

Estados de pseudogap y transiciones de fase cuánticas en el superconductor La_2CuO_4

Autoría principal

Alejandro Cabo Montes de Oca¹

Otros autores

Alejandro Cabo Bizet², Víctor Manuel Martínez Álvarez¹, Yoandri Vielza de la Cruz¹.

Colaboradores

Prof. Norman H. March³, Lic. Yosdanis Vázquez Ponce⁴, Dr. David Oliva Agüero⁵.

Entidad ejecutora principal

¹Instituto de Cibernética, Matemática y Física.

Entidades participantes

²Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear.

³Department of Physics, University of Antwerp, Antwerp, Belgium and Oxford University, Oxford, England.

⁴Department of Physics, Waterloo University, Waterloo, Canada.

⁵Orbservatorio Nacional, CNPq, Rio de Janeiro, Brasil.

Autor para correspondencia

Dr. Alejandro Cabo Montes de Oca,

Instituto de Cibernética, Matemática y Física (ICIMAF)

Calle 15, No. 309, e/ C y D, Vedado, Ciudad de la Habana,

E-Mail: cabo@icimaf.cu

Aporte científico de cada autor al resultado

- ✓ Dr. **Alejandro Cabo Montes de Oca** (60%): Participó en todos los trabajos, en los cuales concibió las ideas y objetivos de estudio. Tomo parte en todos los cálculos asociados a las publicaciones y realizó en todos los casos la escritura de los artículos científicos. En el periodo 2008-2014 supervisó tres tesis de Diploma de Graduación de estudiantes de la Facultad de Física de la UH que se derivaron de la actividad. Estableció cooperación en un trabajo con el Prof. Norman March (Universidad de Oxford), así como colaboró con dos estudiantes de maestría y de doctorado del ICIMAF que participaron en otro trabajo. Visitó la Universidad de Cornell en el 2010, el ICTP de Trieste en el 2013 y la Universidad de Buenos Aires en el 2014 donde expuso los resultados de esta propuesta.
- ✓ Lic. **Alejandro Cabo Bizet** (25%): Participó como coautor en 4 de las publicaciones. En los dos primeros trabajos realizados en el periodo 2007-2009 formuló en colaboración con A.C.M. el modelo para las capas de CuO y programó su solución Hartree-Fock. La solución numérica obtenida predijo ya en el año 2008, la existencia del estado de pseudogap, del La_2CuO_4 , cuya naturaleza se debate aún. Defendió en el año 2008 su Tesis de Graduación en la UH. La mayor parte de su trabajo la realizó como estudiante de Diploma de Graduación del Departamento de Física Teórica del ICIMAF y colaboró en el tema durante el año 2009 en su primer año de trabajo en el CEADEN. Sus resultados fueron elegidos como Resultado Destacado del Centro ese año. Los programas desarrollados por él han sido utilizados en 5 de los trabajos siguientes y en las tesis posteriores.

- ✓ Lic. **Víctor Manuel Martínez Álvarez** (10%): Partiendo de los programas desarrollados por A.C.B. contribuyó a implementar el dopaje con huecos en el modelo y en el correspondiente programa para su solución. Este había sido formulado en los trabajos anteriores solamente para dopaje nulo. Sus resultados numéricos para la solución del problema permitieron dar explicación a la naturaleza de la transición de fase cuántica que se observa experimentalmente en el La_2CuO_4 , un resultado que consideramos de sumo interés. Defendió su Tesis de Graduación con esos resultados. Es coautor de uno de los trabajos publicados.
- ✓ Lic. **Yoandri Vielza de la Cruz** (5%): Extendió los resultados de los programas desarrollados por A.C.B. para dopaje no nulo logrando adaptar los parámetros del modelo a reproducir el gap del La_2CuO_4 y su constante dieléctrica. Logró además reobtener en ese modelo mejorado las mismas indicaciones de existencia de la transición de fase cuántica al aumentar el dopaje. Defendió su Tesis de Graduación con esos resultados.

