). Es fácil ver que el hamiltoniano conmuta con los generadores del álgebra local:

$$[H_t, (-1)^\alpha c_{i(m)}^\dagger d_{i(m)}] |\psi_t\rangle = [H_t, f_{i(j)}^\dagger f_{i(j)}] |\psi_t\rangle = 0, \quad (3.32)$$

con $\alpha = 0, 1$ para $t_{AA} = +, -t_{BB}$. De esta manera, es posible efectuar la diagonalización de H_t en el subespacio que corresponde a la representación de mayor peso de las dos álgebras $SU(2)$ globales. Para un número de fermiones fijo N_f este subespacio está conformado por estados $|\psi_t\rangle$ con todos los $B(m) = F(j) = 1$; concretamente, este subespacio está constituido por todos los estados con un número N_f de fermiones \uparrow y ningún bosón \bullet . El problema de N_f fermiones con igual espín es equivalente al problema de N_f fermiones sin espín y es fácilmente soluble. Los autoestados en la representación original tienen la forma

$$|\psi_\epsilon^0\rangle = \prod_{j=1}^{N_f} c_{k_j}^\dagger |0\rangle, \quad c_{k_l}^\dagger = \left(\frac{2}{L+1}\right)^{1/2} \sum_i \sin(ki) c_{i_l}^\dagger, \quad (3.33)$$

donde $k = m\pi/(L+1)$, con m entero, son los puntos del espacio recíproco correspondientes a una cadena con condiciones de contorno abiertas. Cada uno de estos autoestados tiene una degeneración 2^L que resulta de la aplicación de los operadores $S_{i(j)}^-$ y $\eta_{i(m)}^-$ sobre $|\psi_\epsilon^0\rangle$, resultando

$$|\psi_\epsilon\rangle = \prod_{i=1}^L (n_{f_i} \{F(j_i) + [1 - F(j_i)] c_{i_1}^\dagger c_{i_1}^\dagger\} + (1 - n_{f_i}) \{B(m_i) + [1 - B(m_i)] c_{i_1}^\dagger c_{i_1}^\dagger\}) |\psi_\epsilon^0\rangle, \quad (3.34)$$

donde $n_{f_i} = n_i(2 - n_i)$, $n_i = \sum_\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$, $j_i = \sum_{l=1}^{N_f} n_{f_l}$ y $m_i = 1 - j_i$. Estos estados son también autoestados del hamiltoniano completo $H = H_t + H_U$. El efecto de H_U es el de adicionar UN_d al valor de la energía, a la vez que remover parte de la degeneración, reduciéndola a $2^{N_f} \binom{N_d}{N_f}$.

Dada una densidad de partículas n , la energía del estado fundamental de H se obtiene minimizando la energía con respecto a la densidad de sitios doblemente ocupados $d = N_d/L$ y considerando en (3.33) los N_f valores de k más bajos, con el vínculo $nL = 2dL + N_f$. En el límite termodinámico se distinguen tres regímenes, dependiendo de los valores de U/t y de la densidad de partículas n . En la Fig. 3.18 se muestran estos regímenes y se esquematiza el tipo de configuraciones de partículas en cada caso:

- a. $U > 4t, n = 1$. Corresponde a la línea de puntos de la figura. El número de sitios doblemente ocupados es nulo, y por lo tanto el sistema con una partícula por sitio es un aislador de Mott con un "gap" $U - 4t$. El estado fundamental tiene una degeneración 2^L y $\langle H_t \rangle = \langle H_U \rangle = 0$.
- b. $U > 4t, n \neq 1$. Corresponde a la región I de la figura. Para $n < 1$, el estado fundamental tiene también $\langle H_U \rangle = 0$, pero la energía cinética es no nula en este caso. La física es la misma que la de Ln fermiones sin espín. La energía por unidad de longitud vale

$$c(n) = -\frac{2t}{\pi} \sin(n\pi). \quad (3.35)$$

El caso $n > 1$ se obtiene a partir de éste recurriendo a la simetría partícula-hueco, que conduce a $d = n - 1, c(n) = U(n - 1) + c(2 - n)$.

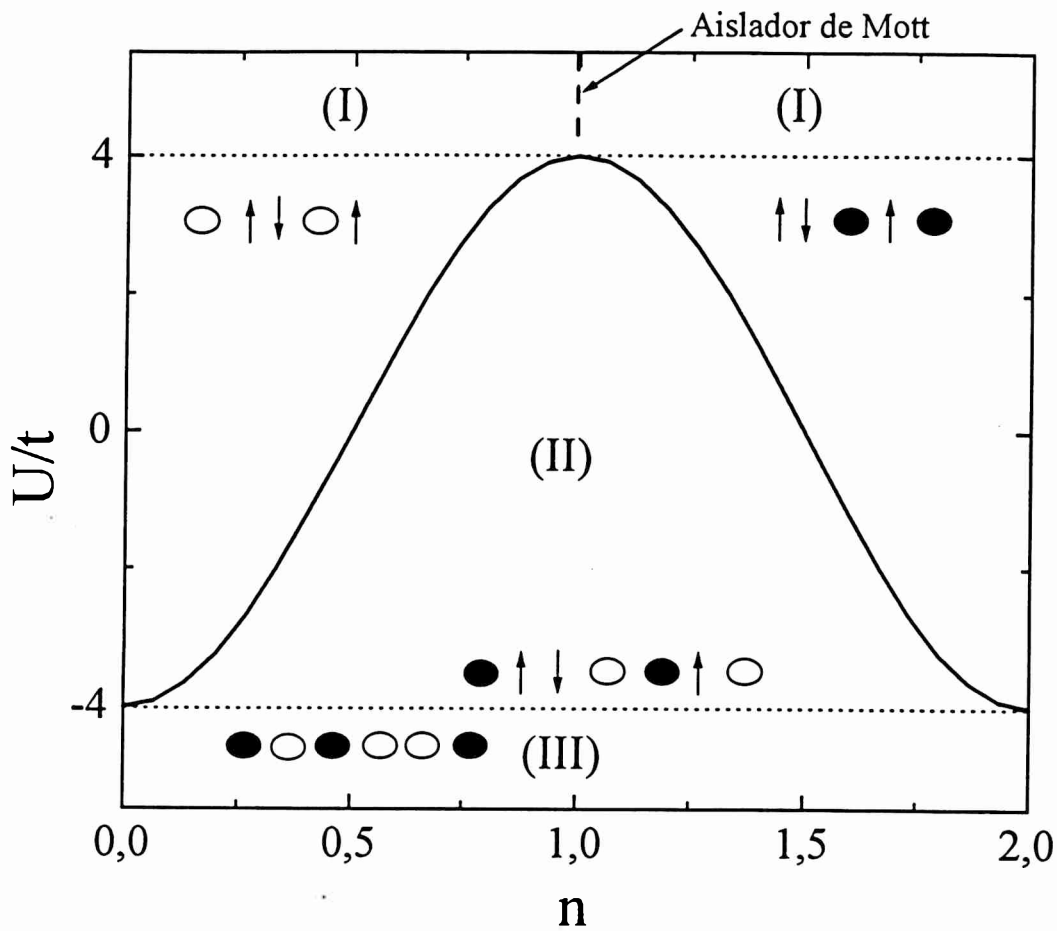


Figura 3.19: Esquema de los diferentes regímenes del estado fundamental. - - -: Régimen de aislador de Mott.

- c. $U < -4t$. Corresponde a la región III de la figura. El estado fundamental tiene todas las partículas formando pares. Estos pares son estáticos $\langle H_t \rangle = 0$, y la energía vale

$$c(n) = U \frac{n}{2}. \quad (3.36)$$

- d. $-4t \leq U \leq 4t$. Corresponde a la Región II de la figura. En este caso, existen dos densidades críticas n_1 y n_2 , con $n_1 = (1/\pi) \arccos(-U/4t)$ y $n_2 = 2 - n_1$, que definen las fronteras con la región I. El estado fundamental dentro de éste régimen, exhibe una competencia entre los dos términos H_t y H_U del hamiltoniano. La densidad de sitios doblemente ocupados y la densidad de energía están dados por

$$d = \frac{n - n_1}{2}, \quad c(n) = Ud - \frac{1}{2\pi}(16t^2 - U^2)^{1/2}. \quad (3.37)$$

En los regímenes II y III el sistema está en el borde de la separación de fases (observar que $\partial^2 c / \partial n^2 = 0$ en estos regímenes), así como en el borde de la superconductividad. Esto último se debe a la propiedad del *orden de largo alcance no diagonal* [147], que en este caso es una consecuencia de la simetría SU(2) de pseudoespín. La existencia de un orden de largo alcance no diagonal significa que la función de correlación de pares $\langle c_{k_1}^\dagger c_{k_1}^\dagger c_l c_l \rangle$, para $1 \ll |k - l|$ tiene un valor no nulo en el límite termodinámico. Para probar esto último primero se considera un autoestado $|\psi_g\rangle$ de H de la forma (3.33), con N_d sitios doblemente ocupados, perteneciente al subespacio de más baja energía. El estado $|\psi\rangle = (\eta^+)^{N_d} |\psi_g\rangle$ pertenece a la representación de mayor peso del álgebra de pseudoespín ($\eta^+ |\psi\rangle = 0$) y es también autoestado de

H_l con el mismo autovalor que $|\psi_g\rangle$. Similarmente, el estado $|\psi_{N_d}\rangle = (\eta^-)^{N_d}|\psi\rangle$ es también autoestado de H y pertenece al mismo subespacio que el estado de partida $|\psi_g\rangle$. A continuación se prueba que los estados de la forma $|\psi_{N_d}\rangle$, pertenecientes al subespacio del estado fundamental del hamiltoniano tienen orden de largo alcance no diagonal con densidades de pares N_d/L y de fermiones en estado normal N_f/L fijas a medida que $L \rightarrow \infty$: considerando

$$\begin{aligned} (\rho_2)_{kl} &= (-1)^{\alpha(l-k)} \frac{\langle \psi_{N_d} | c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger c_{l\uparrow} c_{l\downarrow} | \psi_{N_d} \rangle}{\langle \psi_{N_d} | \psi_{N_d} \rangle} \\ &= (-1)^{\alpha(l-k)} \frac{\langle \psi | (\eta^+)^{N_d} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger c_{l\uparrow} c_{l\downarrow} (\eta^-)^{N_d} | \psi \rangle}{\langle \psi | (\eta^+)^{N_d} (\eta^-)^{N_d} | \psi_{N_d} \rangle}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

con $k \neq l$. Es fácil comprobar, usando las relaciones de conmutación de los generadores del álgebra $SU(2)$ de pseudoespín que la matriz densidad de dos partículas (3.38) resulta

$$\rho_2 = (-1)^{\alpha(l-k)} \frac{(L - N_f - N_d) N_d}{(L - N_f)^2} \langle \psi | (1 - n_l)(1 - n_k) | \psi \rangle. \quad (3.39)$$

En el límite $|k - l| \rightarrow \infty$, $\langle \psi | (1 - n_l)(1 - n_k) | \psi \rangle \rightarrow (1 - N_f/L)^2$, y por lo tanto (3.38) es no nulo en el límite termodinámico. La existencia del orden de largo alcance no diagonal es de fundamental importancia para la existencia de una fase superconductora [147], y es considerado como la condición necesaria y suficiente para la existencia del efecto Meissner, y por lo tanto, la superconductividad [6], [83]. Por este motivo, se han estudiado recientemente modelos que poseen esta propiedad por construcción explícita del hamiltoniano [38]. En estos casos, al igual que en el caso aquí estudiado, la aplicación directa a los materiales superconductores del alta temperatura crítica es dudosa, pero pueden entenderse como laboratorios válidos para el estudio del tipo de procesos que pueden dar lugar a mecanismos superconductores. Sin embargo, como se discutirá en breve, en el caso unidimensional en el que es posible la solución exacta y la verificación del valor no nulo de la matriz densidad de dos partículas (3.38), puede también mostrarse que el modelo no es conductor. La obtención de la solución exacta general en sistemas de mayor dimensionalidad no ha sido posible hasta el momento, salvo en la región de parámetros que corresponden a la fase aisladora. En [2] hemos demostrado que en el caso de redes bipartitas de dimensión arbitraria con número de coordinación z , el estado fundamental para $U > U_c = z(|t_{AA}| + |t_{BB}|)$ y banda semillena, corresponde al de un aislador de Mott con una degeneración de espín de 2^L . En [122] se generalizó el tratamiento expuesto en esta sección para el caso de cadenas cerradas, aunque es claro que el comportamiento en el límite termodinámico será idéntico al de la cadena abierta. A los efectos de comparar, se han realizado cálculos de diagonalización numérica en un "cluster" bidimensional con condiciones de contorno periódicas [45]. En la Fig. 3.21 se muestran los resultados correspondientes a un "cluster" de 10 sitios. En la Fig. 3.20 se muestran los resultados correspondientes a la cadena con condiciones abiertas en el límite termodinámico. La alta degeneración del estado fundamental en el límite termodinámico se rompe parcialmente para $U < U_c$ en $1D$ para sistemas finitos [122], y aún más en $2D$, como puede observarse en la fig. 3.21, en la cual están indicados los números cuánticos correspondientes a las dos álgebras $SU(2)$. En las Figs. se muestran también las evoluciones de la densidad de sitios doblemente ocupados y del valor medio de la energía cinética. En la Fig. 3.21 se muestra, además, el valor del peso de Drude D_w , definido en (2.69). El valor no nulo de D_w indica que el sistema es un conductor. En el caso de un anillo unidimensional,

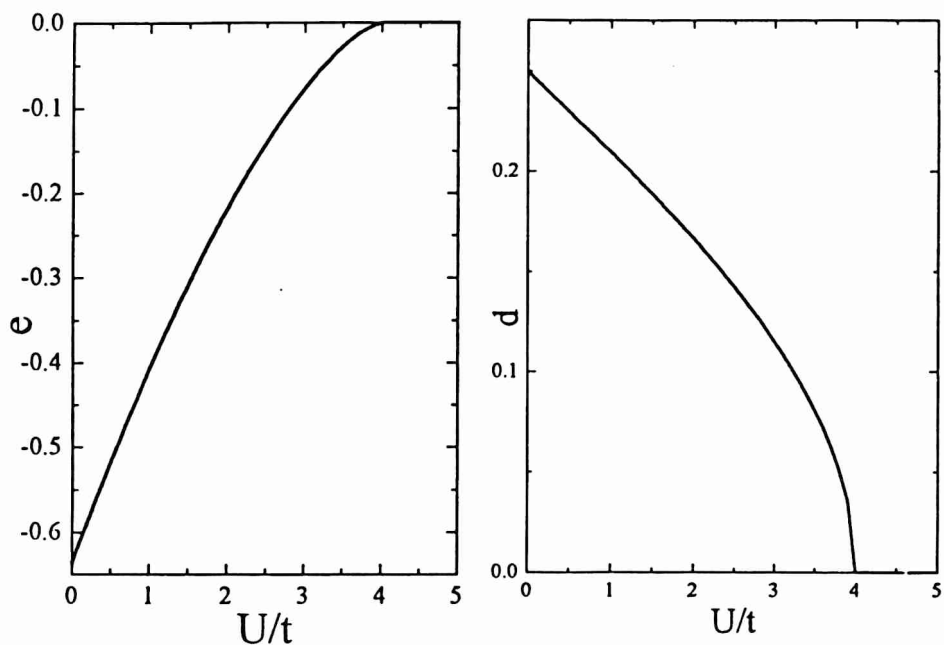


Figura 3.20: Solución exacta para la energía por unidad de longitud $e(U)$ y la densidad de sitios doblemente ocupados d por unidad de longitud correspondientes al estado fundamental en el límite termodinámico para $n = 1$.

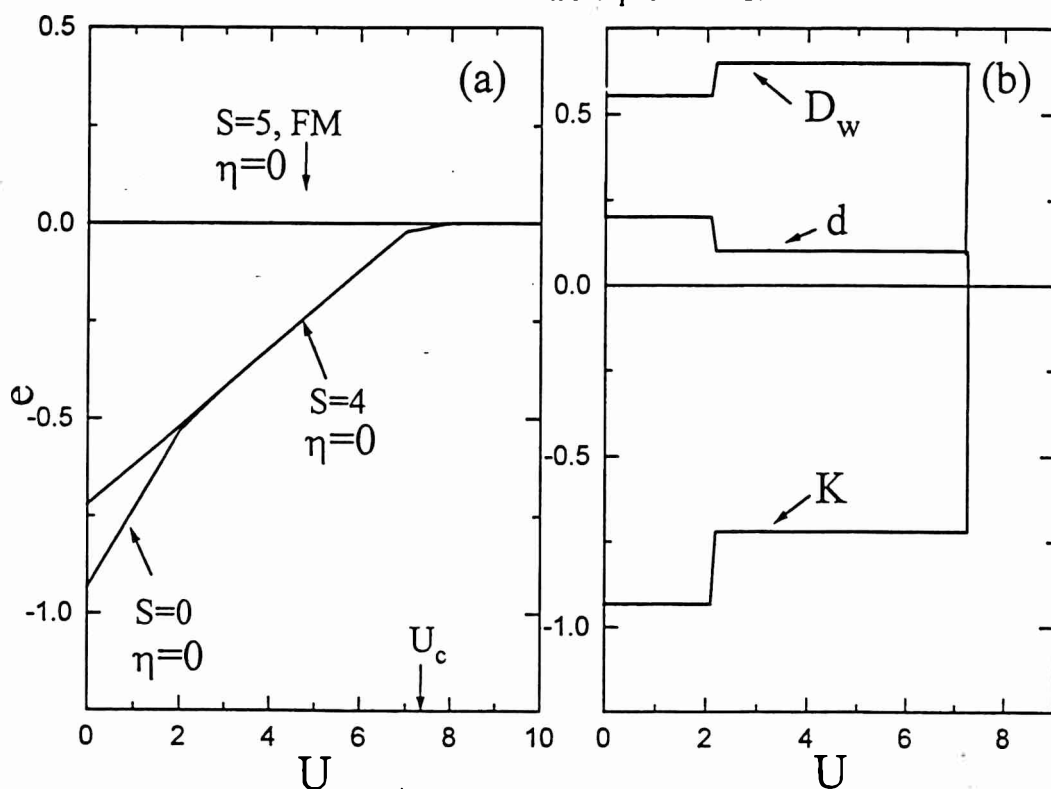


Figura 3.21: Densidad de energía $e(U)$, densidad de sitios doblemente ocupados d , peso de Drude D_w y energía cinética K para el estado fundamental de un “cluster” bidimensional con $L = 10$ sitios y densidad de partículas $n = 1$. En la energía, se indica el valor del espín total del estado fundamental.

