

# OPTIMIZACIÓN DE UN MODELO PARA LOS PLANOS $\text{CuO}$ EN EL $\text{La}_2\text{CuO}_4$

OPTIMIZATION OF A MODEL FOR THE  $\text{CuO}$  PLANES IN  $\text{La}_2\text{CuO}_4$

Y. VIELZA<sup>a †</sup> Y A. CABO MONTES DE OCA<sup>b †</sup>

a) Facultad de Física, UH, Colina Universitaria, Vedado, La Habana, Cuba. yvielzadelacruz@gmail.com<sup>†</sup>

b) Departamento de Física Teórica, Instituto de Cibernética, Matemática y Física, Calle E, No. 309, Vedado, La Habana, Cuba. cabo@icimaf.cu<sup>†</sup>

<sup>†</sup> autor para la correspondencia

(Recibido 6/9/2014 ; Aceptado 8/10/2014)

Se extiende un estudio previo donde se consideró el efecto del dopaje con huecos en un modelo simple de las capas  $\text{CuO}_2$  del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Se reajustan los parámetros con el objetivo de fijar los valores del gap del material en 2 eV y su constante dieléctrica cercana a 21. De nuevo se obtienen indicios de una transición de fase “escondida” dentro del “domo” superconductor. La transición es de segundo orden y está asociada a la coincidencia energética de un estado básico aislante (AFA) con un estado excitado paramagnético que muestra un Pseudogap (PPG) en un punto crítico de concentración de huecos cercano a  $x_c = 0.2$ . Se presenta la evolución con el dopaje de las bandas y las superficies de Fermi en las fases AFA y PPG. En la zona de bajo dopaje los huecos comienzan a ocupar los estados situados en la frontera de la zona de Brillouin, que en el estado AFA son los que cargan el antiferromagnetismo más intenso. Alrededor del dopaje crítico los resultados muestran que ambas fases tienden a coincidir en sus superficies de Fermi y los espectros de energía de los estados ocupados.

The results of a previous work, where it was considered the effect of hole doping on a simple model of the  $\text{CuO}_2$  planes in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , are extended. The parameters are adjusted in order to fix the known values of the gap of 2 eV for this material and its dielectric constant of 21. We find again indications of a “hidden” phase transition inside the superconductor dome. The transition is a second order one, and is associated with an energetic coincidence of a ground insulator state (AFA) with an excited paramagnetic state showing a pseudogap (PPG), at a critical point of the hole concentration around  $x_c = 0.2$ . We show the evolution as a function of doping of the band structures and the Fermi surface of the system in the phases AFA and PPG. In the zone of low doping, the holes begin to occupy the states located at the Brillouin zone, that in the AFA states have the strongest antiferromagnetic character. Around the critical doping the results show that in both phases the Fermi surfaces and the energy spectrum of the filled electronic states tend to coincide.

**PACS:** Cuprate superconductors 74.72.-h, Strongly correlated electron systems 71.27.+a, Metalinsulator transitions 71.30.+h, La-based cuprates 74.72.Dn, Theories and models of many electron systems 71.10.- w

## I. INTRODUCCIÓN

En 1986 Georg Bednorz y Alex Müller, al investigar compuestos basados en el óxido de cobre, descubren los superconductores de alta temperatura crítica (HTSC por sus siglas en inglés) [1], generando un enorme interés en este tipo de materiales conocidos como “cupratos”. Estos sistemas cuentan con una estructura cristalina en la que se observan capas de óxidos de cobre que controlan el comportamiento del material ante el paso de la corriente eléctrica. En el estado normal la conducción eléctrica en estos planos es aproximadamente cien veces mayor que en la dirección perpendicular. Por esta razón se dice que, en cuanto a la conducción eléctrica, los cupratos son sistemas cuasi-bidimensionales [2]. Estos materiales tienen diferencias notables respecto a los superconductores que habían sido encontrados no sólo por su alta temperatura crítica, que no es explicable por la famosa teoría BCS, sino también debido a sus no convencionales propiedades físicas en la fase normal.

En contra de lo esperado a priori, los cupratos son aislantes de Mott y los electrones localizados se ordenan de forma

antiferromagnética. Un aislante de Mott es un sistema electrónico que se encuentra en una fase en la cual hay un gap en el espectro de energías de una partícula y este gap está generado por las fuertes correlaciones electrónicas y no por las características de la red como en los aislantes usuales. El paso de la corriente eléctrica en este tipo de materiales se inhibe para evitar que haya dos electrones en el mismo átomo ya que debido a la fuerte repulsión esto costaría mucha energía. Por su parte la fuerte tendencia de los cupratos a tener estados electrónicos ordenados se evidencia de las famosas fases tipo *nemáticas* o *de stripes* las cuales rompen alguna simetría espacial del sistema. Estas fases han sido intensamente estudiadas en superconductores de alta temperatura y actualmente pueden encontrarse en la literatura de distintos trabajos de resumen acerca del tema [3, 4]. La relación entre estos estados ordenados y los mecanismos que generan la superconductividad de alta temperatura son en la actualidad uno de los temas de mayor interés en la Física de la Materia Condensada.

Así, a pesar de la investigación intensiva y de muchas ideas prometedoras que buscan explicar la existencia de la

superconductividad no convencional, aun no se ha logrado un consenso respecto a la tesis más apropiada. Una de las teorías que parece tener la base necesaria para alcanzar este fin está basada en el proceso de dopar con huecos un aislante de Mott, y en ella la superconductividad se genera directamente de la fuerte interacción repulsiva de los electrones.

Dentro de la amplia familia de cupratos se encuentra el  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  quien figura como uno de los compuestos más estudiados experimentalmente. Su simple estructura cristalina y regulada concentración de huecos sobre los planos bidimensionales  $\text{CuO}_2$ , en un amplio régimen de dopaje, sugieren que una posible condensación de pares de huecos enlazados den lugar a propiedades de transporte superconductoras guiadas sobre las capas Cu-O.