Resumen

Se obtienen soluciones del problema de Hartree-Fock (HF) para un modelo simple de los planos de CuO en el material superconductor de alta temperatura La_2CuO_4 . Un primer estado de campo medio hallado describe algunas de las propiedades de más interés de este material, tales como su carácter aislante y el orden antiferromagnético. Sin embargo, una segunda solución de mayor energía obtenida, sorprendentemente predice la existencia de un estado de pseudogap, cuya naturaleza es aun no comprendida en la literatura. Posteriormente al incorporar el dopaje con huecos del sistema, se logra también describir una transición de fase cuántica que observaciones experimentales indican existe bajo el Domo superconductor (es decir, en la región de dopajes en que se produce la superconductividad en el material). Los resultados brindan entonces una explicación de dicha transición de fase, cuyo origen es desconocido y se debate en la actualidad dentro del tema. Se predice que la transición es de segunda orden, en que al crecer el dopaje con huecos, la energía del estado aislante (de menor energía a bajo dopaje) tiende a coincidir con la energía del estado de pseudogap para una magnitud crítica del dopaje cercana al valor estimado experimentalmente. En un sentido más general, los resultados abren un camino promisorio para comenzar a conciliar los cuadros de Mott y Slater (Primeros Principios), cuya divergencia en las predicciones físicas constituye aún uno de los centrales problemas abiertos en la Física del Estado Sólido. Los resultados están avalados por 5 publicaciones en revistas de amplia difusión, una monografía, la defensa de 3 Tesis de Diploma de Graduación y la presentación de los resultados en eventos y centros científicos de alto nivel en el tema.

Comunicación Corta

Dos problemas centrales para la comprensión de la Física de los superconductores de alta temperatura (cupratos) han sido durante años, por un lado, el descifrar la naturaleza de los llamados efectos de "pseudogap", en que las mediciones de ciertas magnitudes físicas al variar la temperatura en el estado normal, sufren cambios que sugieren la existencia de una fase excitada por encima del estado básico del sistema [1, 2]. Pese a lo ampliamente debatido que ha sido el tema, aun no existe comprensión acerca del mecanismo que causa dichos efectos [3, 4]. Por otro lado, un factor tampoco comprendido es la existencia y origen de una transición de fase cuántica que los

resultados experimentales sugieren debe existir en la zona de dopajes con huecos en que se produce la superconductividad (rango de dopajes en que se extiende el Domo superconductor a cero temperatura) [5].

El trabajo propuesto presenta soluciones para los dos problemas antes descritos. En los artículos [6, 7] primeramente se obtiene un estado bien definido, en forma de un determinante de Slater para el estado de pseudogap. Tal resultado permite posteriormente en los trabajos [8, 9] mostrar, la existencia de una transición de fase cuántica al considerar el dopaje con huecos del sistema. Este cambio de fase ocurre precisamente entre el estado aislante y el nuevo estado de pseudogap a un valor crítico del dopaje cercano al estimado experimentalmente.

A continuación, la sección A resume el modelo considerado para el material La_2CuO_4 . Seguidamente, la sección B describe las condiciones físicas que se imponen para definir los parámetros del modelo en condiciones de máxima simetría de la solución buscada. La sección C resume la solución del problema de campo medio sin restricciones de simetría. Esto permite la obtención del estado aislante antiferromagnético del sistema. La sección D continúa resolviendo las ecuaciones imponiendo solo que las orientaciones de espín sean de tipo α o β . Esto expone uno de los resultados más importantes de este trabajo: la obtención de un estado de pseudogap (PPG) (que muestra un gap que depende de la orientación del momentum). Finalmente, la última sección E, presenta un segundo resultado importante asociado a esta propuesta: una descripción para la transición de fase cuántica que los experimentos indican existe en este material. La transición obtenida es de segundo orden y se produce cuando la energía e del estado aislante (estado básico a pequeño dopaje) llega a coincidir con la energía del estado de pseudogap (estado excitado a bajo dopaje), cuando el número de huecos alcanza un valor crítico. En los trabajos [10, 11] se exponen además extensiones de los resultados que sugieren un camino para la búsqueda de la superconductividad de alta temperatura.

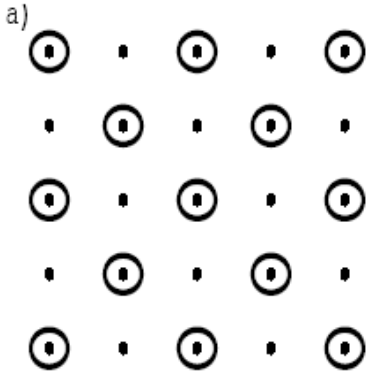
A. Modelo para los planos CuO en el La_2CuO_4

Resumamos ahora primeramente el modelo de un banda efectivo utilizado para describir la dinámica de los electrones más débilmente ligados en el La_2CuO_4 . Se conoce que a bajas temperaturas el La_2CuO_4 es un aislante antiferromagnético [15]. Sin embargo, en evidente contradicción con el experimento, los cálculos de las bandas por el método LAPW (Linear Augmented Plane Waves) predicen para este material propiedades de un metal paramagnético [14]. No obstante, tales resultados para la estructura de bandas, al menos muestran que los electrones de conducción están fuertemente ligados a los centros de la red cristalina de los planos de CuO.