$D_w = 0, \forall U$. En general, puede demostrarse que la energía del estado fundamental no varía cuando se aplica un flujo externo. Como se detalló en el apéndice D del capítulo anterior, el hamiltoniano de interacción con un flujo magnético externo Φ se obtiene mediante la sustitución de Peierls. El término de interacción U de (3.28) no se modifica, mientras que (3.29) resulta

$$H_t(\phi) = -t \left\{ \sum_{i=1}^{L-1} [f_{i+1\sigma}^\dagger f_{i\sigma} (\exp(-i\phi) e_i^\dagger e_{i+1} + (-1)^\sigma \exp(i\phi) d_i^\dagger d_{i+1}) + h.c.] \right. \\ \left. + [f_{1\sigma}^\dagger f_{L\sigma} (\exp(-i\phi) e_L^\dagger e_1 + (-1)^\sigma \exp(i\phi) d_L^\dagger d_1) + h.c.] \right\}, \quad (3.40)$$

donde $\phi = \Phi/L$ y se usó la condición de cierre del anillo $L+1 \equiv 1$. Pueden definirse nuevos operadores fermiónicos de la siguiente manera

$$f_{i\sigma}^\dagger = g_{i\sigma}^\dagger \exp(i\psi_i \phi), \quad \psi_i = \sum_{j \geq i} (d_j^\dagger d_j - e_j^\dagger e_j) = \sum_{j \geq i} (n_{i1} + n_{i-1}). \quad (3.41)$$

Los operadores $g_{i\sigma}^\dagger, g_{i\sigma}$ satisfacen reglas de conmutación fermiónicas, dado que ψ_i es un operador de bosones y debido a las condición de vínculo (3.27). En función de los nuevos operadores fermiónicos, los términos de (3.40) se escriben

$$f_{i+1\sigma}^\dagger f_{i\sigma} d_i^\dagger d_{i+1} = g_{i+1\sigma}^\dagger g_{i\sigma} \exp[i\phi(d_i^\dagger d_i - e_i^\dagger e_i)] d_i^\dagger d_{i+1} = e^{-i\phi} g_{i+1\sigma}^\dagger g_{i\sigma} d_i^\dagger d_{i+1} \\ f_{1\sigma}^\dagger f_{L\sigma} d_L^\dagger d_1 = g_{1\sigma}^\dagger g_{L\sigma} \exp[i\phi \sum_{j=1}^{L-1} (d_j^\dagger d_j - e_j^\dagger e_j)] d_L^\dagger d_1 = \\ = g_{1\sigma}^\dagger g_{L\sigma} \exp[i\phi \sum_{j=1}^L (d_j^\dagger d_j - e_j^\dagger e_j)] \exp(-i\phi) d_L^\dagger d_1, \quad (3.42)$$

donde se hizo uso de $\exp(-i\phi d_i^\dagger d_i) d_i^\dagger = \exp(-i\phi) d_i^\dagger$ y $\exp(-i\phi e_i^\dagger e_i) d_i^\dagger = d_i^\dagger$, como consecuencia de (3.27). En el caso particular de banda semillena $\sum_{j=1}^L (d_j^\dagger d_j - e_j^\dagger e_j) = 0$, de manera que H_t no depende de ϕ cuando se lo escribe en términos de los operadores $g_{i\sigma}^\dagger, g_{i\sigma}$. Este resultado es en primera instancia sorprendente. Sin embargo tiene una interpretación sencilla: para $U < U_c$ el valor de la energía cinética es no nulo, las partículas tienen una movilidad considerable ya que existe un número finito de \circ y \bullet con los cuales los fermiones intercambian posiciones cuando ocupan sitios vecinos. Sin embargo, debido a que $t_{AB} = 0$, no existe proceso alguno que permita el intercambio entre las dos especies de bosones, y por lo tanto no existe posibilidad de transporte neto de carga, a pesar de que el valor del “gap” es nulo y a pesar de tener orden de largo alcance no diagonal. Esto es una patología de la naturaleza estrictamente unidimensional, que desaparece cuando se considera $D > 1$.

3.5 Resumen y Conclusiones.

En este capítulo se presentaron las motivaciones para el estudio de una extensión del modelo de Hubbard, en la que el “hopping” depende de la ocupación de los sitios involucrados en el proceso. Se realizó un estudio detallado de las propiedades de simetría del modelo y se expusieron los resultados basados en cálculos de diagonalización numérica para la versión unidimensional en una región amplia de parámetros. Se utilizó el marco interpretativo de la teoría de líquidos de Luttinger detallada en el

capítulo anterior para delimitar las regiones de parámetros favorables a la superconductividad. En particular, se encontró que para $t_3 = 0, t_2 \lesssim t_1$, para densidades de partículas $n \leq 1$, las correlaciones superconductoras son dominantes para valores de la repulsión coulombiana menores que un valor crítico U_C , que depende de la densidad. El valor U_C disminuye a medida que n aumenta, en un buen acuerdo con los resultados perturbativos y de campo medio. Para $n = 1$ se encontraron evidencias de un régimen con correlaciones superconductoras dominantes hasta valores de $U_C \sim t_1$ y de una transición *superconductor-aislante*. Este resultado es novedoso para los sistemas altamente correlacionados. Para $n > 1$ las correlaciones superconductoras desvanecen. Los resultados para $t_3 \neq 0$, con $t_2 \lesssim t_1$, sugieren una renormalización de t_2 . Se estudiaron, además, regiones de parámetros similares a los parámetros “realistas” para los cupratos superconductores, encontrando evidencias a favor de la superconductividad sólo para valores muy pequeños de U , que resultan poco representativos de los “realistas”.

Finalmente, se presentó la solución analítica exacta para $t_{AB} = |t_{AA}| - |t_{BB}| = 0$ en una cadena con condiciones de contorno abiertas. En este caso, la física subyacente es la supresión de las correlaciones antiferromagnéticas y la transición de Mott. La fase metálica está inhibida en 1D como consecuencia de la topología, mientras los resultados numéricos para 2D muestran la existencia de la misma. Para $t_{AA} = t_{BB}$, queda pendiente cuál es la evolución hacia el límite Hubbard puro, a medida que se conecta t_{AB} . En particular, queda pendiente la investigación de la existencia o no existencia una fase metálica en 1D para $t_{AB} \neq 0$ y banda semillena. Esto se debe a que para $t_{AB} \neq 0$ se permite el intercambio entre las dos especies de bosones, favoreciendo el carácter metálico, a la vez que introduciendo el efecto de las correlaciones antiferromagnéticas, que tienden a favorecer el carácter aislante. Finalmente, queda por analizar el efecto de la interacción coulombiana entre primeros vecinos. Estos aspectos serán analizados en el próximo capítulo.

Capítulo 4

Desde el Modelo de Hubbard Extendido con “Hopping” Correlacionado hacia el Límite Hubbard.

4.1 Introducción.

En el capítulo anterior se presentó un modelo efectivo para los cupratos superconductores y se realizó un estudio general para el caso unidimensional. Se puso énfasis en el estudio de las regiones favorables a la superconductividad, particularmente para valores de parámetros representativos de situaciones “realistas”, tanto en el marco de la teoría de Hirsch, como en el esquema de traducción a partir del modelo de tres bandas para los planos de Cu-O. También se mostró que el modelo es exactamente soluble en 1D para valores particulares de los parámetros, apartados de los “realistas” para los cupratos superconductores. Este caso resulta particularmente interesante debido a que es esclarecedor respecto del rol del magnetismo en la transición metal-aislante (transición de Mott). Este límite corresponde a anular el parámetro de “hopping” t_{AB} , que da lugar a las correlaciones antiferromagnéticas, las cuales inhiben la transición de Mott en el modelo de Hubbard usual para banda semillena. Como se mostró en el capítulo anterior, el caso unidimensional resulta patológico y la topología de la red en 1D no permite el desarrollo de un verdadero estado metálico. Para valores no nulos de este parámetro de “hopping”, no resulta obvio el comportamiento que deba esperarse.

Para banda semillena, corresponden plantearse dos situaciones distintas, dependiendo de los valores de U . Por un lado, desde el punto de vista magnético, para valores grandes de la repulsión coulombiana U , el límite $t_{AB} = 0$ es singular. En particular, la solución exacta en 1D muestra que el estado fundamental es totalmente degenerado en espín en el límite termodinámico y por lo tanto paramagnético. La solución exacta en $D > 1$ no ha sido posible en general, pero sí es posible en aquellas regiones donde el estado fundamental es aislante. La delimitación de estas regiones se detallarán próximamente, pero es evidente que para valores de U lo suficientemente grandes, la doble ocupación no es conveniente energéticamente y el estado fundamental consiste en un estado en el que cada sitio de la red está ocupado por una partícula. Este estado de partículas localizadas, con energía nula, no depende

de la orientación del espín en cada sitio y corresponde a un aislador de Mott, caracterizado por la localización de las partículas y la naturaleza paramagnética. Por el contrario, para valores no nulos de t_{AB} , se conecta una interacción de intercambio antiferromagnético $J = 4t_{AB}^2/U$, aún para valores de t_{AB} arbitrariamente pequeños y $U \gg t_{AB}$. Esta introduce correlaciones antiferromagnéticas, que en el límite de acoplamiento fuerte, favorecen la formación de una onda de densidad de espín con vector de onda π . Esquemáticamente para valores de U lo suficientemente grandes, y suponiendo "hoppings" $0 < t_{AB} \leq t_{AA} = t_{BB}$, la situación es

$$\begin{array}{cccccccccccc}
 \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & & t_{AB} = t_{BB} = t_{AA} \rightarrow \text{Mott - Hubbard} \\
 \\
 \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & & \uparrow \\
 \\
 \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & & t_{AB} = 0 \rightarrow \text{Mott,} \quad (4.1)
 \end{array}$$

donde $\nearrow \searrow$ denota un estado paramagnético y el esquema del medio una especulación acertada.

Por otro lado, cuando se conecta t_{AB} a partir de la fase metálica¹ en banda semilena, no queda claro qué tipo de escenario magnético debe esperarse. Tampoco queda claro si existe una fase metálica para valores de t_{AB} inferiores a los correspondientes al límite Hubbard. Como se discutió en el capítulo 1, en el modelo de Hubbard, el favorecimiento del orden antiferromagnético induce la formación de un "gap" de carga, aún para valores de U arbitrariamente pequeños, resultando un aislador de Mott-Hubbard. A diferencia del aislador de Mott, las partículas no están totalmente localizadas en el aislador de Mott-Hubbard, y la naturaleza antiferromagnética se debe justamente a la ganancia de energía cinética que permite este tipo de ordenamiento. Para valores de t_{AB} inferiores al correspondiente al límite Hubbard, la formación de un "gap" no es evidente, a pesar de la existencia de correlaciones antiferromagnéticas. Como se mencionó en el capítulo anterior, el proceso de t_{AB} permite el intercambio entre un doblón ($\bullet \equiv ||$) y un holón (\circ) cuando están en sitios vecinos. En particular, podría constituir un mecanismo por el cual la fase metálica llegue a desarrollarse plenamente en 1D, para valores pequeños de t_{AB} . La situación esquemática en este caso es

$$\begin{array}{cccccccccccc}
 | & \downarrow & | & \downarrow & | & \downarrow & | & \downarrow & | & \downarrow & & t_{AB} = t_{BB} = t_{AA} \\
 \\
 & & & & & & ? & & & & & \uparrow \\
 \\
 \circ & \searrow \nearrow & \bullet & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \nearrow \searrow & \bullet & \nearrow \searrow & \circ & & & t_{AB} = 0, \quad (4.2)
 \end{array}$$

donde el paramagnetismo representado por $\nearrow \searrow$ es estricto sólo para 1D en el límite termodinámico, en el que la solución exacta para la cadena abierta es válida y se pudo verificar que el estado fundamental es totalmente degenerado. Como se mencionó en el capítulo anterior, para sistemas de mayor dimensionalidad y aún para sistema finitos en 1D, no puede decirse nada respecto del valor del espín total del estado fundamental, aunque los cálculos de diagonalización numérica sugieren una cuasidegeneración en 2D.

¹Se utiliza el término metálico, aunque en 1D no es metálico en el sentido estricto.

Otro aspecto de interés, resulta el estudio del efecto de una repulsión coulombiana entre primeros vecinos. Esto corresponde a considerar el hamiltoniano completo (3.6). El caso más simple, que se considerará en este capítulo corresponde a $V_{AA} = V_{BB} = V_{AB} \equiv V$. El modelo pariente, que resulta de considerar todos los parámetros de “hopping” iguales ($t_{AA} = t_{AB} = t_{BB} \equiv t$), es el de Hubbard extendido

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j. \quad (4.3)$$

Aún antes del descubrimiento de los superconductores de alta temperatura crítica, el modelo de Hubbard extendido había despertado gran interés, en relación con los conductores orgánicos, [64]. Por este motivo, ha sido extensamente estudiado [64], [65], [33], [41], [42], [24], [25], [143], [67] particularmente en 1D y para banda semillena. Fuera de banda semillena, continúa siendo motivo de estudio [87], [114] en la actualidad. Se ha encontrado que el modelo exhibe una rica estructura de fases. Para $U, V > 0$ y banda semillena, existen dos fases ordenadas. Como ya se discutió extensamente a lo largo de esta tesis, en el límite de acoplamiento fuerte para U , con $V = 0$, se forma una onda de densidad de espín antiferromagnética. Por otro lado en el límite de acoplamiento fuerte para V , con $U = 0$ se forma una onda de densidad de carga. Intuitivamente, es fácil ver que para V lo suficientemente grande y $U = 0$, la forma más eficiente para evadir el pago de la repulsión coulombiana entre dos sitios vecinos, es mediante una disposición alternada de un sitio doblemente ocupado y otro vacío. En 1D, las dos fases ordenadas (onda de densidad de espín y onda de densidad de carga) tienen características diferentes. La fase de onda de densidad de espín tiene una simetría continua, no hay “gap” en las excitaciones de espín y no corresponde a un estado estrictamente ordenado en virtud de la validez del teorema de Mermin-Wagner para esta situación. Tiene, en cambio, un decaimiento algebraico de las correlaciones, como ya se discutió, también, en capítulos anteriores. La fase de onda de densidad de carga, por el contrario, tiene una simetría discreta, y exhibe “gap” tanto en las excitaciones de carga como de espín. Esta fase tiene un verdadero orden de largo alcance, a pesar de ser un sistema unidimensional. En base a resultados de campo medio de Hartree-Fock [117], se encontró que ambas fases están separadas por la recta $U = 2V$, en un diagrama (U, V) , con $U > 0, V > 0$. Esta delimitación de las dos fases fue corroborada por cálculos de grupo de renormalización de acoplamiento débil [33]. Luego, en [41], [42], [66], [67], encontraron mediante técnicas de grupo de renormalización en el espacio real y numéricas, que el diagrama de fases difiere levemente del predicho por la teoría de campo medio. El diagrama de fases completo, es decir, incluyendo también la región $U, V < 0$, contiene además fases superconductoras de tripletes y de singletes y un región de separación de fases, como se muestra en la Fig. 4.1. La parte que interesa para comparaciones futuras es el cuadrante $U > 0, V > 0$. La línea de transición entre la fase de onda de densidad de espín y de carga presenta peculiaridades. Usando simulaciones Monte Carlo, Hirsch [67] encontró que que $U_C \sim 2V \sim 3t$ es un punto tricrítico, tal que para $U \sim 2V > U_C$ la transición entre las dos fases es de segundo orden, mientras que para $U \sim 2V < U_C$, la transición es de primer orden. El punto tricrítico $U_C \sim 2V$ se caracteriza, además, por tener “gap” de carga nulo. Esta evidencia fue confirmada por Fourcade y Spronken [41], [42]. Más recientemente Cannon y Fradkin también encontraron evidencias sobre la existencia del punto tricrítico para $U \sim 2V \sim 1.5t$ en base a teoría de campos y simulación Monte Carlo. Luego Cannon, Scalettar y Fradkin determinaron la posición del punto tricrítico para $U \sim 2V \sim (4 - 5)t$ mediante un estudio de diagonalización numérica.

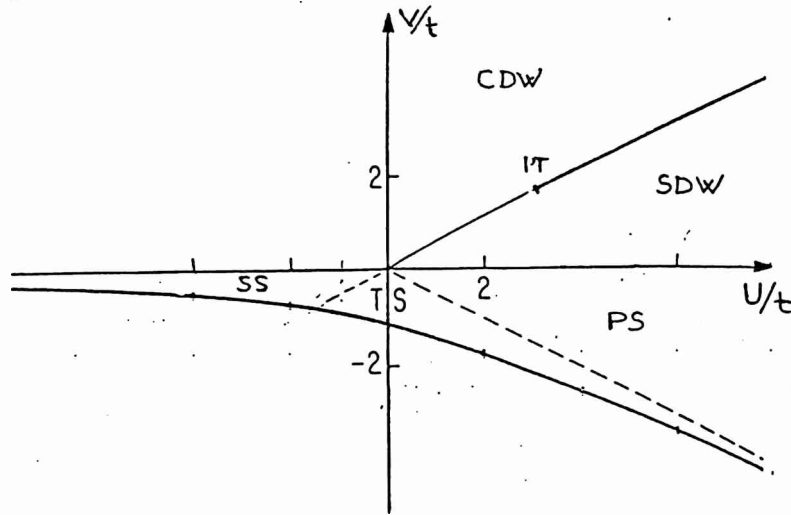


Figura 4.1: Diagrama de fases en el modelo de Hubbard extendido usual para 1D y banda semillena, (SDW) denota onda de densidad de espín; (CDW), onda de densidad de carga; (TS), tripletes superconductores; (SS) singletes superconductores y (PS), separación de fases [Cannon y Fradkin (1990)].

Finalmente, Voit determinó mediante teoría de campos y grupo de renormalización, la posición del punto tricrítico en $U_C \sim 4.76t$.

En la sección siguiente se muestran nuestros resultados para el diagrama de fases para el modelo de Hubbard extendido con $U, V > 0$ y $t_{AB} = 0$ [2]. En este caso particular, el modelo tiene una rica estructura de simetría, y en una amplia región de los parámetros, es posible obtener la solución exacta del estado fundamental. En la sección 4.3 se analiza la evolución hacia el límite Hubbard puro ($V=0$), y en particular, los puntos planteados en esta introducción, en base a nuestros resultados numéricos para 2D y 1D [45], [10]. Como se verá más adelante, el diagrama de fases planteado en la sección 4.2, contiene apartamientos del diagrama de fases del Hubbard extendido usual dado en la Fig. 4.1, lo cual da lugar a planteos similares a los dados en esta sección, en cuanto a cuál es la evolución hacia el límite Hubbard extendido. Este aspecto se analizará en la sección 4.4, en base nuestros resultados numéricos en 1D [10]. Finalmente, la sección 4.5 está dedicada a realizar un resumen y discusión.