Interesante resulta la variedad de fases de este material en la región de temperaturas cercanas al cero absoluto donde, en la medida que aumentamos la concentración de huecos, un estado AFA, existente a bajo dopaje, evoluciona hacia un estado superconductor y luego a un metal normal. No obstante, entre los aspectos más enigmáticos del diagrama de fases destaca una posible transición de fase cuántica dentro del Domo superconductor que se estima ocurre a cero temperatura en un punto crítico de concentración de huecos [5]. Resulta así necesario esclarecer los orígenes de la conducción en estos materiales y su evolución en la medida que se dopa el compuesto con vistas a descifrar la forma compleja que adopta su estructura. En particular nosotros estimamos que la existencia de estados ligados de huecos preformados en la fase AF aislante de Mott y su posterior condensación de Bose-Einstein muestran una ruta prometedora hacia la superconductividad.

Haciendo uso de un modelo de una banda resuelto en aproximación a HF, en las referencias [6, 7, 8] fue posible predecir la existencia tanto del estado aislante antiferromagnético como del estado de pseudogap en este material. Posteriormente en [13, 14], se introdujo el efecto de dopaje con huecos en dicho modelo, lo cual permitió describir varias propiedades de mucho interés del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  a  $T = 0$  K. Sin embargo, cabe subrayar que los resultados experimentales fijan el gap del estado básico AFA del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  a 2.0 eV [9] y su constante dieléctrica  $\epsilon$  a un valor cercano a 20 [10]. Los parámetros utilizados en [13], aunque fueron semejantes no coincidieron con esos valores (1.3 eV de gap y  $\epsilon$  aproximadamente igual a 10). De esa manera, la motivación central del presente trabajo la constituyó fijar con más precisión estas dos propiedades con vistas a establecer más apropiadamente dichos parámetros. En consecuencia, una vez optimizada las bases del modelo, también hicimos una corrección a los cálculos que incluyen el dopaje con huecos del compuesto. Como se describirá más adelante, en este proceso se prefijó nuevamente el ancho de la banda paramagnética obtenida de la solución HF, al valor del ancho 3.8 eV de la única banda que cruza el nivel de Fermi en los cálculos de bandas de Matheiss [11].

Describamos a continuación cómo procede la exposición. En la Sección 2 hacemos de inicio una revisión del modelo de una banda introducido en las referencias [6, 7, 8] y de su solución de campo medio. En esta sección también se realiza la fijación de los valores observados del gap (2 eV) y la constante dieléctrica ( $\epsilon = 21$ ) del material. La solución de campo medio brinda entonces los estados aislante y de pseudogap a semillado (ausencia de dopaje). Finalmente, en la Sección 3 se investigan los estados que predice el modelo para las capas Cu-O en función del dopaje con huecos. Se estudia la evolución de la superficie de Fermi y de los estados uniparticulares HF en las fases AFA y PPG. Todo ello permite profundizar la argumentación dada en [13, 14] acerca de la existencia de una transición de fase cuántica dentro del Domo superconductor, tal como indican los datos experimentales [5].

## II. MODELO DE TIGHT-BINDING DE LOS PLANOS $\text{CuO}$

En esta sección describiremos el modelo simplificado del plano cobre-oxígeno electrónico introducido en las referencias [6, 7, 8]. En la Figura 1, se ilustra el diagrama de bandas asociado al  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  obtenido mediante técnicas de LAPW (Linear Aumented Plane Waves) [4]. Describamos a partir de ese diagrama la construcción del modelo. Puede notarse que la última banda ocupada está semillena, lo cual predice un comportamiento metálico del material (hay una banda que atraviesa el nivel de Fermi en la Fig. 1). La forma de esta banda sugiere la validez de un esquema de electrones fuertemente ligados (TB) para el gas de electrones que la puebla. El electrón menos ligado al compuesto  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , es aquel que no se encuentra apareado en el  $\text{Cu}^{2+}$ , que a diferencia de los  $\text{O}^{2-}$  en el plano, no tiene su última capa (3d) cerrada. Estos electrones en un cuadro cualitativo, pueden estimarse como los que constituyen la única banda del material que corta el nivel de Fermi en los cálculos de la referencia [4]. Por esto es razonable considerar que esos electrones están fuertemente correlacionados a las celdas base  $\text{CuO}_2$  y con especial preferencia hacia los átomos de Cu correspondientes, asumida la completitud de capas del  $\text{O}^{2-}$ . La anterior idea justifica tomar como la red asociada al modelo TB que daría lugar a la banda semillena de la referencia [4], como una red cuadrada de puntos coincidentes con los sitios Cu en el plano  $\text{CuO}_2$ .

La presencia de todos los demás electrones que llenan las otras bandas en conjunto con las cargas nucleares que neutralizan la electrónica, juega un doble papel en el modelo. En primer lugar: como medio efectivo polarizable al cual asociamos cierta permitividad dieléctrica  $\epsilon$  que apantalla el campo producido por cualquier carga puntual extraña a él. En segundo lugar: por su distribución espacial y magnitud, se considera responsable en garantizar con su acción el orden periódico del sólido. Esto se modela a partir de suponer que esos electrones y cargas nucleares crean un potencial periódico confinante  $W_y$  en la red puntual. El modelo se completa considerando las interacciones internas del gas electrónico que semillena la banda considerada y además su interacción con el excedente de cargas (jellium) que los neutraliza  $F_b$ . A este lo modelamos como una distribución

gaussiana de cargas positivas alrededor de cada punto de la red, con radio característico  $b$ .

El Hamiltoniano del modelo tiene la forma

$$\hat{H}_0(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + W_\gamma(\mathbf{x}) + F_b(\mathbf{x}), \quad (1)$$

donde se tiene

$$W_\gamma(\mathbf{x}) = W_\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{R}), \quad (2)$$

$$F_b(\mathbf{x}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \sum_{\mathbf{R}} \int d^2y \frac{\exp(-\frac{(\mathbf{y}-\mathbf{R})^2}{b^2})/\pi b^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}, \quad (3)$$

donde  $b \ll p$  y los vectores que describen las coordenadas de los átomos de Cu se definen

$$\mathbf{R} = \begin{cases} (n_{x_1}p \mathbf{e}_{x_1} + n_{x_2}p \mathbf{e}_{x_2}) \\ \text{con } n_{x_1}, n_{x_2} \in \mathbb{Z} \end{cases}, \quad (4)$$