Claramente, este comportamiento de enlace fuerte está determinado por la interacción de los electrones con el entorno que lo rodea en la red. El electrón menos ligado en la molécula de La_2CuO_4 es aquel no apareado correspondiente al átomo de Cu^{2+} . A diferencia de los iones O^{2-} , los iones Cu no tienen su última capa (3d) cerrada.

Esos electrones 3d de los cobres llenan parcialmente la última banda del La_2CuO_4 y en lo que sigue ellos serán referidos como: el gas electrónico. Parece apropiado el considerar esos electrones como fuertemente ligados a las celdas de CuO_2 y con preferencia a los centros cristalinos del cobre [13]. Por lo tanto, nuestra red de Bravais será la red cuadrada que coincide con los sitios del Cu (ver la figura 1).

FIG. 1: La figura muestran la red de puntos asociada a los planos de CuO . Para remover las restricciones de simetría, sería útil separar la red en las dos subredes representadas, exigiendo la condición de Bloch solo en las subredes.



Adicionalmente, la presencia de los electrones pertenecientes a las diversas bandas completamente llenas, en conjunto con las cargas nucleares, jugará un doble rol en el modelo. En primer lugar se considerará que actúan como un medio efectivo polarizable que apantalla el campo de las partículas del gas electrónico. Esto se reflejará por una constante dieléctrica ϵ que reduce la interacción de Coulomb. En segundo lugar, el campo medio creado por el entorno se supondrá que actúa como un potencial periódico W_γ , que enlaza fuertemente a los electrones a los centros de Cu.

La interacción F_b entre el gas electrónico y un "jellium" que neutraliza sus cargas se considera también. Este fue modelado como una distribución gaussiana de cargas positivas $\rho_b(\mathbf{y}) = \frac{1}{\pi b^2} \exp(-\frac{\mathbf{y}^2}{b^2})$, de radio característico b que rodea cada punto de la red. En resumen, el Hamiltoniano libre del modelo toma la forma

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + W_\gamma(\mathbf{x}) + F_b(\mathbf{x}),$$

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

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

donde \mathbf{p}_i^2 es el operador de momentum al cuadrado del electrón i -ésimo; m es la masa del electrón; ϵ_0 es la permitividad del vacío y los vectores de la red $\mathbf{R} = n_{x1}p \mathbf{e}_{x1} + n_{x2}p \mathbf{e}_{x2}$ con n_{x1} y n_{x2} enteros, describen la red de los átomos de cobre. Esta red se referirá en lo que sigue como la red absoluta. Los versores \mathbf{e}_{x1} y \mathbf{e}_{x2} descansan en las direcciones definidas por los vecinos cercanos en la red (ver la figura 1 a)). La distancia entre los Cu que son vecinos cercanos es $p \approx 3.8 \text{ \AA}$ [15]. La

interacción entre los pares de electrones se toma en la forma $V(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$, la cual incluye una constante dieléctrica que modela la presencia del medio cristalino.

Nosotros buscamos soluciones HF que posean orbitales no separables en sus estructuras de espín y orbital. Consecuentemente, consideramos que el espín podrá tener diferentes componentes para diferentes orbitales de Wannier, cuya combinación definirá los orbitales de HF. Específicamente el espín de cada orbital de Wannier podrá ser del tipo α o β en dependencia de que dichos orbitales estén asociados a una u otra de las dos subredes mostradas en la figura 1 a). Las soluciones buscadas fueron construidas como autofunciones de los operadores pertenecientes al grupo de las traslaciones que transforma cada subred en ella misma. Impusimos además condiciones de frontera periódicas sobre esas funciones en las fronteras de la red absoluta $x_1 = -pL$ y pL , y $x_2 = -pL$ y pL (ver la figura 1 a)). Esta condición determina un

conjunto de valores permitidos de los cuasi-momenta k . Note que hemos demandado menos que la simetría cristalina total de la red *absoluta* sobre los estados de una partícula que buscamos. La base de funciones de *enlace fuerte* (tight binding) utilizada se define explícitamente como de Bloch solo en cada una de las subredes. En este modelo simple los electrones han sido considerados como moviéndose en dos dimensiones y se han asumido orbitales gaussianos de *enlace fuerte* (Tight Binding).