4.2 Resultados Exactos para el Diagrama de Fases en el Límite $t_{AB} = 0$.

En esta sección se estudiará el modelo definido por el hamiltoniano (3.6) con $t_{AB} = 0$ y $V_{AA} = V_{BB} = V_{AB} \equiv V$ para banda semillena [2]. Este caso fue estudiado por Strack y Volhardt [134] quienes, reescribiendo el hamiltoniano en términos de nuevos operadores, encontraron cotas mínimas para el valor de la energía en dos regiones de parámetros en las que además pudieron encontrarse autoestados exactos del hamiltoniano, con energías coincidentes con los valores de las cotas mínimas. A partir de este procedimiento, encontraron que el estado fundamental para dimensión arbitraria en los siguientes casos:

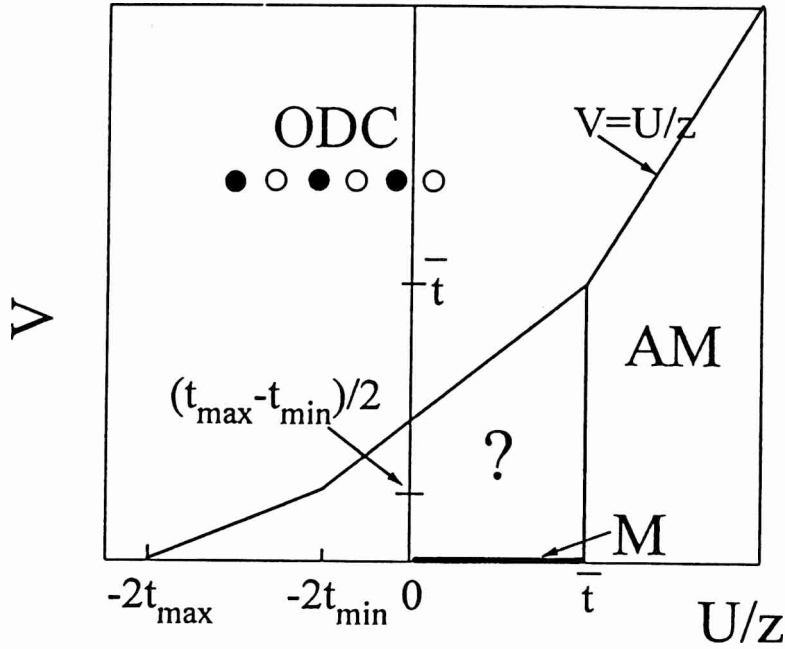


Figura 4.2: Diagrama de fases del estado fundamental para $t_{AB} = 0$ y banda semillena. (AM), (ODC) y (M) indican fases de aislador de aislador de Mott, de onda de densidad de carga y metálica, respectivamente, (esta última denominación es un abuso de lenguaje en 1D). $\bar{t} = |t_{AA}| + |t_{BB}|$, $t_{max} = \text{Max}(|t_{AA}|, |t_{BB}|)$, $t_{min} = \text{Min}(|t_{AA}|, |t_{BB}|)$.

- a. Para $U - (4t + V)z \geq 0$, siendo z el número de coordinación y L el número de sitios de la red, corresponde a un aislador paramagnético con una partícula localizada con espín arbitrario en cada sitio.
- b. Para $U + (4t - V)z \leq 0$ en redes bipartitas, corresponde a una onda de densidad de carga en la que todos los sitios de una subred están ocupados por doblones y todos los de la otra, por holones.

Un procedimiento similar, fue llevado a cabo por Ovchinnikov [111] quien encontró que las dos zonas descritas arriba tienen, en realidad, una mayor extensión en el diagrama (U, V) . Luego en [2] definimos varias fronteras exactamente, que se resúmen en la Fig. 4.2. Para definir la extensión de las fases de aislador de Mott y de onda de densidad de carga, se definen las cantidades N_i , para denotar el número de sitios con ocupación i y $M_{ij} = M_{ji}$, para denotar el número de pares de primeros vecinos con ocupación i en un sitio y j en el otro. Por ejemplo, la configuración

$$\uparrow \quad | \quad \circ \quad \bullet \quad (4.4)$$

tiene $N_1 = 2$, $N_0 = N_2 = 1$, $M_{11} = 1$, $M_{10} = 1$, $M_{02} = 1$ y $M_{12} = M_{00} = M_{22} = 0$, suponiendo condiciones de contorno abiertas. Estas cantidades están relacionadas por

$$zN_i = M_{ii} + \sum_j M_{ij}; \quad L = \sum_i N_i = N_1 + 2N_2, \quad (4.5)$$

donde L es el número de sitios, y z el número de coordinación de la red. Los elementos de matriz de los términos de interacción con U y V pueden expresarse directamente

en términos de estas cantidades, mientras que el término cinético puede acotarse usando el teorema de Gerschgorin [146], según el cual cada autovalor de la matriz H_t pertenece a al menos uno de los intervalos $[A_n - B_n, A_n + B_n]$, con $A_n = \langle n|H_t|n\rangle$ y $B_n = \sum_{m \neq n} |\langle n|H_t|m\rangle|$. En la base de las configuraciones en el espacio real con un número definido de partículas, puede escribirse

$$E \geq E_{min} = UN_2 + V(4M_{22} + 2M_{12} + M_{11}) - |t_{AA}|M_{10} - |t_{BB}|M_{12}. \quad (4.6)$$

Usando (4.5), para (4.6)

$$\begin{aligned} E_{min} &= \frac{zLV}{2} + (U - z\tilde{t})N_2 + (\tilde{t} - V)M_{02} + [(V + 2|t_{AA}|)M_{00} \\ &+ (V + 2|t_{BB}|)M_{22}] \geq \frac{zLV}{2} + (U - z\tilde{t})N_2 + (\tilde{t} - V)M_{02}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

con $\tilde{t} = |t_{AA}| + |t_{BB}|$. El problema se reduce a resolver desigualdades para encontrar cotas por debajo de la dada en (4.7). Para $\tilde{t} - V \geq 0$ y $U - z\tilde{t} \geq 0$, la cota inferior resulta $zLV/2$, y corresponde a tomar $M_{02} = N_2 = 0$ en (4.7). Dado que el valor encontrado para la cota inferior es igual al valor de la energía en el aislador de Mott, se concluye que en esta región de parámetros, el estado fundamental *exacto* es el aislador de Mott. Para $\tilde{t} - V < 0$, la cota inferior se obtiene tomando el máximo valor posible para M_{02} . Este es $M_{02} = zN_2$. Resulta el valor $(U - zV)N_2 + zLV/2$ para la cota inferior. Para $U - zV < 0$, esta cota puede mejorarse eligiendo $N_2 = L/2$. Dado que este es el valor que corresponde a la energía de un estado de onda de densidad de carga, siendo este autoestado del hamiltoniano, se concluye que en esta región del plano (U, V) , el estado fundamental *exacto* es una onda de densidad de carga. Por otro lado, para $U - zV \geq 0$, la cota puede mejorarse eligiendo $N_2 = 0$, obteniéndose la energía correspondiente al aislador de Mott.

Para estudiar la estabilidad de la onda de densidad de carga, se puede escribir E_{min} en la forma equivalente

$$\begin{aligned} E_{min} &= U\frac{L}{2} + (zV - \frac{U}{2} - z\frac{\tilde{t}}{2})N_1 + (\tilde{t} - V)M_{11} \\ &+ [(2V + |t_{AA}| - |t_{BB}|)M_{00} + (2V - |t_{AA}| + |t_{BB}|)M_{22}], \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde para $2V - ||t_{AA}| - |t_{BB}|| \geq 0$, se obtiene una cota inferior anulando el término entre corchetes. Procediendo en forma análoga se encuentra que para $\tilde{t} - V \leq 0$, la frontera que separa la fase de aislador de Mott de la fase de onda de densidad de carga es la línea $U = zV$, mientras que para $\tilde{t} - V > 0$, la onda de densidad de carga es estable para $V \geq U/2z + \tilde{t}/2$. Para estudiar el caso $2V - ||t_{AA}| - |t_{BB}|| < 0$, conviene plantear

$$\begin{aligned} E_{min} &= \frac{UL}{2} - (\frac{U}{2} + z|t_{BB}|)N_1 + (2V - |t_{AA}| + |t_{BB}|)M_{01} \\ &+ [4VM_{00} + 2(V + |t_{BB}|)M_{11}], \end{aligned} \quad (4.9)$$

y procediendo en forma análoga se encuentra que la fase de onda de densidad de carga es estable para $2zV - U/2 - z|t_{AA}| \geq 0$. Usando la transformación partícula-hueco, puede analizarse la estabilidad de la onda de densidad de carga para $|t_{BB}| - |t_{AA}| > 2V$.

Las extensiones de las fases de aislador de Mott y de onda de densidad de carga, halladas mediante este procedimiento, se resúmen en la Fig. 4.2. En el capítulo

anterior se mostró que en 1D ($z = 2$), para $t_{AA} = t_{BB} = \tilde{t} / 2$, el punto $(U, V) = (z \tilde{t}, 0)$ delimita exactamente la fase de aislador de Mott para banda semillena. Puede mostrarse que en sistemas de mayor dimensionalidad, este punto también corresponde a una frontera exacta. Para $D > 1$, el teorema de Nagaoka es válido, según el cual, el estado fundamental con un hueco tiene el máximo espín posible. La frontera entre la fase metálica y la fase de aislador de Mott, queda definida a partir del máximo valor de U para el cual sobrevive un estado de Nagaoka con un doblón y un holón. Mediante la transformación de Shiba, (3.20), el problema del doblón y el holón en el fondo ferromagnético, puede formularse en términos de un problema de dos partículas con espines opuestos, con una repulsión infinita cuando se encuentran en un mismo sitio, y una atracción $-V$ cuando están a una distancia de un parámetro de red. El problema de dos partículas, puede formularse en términos de un problema de "scattering" de una partícula respecto de la otra y, por lo tanto, en términos de un problema efectivo de una partícula. En una red cúbica simple, es fácil ver que el estado fundamental pertenece al sector $\mathbf{K} = 0$, siendo \mathbf{K} el vector de onda total y a la representación irreducible Γ_1 del grupo puntual (funciones de onda pertenecientes a otras representaciones irreducibles, aprovechan menos los términos de "hopping"). La ecuación de Schrödinger para el problema efectivo de una partícula resulta

$$a_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} + U - \lambda) + \frac{I_0}{L} \sum_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} - \frac{2V}{L} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{i=1}^D a_{\mathbf{k}'} \cos(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}'_i) = 0, \quad (4.10)$$

donde $I_0 \rightarrow \infty$ es la repulsión local entre las dos partículas, \mathbf{k} es el vector de onda relativo en la función de onda del estado fundamental, $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2 \tilde{t} \sum_{i=1}^D \cos k_i$, y λ es la energía medida respecto de la energía del aislador de Mott. Luego de un poco de álgebra, se llega a

$$\left(\lambda' + \frac{z \tilde{t}^2}{V}\right) G_0(\lambda') = 1, \quad (4.11)$$

donde $G_0(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} [L(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})]^{-1}$, y $\lambda' = \lambda - U$. Si existe un estado ligado, debe tener una energía más baja que el estado disponible de menor energía de la banda, es decir $\lambda' < -z \tilde{t}$, lo cual conduce a que $V > \tilde{t} [1 + 1/(z \tilde{t} G_0(-z \tilde{t} - \epsilon))]^{-1}$, con $\epsilon \rightarrow 0^+$. Pero para estos valores de V los argumentos dados anteriormente indican que el estado fundamental sólo puede ser un aislador de Mott o una onda de densidad de carga. Por lo tanto, en el límite termodinámico, el estado de más baja energía corresponde al estado del fondo de la banda, para el cual $\lambda' = -z \tilde{t}$. El valor crítico de U , para la transición hacia el estado de aislador de Mott ($\lambda' = 0$) es $U_C = z \tilde{t}$. En los sistemas finitos, la existencia de una repulsión efectiva entre un doblón y un holón, debido a la pérdida de energía cinética cuando se ubican en sitios vecinos, conduce a un valor $U_C < z \tilde{t}$, que se encuentra de resolver (4.11) para el sistema finito en cuestión.

Haciendo una comparación entre las figuras 4.1 y 4.2, pueden plantearse preguntas análogas a las planteadas en la introducción de este capítulo, respecto de la evolución del diagrama de fases desde el límite $t_{AB} = 0$ expuesto en la Fig. 4.2 hacia el límite Hubbard extendido usual de la Fig. 4.1. Nuevamente, la región de mayor interés, y la que plantea el mayor número de incógnitas respecto de su evolución, es la región metálica. Otro aspecto en cuestión es si existe alguna relación entre la fase metálica para $t_{AB} = 0$ y el punto tricrítico del modelo de Hubbard extendido usual. En las próximas secciones se intentarán dar algunas respuestas a estas preguntas, o bien, generar más preguntas.

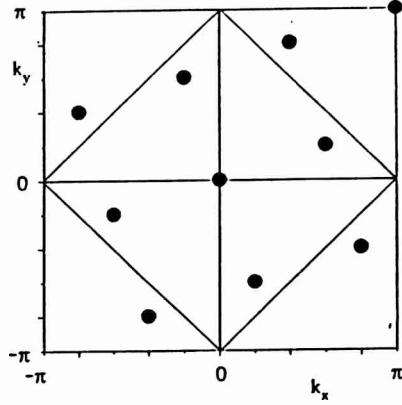


Figura 4.3: Vectores permitidos de la primera zona de Brillouin para el "cluster" de 10 partículas con condiciones de contorno periódicas. El cuadrado indicado corresponde a la superficie de Fermi del sistema no interactuante en el límite termodinámico.

4.3 Estudio Numérico de la Evolución hacia el Límite Hubbard Puro.

Esta sección está dedicada al estudio de la evolución desde el límite $t_{AA} = t_{BB}, t_{AB} = 0$ hacia el límite Hubbard $t_{AA} = t_{BB} = t_{AB} \equiv t$ para $V = 0$, en particular, el análisis del comportamiento magnético en 1D y en 2D. Es esperable encontrar diferencias severas entre el tipo de escenarios magnéticos en 1D y en sistemas de mayor dimensionalidad, ya que en estos últimos, el teorema de Nagaoka [106] es aplicable y por lo tanto existe la posibilidad de un estado ferromagnético, mientras que en los sistemas unidimensionales, el teorema no es aplicable, y por lo tanto, se espera un singlete para el estado fundamental. Se analizará, también en esta sección la existencia o no existencia de una verdadera fase metálica en 1D.

4.3.1 Resultados en 2D.

Los resultados de esta sección [45] están basados en cálculos numéricos realizados en una red bidimensional de 10 sitios con condiciones de contorno periódicas. Se ha considerado el término de interacción en la forma $U(n_{i\uparrow} - 1/2)(n_{i\downarrow} - 1/2)$ para que frente a la transformación partícula-hueco, no se genere la constante aditiva $U(L - N)$, siendo L , el número total de sitios y N el número de partículas. La Fig. 4.3 muestra la primera zona de Brillouin para este caso y los puntos de la red recíproca correspondientes al "cluster" estudiado.

La metodología empleada consiste en el cálculo de la función espectral de una partícula, $D_\sigma(\omega) = D_\sigma^+(\omega) + D_\sigma^-(\omega)$, siendo $D_\sigma^{\pm}(\omega)$ las densidades de estados que resultan de agregar o extraer un partícula con espín σ en el estado fundamental $|\psi_0\rangle$ del sistema de N partículas, es decir,

$$\begin{aligned}
 D_\sigma^+(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_0 | c_{\mathbf{k}\sigma} R(\omega + i\delta + E_0) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | \psi_0 \rangle \\
 D_\sigma^-(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_0 | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger R(-\omega + i\delta + E_0) c_{\mathbf{k}\sigma} | \psi_0 \rangle,
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

siendo E_0 la energía del estado fundamental del sistema de N partículas y $R(x) = (x - H)^{-1}$, el operador resolvente. En un sistema finito, las densidades de estados (4.12)

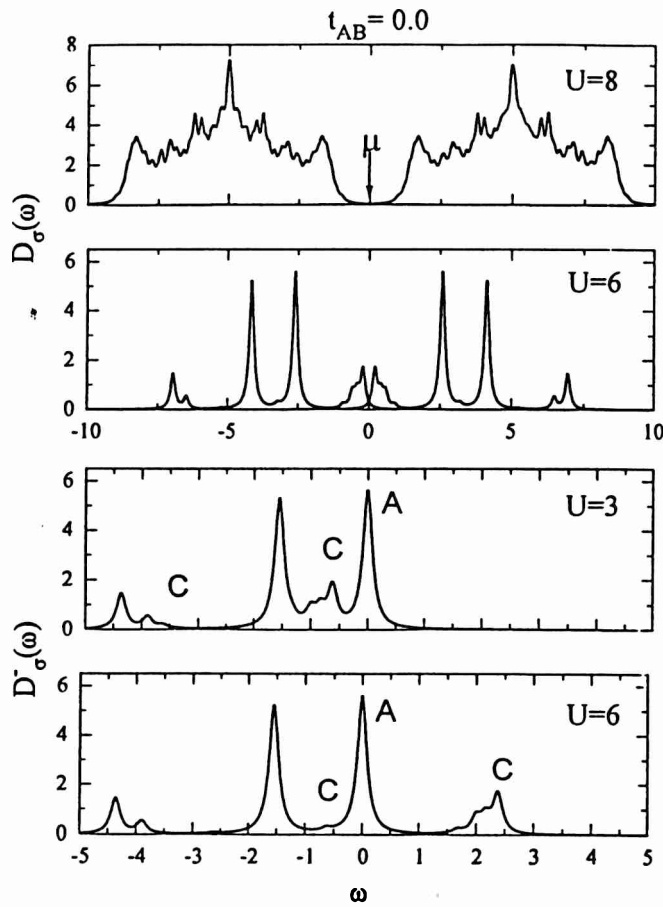


Figura 4.4: Densidad espectral de una partícula para $t_{AB} = 0$ y banda semillena. $U = 10$ corresponde a la fase aisladora, y $U = 6$ y $U = 3$ corresponden a la fase metálica.

pueden ser calculadas a partir del método de Lanczos, como se indica en el apéndice A de este capítulo. Los espectros así generados informan sobre todas las excitaciones de una partícula que tienen proyección no nula sobre el estado fundamental.