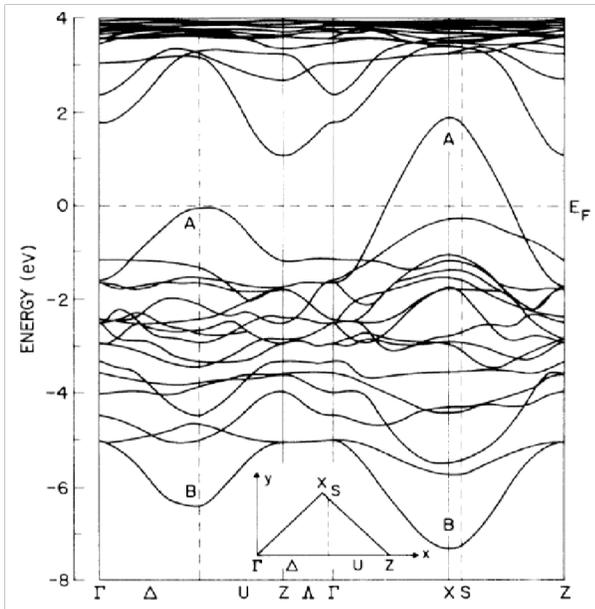


Figura 1: Estructura de bandas para el  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  calculada por Horsch y Stephan y cols. en 1993 y Matheiss y cols. en 1987. La banda semillena, predice un comportamiento tight-binding en el plano recíproco al  $\text{CuO}_2$  (dirección  $\Gamma$ -X).

siendo  $\mathbf{e}_{x_1}$  y  $\mathbf{e}_{x_2}$  los versores que están sobre las direcciones definidas por los vecinos más cercanos de esa red. Se conoce que la distancia entre un átomo de Cu y su vecino más próximo es  $p = 3,82 \text{ \AA}$  [18, 19]. Por otra parte se considera que la interacción entre un par de electrones del gas que semillena la banda electrónica en consideración está dada por el potencial de Coulomb:

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}, \quad (5)$$

la cual incluye una constante dieléctrica que se asume determinada por la respuesta electromagnética del gas de electrones y núcleos, ya que estos constituyen el medio en que se mueve el gas electrónico de la banda semillena en consideración. En su fase normal el  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  es antiferromagnético (Fig. 2 a) y se tiene que la invarianza de traslación que lleva de un Cu a

un Cu vecino cercano se rompe. Por ese motivo en [6, 7, 8] se consideró que los estados de una partícula en el tratamiento HF pudieran romper la invarianza de traslación. Por tanto el estado físico que describe los orbitales de HF debe ser invariante solamente ante las traslaciones discretas que transforman una subred en ella misma (Fig. 2 b), pero no ante las que transformen una subred en la otra. Este grupo de traslaciones es un subgrupo del conjunto de simetrías del cristal original y por ende su representación en el espacio inverso  $\mathbf{k}$ , debe ser más reducida en número de estados. Teniendo en cuenta lo mencionado antes, se definen cada una de las dos subredes puntuales  $r = 1$  o  $2$  en la forma:

$$\mathbf{R}^{(r)} = \sqrt{2}n_1p \mathbf{q}_1 + \sqrt{2}n_2p \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}^{(r)}, \quad (6)$$

$$\mathbf{q}^{(r)} = \begin{cases} \mathbf{0}, & \text{si } r = 1, \\ p \mathbf{e}_{x_1}, & \text{si } r = 2, \end{cases}$$

donde  $\mathbf{q}_1$  y  $\mathbf{q}_2$  son los versores base de ambas subredes.

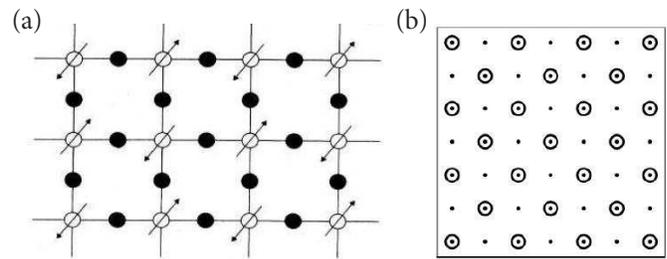


Figura 2: (a) Estructura magnética del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  en sus planos bidimensionales Cu-O. El Cu y el O se representan mediante círculos abiertos y cerrados respectivamente. (b) Red puntual asociada al modelo de los planos Cu-O. En la búsqueda de propiedades de correlaciones fuertes del gas de electrones fue útil liberar restricciones de simetría al separar la red puntual absoluta en dos subredes representadas con puntos coincidentes con los sitios de cobre.

Así pues, las soluciones que buscamos son autofunciones del grupo de traslaciones discretas  $\hat{T}_{\mathbf{R}^{(1)}}$ , que transforman una subred en sí misma:

$$\hat{T}_{\mathbf{R}^{(1)}}\phi_{\mathbf{k},l} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^{(1)})\phi_{\mathbf{k},l}. \quad (7)$$

Si la red puntual fuese infinita, la zona de Brillouin asociada a  $\hat{T}_{\mathbf{R}^{(1)}}$  sería la zona sombreada en la Figura 3a, mientras que el cuadrado continente representa la asociada al grupo de traslaciones en la red total. Dado que en un estudio numérico resulta imposible considerar la red infinita, escogeremos dentro ella una red de estados  $\mathbf{k}$  que implementen las condiciones de periodicidad de las  $\phi_{\mathbf{k},l}$  en las fronteras de la red total  $x_1 = -Lp$  y  $Lp$ ,  $x_2 = -Lp$  y  $Lp$  (Fig. 3b). Esta condición determina los valores

$$\mathbf{k} = \begin{cases} \frac{2\pi}{Lp}(n_{x_1}\mathbf{e}_{x_1} + n_{x_2}\mathbf{e}_{x_2}) \\ \text{con } n_{x_1}, n_{x_2} \in \mathbb{Z} \\ y \quad -\frac{L}{2} \leq n_{x_1} \pm n_{x_2} < \frac{L}{2} \end{cases}.$$