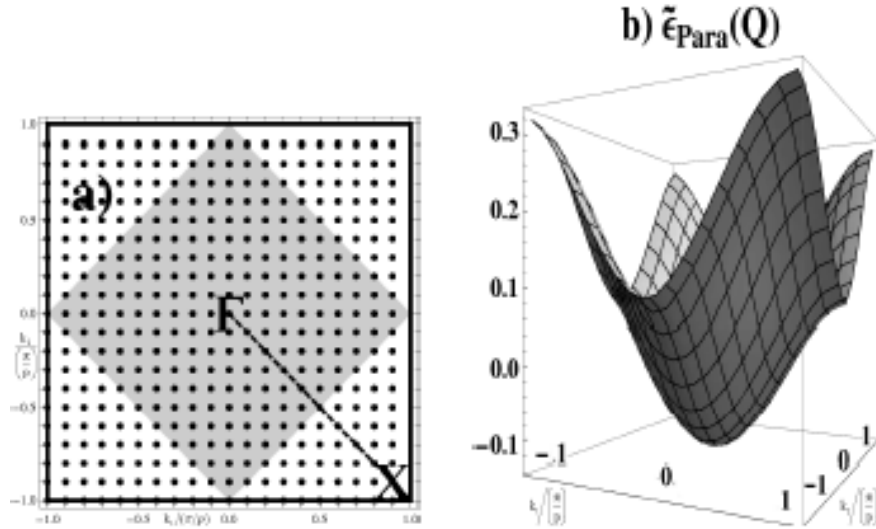


FIG. 2: La figura 1 a) muestra la zona de Brillouin asociada a la red absoluta. La region gris indica la zona de Brillouin (B.Z.) de las subredes. La unidad de quasimomentum es $\frac{\pi}{p}$. La Figura b) muestra las bandas doblemente degeneradas asociadas al estado paramagnético y metálico. El nivel de energía cero en todos los diagramas de bandas es la energía de Fermi de la solución aislante y antiferromagnética que será presentada en lo que sigue.

B. Estado simétrico por completo: fijación de parámetros

La primera solución considerada, la cual será designada por PM, fue una en que los orbitales de HF se buscan como autofunciones del grupo maximal de simetría de traslación que deja invariante la red *absoluta*. Es decir, se demanda la simetría cristalina máxima. Adicionalmente, los orbitales fueron asumidos para ser del tipo α o β . Para este caso la figura 2 muestra la banda metálica, paramagnética y doblemente degenerada que se obtiene de un proceso iterativo de solución de las ecuaciones de HF en la Ref. [6, 7]. Para el caso de $N = 20 \times 20$ electrones, los momentos de los estados ocupados se muestran en la figura 2 a). Ellos se encuentran dentro del cuadrado sombreado de lado $\sqrt{2}\pi/p$: la zona de Brillouin (B.Z.) de las subredes. La condición de reproducir el ancho de banda de 3.8 eV para la banda de conducción reportada en la Ref. [14], permitió fijar los valores adimensionales para los parámetros libres del modelo para ser: $\epsilon = 10, \tilde{a} = 0.25, \tilde{b} = 0.05, \tilde{\gamma} = -0.03$. (ver la Ref. [6, 7] para esas definiciones adimensionales).

Es de resaltar que la banda de energías obtenida en este trabajo coincide en forma con la única banda de conducción presente en la estructura completa de ellas calculada en la Ref. [14].

C. Estado Aislante-AF

Después de haber determinado los parámetros del modelo, se pasó a buscar soluciones de HF más generales mostrando una estructura no separable en sus componentes de espín y orbitales.

Adicionalmente se dio cabida a soluciones con una simetría cristalina reducida con respecto a aquella de la red *absoluta*. La solución iterativa para hallar dicha solución comenzó por asumir un estado inicial mostrando un carácter antiferromagnético de entrada (ver Ref. [6, 7]). Esta forma inicial auxilió la convergencia hacia los resultados para las bandas de energía que se muestran en la figura 3.