En el límite termodinámico, los resultados de la sección anterior para $t_{AB} = 0$ indican que la transición metal-aislante tiene lugar para $U_C = 4(t_{AA} + t_{BB}) \equiv 8t_{AA}$. La solución de (4.11) para este "cluster" conduce a $U_C \sim (t_{AA} + t_{BB})\sqrt{13}$. La energía del estado fundamental como función de U , así como la densidad de sitios doblemente ocupados y el valor del espín total, están dados en la Fig. 3.22 del capítulo anterior. Para $0 \leq U \lesssim 2t_{AA}$, el estado fundamental tiene dos doblones y dos holones y espín total $S = 0$, mientras que para $2t_{AA} \lesssim U \leq U_C$, tiene un doblón y un holón y espín total $S = 4$. En la Fig. 4.4 se muestran espectros dentro de las fases metálica y aisladora. En los dos primeros gráficos de la Fig. 4.4, $\omega = 0$ corresponde a la energía del estado fundamental del sistema de N partículas, la parte de $\omega < 0$ corresponde a la contribución de $D_{\sigma}^{-}(\omega)$ y la parte de $\omega > 0$ a la de $D_{\sigma}^{+}(\omega)$. Ambas contribuciones son idénticas debido a que para estos valores de los parámetros de "hopping", el hamiltoniano es simétrico respecto de una transformación partícula-hueco. En el gráfico correspondiente a $U = 10$, pueden distinguirse dos bandas de ancho $\pm(t_{AA} + t_{BB})$ y un "gap" igual a U , característicos de un aislador de Mott. La rica estructura de picos se debe a la alta degeneración de espín que exhibe este caso. En los dos últimos gráficos de la Fig. 4.4 se muestran sólo las contribuciones de $D_{\sigma}^{-}(\omega)$, y se ha seleccionado $\omega = 0$ de manera que quede centrado en el pico señalado como A en el dibujo, a los efectos de distinguir las contribuciones de los dos subespacios con distinto número de doblones que intervienen en este caso. El estado fundamental

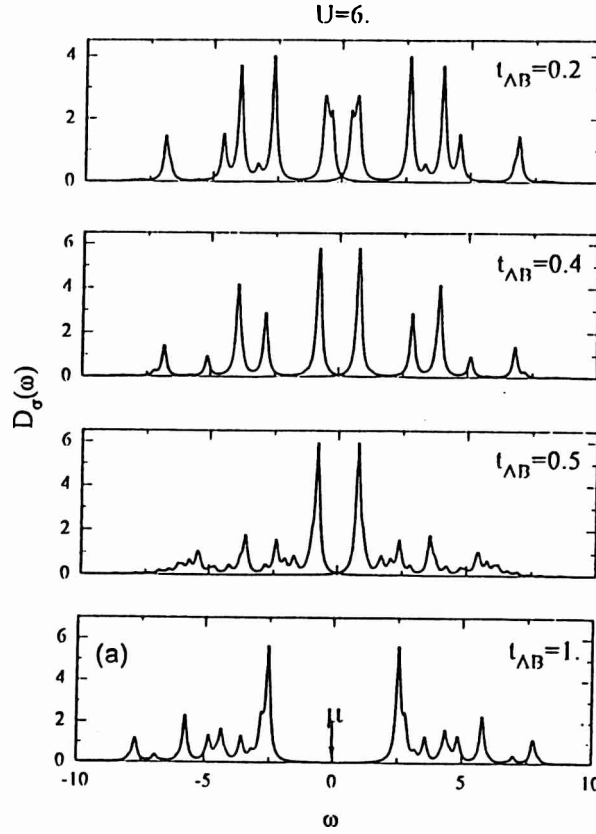


Figura 4.5: $D_{\sigma}^{-}(\omega)$ para varios valores de t_{AB} y $U = 6$.

de N partículas, contiene, para este valor de U , un doblón y un holón, de manera que la partícula que se extrae en el cálculo de $D_{\sigma}^{-}(\omega)$, puede provenir de la destrucción del doblón o de extraer cualquiera de las restantes partículas no apareadas. Las excitaciones en cada caso $t_{AB} = 0$ tienen lugar en dos subespacios desacoplados del sistema de $N - 1$ partículas, definidos por $N_d = 0$ y $N_d = 1$ respectivamente, siendo N_d el número cuántico correspondiente a la doble ocupación. El subespacio de $N_d = 0$ es el indicado por C en las figuras, mientras que el de $N_d = 1$ está indicado por A, y son identificables debido a que el último se mueve en U respecto del primero, cuando U varía. Los estados de C pueden identificarse como las “señales” del estado fundamental ($k = (0, 0)$) y las excitaciones del estado de Nagaoka correspondientes al único hueco moviéndose en el fondo ferromagnético.

Tomando la Fig. 4.4 como referencia, las Figs. 4.5 y 4.6 muestran la evolución del espectro hacia el límite Hubbard a partir de la fase metálica para $t_{AB} = 0$ con un doblón y un holón. En la Fig. 4.5 puede observarse el desarrollo de un “gap” en el espectro a medida que $t_{AB} = t_{AA} = t_{BB}$, y de la formación de un pico de cuasipartícula, característico del aislador de Mott-hubbard. La Fig. 4.6 da un detalle de la evolución de la estructura de picos de más baja energía, y puede observarse un cambio de comportamiento en este sector:

- Para $0 \leq t_{AB} \leq 0.4$ la excitación de más baja energía tiene momento total $k = (0, 0)$, y corresponde al estado de Nagaoka, en el cual todos los estados del espacio recíproco indicados en la Fig. 4.3 están ocupados con partículas con idéntico espín, excepto el $k = (\pi, \pi)$.

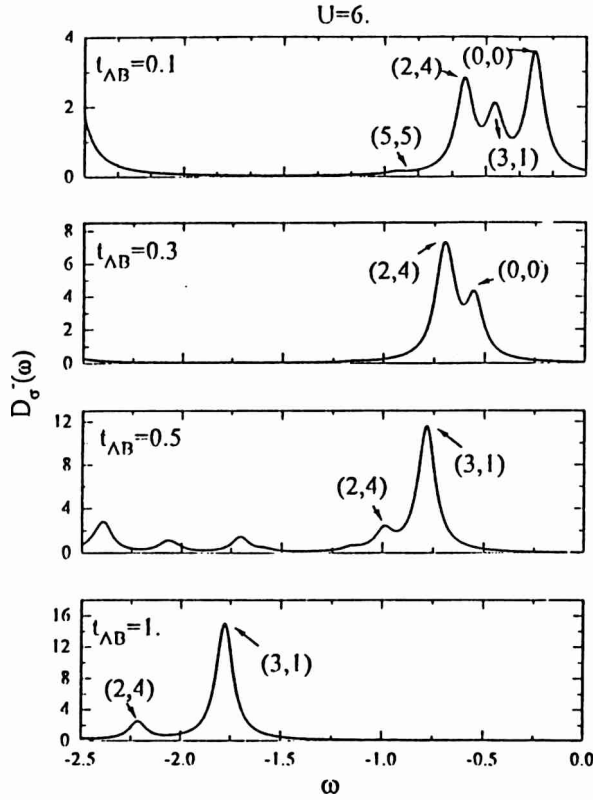


Figura 4.6: Detalle de la evolución del sector de más baja energía del espectro de la Fig. 4.5 para varios valores de t_{AB} . Los momentos de las excitaciones indicados en los picos están en unidades de $\pi/5$.

- Para $0.4 < t_{AB} \leq 1$, en cambio, la excitación de menor energía tiene momento total $\mathbf{k} = (3\pi/5, \pi/5)$. Este cambio está asociado con un cambio en el valor del espín total del estado fundamental. Para estos valores de t_{AB} , el estado fundamental tiene espín total $S = 0$. En el límite no interactuante ($U = 0, t_{AA} = t_{BB} = t_{AB}$), el estado fundamental de N partículas con espín total $S = 0$, corresponde al “mar de Fermi” conformado por todos los estados \mathbf{k} contenidos dentro del cuadrado de la Fig. 4.3, doblemente ocupados². La configuración de menor energía con una partícula menos corresponde a ocupar los mismos estados con dos partículas, excepto el de $\mathbf{k} = (3\pi/5, \pi/5)$ o alguno de sus simétricos, que se ocupa con una sola partícula.

En síntesis, el cambio de comportamiento en el espectro refleja el cambio de espín del estado fundamental, con el consecuente cambio del comportamiento magnético. Mientras que para valores pequeños de t_{AB} , el estado fundamental es un “doble Nagaoka”, en el que un doblón y un holón se mueven en un fondo ferromagnético, el estado fundamental para mayores valores de t_{AB} está dominado por las correlaciones antiferromagnéticas. Existe un argumento sencillo para estimar el valor crítico de t_{AB} para el cual el estado de “doble Nagaoka” es inestable frente a las correlaciones antiferromagnéticas, y consiste en comparar la energía del problema efectivo de dos partículas mencionado previamente con la energía de un modelo de Heisenberg con $J = 4t_{AB}^2/U$ en una red bidimensional del mismo tamaño. Esto conduce a un valor crítico $t_{AB}^C = 0.49$, en buen acuerdo con el análisis numérico. Efectuando la com-

²En el caso interactuante, la superficie de Fermi se desdibuja, pero la imagen no interactuante, sirve para fijar ideas respecto del momento de las excitaciones.

paración de energías entre un estado de Nagaoka usual, con un doblón o un holón, con la de un estado antiferromagnético para el caso de un “cluster” genérico de dimensiones $\sqrt{L} \times \sqrt{L}$, se encuentra que el tamaño crítico del “cluster” para el cual el estado de Nagaoka es inestable corresponde a $L = \pi \sqrt{z/(J - 2\epsilon_0)}$ [22], siendo ϵ_0 la energía por sitio del antiferromagneto de Heisenberg. Para el valor de J correspondiente a $t_{AB} = 0.4$, esta estimación conduce a $L \sim 12$ sitios. Para este valor de t_{AB} , puede esperarse, entonces, que en “clusters” de mayor tamaño que el estudiado, con igual densidad de doblones y holones, se formen polarones, constituidos por una nube ferromagnética de ~ 12 sitios rodeando a cada doblón y a cada holón, que se mueven en un fondo antiferromagnético.

4.3.2 Resultados en 1D.

Los resultados de esta sección están basados en cálculos de diagonalización numérica con el método de Lanczos y la teoría de los líquidos de Luttinger descrita en el capítulo 1, complementados con cálculos de algunas funciones de correlación realizados con el método de Monte Carlo de líneas de mundo, que se describe en el apéndice B de este capítulo. Este último posee la ventaja respecto del método de Lanczos de poder hacer cálculos en sistemas de mayor longitud, pero tiene el inconveniente de estar definido para temperatura finita, lo cual requiere un tratamiento cuidadoso de las conclusiones que se extraigan para el estado fundamental.

Como se mencionó anteriormente, el teorema de Nagaoka no es aplicable a los sistemas unidimensionales, por lo cual se espera que el estado fundamental tenga espín total $S = 0$ para valores de $t_{AB} \neq 0$ arbitrariamente pequeños. Al igual que en el caso bidimensional, el límite $t_{AB} \ll |t_{AA}| = |t_{BB}|$, posee fuertes reminiscencias del límite $t_{AB} = 0$. A pesar de que el número de sitios doblemente ocupados deja de ser una cantidad conservada a t_{AB} finito, para valores suficientemente pequeños de esta cantidad, las propiedades físicas del sistema para valores de U inferiores al valor crítico $U_C = 4t_{AA}$, exhiben comportamientos que pueden interpretarse en forma efectiva, en términos de holones, doblones y espines. La fig. 4.7 se muestra la evolución con t_{AB} , del factor de estructura magnético, definido como la transformada de Fourier de la función de correlación espín-espín en el espacio real,

$$S(q) = \frac{1}{L} \sum_{j,l} \exp(-iql) \langle \psi_0 | S_j^z S_{j+l}^z | \psi_0 \rangle, \quad (4.13)$$

donde $|\psi_0\rangle$ es el estado fundamental del sistema finito, calculado mediante el método de Lanczos. En la figura se observa, para valores de $t_{AB} < 0.6$, una estructura de picos “incommensurados” para $U < U_C$, mientras que para valores $t_{AA} \geq 0.6$, se observa el desarrollo de un pico en $q = \pi$, característico de las correlaciones antiferromagnéticas a banda semillena (típicamente, se observa el desarrollo de un pico en $2k_F$). Para fijar ideas, considérese el factor de estructura $S(q)$ para un sistema con orden antiferromagnético de largo alcance en banda semillena (un estado de Neel).

$$| \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad (4.14)$$

Es inmediato comprobar que $S(q)$ consiste en un único pico en $q = \pi$ y vale cero en el resto de la primera zona de Brillouin, mientras que apartamientos del estado de Neel perfecto dan lugar a la contribución de otras componentes de Fourier, con el consecuente ensanchamiento del pico de π del factor de estructura. Por otro lado,

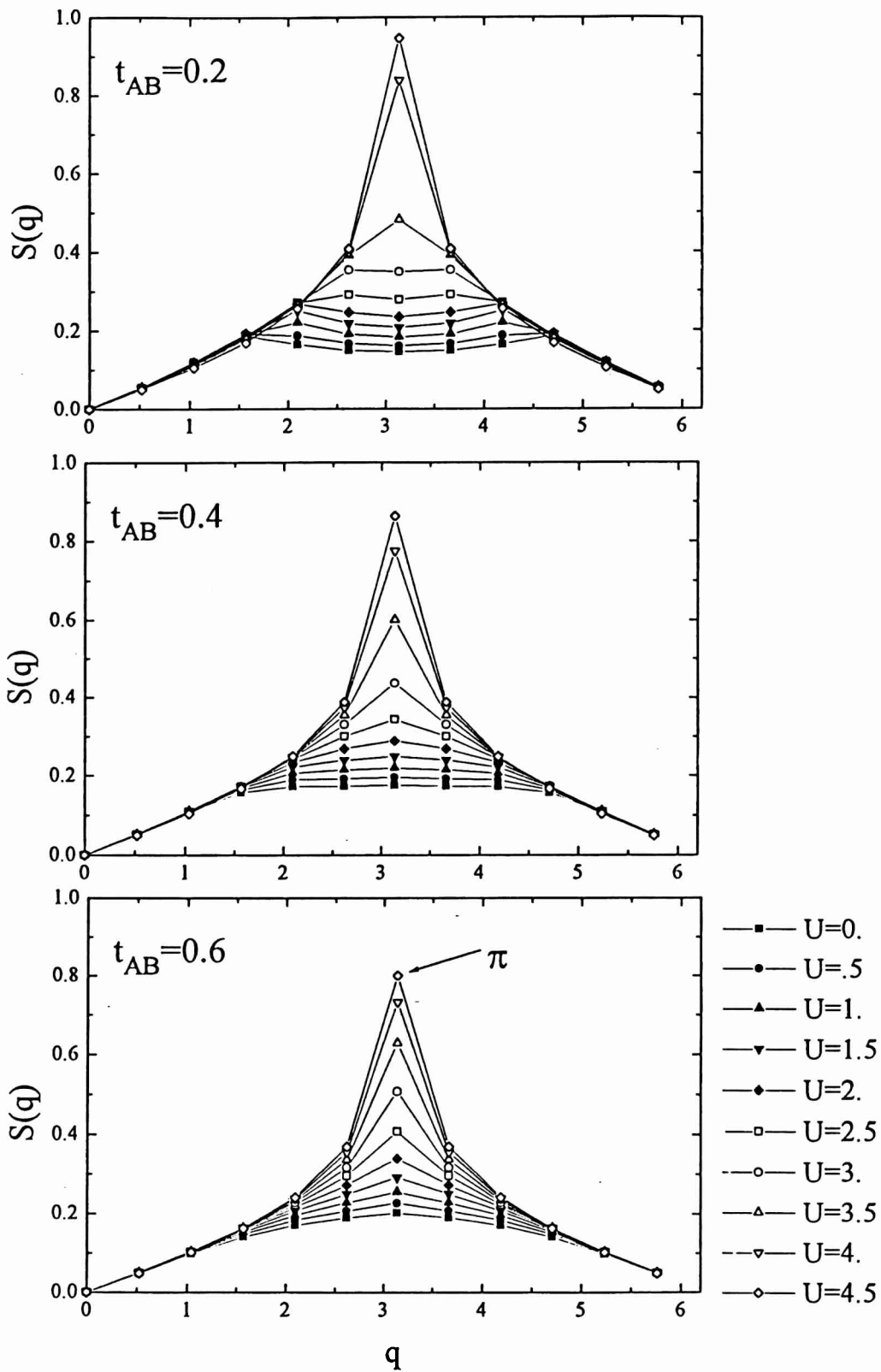


Figura 4.7: Factor de estructura magnético en una cadena de $L = 12$ sitios para varios valores de U tres valores distintos de t_{AB} .

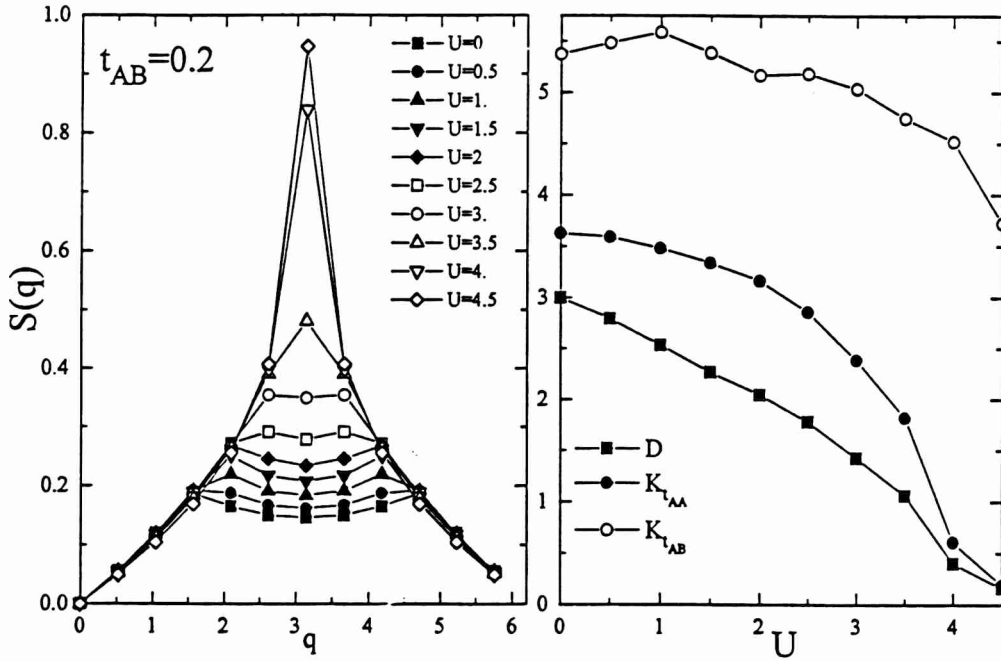


Figura 4.8: Factor de estructura magnético para $t_{AB} = 0.2$ en una cadena de $L = 12$ sitios (izquierda), número de sitios doblemente ocupados D y contribuciones de los distintos términos de la energía cinética (derecha).

considérese un estado con orden de largo alcance de la forma

$$| \quad | \quad | \quad \circ \quad | \quad | \quad | \quad \bullet \quad (4.15)$$

donde también puede comprobarse que el factor de estructura observa picos “incommensurados” en $q = (1 - 2d)\pi$, siendo d la densidad de doblones en la cadena. Los picos estarán más o menos ensanchados, dependiendo del grado de localización de los \circ y \bullet , respecto de las posiciones indicadas en el esquema (4.15). El mismo argumento vale si se reemplaza en (4.15) \bullet por \circ . En la Fig. 4.8 se muestra la relación existente entre el número de sitios doblemente ocupados y los picos “incommensurados” en el factor de estructura para $t_{AB} = 0.2$. Para valores pequeños de t_{AB} , existe una repulsión efectiva entre un doblón y un holón, dado que la ganancia de energía cinética es mayor cuando están alejados en una distancia mayor que un parámetro de red. Un estado ordenado como en (4.15), en el cual los doblones y holones permanecen estáticos formando paredes de dominio, tendría una naturaleza aislante y no aprovecha la ganancia de energía cinética producida por los movimientos de doblones y holones, resultando energéticamente favorable una deslocalización de los mismos. Esto es consistente con los resultados de la Fig. 4.8. En particular, el gráfico correspondiente a $U = 3$, corresponde a aproximadamente un doblón y un holón y puede apreciarse la respuesta de varias componentes de Fourier en el factor de estructura, además del los picos dominantes de $q = \pi \pm 2\pi/L$. Un efecto similar se observa en la solución exacta del ansatz de Bethe en el modelo de Hubbard unidimensional con $U \gg t$ fuera de banda semillena [108]. Se intentaron cálculos con el método de Monte Carlo cuántico para estos valores particulares de los parámetros, en sistemas de mayor longitud, con igual densidad de doblones y de holones, con el objeto de estudiar con más detalle el comportamiento del factor de estructura. Esto no fue posible debido a la alta densidad de estados excitados de baja energía con doble ocupación nula, lo cual requería de temperaturas impracticablemente bajas, para obtener una descripción significativa