Luego el número de elementos en este subgrupo de traslaciones es la mitad de la cantidad de elementos que hay en el grupo de traslaciones en la red puntual absoluta. Trabajemos ahora en una base que cumpla con (7). Definamos así la base tight-binding en aproximación de una banda

$$\begin{aligned} \varphi_{\mathbf{k}}^{(r,\sigma_z)}(\mathbf{x}, s) &= \sqrt{\frac{2}{N}} u^{\sigma_z}(s) \sum_{\mathbf{R}^{(r)}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}^{(r)}) \varphi_0(\mathbf{x} - \mathbf{R}^{(r)}), \\ \hat{\sigma}_z u^{\sigma_z} &= \sigma_z u^{\sigma_z}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\varphi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{2a^2}\right), \quad a \ll p, \quad (9)$$

donde  $N$  es la cantidad de electrones en el gas dinámico y  $\hat{\sigma}_z$  el operador de proyección de espín en la dirección  $z$ , que para nosotros es la perpendicular a los planos  $\text{CuO}_2$ ;  $\sigma_z = -1$  o  $1$ , sus autovalores;  $r = 1$  o  $2$  es el índice de cada una de las subredes. En la aproximación de solapamiento pequeño entre vecinos cercanos, o sea de subredes diferentes, solo se pierde el carácter ortogonal de elementos correspondientes a distintas subredes con la misma cuantización de espín. Sin embargo, la ortogonalización de elementos distintos correspondientes a la misma subred, así como la norma unidad de todo elemento, se mantiene, ya que solo implican solapamiento entre vecinos no cercanos.

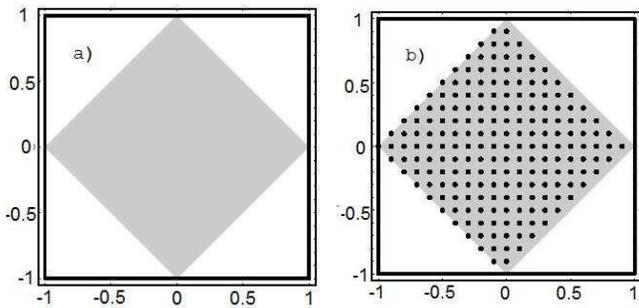


Figura 3: (a) Se muestra en gris la zona de Brillouin asociada al grupo  $T_{R(1)}$  para una red puntual infinita. (b) La red de puntos muestra el carácter discreto de la zona de Brillouin asociada a  $T_{R(1)}$  cuando la red puntual es finita con condiciones periódicas en sus fronteras. La escala unidad significa  $\frac{\pi}{p}$ .

Los orbitales de Wannier aquí propuestos  $\varphi_0(\mathbf{x} - \mathbf{R}^{(r)})$  representan la amplitud de probabilidad de encontrar un electrón en el sitio  $\mathbf{R}^{(r)}$ , o sea, en la base  $\text{CuO}_2$  que el representa. Consideramos aquí solamente una aproximación de un banda, ya que nuestra intención no fue realizar un estudio exacto del problema. Pretendemos solo considerar sus rasgos principales en vías de obtener soluciones que reflejen las propiedades físicas del material. Siguiendo este principio hemos considerado que el potencial efectivo sobre cada electrón del gas, es cuadrático en las vecindades de cada sitio Cu, y como referimos anteriormente, fuertemente confinante a la celda  $\text{CuO}_2$ . Esta suposición justifica la forma Gaussiana seleccionada antes para la función de Wannier.

### III. SOLUCIÓN DE CAMPO MEDIO

En esta sección se presenta el problema matricial equivalente, que resulta de proyectar las ecuaciones de HF asociadas al sistema, en la base Tight-Binding (8) definida en el capítulo anterior. Se reajustan aquí los parámetros del modelo a

fijar en la forma siguiente: el ancho de banda de la solución paramagnética metálica al valor de la banda de Matheiss  $3,8 \text{ eV}$ , el gap del estado básico AFA a  $2,0 \text{ eV}$  y el valor de la constante dieléctrica de  $21$ , que es cercano al medido experimentalmente. Sean los estados de HF de una sola partícula a determinar, escritos en la forma

$$\phi_{\mathbf{k},l}(\mathbf{x}, s) = \sum_{r,\sigma_z} B_{r,\sigma_z}^{\mathbf{k},l} \varphi_{\mathbf{k}}^{(r,\sigma_z)}(\mathbf{x}, s), \quad (10)$$

donde  $\varphi_{\mathbf{k},l}^{(r,\sigma_z)}(\mathbf{x}, s)$  son los elementos de la base tight-binding antes definida,  $\mathbf{k}$  el vector de onda asociado al espacio recíproco de la red absoluta y  $l$  es el índice de los restantes números cuánticos necesarios para precisar el estado de una partícula en cuestión.

Las ecuaciones de HF sin restricciones algunas sobre los orbitales de una partícula fueron obtenidas por Dirac [15] y sus expresiones básicas aplicadas al sistema en consideración son discutidas en detalle en las referencias [6, 7, 8]. Después de proyectar las ecuaciones de HF escritas en la representación de coordenadas en la base de funciones (8), se puede obtener la siguiente versión matricial del problema autoconsistente (para los detalles ver [6, 7, 8]):

$$[E_{\mathbf{k}}^0 + \tilde{\chi}(G_{\mathbf{k}}^C - G_{\mathbf{k}}^i - F_{\mathbf{k}})] \cdot B^{\mathbf{k},l} = \tilde{\varepsilon}_l(\mathbf{k}) I_{\mathbf{k}} \cdot B^{\mathbf{k},l}, \quad (11)$$

donde las constantes:

$$\tilde{\chi} = \frac{me^2 a^2}{4\pi \hbar^2 \epsilon \epsilon_0 p}, \quad \tilde{\varepsilon}_l(\mathbf{k}) = \frac{ma^2}{\hbar^2} \varepsilon_l(\mathbf{k}), \quad (12)$$

son adimensionales, al igual que todos los parámetros implícitos en la definición de las matrices:

$$E_{\mathbf{k}}^0 = \left\| E_{\mathbf{k},(t,r,\alpha_z,\sigma_z)}^0 \right\|_{4 \times 4}, \quad G_{\mathbf{k}}^C = \left\| G_{\mathbf{k},(t,r,\alpha_z,\sigma_z)}^C \right\|_{4 \times 4},$$

$$G_{\mathbf{k}}^i = \left\| G_{\mathbf{k},(t,r,\alpha_z,\sigma_z)}^i \right\|_{4 \times 4}, \quad F_{\mathbf{k}} = \left\| F_{\mathbf{k},(t,r,\alpha_z,\sigma_z)} \right\|_{4 \times 4},$$

$$I_{\mathbf{k}} = \left\| I_{\mathbf{k},(t,r,\alpha_z,\sigma_z)} \right\|_{4 \times 4}.$$