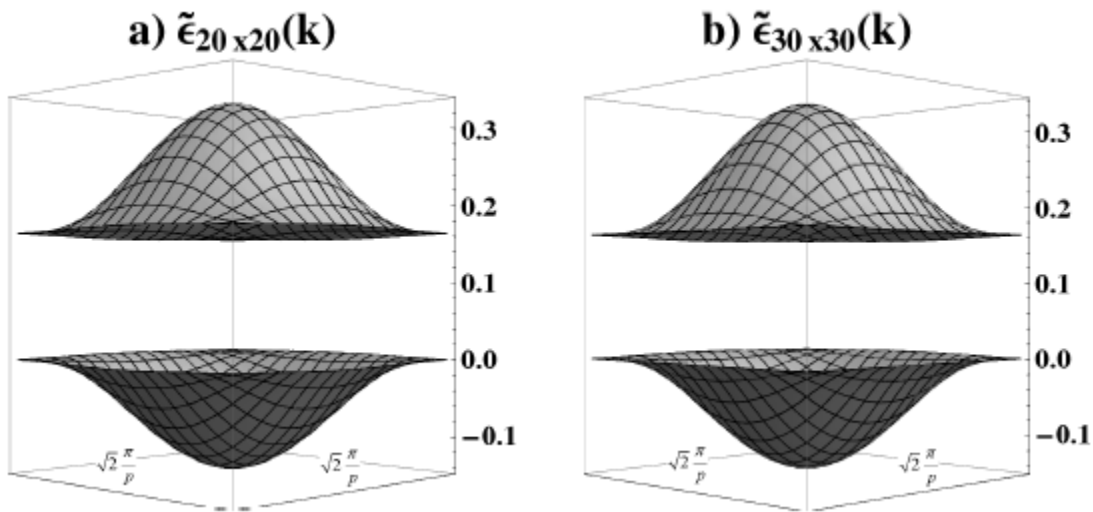


FIG. 3: Bandas de energía obtenidas para: a) Una muestra de 20x20 celdas , $E_{gap} = 1.32$ eV. b) Una muestra de 30x30 celdas, $E_{gap} = 1.32$ eV. El nivel de energía cero se toma en el nivel de Fermi del sistema 20x20 celdas y la región de ploteo B.Z. de las subredes: el cuadrado sombreado con lado de tamaño $\sqrt{2}\pi/p$ en la Fig. 2 a).

El gráfico muestra dos conjuntos de bandas en condiciones de semi-llenado, correspondientes a dos sistemas satisfaciendo condiciones de periodicidad en regiones formadas por 20x20 y 30x30 celdas.

La diferencia entre las auto-energías en uno y otro caso es del orden de 10^{-5} unidades adimensionales de energía $\frac{\hbar^2}{ma^2} = 8.3eV$. La medida del gap que se observa indica que las bandas corresponden a estados aislantes.

La gran similitud entre los dos resultados muestra que el límite termodinámico se ha obtenido con bastante aproximación. La energía de HF de esta solución fue la menor de todas las obtenidas. También se siguió que para el tipo de iteración considerada, y en coincidencia con la experiencia, el estado HF muestra un momentum magnético local que descansa en la dirección x_{12} como se muestra en la figura 4. En la Fig. 4 a) se plotea la única componente no nula de la magnetización m en esa dirección.

Los estados de una partícula de esta solución poseen un carácter antiferromagnético más intenso a medida que ellos se encuentran más cercanos en energía al nivel de

Fermi. Esta propiedad ofrece una clara explicación de la pérdida gradual del antiferromagnetismo que se observa al dopar con huecos el material considerado [12].