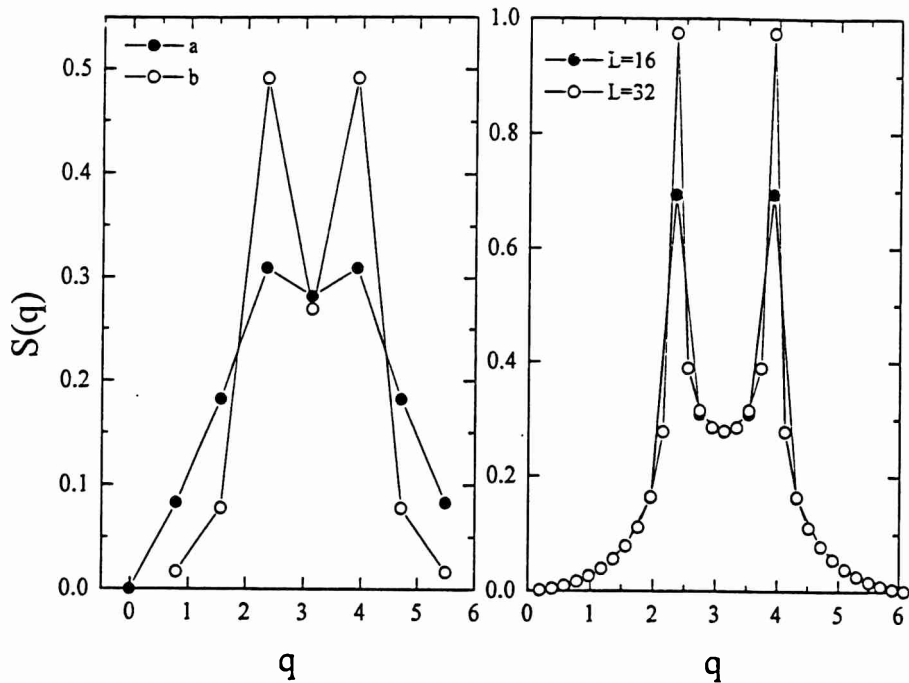


Figura 4.9: Izquierda: Factor de estructura magnético para una cadena de $L = 8$ sitios para $t_{AB} = 0.2$ y $U = 2.5$, (a) corresponde a $N = 8$ partículas (un doblón y un holón) y (b) corresponde a $N = 6$ partículas (dos huecos). Derecha: Factor de estructura magnético para cadenas de distintas longitudes y densidad de partículas $n = 3/4$.

del estado fundamental. Lo mejor que se pudo hacer en este sentido, fue analizar la situación correspondiente a reemplazar los doblones por huecos. Desde el punto de vista magnético, esta situación difiere levemente de la anterior. Si bien en un estado ordenado rígido como el que se muestra en (4.15) serían equivalentes, en un estado con doblones y holones deslocalizados, esta equivalencia no es estricta, ya que el proceso de “hopping” con $t_{AB} \neq 0$, permite un cruce efectivo entre un doblón y un holón, resultando una repulsión efectiva entre los mismos de menor magnitud que en el caso de dos huecos. En la Fig. 4.9 se comparan las dos situaciones en una cadena de $L = 8$ sitios, y se analiza el comportamiento del factor de estructura a densidad fija de partículas cuando aumenta el tamaño del sistema. Los cálculos se realizaron con el método de Monte Carlo de líneas de mundo para valores de la inversa de la temperatura $\beta = 20$, con una discretización del tiempo imaginario $\Delta\tau = 0.125$. Puede observarse el ancho finito del pico “incommensurado” del factor de estructura a medida que aumenta el tamaño del sistema, consistente con el movimiento de los huecos en el fondo antiferromagnético. Para completar el análisis, se realizaron cálculos del “gap” de carga y del parámetro K_ρ con diagonalización de Lanczos para cadenas de $L = 8, 10, 12$ sitios. Los resultados se muestran en la Fig. 4.10. En la estimación del “gap” de carga y el peso de Drude, pueden observarse oscilaciones en la región de U en los cuales el número de doblones es finito. Tales oscilaciones pueden entenderse como una consecuencia de la diferente densidad de doblones en las distintas cadenas para un mismo valor de U . Por ejemplo, para $U = 2.5$, la cadena con $L = 8$ tiene $D \sim 1$, la de $L = 10$ tiene $D \sim 1.5$ y la de $L = 12$ tiene $D \sim 1.9$ sitios doblemente ocupados. En un sistema con las características estudiadas, el análisis en función de la longitud debiera realizarse en sistemas con igual densidad de doblones, pero resulta prácticamente inaccesible. A pesar de los efectos de tamaño, el valor finito del

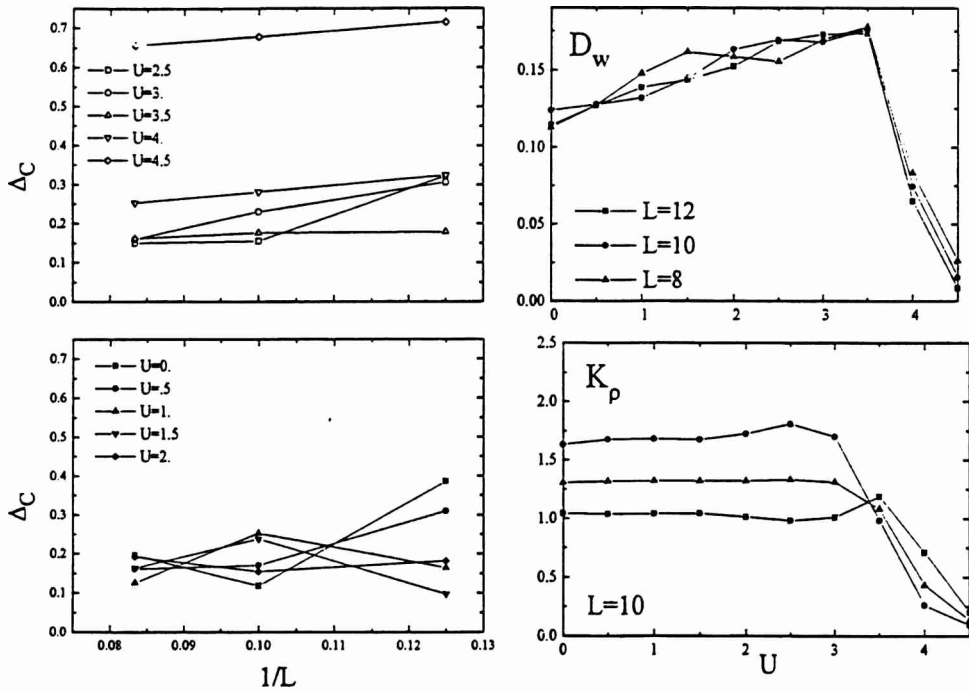


Figura 4.10: “Gap” de carga como función de la inversa de la longitud para varios valores de U y $t_{AB} = 0.2$, peso de Drude D_w en cadenas de distinta longitud como función de U para cadenas de $L = 8, 10, 12$ sitios, y las tres estimaciones diferentes de K_ρ para $L = 10$ sitios. (a) corresponde a ecs. (2.65) y (2.69), (b) a ecs. (2.65) y (2.66) y (c) a (2.66) y (2.69).

peso de Drude y el pequeño valor del “gap” de carga para valores de $U \lesssim 3.5$ parecen indicar características metálicas, sin embargo la dispersión entre las diferentes maneras de estimar K_ρ podrían poner en duda la validez de un comportamiento de líquido de Tomonaga-Luttinger. Por motivos análogos, tampoco fue posible realizar un “escaleo” de las energías para calcular el valor de la carga central en este caso, lo cual constituiría un examen independiente. Para valores de $U \gtrsim 3.5$, la naturaleza aislante se pone de manifiesto en el rápido descenso del peso de Drude, así como en el aumento del valor del “gap” de carga. Esto último es consistente con el valor despreciable del número de sitios doblemente ocupados y con el desarrollo de correlaciones antiferromagnéticas importantes.

Para $t_{AB} = 0.4$, la imagen de los doblones y holones está más desdibujada, aunque siguen observándose picos “incommensurados” en el factor de estructura magnético. Esto significa que la función de onda del estado fundamental tiene una proyección importante sobre los estados pertenecientes al subespacio con un número óptimo de doblones y holones, en una “mezcla” de estados con diferente número de doblones y holones. Los efectos de tamaño finito no son tan serios en este caso, como puede apreciarse en la Fig. 4.11. También en este caso, los resultados del “gap” de carga y del peso de Drude sugieren la existencia de un régimen con características metálicas para valores de $U \lesssim 3$. La estimaciones de K_ρ sugieren que las correlaciones superconductoras son dominantes, aunque la dispersión entre las distintas estimaciones es de $\sim 15\%$. El cálculo de la carga central, que se indica también en la Fig. 4.11 conduce a $c \sim 1$ dentro de un error inferior a 10%, en este caso, lo cual es consistente con un comportamiento de líquido de Tomonaga-Luttinger. Apartamientos impor-

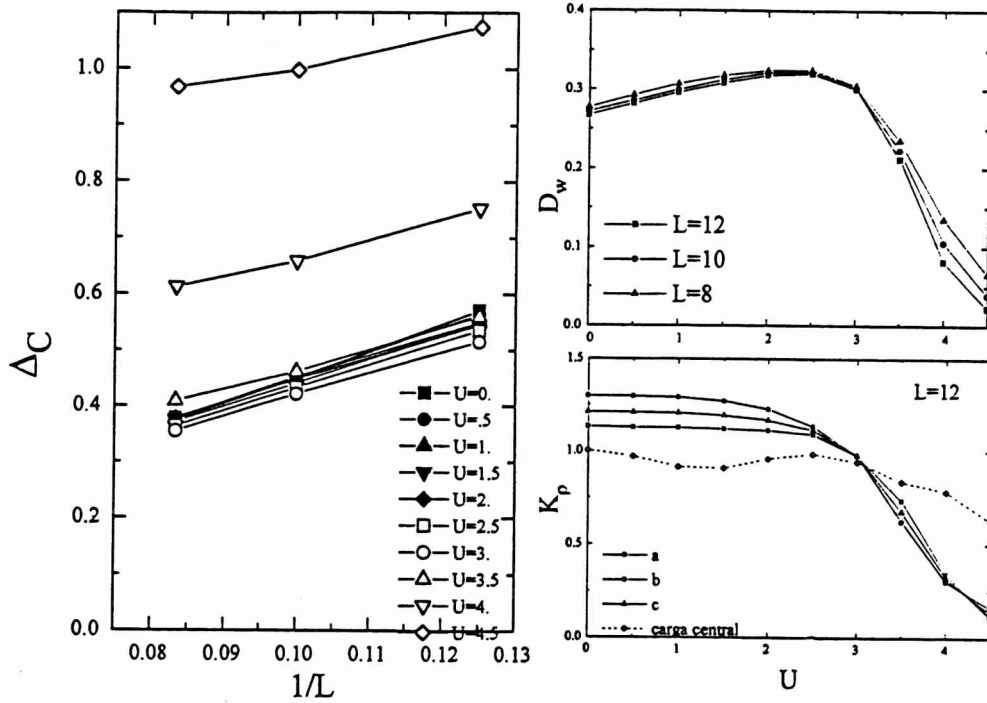


Figura 4.11: “Gap” de carga como función de la inversa de la longitud para varios valores de U y $t_{AB} = 0.4$, peso de Drude D_w para cadenas de $L = 8, 10, 12$ sitios, y las tres estimaciones diferentes de K_ρ para $L = 12$ sitios. (a) corresponde a ecs. (2.65) y (2.69), (b) a ecs. (2.65) y (2.66) y (c) a (2.66) y (2.69).

tantes de este valor se observan para $U \gtrsim 3$, en forma consistente con el incremento del “gap” de carga, el decaimiento del peso de Drude y el desarrollo de correlaciones antiferromagnéticas dominantes.

En las Figs. 4.12 y 4.13 se muestran los resultados correspondientes a $t_{AB} = 0.6, 0.8$. Para estos valores, la imagen de doblones y holones está totalmente desdibujada en este caso, no observándose picos “incommensurados” en el factor de estructura magnético. En estos casos, se encuentran efectos de tamaño despreciables en el cálculo de las distintas cantidades calculadas para la estimación de K_ρ . Los resultados indican una fase de líquido de Tomonaga-Luttinger con correlaciones superconductoras dominantes para valores de U inferiores a un valor crítico U_C que disminuye a medida que t_{AB} se acerca al límite Hubbard puro ($t_{AB} = 1$).

4.4 El Efecto de la Repulsión Coulombiana a Primeros Vecinos.

En el límite Hubbard extendido, el efecto de la repulsión entre partículas situadas en sitios primeros vecinos, es el de inducir la formación de una onda de densidad de carga consistente en dos redes intercaladas, una de las cuales contiene todos los sitios doblemente ocupados y la otra, todos vacíos. Como se mostró anteriormente, esta es también la situación en una región de parámetros del límite $t_{AB} = 0$. Para $U = 0$ y $t_{AB} = 0$, existe un valor crítico de V a partir del cual se forma completamente la onda de densidad de carga. Para valores inferiores a ese valor crítico, la existencia de un número finito de espines no apareados es energéticamente favorable, ya que esta situación permite que el sistema gane energía cinética por el movimiento de los

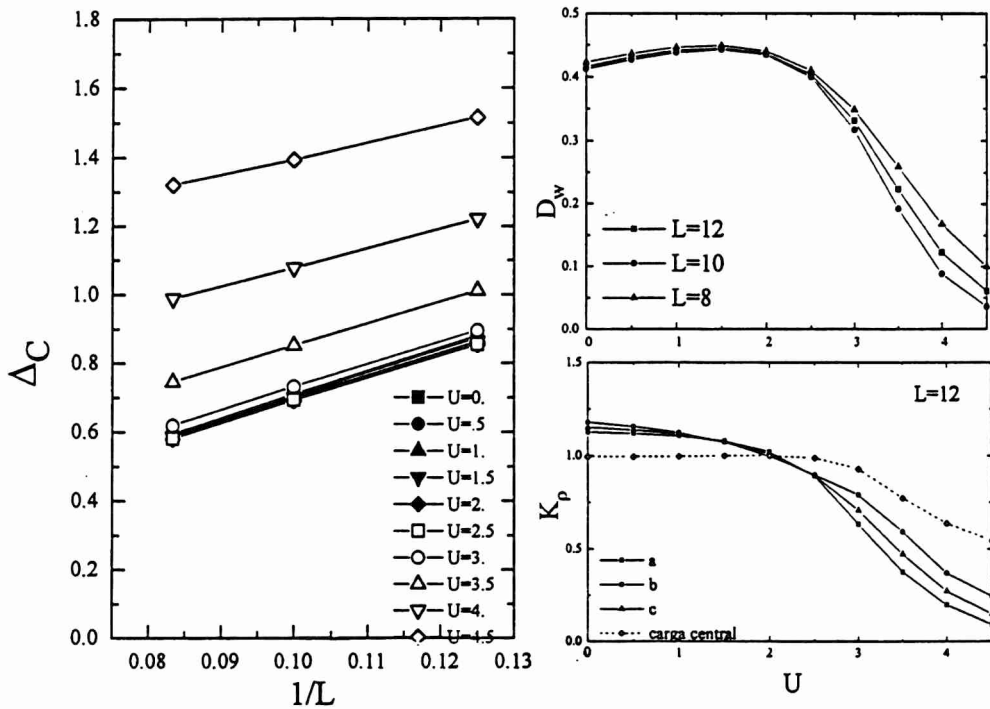


Figura 4.12: “Gap” de carga como función de la inversa de la longitud para varios valores de U y $t_{AB} = 0.6$, peso de Drude D_w para cadenas de $L = 8, 10, 12$ sitios, y las tres estimaciones diferentes de K_p para $L = 12$ sitios. (a) corresponde a ecs. (2.65) y (2.69), (b) a ecs. (2.65) y (2.66) y (c) a (2.66) y (2.69).

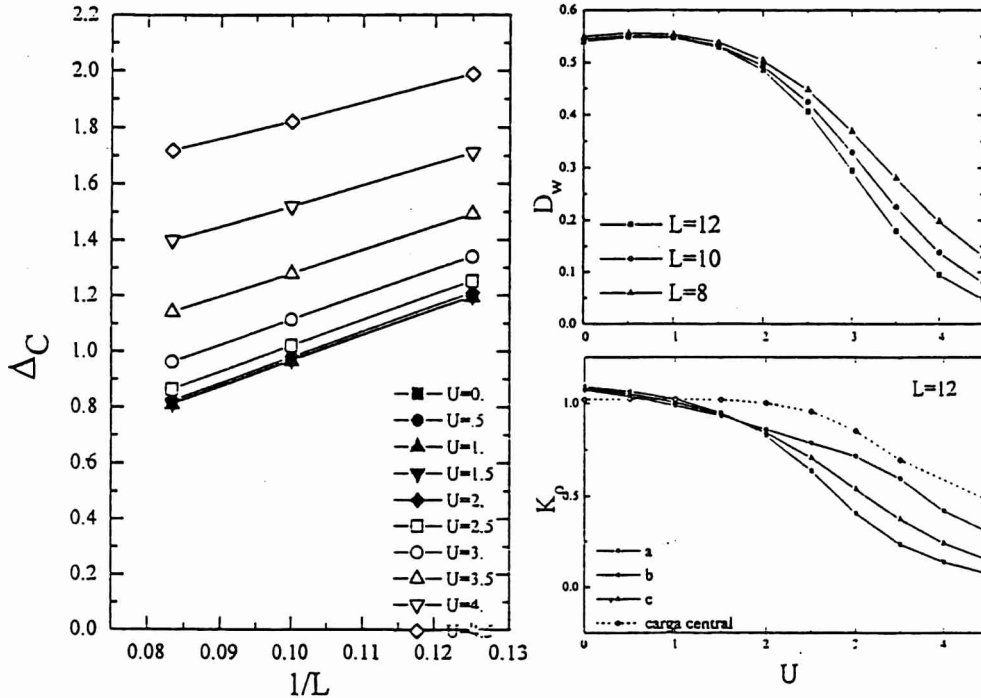


Figura 4.13: “Gap” de carga como función de la inversa de la longitud para varios valores de U y $t_{AB} = 0.8$, peso de Drude D_w para cadenas de $L = 8, 10, 12$ sitios, y las tres estimaciones diferentes de K_p para $L = 12$ sitios. (a) corresponde a ecs. (2.65) y (2.69), (b) a ecs. (2.65) y (2.66) y (c) a (2.66) y (2.69).

mismos en un fondo de onda de densidad de carga incompleta. En el caso del modelo de Hubbard extendido, la onda de densidad de carga se forma, en cambio, para valores de V arbitrariamente pequeños en el caso de $U = 0$, como se muestra en la Fig. 4.1 [24], [25]. Para t_{AB} pequeños, se observan, por lo tanto picos “incommensurados” en el factor de estructura de carga

$$C(q) = \frac{1}{L} \sum_{j,l} \exp(-iql) \langle \psi_0 | n_j n_{j+l} | \psi_0 \rangle. \quad (4.16)$$

En forma análoga al factor de estructura magnético, el factor de estructura de carga correspondiente a una onda de densidad de carga presenta un pico en $q = \pi$. De manera que los picos “incommensurados”, en este caso están asociados a la distorsión producida por el movimiento de los espines no apareados en el fondo de onda de densidad de carga, en forma análoga a la presentada en la sección anterior para el caso de los doblones y holones moviéndose en el fondo de espines con correlaciones antiferromagnéticas. En la Fig. 4.14 puede observarse que el desarrollo del pico en π corresponde a la saturación en el número de sitios doblemente ocupados. A diferencia del caso estudiado en la sección anterior, se observa el desarrollo de un “gap” de carga importante para valores de V pequeños y un brusco decaimiento del peso de Drude, aún en el régimen de $t_{AB} < 0.6$, en el cual existen partículas con movilidad, como puede apreciarse en la Fig. 4.15.