Los diferentes términos que participan en esta ecuación son: el potencial periódico del medio  $W$ , los términos de Coulomb  $G_{\mathbf{k}}^C$  y de intercambio  $G_{\mathbf{k}}^i$ , el potencial de interacción con el fondo neutralizante  $F_b$  y la matriz de solapamiento  $I_{\mathbf{k}}$  entre vecinos cercanos, respectivamente. La forma de los elementos matriciales se da explícitamente en los Apéndices de [6, 8]. En esta representación la energía HF a  $T = 0 \text{ K}$  del sistema y la condición de normalización de la función de onda de cada estado uniparticular, toman la forma:

$$E^{HF} = \sum_{\mathbf{k},l} \Theta_{(\tilde{\varepsilon}_F - \tilde{\varepsilon}_l(\mathbf{k}))} [\tilde{\varepsilon}_l(\mathbf{k}) - \frac{\tilde{\chi}}{2} B^{\mathbf{k},l*} (G_{\mathbf{k}}^C - G_{\mathbf{k}}^i) B^{\mathbf{k},l}], \quad (13)$$

$$1 = B^{\mathbf{k},l*} I_{\mathbf{k}} B^{\mathbf{k},l}.$$

El sistema (11) es no lineal en las variables  $B_{r,\sigma_z}^{\mathbf{k},l}$ , que son las cuatro componentes de cada vector  $B^{\mathbf{k},l}$ , y que se interpretan como amplitudes de probabilidad de encontrar al electrón en el estado  $(\mathbf{k},l)$ , en la subred  $r$ , con cuantización  $\sigma_z$  del espín a lo largo del eje  $z$ . Con vistas a resolverlo numéricamente por el método de iteraciones sucesivas, es conveniente

premultiplicarlo por  $I_{\mathbf{k}}$  para cada  $\mathbf{k}$ . Nótese que para cada  $\mathbf{k}$  se obtendrán cuatro autovalores ( $l = 1,2,3,4$ ), o lo que es igual, cuatro bandas en la ZB. La invariancia de traslación sobre las subredes implica que en la representación (8) el potencial de interacción HF y en general el operador de Fock del problema de HF, son diagonales en bloque respecto a los estados  $\mathbf{k}$ . Esto es consecuencia directa de su conmutación con el grupo de traslaciones discreta reducido.

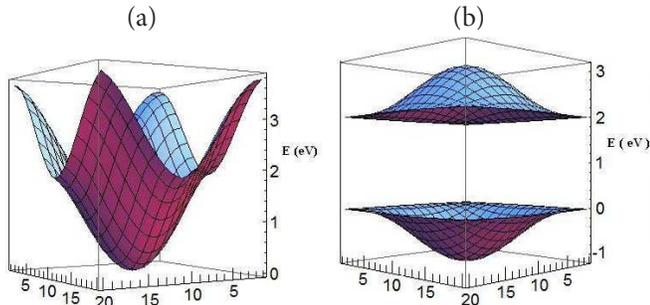


Figura 4: (a) Banda de energía doblemente degenerada paramagnética y metálica. (b) Banda de energía AFA. La unidad de la escala mostrada en los gráficos se define como la longitud del lado de la celda de Brillouin asociada a las subredes:  $\sqrt{2\pi}/p$ , luego de ser divididas por 20. Se ha empleado el mismo convenio en los otros gráficos mostrados debajo.

**3.1 Ajuste de los parámetros libres** En la presente subsección ajustamos los parámetros libres introducidos en el modelo,  $\epsilon$ : constante dieléctrica del medio efectivo;  $m$ : masa efectiva del medio;  $\tilde{a}$ : radio en que superviven los orbitales de Wannier gaussianos;  $\tilde{\gamma}$ : amplitud de probabilidad de salto de un sitio a otro cercano fijada por el medio efectivo y  $\tilde{b}$ : radio en que supervive la densidad de carga asociada al medio neutralizante. Con este fin y apoyados en los resultados obtenidos en las referencias [6, 7, 8], buscamos fijar simultáneamente: el ancho de banda de Matheiss a 3,8 eV (tal y como muestra el perfil de dispersión de la Figura 1), el gap del estado normal antiferromagnético aislante del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  a 2,0 eV y el valor observado de su constante dieléctrica igual a 21.

Con vistas a obtener un estado paramagnético metálico que pudiera describir la banda calculada por Mathieiss, se buscó primeramente la solución HF del problema en un espacio de funciones de Bloch del grupo maximal de traslaciones, esto es, que dejan invariante la red puntual absoluta. La base de Bloch Tight-Binding de una banda para este problema tiene la forma adoptada en [6, 7, 8],

$$\varphi_{\mathbf{Q}}^{\sigma_z}(\mathbf{x}, s) = \sqrt{\frac{1}{N}} u^{\sigma_z}(s) \sum_{\mathbf{R}} \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}) \varphi_0(\mathbf{x} - \mathbf{R}), \quad (14)$$

donde los momenta  $\mathbf{Q}$  que aparecen se definen por

$$\mathbf{Q} = \left\{ \begin{array}{l} \frac{2\pi}{Lp} (n_{x_1} \mathbf{e}_{x_1} + n_{x_2} \mathbf{e}_{x_2}) \\ \text{con } n_{x_1}, n_{x_2} \in Z \\ -\frac{L}{2} \leq n_{x_1}, n_{x_2} < \frac{L}{2} \end{array} \right\}.$$

Además  $N = L \times L$  y  $R$  son, respectivamente, la cantidad de celdas base en la red puntual absoluta y las coordenadas de la misma. Sean los estados de Bloch que buscamos en la base antes mencionada expresados en la forma:

$$\phi_{\mathbf{Q},l}(\mathbf{x}, s) = \sum_{\sigma_z} B_{\sigma_z}^{\mathbf{Q},l} \varphi_{\mathbf{Q}}^{\sigma_z}(\mathbf{x}, s). \quad (15)$$

El problema matricial equivalente para las  $B^{\mathbf{Q},l}$  es esta vez de segundo orden para cada estado  $(\mathbf{Q},l)$ , es decir, serán vectores de 2 componentes. Así pues, en forma análoga a como se derivó (11), se puede obtener el sistema de ecuaciones de HF en la forma:

$$[E_{\mathbf{Q}}^0 + \tilde{\chi}(G_{\mathbf{Q}}^C - G_{\mathbf{Q}}^i - F_{\mathbf{Q}})] \cdot B^{\mathbf{Q},l} = \tilde{\epsilon}_l(\mathbf{Q}) I_{\mathbf{Q}} \cdot B^{\mathbf{Q},l}, \quad (16)$$

que constituyen un conjunto de ecuaciones matriciales no lineales a resolver.

Para comenzar la iteración se utilizó un estado inicial paramagnético. En la Figura 4a, se muestra la banda paramagnética, metálica y doblemente degenerada obtenida iterativamente en condición de semillado, es decir con  $N = 20 \times 20$  electrones.

Para el caso aislante antiferromagnético se llevó a cabo la solución del sistema de ecuaciones (11) por el método de iteraciones sucesivas partiendo siempre de un estado con carácter antiferromagnético. En la Figura 4b, se muestran el perfil adoptado en condición de semillado obtenido para la red puntual de  $20 \times 20$  puntos. Evidentemente corresponden a bandas de estados aislantes.

Los estados correspondientes, resultaron ser los más estables, o sea, los de más baja energía (HF) entre todos los encontrados. Así los valores de los parámetros del modelo fijados resultaron ser:  $\epsilon = 21$ ,  $m = 2.5m_p$ ,  $\tilde{a} = 0.09$ ,  $\tilde{b} = 17.125 \cdot 10^{-3}$  y  $\tilde{\gamma} = -17.125 \cdot 10^{-3}$ . Obsérvese las coincidencias topológicas entre la banda obtenida y la banda de conducción presentada en la Figura 1, en ambas el nivel de Fermi en la dirección  $\Gamma$ -X pasa a la mitad de los bordes de banda correspondiente, mientras en la dirección que descansa a 45 grados respecto a  $\Gamma$ -X la roza en su extremo superior. Así quedan argumentadas las bases del modelo de una banda que presentamos y la elección de parámetros realizada.

#### IV. TRANSICIÓN DE FASE CUÁNTICA

La evidencia experimental acerca de la existencia de un punto crítico cuántico en el  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  proviene de un estudio exhaustivo hecho por Jeffery Tallon y John Loram acerca de las propiedades físicas de la fase de pseudogap a partir de un gran cuerpo de experimentos de termodinámica que ellos mismos realizaron [5]. Encontraron que el pseudogap se caracteriza por una energía característica que cae abruptamente a cero en el dopaje crítico de 0.19 huecos, por átomo de cobre en el plano de conducción de un variado número de cupratos. Propiedades como la capacidad calorífica electrónica cambian abruptamente en el valor del dopaje crítico, lo cual indica que puede existir una transición a temperatura cero entre dos fases distintas. Pensando en ello, y una vez precisados los estados AFA y PPG en condición de semillado, para los valores mejorados de los parámetros del modelo, nos propusimos reconsiderar el estudio presentado en [13, 14], para la evolución

con el dopaje de dichos estados a temperatura cero. Se calculó la energía HF por partícula al ir variando la concentración de huecos en el rango  $0 \leq x \leq 0.25$  para los estados AFA y PPG mediante la expresión:

$$E^{HF} = \sum_{\mathbf{k}, l} \Theta(\tilde{\varepsilon}_F - \tilde{\varepsilon}_l(\mathbf{k})) [\tilde{\varepsilon}_l(\mathbf{k}) - \frac{\tilde{\chi}}{2} B^{\mathbf{k}, l*} \cdot (G_{\mathbf{k}}^C - G_{\mathbf{k}}^i) \cdot B^{\mathbf{k}, l}] \quad (17)$$

En la Figura 5 se muestra como el estado AFA que es el de menor energía HF a dopaje cero, evoluciona y se hace degenerado con el PPG para un dopaje crítico alrededor de  $x_c = 0.2$ . A partir del mencionado valor de dopaje, los estados AFA y PPG tienden a volverse degenerados, compartiendo así sus propiedades. Estudiamos también la superficie de Fermi y su dependencia con el dopaje en el  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  para un amplio rango de concentración de huecos de  $0 \leq x \leq 0.3$ . En las Figuras 6 y 7, se muestra la evolución de la superficies de Fermi en las fases AFA y PPG en la medida que la concentración de huecos aumenta. Se puede apreciar en el caso AFA, cómo para una pequeña concentración de huecos la superficie de Fermi está compuesta de los llamados “arcos de Fermi” en el centro de las caras de la frontera de la zona de Brillouin ( ZB ).

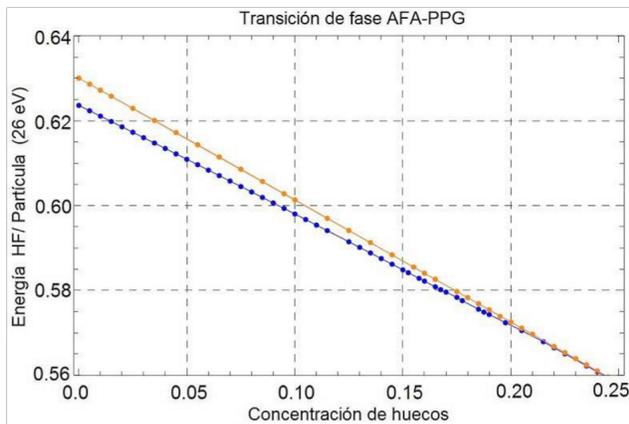


Figura 5: Dependencia de las energías HF por partícula en los estados AFA y PPG con respecto al dopaje con huecos.

La longitud de estos arcos aumenta proporcionalmente al dopaje hasta formar unos tipos de bolsas de huecos (hole pockets) en las esquinas de la ZB. A partir de este punto las formas de las superficies de Fermi de ambos estados, AFA y PPG, tienden a acercarse. De acuerdo con nuestros resultados la superficie de Fermi para  $x = 0.3$  parece ser casi cuadrada teniendo una larga porción de rectas paralelas a las caras de la frontera de la ZB.

Puede entonces argumentarse que en la medida que se dopa con huecos el  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , partiendo de su estado normal AFA, su superficie de Fermi experimenta un cambio drástico al pasar de una superficie de Fermi centrada en el nodo  $(\pi, \pi)$  del espacio recíproco para  $0 < x < 0.1$  a una superficie de Fermi de electrones centrada en  $(0,0)$  para  $0.1 < x < 0.3$ .