Finalmente, se realizaron cálculos de Monte Carlo para estudiar el valor de V para el cual se forma la onda de densidad de carga a U finito. Se analizó el caso particular de $t_{AB} = 0.6$ y $U = 1$. Los resultados de la sección anterior muestran que para $V = 0$, esta situación corresponde a un régimen de líquido de Tomonaga-Luttinger con correlaciones superconductoras dominantes, mientras que los resultados de [24], [25] en el límite Hubbard extendido, que se muestran en la Fig. 4.1 indican que la formación de la onda de densidad de carga tiene lugar a $V \sim 0.5$. En la Fig. 4.16 puede apreciarse la evolución de los factores de estructura de carga y de espín. Como se mencionó anteriormente, el ensanchamiento del pico de $S(q)$ en torno a $q = \pi$ está asociado con la distorsión del fondo antiferromagnético generado por el movimiento de partículas. Los resultados de las Figs. 4.16 y 4.17 sugieren que la formación de la onda de densidad de carga tiene lugar para $V_C \sim 0.5$, al igual que en el límite Hubbard extendido. Los resultados de la Fig. 4.18 son consistentes con la existencia de una fase de líquido de Tomonaga-Luttinger con correlaciones superconductoras dominantes, dentro de la región de valores de $V < V_C$.

4.5 Resumen y Discusión.

En este capítulo se ha analizado el efecto de la repulsión coulombiana a primeros vecinos en el límite exactamente soluble $t_{AB} = 0$ del modelo con diferentes amplitudes de “hopping” presentado en el capítulo anterior. Ha sido posible definir regiones de parámetros donde el estado fundamental exacto es un aislador de Mott o una onda de densidad de carga. También se delimitó una línea en la que el sistema tiene un comportamiento metálico. Esta última denominación no es estrictamente válida para el caso unidimensional, pero los restantes rasgos del diagrama de la Fig. 4.2 son válidos para redes bipartitas de dimensionalidad arbitraria. Luego se analizó la evolución hacia el límite Hubbard puro a partir del límite $t_{AB} = 0$. Se mostraron las diferencias en el comportamiento magnético para el caso bidimensional y unidimensional. En el primero, la fase metálica contiene polarones magnéticos en el estado fundamental

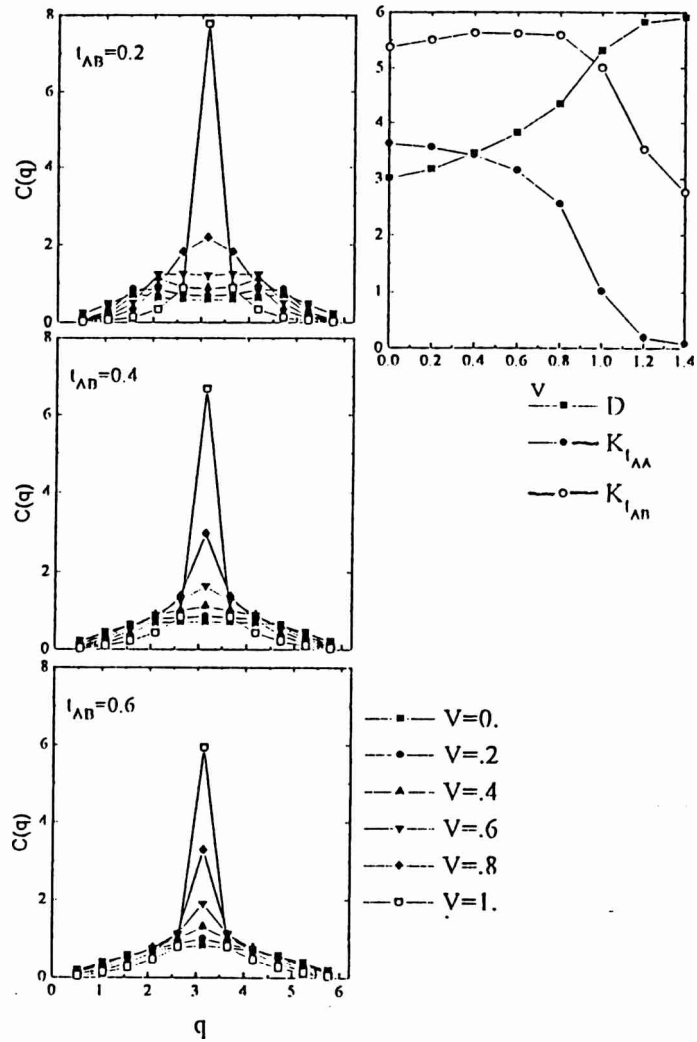


Figura 4.14: Factor de estructura de carga en una cadena de $L = 12$ sitios para varios valores de V y t_{AB} , y $U = 0$, número de sitios doblemente ocupados D y las contribuciones a la energía cinética para $t_{AB} = 0.2$.

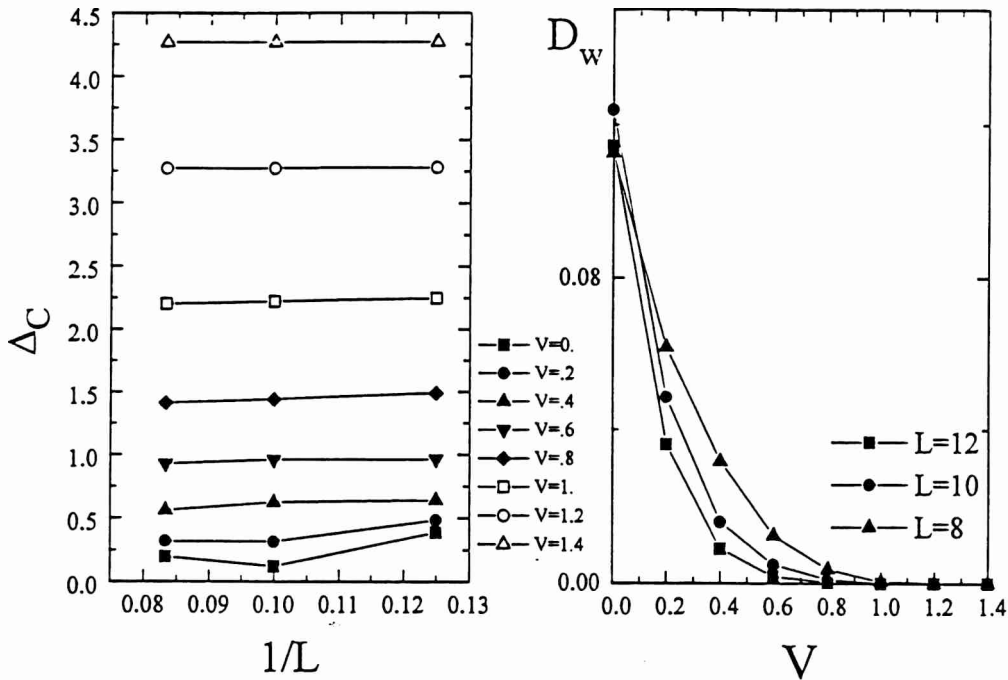


Figura 4.15: “Gap” de carga como función de la inversa de la longitud y peso de Drude en cadenas de $L = 8, 10, 12$ sitios, para $t_{AB} = 0.2$, $U = 0$ y varios valores de V .

formados por configuraciones de Nagaoka correspondientes a un doblón o un holón rodeados por una nube ferromagnética. Para valores de t_{AB} superiores al valor crítico $t_{AB}^c \sim 0.5$, el espín total del estado fundamental es $S = 0$ y el espectro de excitaciones adquiere características similares a las del modelo de Hubbard. En el caso unidimensional, valores de t_{AB} finitos parecen facilitar el desarrollo de propiedades metálicas. En el estado fundamental se observan, al igual que en el caso bidimensional, efectos asociados a la existencia de doblones y holones para t_{AB} pequeños, aunque en este caso no existe la nube ferromagnética de Nagaoka. Los doblones y holones se desplazan en un fondo antiferromagnético introduciendo distorsiones que se manifiestan el factor de estructura magnético. A medida que aumenta t_{AB} , los estados con un número determinado de doblones y holones se “mezclan” cada vez más en la función de onda del estado fundamental con otros estados que contienen diferente número de doblones y holones. Sin embargo, para $t_{AB} \neq t_{AA} = t_{BB}$, el estado fundamental tendrá una proyección mayor sobre el subespacio que tiene algún número óptimo de doblones, ya que para valores diferentes de los parámetros de “hopping”, esta es la situación que permite la mayor ganancia de energía cinética. Finalmente, la existencia de estas entidades tiene asociadas correlaciones superconductoras, y la posibilidad de “hopping” efectivo de pares formados por partículas situadas en sitios vecinos dentro de este subespacio, esquemáticamente:

$$| \quad | \quad (| \quad |) | \quad | \quad | \quad | \quad \circ \quad \xrightarrow{t_{RR}} \quad | \quad (| \quad |) \quad | \quad | \quad | \quad | \quad \circ. \quad (4.17)$$

Esta interpretación daría cuenta de las correlaciones superconductoras dominantes observadas en el marco de la teoría de líquidos de Luttinger. Y es interesante que una pequeño apartamiento respecto del límite Hubbard puro es suficiente para la aparición de una fase con correlaciones superconductoras *en banda semillena!* Finalmente, se consideró el efecto de la repulsión coulombianas a primeros vecinos y se comparó con la situación correspondiente al límite Hubbard extendido usual. Se encontró que para

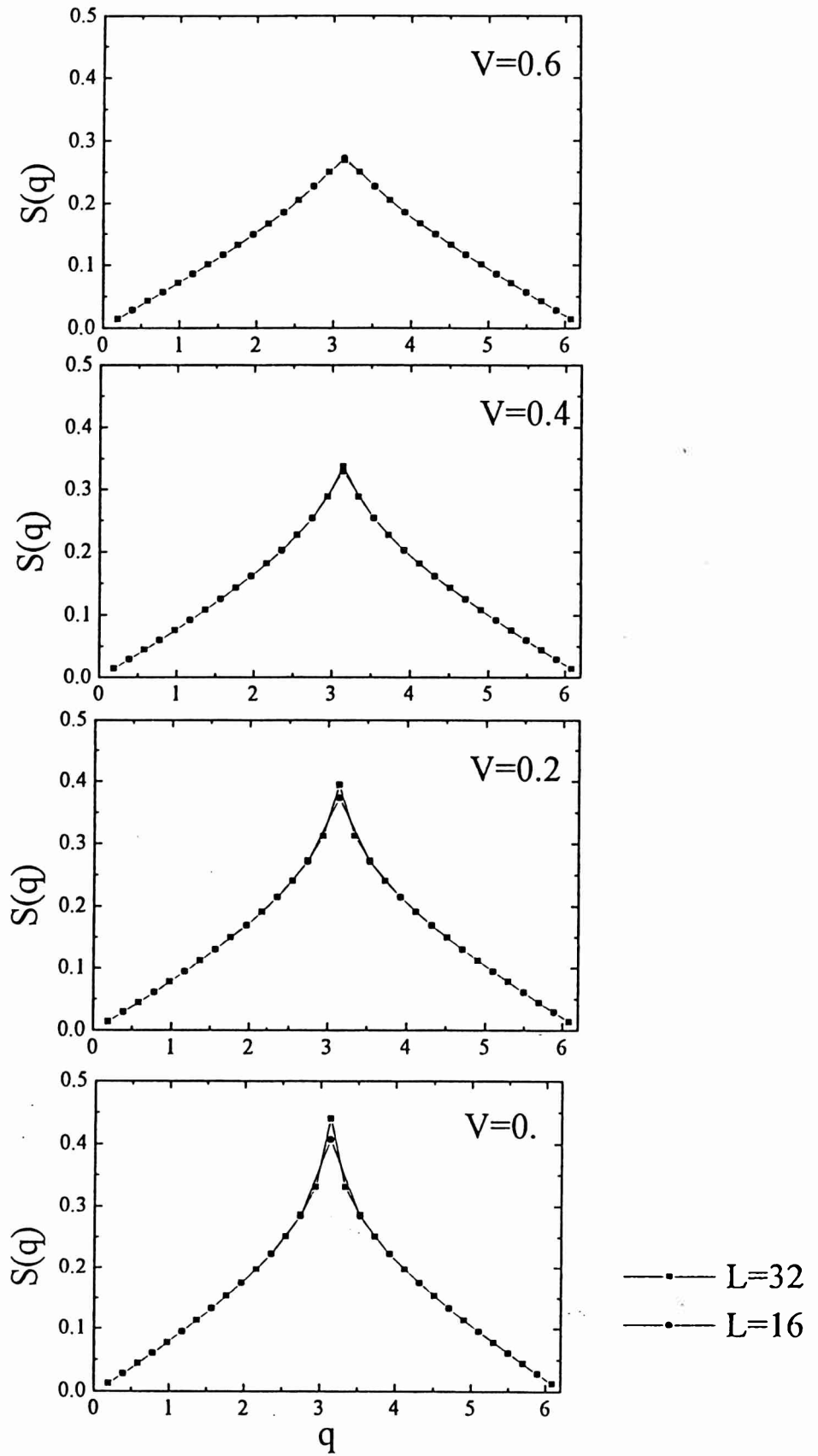


Figura 4.16: Evolución del factor de estructura de espín en cadenas de $L = 16, 32$ sitios para $U = 1$, $t_{AB} = 0.6$ y varios valores de V .

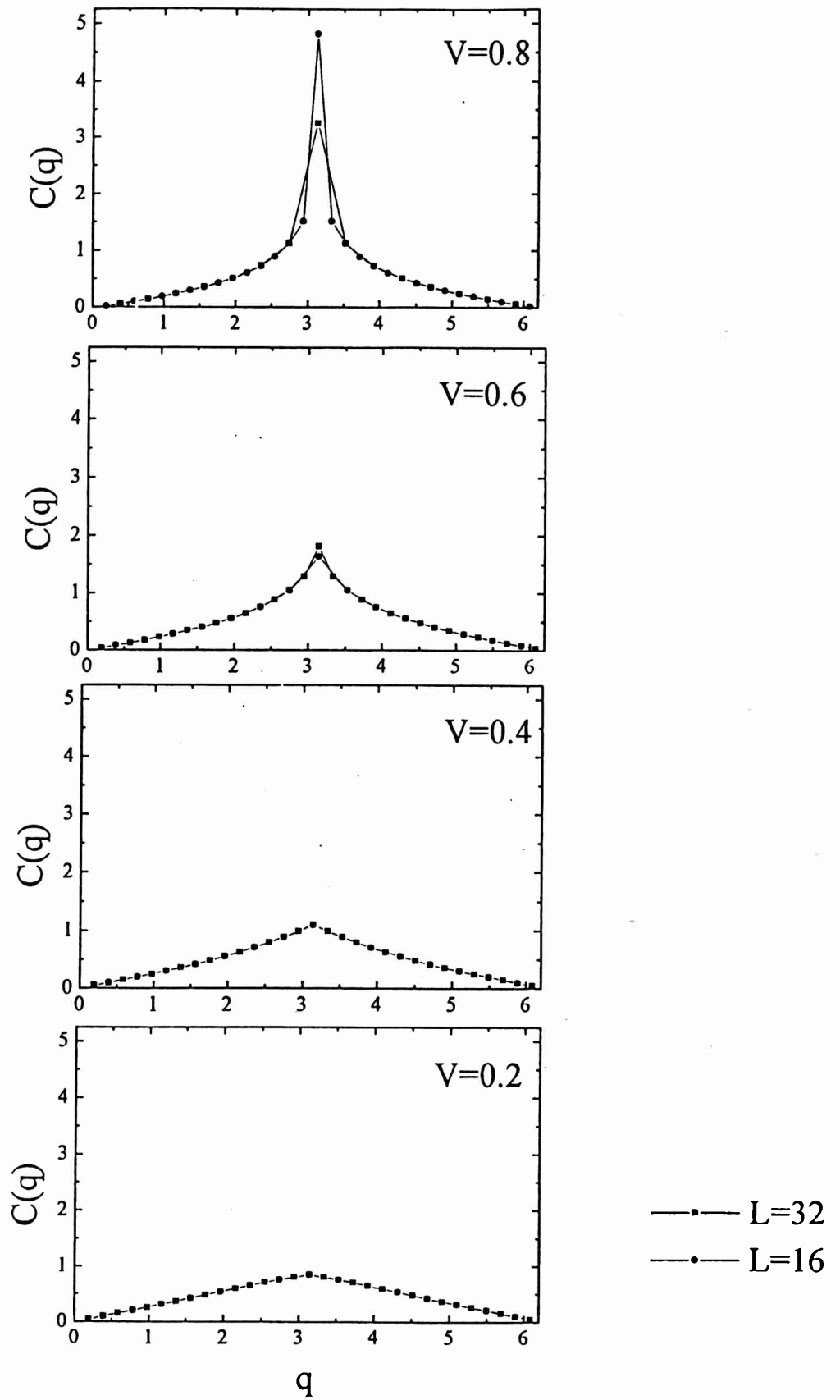


Figura 4.17: Evolución del factor de estructura de carga en cadenas de $L = 16, 32$ sitios para $U = 1$, $t_{AB} = 0.6$ y varios valores de V .

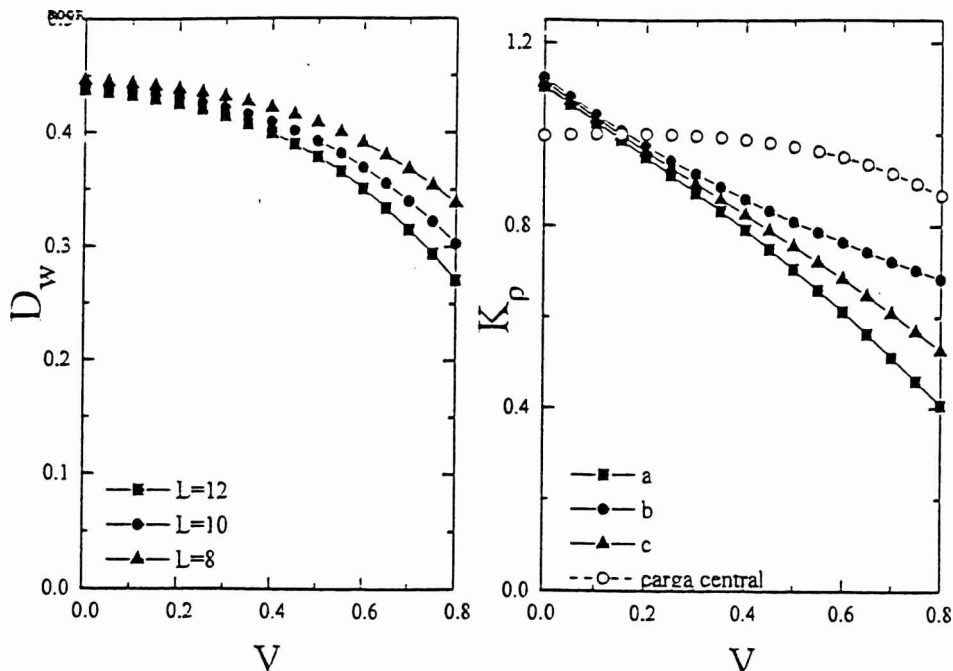


Figura 4.18: Peso de Drude D_w para cadenas de $L = 8, 10, 12$ sitios, y las tres estimaciones diferentes de K_ρ para $L = 12$ sitios. (a) corresponde a ecs. (2.65) y (2.69), (b) a ecs. (2.65) y (2.66) y (c) a (2.66) y (2.69).