Debe comentarse que este resultado no coincide exactamente con lo reportado en la referencia [6].

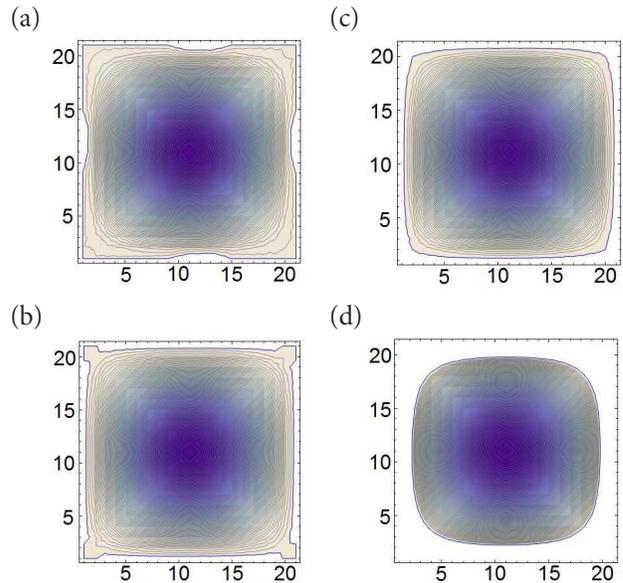


Figura 6: Evolución de la superficie de Fermi a medida que la concentración de huecos aumenta a partir del semllenado para el estado básico AFA. Las superficies de Fermi mostradas corresponden a los valores de dopaje: a)  $x = 0.02$ , b)  $x = 0.075$ , c)  $x = 0.095$ , d)  $x = 0.3$ . Las energías de los estados uniparticulares decrecen con el grado de oscuridad en el gráfico.

En ese trabajo los huecos pasaron de estar centrados en las caras a las esquinas de la zona de Brillouin, cerca del llenado  $x_c = 0.2$ . Estimamos que esto pudiera deberse a la diferencia entre los parámetros utilizados en el modelo. Un parámetro que puede aún ajustarse es el ancho de las densidades de carga de jellium, el cual se asumió muy pequeño. El representar la densidad del jellium en el límite contrario, es decir, como una distribución de carga casi homogénea, pudiera cambiar el valor de dopaje en el que la transición de los huecos de las caras a las esquinas ocurra. Esperamos estudiar este efecto en las próximas extensiones del trabajo.

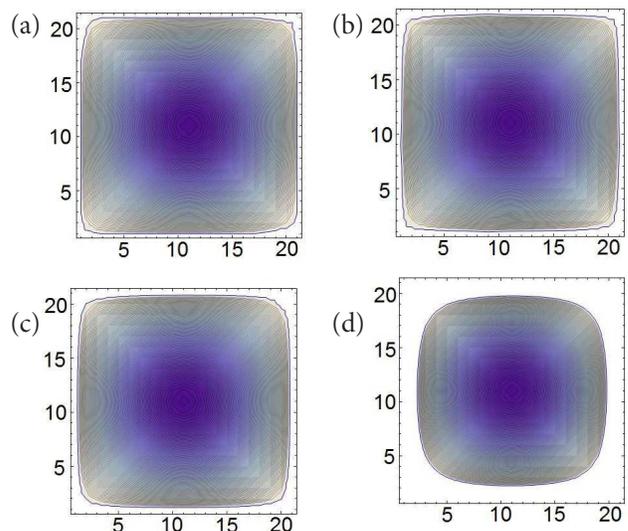


Figura 7: Evolución de la superficie de Fermi a medida que la concentración de huecos aumenta a partir del semllenado para el estado excitado PPG. Las superficies de Fermi mostradas corresponden a los valores de dopaje: a)  $x = 0.02$ , b)  $x = 0.075$ , c)  $x = 0.095$ , d)  $x = 0.3$ . Las energías de los estados uniparticulares decrecen con el grado de oscuridad en el gráfico.

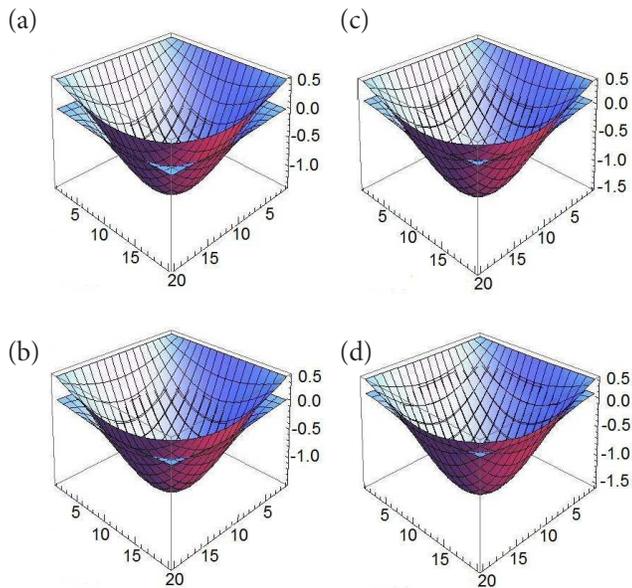


Figura 8: Evolución de las energías HF de los estados uniparticulares en las fases AFA y PPG en la medida que aumenta la concentración de huecos desde  $x = 0$  hasta  $x = 0.2$ . El eje vertical refiere a la energía dada en eV. Note que se hace coincidir el nivel de Fermi del estado AFA con 0 eV. Las autoenergías mostradas corresponden a los valores de dopaje : a)  $x = 0$ , b)  $x = 0.1$ , c)  $x = 0.15$ , d)  $x = 0.2$ .

También representamos en un marco común las energías de los estados HF uniparticulares en las fases AFA y PPG con vistas a visualizar su correspondiente evolución en la medida que se dopa el material, y así tener una idea de la degeneración de estados en el sistema. En la Figura 8 puede observarse como en condición de semillanado los estados de energías más bajas coinciden y la diferencia esencial de energía se encuentra entre los estados ubicados en las proximidades de la frontera de la ZB. Al dopar el material, los huecos crean estados vacíos en dicha frontera, tal y cómo mostramos en la evolución de las superficies de Fermi para ambas fases, perdiendo así la fase AFA los estados que cargan con un antiferromagnetismo más fuerte [6, 7, 13]. Simultáneamente el número de estados con energías uniparticulares similares va aumentando al aumentar el dopaje. Las autoenergías de los orbitales ocupados asociados a los estados AFA y PPG tienden a coincidir alrededor de una concentración de huecos cercana a  $x_c = 0.2$ , donde se ha perdido el orden antiferromagnético [13].