$t_{AB} \gtrsim 0.6$ la fase de onda de densidad de carga es similar a la del límite Hubbard extendido usual. Por debajo de este valor de t_{AB} y $U = 0$, la total realización del orden de largo alcance de la onda de densidad de carga no es energéticamente favorable, existiendo espines no apareados que se mueven en un fondo de onda de densidad de carga, sin embargo se encuentra la existencia de un “gap” de carga y por lo tanto un comportamiento aislante del sistema. Para U finito, la formación de la onda de densidad de carga tiene lugar aproximadamente para los mismos valores de V que en el límite Hubbard. Sin embargo, en este caso, existe una región de parámetros para la cual la transición a la onda de densidad de carga no tiene lugar desde una fase de onda de densidad de espín, como en el límite Hubbard extendido puro, sino desde una fase con características metálicas y correlaciones superconductoras. Estos resultados indican un fase metálica emergente cuando se consideran apartamientos respecto del límite Hubbard extendido. Esto daría lugar a especulaciones sobre la relación entre esta fase y la existencia del punto tricrítico, y con el cambio en el orden de la transición entre la onda de densidad de espín y de carga en el modelo de Hubbard extendido. Concretamente, podría sospecharse que el punto tricrítico consiste en el confinamiento a un único punto de una fase metálica que se abre cuando $t_{AB} < 1$, aunque por el momento, esto no deja de ser una mera conjetura.

4.A Apéndice A. Método de Lanczos para las Propiedades Dinámicas.

Se supone que se quiere calcular una función espectral con la forma general

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \langle \psi_0 | O^\dagger \frac{1}{\omega + E_0 + i\epsilon - H} O | \psi_0 \rangle \right\}, \quad (4.A.1)$$

donde O es un operador que depende de la función de Green que se analiza, $|\psi_0\rangle$ es el estado fundamental del hamiltoniano H , E_0 es la correspondiente energía, ω es la frecuencia y ϵ es un número real pequeño, introducido para correr los polos de la función de Green en cuestión fuera del eje real. Introduciendo la base completa de autovectores de H , $\sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| = 1$, y usando que

$$\frac{1}{x + i\epsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x), \quad (4.A.2)$$

se llega a

$$I(\omega) = \sum_n |\langle\psi_n|O|\psi_0\rangle|^2 \delta(\omega - (E_n - E_0)), \quad (4.A.3)$$

donde E_n son los autovalores correspondientes a los $|\psi_n\rangle$. En la práctica, se considera $\delta(x) = (1/\pi)\epsilon/(x^2 + \epsilon^2)$.

La función espectral (4.A.3) puede ser evaluada a partir de la técnica de Lanczos [46], partiendo del estado inicial

$$|\phi_0\rangle = \frac{O|\psi_0\rangle}{\sqrt{\langle\psi_0|O^\dagger O|\psi_0\rangle}}. \quad (4.A.4)$$

Considérese la identidad matricial $(z - H)(z - H)^{-1} = I$, con $z = \omega + E_0 + i\epsilon$ y con las matrices escritas en la base (2.B.2), construída a partir de $|\phi_0\rangle$ dado en (4.A.4). Se obtiene $\sum_n (z - H)_{mn}(z - H)_{np}^{-1} = \delta_{mp}$. En particular, para $p = 0$, resulta $\sum_n (z - H)_{mn}x_n = \delta_{m0}$, donde $x_n = (z - H)_{n0}^{-1}$. Esto representa un sistema de ecuaciones para los x_n , siendo $x_0 = \langle\phi_0|(z - H)^{-1}|\phi_0\rangle$, la cantidad que interesa estudiar. El sistema se resuelve usando la regla de Cramer. En la base considerada, la matriz $z - H$ tiene elementos diagonales $(z - H)_{n,n} = a_n$ y los elementos de las subdiagonales principales inferiores y superiores son $(z - H)_{n,n+1} = (z - H)_{n+1,n} = -b_n$, con a_n y b_n definidos en el apéndice C. del capítulo 2, mientras que los restantes elementos de matriz son nulos. De esta manera, resulta $x_0 = \det B_0 / \det(z - H)$ siendo B_0 la matriz que resulta de reemplazar la primera columna de $z - H$ por la columna que tiene primer elemento 1 y los restantes 0. El determinante de $(z - H)$ puede desarrollarse como $\det(z - H) = (z - a_0)\det D_1 - b_1^2 \det D_2$, con $\det D_1 = \det B_0$, siendo D_n la matriz que resulta de remover las n primeras filas y las n primeras columnas de $(z - H)$. Luego, puede escribirse

$$x_0 = \frac{1}{z - a_0 - b_1^2 \frac{\det D_2}{\det D_1}}. \quad (4.A.5)$$

El cociente entre determinantes también admite un desarrollo similar, de manera que

$$\frac{\det D_2}{\det D_1} = \frac{1}{z - a_1 - b_2^2 \frac{\det D_3}{\det D_2}} \quad (4.A.6)$$

y continuando el procedimiento, se obtiene la fracción continua

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{\langle\psi_0|O^\dagger O|\psi_0\rangle}{z - a_0 - \frac{b_1^2}{z - a_1 - \frac{b_2^2}{z - a_2 - \dots}}} \right\}. \quad (4.A.7)$$

De esta manera, es posible calcular la función espectral para un sistema de tamaño finito, a partir de iteraciones sucesivas con el método de Lanczos, obteniéndose tantos polos como iteraciones (no necesariamente se busca explorar el subespacio completo).

4.B Apéndice B. Método de Monte Carlo de Líneas de Mundo.

El método de Monte Carlo cuántico de líneas de mundo [68] está especialmente diseñado para tratar modelos unidimensionales de tipo Hubbard, cuyos hamiltonianos están definidos en el espacio real y admiten una decomposición de la forma $H = H_{imp} + H_{par}$, donde $H_{imp} = \sum_{\langle ij \rangle} H_{\langle ij \rangle}$, con la suma sobre los sitios i impares, y $H_{par} = \sum_{\langle ij \rangle} H_{\langle ij \rangle}$, con la suma sobre los sitios i pares, mientras que $\langle ij \rangle$ denota el par formado por el sitio i , y su vecino a la derecha. Además el hamiltoniano tiene la forma $H_{par/imp} = K_{par/imp} + V/2$, donde K es el término cinético y V el de interacción.

La idea básica, común a todos los métodos de Monte Carlo, es es la de calcular un valor medio *clásico* de la forma

$$\langle O \rangle = \sum_n P(n) O(n), \quad (4.B.1)$$

en forma estocástica. Dado un conjunto de números aleatorios, n_1, n_2, \dots, n_L , distribuidos según la ley $P(n) = \lim_{L \rightarrow \infty} (1/L) \sum_{i=1}^L \delta_{n, n_i}$. Se aproxima el valor medio (4.B.1) por el promedio calculado en el conjunto reducido de L estados,

$$\langle \tilde{O} \rangle = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L O(n_i). \quad (4.B.2)$$

Dado que (4.B.2) es una suma sobre variables aleatorias, está distribuido normalmente, y el error estadístico está determinado por la varianza de $O(n)$,

$$\langle \tilde{O} \rangle = \langle O \rangle \pm \frac{\sigma}{\sqrt{L}}, \quad \sigma^2 = \sum_n (O(n) - \langle O \rangle)^2 P(n). \quad (4.B.3)$$

Desde el punto de vista práctico, una forma de generar los L estados, de acuerdo a la distribución $P(n)$, puede ser la fuerza bruta, generando números r al azar en el intervalo $0 < r \leq 1$, y eligiendo un estado cualquiera n_T . El estado correspondiente es aceptado si $P(n_T) \geq r$. De acuerdo con lo que ocurre generalmente, la fuerza bruta resulta un proceso poco eficiente. En este caso, implica demasiados intentos hasta aceptar un cambio. Una alternativa más eficiente es el algoritmo de Metropolis [17], que consiste en partir de l estados, etiquetados con índices $n_i, i = 1, \dots, l$ luego seleccionar un nuevo estado, etiquetado por n_T , "apenas apartado" del estado n_l . Se calcula el cociente $R = P(n_T)/P(n_l)$ y se compara con un número al azar r . Si $R \geq r$, el nuevo estado es aceptado y se incorpora al conjunto, $n_{l+1} = n_T$. En problemas en los que los cambios son tan pequeños que $R \sim 1$, es conveniente usar el algoritmo del "baño térmico", en el que la probabilidad de transición se define como $R/(1+R)$. En la práctica, se seleccionan estados iniciales cualesquiera para iniciar el proceso. Esto implica la necesidad de aplicar el procedimiento descrito varias veces hasta llegar a una situación de equilibrio, a partir de la cual se considera el inicio del algoritmo propiamente dicho. Debe tenerse en cuenta, además, que los cambios que se proponen para generar el estado n_T "apenas apartado" del estado n_l debe ser tal que se satisfaga el balance detallado: $p(n_i \rightarrow n_j) = p(n_j \rightarrow n_i)$.

El punto de partida para formular el método de Monte Carlo de líneas de mundo, es el valor de expectación *cuántico* en el conjunto canónico de un operador que admita

una descomposición similar a la del término cinético, es decir, en la forma $O = O_{imp} + O_{par}$,

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(\exp(-\beta H) O), \quad Z = \text{Tr} \exp(-\beta H). \quad (4.B.4)$$

Se utiliza un procedimiento similar al de la integral funcional para tratar Z . El intervalo de tiempo imaginario $0 < \tau < \beta$ se divide en m intervalos de ancho $\Delta\tau = \beta/m$ (pasos de Trotter), aproximando la función de partición por

$$Z = \text{Tr} \left(\underbrace{\exp(-\Delta\tau H_{imp}) \exp(-\Delta\tau H_{par}) \dots \exp(-\Delta\tau H_{imp}) \exp(-\Delta\tau H_{par})}_{1, \dots, m} \right) + O(1/m)^2, \quad (4.B.5)$$

luego se introduce $1 = \sum_R |R\rangle\langle R|$ entre los $2m$ factores exponenciales, siendo $|R\rangle$ configuraciones de partículas en el espacio real, y se utiliza la fórmula de Suzuki-Trotter $\exp(A+B) = [\exp(A/2m) \exp(B/m) \exp(A/2m)]^m + O(1/m^2)$ para descomponer las exponenciales con K y V , resultando

$$Z = \sum_{R_1, \dots, R_{2m}} \left\{ \prod_{\alpha=1}^m \langle R_{2\alpha-1} | \exp(-\Delta\tau K_{par}) | R_{2\alpha} \rangle \langle R_{2\alpha} | \exp(-\Delta\tau K_{imp}) | R_{2\alpha+1} \rangle \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2} \sum_{\alpha=1}^{2m} E^V(R_\alpha)\right) \right\}, \quad (4.B.6)$$

con $R_{2m+1} = R_1$. Puede utilizarse una descomposición similar para el valor medio (4.B.4). El método de Monte Carlo, que se explicó anteriormente puede utilizarse identificando la probabilidad clásica $P(n) \rightarrow A(R_1, \dots, R_{2m})/Z$, donde $A(R_1, \dots, R_{2m})$ denota uno de los sumandos de (4.B.6).

El término entre llaves se factoriza, además, entre las dos componentes de espín. Los elementos de matriz de $\langle R_n | \exp(-\Delta\tau K_{imp/par}) | R_{n+1} \rangle$ pueden descomponerse en productos de elementos de matriz entre estados de dos sitios,

$$\langle R | \exp(-\Delta\tau K_{imp/par}) | R' \rangle = \prod_{i=imp/par} \langle R_i R_{i+1} | \exp(-\Delta\tau K_{imp/par}) | R'_i R'_{i+1} \rangle, \quad (4.B.7)$$

donde $|R_i R_{i+1}\rangle, |R'_i R'_{i+1}\rangle$ denota configuraciones de dos sitios vecinos, de la forma $|\gamma_i \gamma_{i+1}\rangle_1 \times |\gamma_i \gamma_{i+1}\rangle_2$, con $\gamma_{j\sigma} = 1, 0$ indicando que el sitio está ocupado o vacío, respectivamente, para cada componente de espín. El producto secuencial de configuraciones, se esquematiza en gráficos [52] como los que se muestran en la Fig. 4.19, correspondiendo un “damero” para cada espín. Los cuadrados con doble recuadro del tablero señalan las plaquetas sobre las cuales “actúa” el hamiltoniano. Los cuadros inferiores dentro de una “rebanada” de tiempo imaginario $\Delta\tau$, están asociados a H_{par} y los superiores a $H_{imp/par}$. El cálculo de la traza en forma exacta implica la suma sobre todas las líneas de mundo posibles, que satisfagan condiciones de contorno periódicas en el tiempo. El procedimiento de Monte Carlo, en cambio, supone la suma sobre unas pocas, elegidas adecuadamente. En la práctica se parte de una configuración arbitraria de líneas en cada damero, luego se proponen deformaciones de estas líneas. El tipo de deformación es local, como la que se muestra en la Fig 4.19., y genera un nuevo estado que resulta un “apartamento pequeño” respecto del anterior. El cambio propuesto se acepta o no, dependiendo del valor de R o de $R/(1+R)$, (dependiendo si se considera el algoritmo de Metrópolis o del baño térmico), en comparación con un número al azar r .

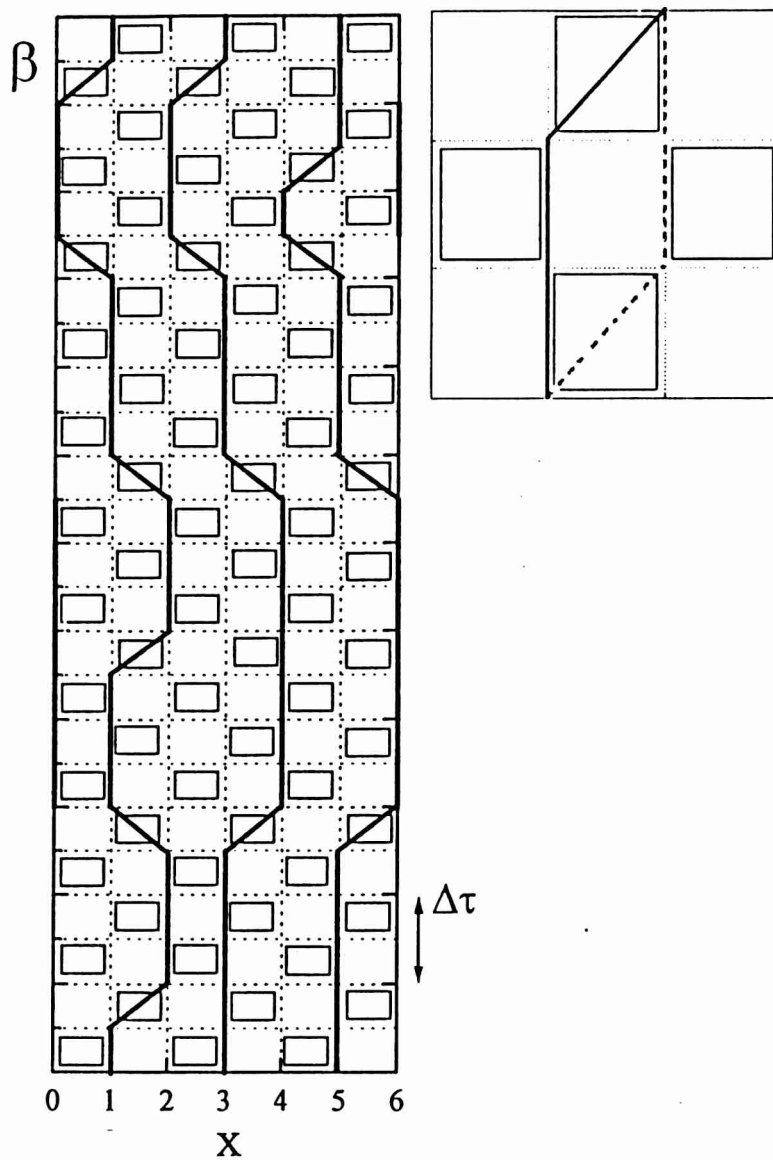


Figura 4.19: Líneas de mundo para tres fermiones en una red de $L = 6$ sitios (izquierda). El eje horizontal corresponde al espacio y el vertical al tiempo imaginario. Cambios locales en las líneas de mundo (derecha).

Capítulo 5

Resumen y Conclusiones.

En la primera parte de esta tesis, se propuso una extensión de la aproximación de Gutzwiller para aproximar el estado fundamental del hamiltoniano de Hubbard. Se reformuló la técnica de Gutzwiller tradicional para el caso unidimensional y sistemas finitos, de manera de tomar en cuenta el efecto de las correlaciones espaciales, sin realizar aproximaciones adicionales. Esto permitió, por un lado, estudiar las deficiencias introducidas por las aproximaciones adicionales que se realizan en los tratamientos usuales, y por otro lado, incluir en el formalismo, nuevos parámetros variacionales que incorporan el efecto de las correlaciones entre cargas y espines situados en posiciones vecinas de la red. Se obtuvieron resultados muy precisos en el cálculo de la energía del estado fundamental, sin la predicción de resultados patológicos como la transición de Brinkman-Rice que se encuentra con el tratamiento usual, así como también en el cálculo de las funciones de correlación.

Luego se realizó un estudio exhaustivo de un modelo efectivo para los cupratos superconductores de alta temperatura crítica. Este modelo constituye una generalización del modelo de Hubbard y consiste en considerar parámetros de "hopping" que dependen de la ocupación de los sitios involucrados en el proceso cinético. Se realizó un estudio numérico de la versión unidimensional del modelo, tomando como base interpretativa la teoría de líquidos de Luttinger. Se analizó el comportamiento a grandes distancias de las funciones de correlación para un amplio rango de valores de los parámetros del modelo y se delimitaron las regiones en las que las correlaciones superconductoras son dominantes. En particular, se analizaron aquellas regiones de parámetros que pueden ser representativas de situaciones "realistas" para los cupratos superconductores.

También fue posible resolver analíticamente el modelo para valores particulares de los parámetros de "hopping", $D=1$ y condiciones de contorno abiertas. Este caso particular, corresponde al hamiltoniano de Hubbard usual, en el cual se suprime el proceso de "hopping" que no conserva la doble ocupación, el cual es el responsable de las correlaciones antiferromagnéticas. El estado fundamental es altamente degenerado, existiendo regímenes en los cuales existen estados con orden de largo alcance no diagonal en este subespacio. Para el caso particular de banda semillena, el sistema exhibe una "transición de Mott" para un valor de $U > 0$ finito. Sin embargo, puede demostrarse que como consecuencia de la topología estrictamente unidimensional, la fase metálica queda inhibida. En sistemas con mayor dimensionalidad, no fue posible hallar la solución exacta en general, pero si fue posible definir regiones de parámetros en los que el estado fundamental es una onda de densidad de carga o un aislador de Mott. Considerando, además el efecto de la repulsión coulombiana a

primeros vecinos en límite exactamente soluble mencionado previamente, fue posible determinar exactamente algunas de las fronteras que delimitan a estas regiones. La existencia de la transición de Mott fue confirmada para el caso bidimensional en base a resultados numéricos. A partir de un estudio numérico de las funciones espectrales, se analizó la evolución del modelo hacia el límite Hubbard puro, en el cual todos los parámetros de "hopping" toman el mismo valor. Para banda semillena, se encontraron estructuras de polarones conformados por doblones o holones rodeados por nubes ferromagnéticas. Estas estructuras evolucionan hacia estados dominados por correlaciones antiferromagnéticas a medida que se tiende al límite Hubbard puro. Finalmente, se estudió la evolución hacia el límite Hubbard en el caso unidimensional. Se encuentra un comportamiento bastante diferente al correspondiente a 2D, esencialmente por la no validez del teorema de Nagaoka en los sistemas unidimensionales. En este caso se realizaron cálculos de las funciones de correlación con el método de Monte Carlo de líneas de mundo. Se encontró la formación de estructuras inconmensuradas en el factor de estructura magnético para banda semillena. Estas estructuras son similares a las observadas fuera de banda semillena y, en el caso estudiado, están asociadas a la existencia de un número finito de holones y doblones. Se complementó el estudio con el análisis del comportamiento de líquido de Luttinger y de las funciones de correlación a grandes distancias. Se encontró la existencia de una región con características metálicas y con correlaciones superconductoras dominantes, aún en situaciones cercanas al límite Hubbard. Esta región metálica se extiende para valores finitos de la repulsión coulombiana a primeros vecinos, y su naturaleza puede estar vinculada con la existencia del punto tricrítico en el modelo de Hubbard extendido usual.

Bibliografía

- [1] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinsky, “Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics”, Dover Publications, New York (1975).
- [2] A. A. Aligia, Liliana Arrachea, and E. R. Gagliano, Phys. Rev. B., aceptado para su publicación.
- [3] A. A. Aligia, M. E. Simón and C. D. Batista, Phys. Rev. B 49, 1361 (1994) y referencias allí citadas.
- [4] P. W. Anderson, “Concepts in Solids”, Ed. Reading, W. A. Benjamin (1963).
- [5] P. W. Anderson, Science 235, 1196 (1987).
- [6] P. W. Anderson, Rev. Mod. Phys. 38, 298 (1966).
- [7] L. Arrachea, N. Canosa, R. Rossignoli, and A. Plastino, Phys. Lett. A 176, 353 (1993); L. Arrachea, N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli. Proceedings of the XVI International Workshop on Condensed Matter Theories, “Condensed Matter”, Vol. 8, Plenum Press (1992); L. Arrachea, N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli, Scientia 167, 357 (1992).
- [8] L. Arrachea, A. Aligia, E. Gagliano, K. Hallberg and C. Balseiro, Phys. Rev. B. 50, 16044 (1994).
- [9] Liliana Arrachea, and A. A. Aligia, Phys. Rev. Lett. 73, 2240 (1994).
- [10] Liliana Arrachea, E. R. Gagliano, and A. A. Aligia, en redacción.
- [11] Baeriswyl, J. Carmelo and Luther, Phys. Rev. B 33, 7247 (1986).
- [12] D. Baeriswyl, P. Horsch, and K. Maki, Phys. Rev. Lett. 60, 70 (1988).
- [13] C. A. Balseiro, A. G. Rojo, E. R. Gagliano, and B. Alasio, Phys. Rev. B, 38, 9315 (1988).
- [14] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B 64, 189 (1986).
- [15] A. A. Belavin, A. M. Polyakov and A. B. Zamolodchikov, Nucl. Phys. B 241, 333 (1984).
- [16] V. I. Belinicher and A. L. Chernyshev, Phys. Rev. B 49, 9746 (1994).
- [17] K. Binder, “Monte Carlo Methods in Statistical Physics”, Topics in Current Physics, Vol. 7, ed. K. Binder (Springer, Berlin, 1979).

- [18] R. J. Birgeneau, and G. Shirane, "Physical Properties of High Temperature superconductors I", ed. D. M. Ginsberg, World Scientific (1989).
- [19] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, *Phys. Rev. D* 24, 2278 (1981).
- [20] H. W. J. Blöte, J. Cardy and M. P. Nightingale, *Phys. Rev. Lett* 56, 742 (1986).
- [21] C. Bourbonnais, F. Creuzet, D. Jérôme, K. Bechgaard and A. Motadpour, *J. Phys. (Paris) Lett* 45, L755 (1984).
- [22] W. F. Brinkman and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* 2, 1324(1970).
- [23] N. Byers and C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* 7, 46 (1961).
- [24] Joel W. Cannon and Eduardo Fradkin, *Phys. Rev. B* 41 9435 (1990).
- [25] Joel W. Cannon, Richard T. Scalettar and Eduardo Fradkin, *Phys. Rev. B* 44 5995 (1991).
- [26] N. Canosa, A. Plastino and R. Rossignoli, *Phys. Rev. A* 40, 519 (1989); *Nucl. Phys. A*, 512, 492 (1989); *Phys. Rev. A* 43, 1445 (1991).
- [27] S. Coleman, *Phys. Rev. D* 11, 2088 (1975).
- [28] Elbio Dagotto and Adriana Moreo, *Phys. Rev. D* 31 865 (1985).
- [29] S. Doniach and E. H. Sondheimer, "Green's Functions for Solid State Physicists". *Frontiers in Physics* (1974).
- [30] I. E. Dzyaloshinsky and A. I. Larkin, *Soviet Phys. JETP* 38, 202 (1974).
- [31] V. J. Emery, "The Many Body Problem in One Dimension".
- [32] V. J. Emery, "Theory of the One-Dimensional Electron Gas".
- [33] V.J. Emery, "Highly conducting One-Dimensional Solids", editado por J.T. De Vreese, R.P. Evvard y V.E. Van Doren (Plenum, New York, 1979).
- [34] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* 58, 2794 (1987).
- [35] V. J. Emery and G. Reiter, *Phys. Rev. B* 38, 4547 (1988).
- [36] H. Eskes, G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. Lett.* 61, 1415 (1988).
- [37] H. Eskes, G. A. Sawatzky, and L. F. Feiner, *PhysicaC* 160, 424 (1989).
- [38] Fabian H. Essler, Vladimir E. Korepin, and Kareljan Schoutens, *Phys. Rev. Lett.* 70, 73 (1992); *Phys. Rev. Lett.* 68, 2960 (1992).
- [39] P. Fazekas and K. Penc, *Int. J. Modern Phys. B* 2, 4302 (1988); P. Fazekas, *Int. J. Modern. Phys. B* 3 39 (1989).
- [40] L. F. Feiner, M. Grilli, and D. Di Castro, *Phys. Rev. B* 45, 10647 (1992).
- [41] B. Fourcade and G. Spronken, *Phys. Rev. B* 29, 5012 (1984).
- [42] B. Fourcade and G. Spronken, *Phys. Rev. B* 29, 5089 (1984).

- [43] E. Fradkin, "Field Theories of Condensed Matter Systems", (Frontiers in Physics, 1991).
- [44] H. Frahm and V.E. Korepin, Phys. Rev. B 42, 10553 (1990).
- [45] E. R. Gagliano, A. A. Aligia, Liliana Arrachea and Michel Avignon, Phys. Rev. B., aceptado para su publicación.
- [46] E. R. Gagliano, E. Dagotto, A. Moreo and F. Alcaraz, Phys. Rev. B 34, 1677 (1986); E. R. Gagliano and C. Balseiro, Phys. Rev. Lett. 59, 2999 (1987).
- [47] J. T. Gammel and D. K. Campbell, Phys. Rev. Lett. 60, 71 (1988); D. K. Campbell, J. T. Gammel, and E. Y. Loh, Phys. Rev. B 42, 475 (1990).
- [48] T. Giamarchi and H. J. Schulz, Phys. Rev. B 37, 325 (1988).
- [49] Y. Grandati, Ann. Phys. Fr. 17, 159 (1992).
- [50] J. B. Grant and A. K. MacMahan, Phys. Rev. Lett., 66, 488 (1991).
- [51] C. Gross, R. Joynt, and T. M. Rice, Phys. Rev. B, 36, 381 (1987).
- [52] J. Gubernatis and W. Somsy, Int. J. Mod. Phys. C 3, 1 (1992).
- [53] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. 10, 159 (1963); Phys. Rev. 134, A923 (1964); Phys. Rev. 137, A1726 (1965).
- [54] F. D. M. Haldane, J. Phys. C 14, 2585 (1981).
- [55] F. D. M. Haldane Phys. Rev. Lett 45, 1358 (1980).
- [56] F. D. M. Haldane Phys. Rev. Lett 47, 1840 (1981).
- [57] K. Hashimoto, Phys. Rev. B 38, 7368 (1985).
- [58] R. Heidenreich, R. Seiler and D. A. Uhlenbrock, J. Stat Phys. 22, 27 (1980).
- [59] Y. Hidaka and m. Suzuki, Nature 338, 635 (1989); Nature 338, 49 (1989).
- [60] J. Hirsch and S. Tang, Phys. Rev. Lett 62, 591 (1989).
- [61] J.E. Hirsch, Physica C 158, 326 (1989); Phys.Lett.A 134, 451 (1989); J.E. Hirsch and F. Marsiglio; Phys.Rev. B 39, 11 515 (1989); F. Marsiglio and J.E. Hirsch, ibid 41, 6435 (1990).
- [62] J.E. Hirsch and F. Marsiglio; Phys.Rev. B 39, 11 515 (1989); F. Marsiglio and J.E. Hirsch, ibid 41, 6435 (1990).
- [63] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B 48, 3327 (1993).
- [64] J. E. Hirsch and D. J. Scalapino, Phys.Rev. B 29, 5554 (1984).
- [65] J. E. Hirsch and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B 27, 7169 (1983); H. Q. Lin and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B 33, 8155 (1986).
- [66] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B 31, 6022 (1985).
- [67] J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett 53, 2327 (1984).

- [68] J. Hirsch, D. J. Scalapino and R. Blankenbecler, Phys. Rev. Lett. 47 1628 (1981).
- [69] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. London A276, 238 (1963); A277, 237 (1964); A281, 401 (1964).
- [70] M. S. Hybertsen, M. Schlüter, and N. E. Christensen, Phys. Rev. B. 35, 8807 (1989).
- [71] M. S. Hybertsen, E. B. Steschel, M. Schlüter, and D. R. Jennison, Phys. Rev. B 44, 7504 (1991).
- [72] C. Itzykson and J. M. Drouffe, "Statistical field theory", Vol. 2, Cambridge Monographs on Mathematical Physics.
- [73] G. Japaridze and E. Müller-Hartmann, Ann. Phys. (Leipzig) 3, 163 (1994).
- [74] R. Jastrow, Phys. Rev. 98, 1479 (1955).
- [75] J. Jaynes, Phys. Rev. 106, 620 (1957); Phys. Rev. 108, 171 (1957).
- [76] J. J. Jefferson, H. Eskes, and L. F. Feiner, Phys. Rev. B 45, 7959 (1992).
- [77] D. Jérôme and H. J. Schulz, Adv. Phys. 31, 299 (1992).
- [78] J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. 30, 275 (1963).
- [79] T. A. Kaplan, P. Horsch, and P. Fulde, Phys. Rev. Lett. 49, 889 (1982).
- [80] A. Katz, "Principles of Statistical Mechanics", (Freeman, San Francisco, 1967).
- [81] S. Kivelson, W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Phys. Rev. Lett. 58, 1899 (1988).
- [82] W. Kohn, Phys. Rev. 133, A171 (1964).
- [83] W. Kohn and D. Sherrington, Rev. Mod. Phys. 42, 1 (1970).
- [84] G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. 57, 1362 (1986).
- [85] H. R. Krishnamurthy, C. Jayaprakash, S. Sarker, and W. Wenzel, Phys. Rev. Lett. 64, 950 (1990).
- [86] P. Kuiper, G. Kruizinga, J. Ghisen, M. Gioni, G. A. Sawatzky, P. J. W. Weijss, F. H. M. de Groot, H. Verweij, L. F. Feiner, and H. Petersen, Phys. Rev. B 38, 6483 (1988).
- [87] H. Q. Lin, E. R. Gagliano, D. K. Campbell, E. H. Fradkin, and J. E. Gubernatis, enviado a Phys. Rev. B; Proceedings of the 1993 Nato AKW on "The Physics and Mathematical Physics of the Hubbard Model", editado por D. Baeriswyl (Plenum, 1995).
- [88] S. Liang, B. Douçot, and P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. 61, 365 (1988).
- [89] E. H. Lieb, and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett 20, 1445 (1968).
- [90] E. H. Lieb and D. Mattis, Phys. Rev. 125 164 (1962).

- [91] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. 62, 1201 (1989).
- [92] E. H. Lieb, T. Schultz and d. C. Mattis, Ann. Phys. 16, 407 (1961).
- [93] Wolfgang von der Linden, Physics Report 220 (1992).
- [94] P. B. Littlewood, C. M. Varma and E. Abrahams, Phys. Rev. Lett. 63, 2602 (1989).
- [95] A. Luther and V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. 33, 589 (1974).
- [96] A. Luther and I. Peschel, Phys. Rev. B 9 2911 (1974); Phys. Rev. Lett. 32 992 (1975).
- [97] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. (N.Y.) 4, 1154 (1963).
- [98] A. K. McMahan, J. F. Annett, and R. M. Martin, Phys. Rev. B 39, 9028 (1990).
- [99] G. Mahan, "Many Particle Physics", (Plenum, New York and London, 1981).
- [100] D. C. Mattis, J. Math. Phys. 15, 609 (1974).
- [101] D. C. Mattis and E. H. Lieb, J. Math. Phys. 6, 304 (1965).
- [102] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. 17, 1133 (1966); L. D. Landau and E. M. Lifshitz, "Statistical Physics" (London: Pergamon) (1959).
- [103] W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. B 37, 7382 (1988).
- [104] A. Moreo and D. Scalapino, Phys. Rev. B 41 2313 (1990).
- [105] N.F.Mott, *Metal-Insulator Transitions*, (Taylor & Frances, London,1974).
- [106] Y.Nagaoka, Phys. Rev. 147,392(1966). 401(1964).
- [107] N. Nücker, J. Fink, J. C. Fuggle, P. J. Durham, and W. M. Temmerman, Phys. Rev. B 37, 5158 (1988).
- [108] M. Ogata, M.U. Luchini, S. Sorella, and F.F. Assaad, Phys.Rev.Lett. 66, 2388 (1991).
- [109] T. Ogawa, K. Kanda, Z. Phys. B 30, 355 (1978); T. Ogawa, K. Kanda, and T. Matsubara, Prog. Theor. Phys. 53, 614 (1975).
- [110] A. M. Oleś, J. Phys. C 15, L1065 (1982).
- [111] A. A. Ovchinnikov, Mod. Phys. Lett 7, 1397 (1993).
- [112] L. Paige, J. Inst. Math. Phys. 18, 341 (1976); 10, 373 (1972).
- [113] R. E. Peierls, " Quantum Theory of Solids" (London: Oxford University Press) (1955); H. Frölich, Proc. R. Soc. 223 A, 296 (1954).
- [114] K. Penc and F. Mila, Phys. Rev. B 49, 9670 (1994).
- [115] D. Penn, Phys. Rev. 142, 350 (1966).

- [116] Proceedings of the Conference M²S HTSC II, Stanford, 1989, editado por R. N. Shelton, W. A. Harrison and N. E. Phillips [*Physica C* 162-164]; *Strongly Correlated Electron Systems*, Proceedings of the Anniversary Adriatico Conference and Workshop, editado por G. Baskaran, A. E. Ruckenstein, E. Tosati and Y. Lu, Progress in High Temperature Superconductivity Vol. 23 (World Scientific, Singapore, 1990).
- [117] S. Robaszkiewicz, R. Micnas, and K. A. Chao, *Phys. Rev. B* 24, 4018 (1981).
- [118] M. J. Rozenberg, Z. Y. Zhang, and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett* 69, 1236 (1992); A. Georges and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* 64, 1240 (1992).
- [119] R. T. Scalettar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, A. Moreo S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, *Phys. Rev. Lett* 62, 1407 (1989); A. Moreo and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* 66, 946 (1991).
- [120] H. Shiba, *Prog. Theor.Phys. B* 18, 2171 (1972).
- [121] D. J. Scalapino, S. D. White, S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* 68, 2830 (1992).
- [122] A. Schadschneider, *Phys. Rev. B* 51, en prensa.
- [123] H.J. Schulz, *Phys. Rev. Lett* 64, 2831 (1990).
- [124] H. J. Schulz, *Int. Jour. Mod. Phys B* 5, 57, (1991).
- [125] H. J. Schultz, *Phys. Rev. Lett*, 64, 1445 (1990).
- [126] H. B. Schüttler and A. J. Fedro, *Phys. Rev. B* 45, 7588 (1992).
- [127] M.E. Simón, M. Balaña, and A.A. Aligia, *Physica C* 206, 297 (1993).
- [128] M.E. Simón and A.A. Aligia, *Phys.Rev. B* 48, 7471 (1993).
- [129] J. O. Sofo, C. A. Balseiro and H. E. Castillo, *Phys. Rev. B* 45, 9860 (1992).
- [130] J. Solyom, *Adv.Phys.* 28, 201 (1979).
- [131] G. Shirane, Y. Endok, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. Hidaka, M. Oda, M. Suzuki, and T. Murakami, *Phys. Rev. Lett.* 59, 1613 (1987).
- [132] E. B. Stechel and D. R. Jennison, *Phys. Rev. B* 38, 4632 (1988).
- [133] Stolhoff and Fulde, *Z. Phys. B* 26, 257 (1977); *Z. Phys. B* 29, 231 (1978).
- [134] R. Strack and D. Vollhardt, *Phys.Rev.Lett.* 70, 2637 (1993).
- [135] H. B. Thacker, *Rev. Mod. Phys.* 53, 253 (1981); A. M. Tselick and P. B. Wiegmann, *Adv. Phys.* 32, 453 (1983); A. A. Aligia, C. A. Balseiro, and C. R. Proetto, *Phys. Rev. B* 33, 6476 (1986); y referencias allí citadas.
- [136] S. Tomonaga, *Prog. Theor. Phys. Osaka* 5, 349 (1950).
- [137] J. M. Tranquada, *Phys. Rev. B* 38, 1477 (1988).
- [138] M. Troyer, H. Tsunetsugu, T.M. Rice, J. Riera and E. Dagotto, preprint.