Se observa además como los estados excitados, ya ocupados por huecos una vez ocurrida la transición, no resultan degenerados dentro de la tolerancia de los cálculos del programa. Esto estimamos que es debido a que en el marco en que trabajamos, donde imponemos periodicidad sobre una red puntual de  $20 \times 20$ , el número de grados de libertad del sistema resulta finito. Es conocido que para un número finito de grados de libertad no se pueden obtener transiciones de fase discontinuas. Según resultados de la referencia [6], donde los parámetros del modelo no estaban aún bien especificados, los indicios de la transición se obtuvieron con mayor aproximación debido a que diferencia de energía de los estados excitados resultó estar por debajo de la precisión de los cálculos numéricos. Esto

sugiere que en extensiones futuras del trabajo, al incrementar el número de grados de libertad en la solución del modelo, se precise más la existencia de una sola solución cuando el dopaje supere el valor crítico.

## CONCLUSIONES

En términos generales, puede concluirse que los resultados obtenidos en este trabajo apoyan las indicaciones obtenidas en [13, 14] acerca de la existencia de una transición de fase cuántica del compuesto  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  controlada por el dopaje con huecos, en las inmediaciones de  $x_c = 0.2$ . Se realizó una revisión del modelo de una banda introducido en [6, 7, 8]. Los parámetros del modelo fueron reajustados al fijar el ancho de banda de Matheiss a 3.8 eV, el gap del estado normal antiferromagnético aislante del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  a 2.0 eV y el valor observado de la constante dieléctrica de este material a 21. Se repitió estudio el sistema como función del dopaje con huecos realizado en las referencias [13, 14], presentando la evolución de los estados uniparticulares electrónicos y de la superficie de Fermi del sistema en las fases AFA y PPG para un amplio rango de la concentración de huecos. Nuevamente, obtuvimos que en la zona de bajo dopaje, los huecos comienzan a ocupar los estados situados en la frontera de la zona de Brillouin y que en el estado AFA son los que cargan con el antiferromagnetismo más intenso. Los estados ocupados en ambas fases tienden gradualmente a hacerse degenerados cuando el dopaje crece. La energía total de ambos estados coincide para una concentración de huecos cercana a  $x_c = 0.2$ . Los resultados indican así la presencia de una transición de fase cuántica del compuesto  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  que pasa de un estado básico aislante con correlaciones antiferromagnéticas a un estado paramagnético metálico en un punto crítico de concentración de huecos que se encuentra dentro del Domo superconductor. Puede concluirse que el presente estudio, en conjunto con el realizado en las referencias [13, 14], contribuye a aclarar un importante problema abierto en la Física de los superconductores de alta temperatura: el relativo a la naturaleza y propiedades del llamado estado de pseudogap en dichos materiales [5].

## AGRADECIMIENTOS

Queremos expresar nuestro agradecimiento a colegas cuyos comentarios han sido de utilidad durante el desarrollo de este trabajo. Entre ellos se encuentran: C. RodríguezCastellanos, E. Altshuler, A. Martínez, Ll. Uranga, V. Martínez, E. Fradkin, J. Kroha, A. LeClair, M. D. Coutinho. También se agradece el apoyo recibido para la labor desde el Network N-35 de la .Office of External Activities”(OEA) del International Centre for Theoretical Physics”(ICTP), en Trieste, Italia; así como del Proyecto Nacional de Ciencias Exactas “Teoría Cuántica de Campos y de Muchos Cuerpos en Astrofísica, Física de Altas Energías y Física de la Materia Condensada”del Ministerio de Ciencia Tecnología y Medio Ambiente (CITMA), La Habana, Cuba.

- [1] J. G. Bednorz y K. A. Müller, *Zeitschrift für, Z. Phys. B: Condens. Matter* **64**, 189 (1986).
- [2] G. Deutscher, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 109 (2005).
- [3] S. A. Kivelson, E. Fradkin, Va. Oganesyan, I. Bindloss, J. Tranquada, A. Kapitulnik y C. Howald, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1201 (2003).
- [4] J. M. Tranquada, *Treatise of High Temperature Superconductivity*, J. R. Schrieffer and J. Brooks, eds., (Springer-Verlag, 2007) pp. 257– 298.
- [5] J. L. Tallon y J. W. Loram, *Physica C* **349**, 53 (2001).
- [6] A. Cabo-Bizet, “Una aproximación Hartree Fock al antiferromagnetismo del  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ ,” Tesis de Diploma, Facultad de Física, Universidad de La Habana, 2008.
- [7] A. Cabo-Bizet y A. Cabo Montes de Oca, *Phys. Lett. A* **373**, 1865 (2009).
- [8] A. Cabo-Bizet y A. Cabo Montes de Oca, *Symmetry* **2**, 388 (2010).
- [9] J. K. Perry, J. Tahir-Kheli and W.A. Goddard III, *Phys. Rev. B* **63**, 144510 (2001).
- [10] C. Y. Chen, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, N. W. Preyer and Tineke Thio, *Phys. Rev B* **43**, 392 (1991).
- [11] L. F. Matheiss, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1028 (1987).
- [12] E. Fradkin, *Field Theory of Condensed Matter Systems*, (Addison-Wesley, New York, 1991).
- [13] V. M. Martínez, “Transición de fase cuántica dentro del domo superconductor,” Tesis de Diploma, Facultad de Física, Universidad de La Habana, 2012.
- [14] V. M. Martinez Alvarez, A. Cabo-Bizet and A. Cabo Montes de Oca, *Int. J. Mod. Phys. B* **28**, 1450146 (2014).
- [15] P. A. M. Dirac, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **26**, 376 (1930).
- [16] F. F. Balakirev, J. B. Betts, A. Migliori, I. Tsukada, Y. Ando y G. S. Boebinger, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 017004 (2009).
- [17] R. Daou, y col, *Nat. Phys.* **5**, 31 (2009).
- [18] Y. Yanase, *Physics Reports* **387**, 1 (2003).
- [19] W. E. Pickett, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 433 (1989).