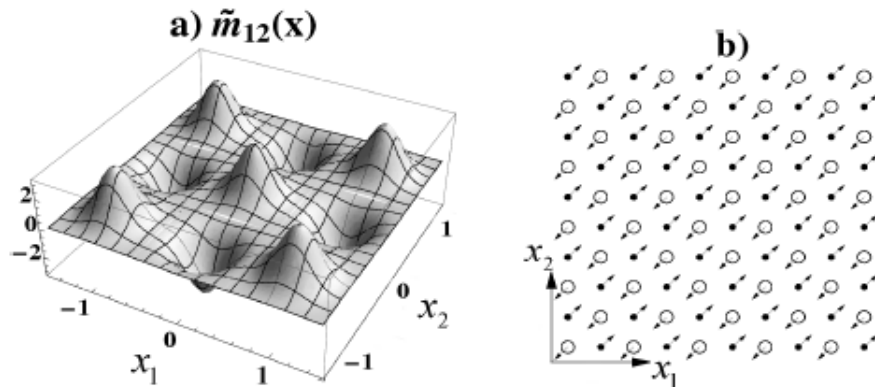


FIG. 4: El vector de magnetización m del estado de HF más estable descansa en la dirección 1-2. a) La figura muestra la proyección \tilde{m}_{12} de la magnetización adimensional, en la dirección 1-2. La unidad de magnetización es $\frac{\mu B}{p^2}$. b) El cuadro ilustra un esquema del momento magnético medio por sitio en la red. El área de ploteo es de nuevo la zona B.Z. de las subredes en la Fig. 2 a).

D. Estado de Pseudogap

En la figura 5 a) se muestra el espectro de bandas correspondiente a otra solución de tipo también paramagnético obtenida, la cual corresponde con un estado que muestra un pseudogap (gap dependiente de la orientación del spin). Esa solución de forma similar a las anteriores, se obtiene de las ecuaciones de HF escritas en la Ref. [6, 7]. Fue hallada después de solamente requerir que sus orbitales pudieran no mostrar la simetría de traslación completa de la red *absoluta*, pero sin embargo sus orientaciones de espín fueran del tipo α o β , necesariamente. Note que simplemente permitiendo la citada libertad determinó la existencia de un estado de *pseudogap* (PPG). El gap de energía alcanza un valor máximo de $0.1 eV \approx 10^3 K$ (equivalente a 0.012 unidades dimensionales de energía $\frac{\hbar^2}{ma^2} = 8.3eV$).

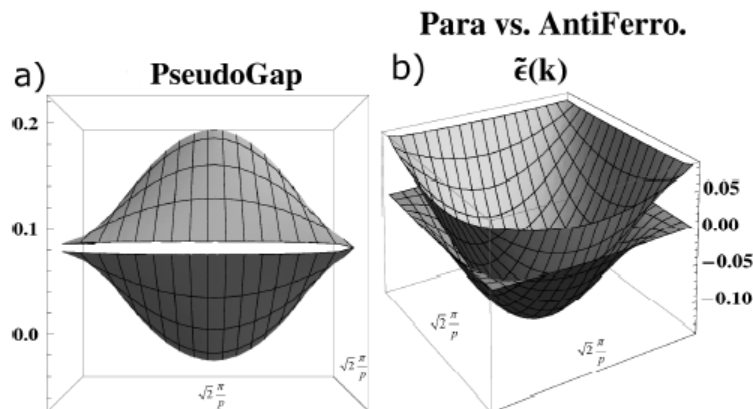


FIG. 5: a) La estructura de bandas asociada al estado paramagnético que también presenta un pseudogap. b) Esta figura muestra en un mismo gráfico las dos bandas ocupadas asociadas con el pseudogap y el estado IAF. La diferencia entre sus energías se concentra en las cercanías del nivel de Fermi.

Es un resultado interesante que la energía de HF de este estado coincide exactamente con aquella correspondiente al estado paramagnético y metálico obtenido anteriormente. Más aún, los estados de una partícula ocupados en ambas soluciones son también idénticos y en consecuencia la dependencia con el momentum, de las bandas llenas también coincide. Por lo tanto, la diferencia entre las dos soluciones solo se refiere a los estados no ocupados. De esa manera, las energías por partícula de los estados de HF de tipo metal paramagnético (PM) y paramagnético con pseudogap (PPG) coinciden. Ellas muestran un valor en +0.076 eV mayor que la energía por partícula correspondiente al estado básico de tipo aislante-antiferromagnético (IAF).

La estructura de espín de los orbitales excitados puede entenderse como un efecto dinámico de "correlación" determinado por la libertad adicional otorgada a la estructura de espín de los orbitales HF. Es conveniente notar que la diferencia de energía PM (PPG)-IAF y la temperatura de Néel de este tipo de materiales son los dos de orden $10^2 K$. Por lo tanto, los resultados sugieren la posibilidad de aplicar con éxito el tratamiento considerado en este trabajo a la descripción de algunas regiones del diagrama de fases del La_2CuO_4 . En la figura 5 b) se muestran en un mismo gráfico las bandas ocupadas de los estados PPG (PM) y IAF. La diferencia principal en energía corresponde a los estados de una partícula que están cercanos al nivel de Fermi.

Como se resaltó antes, el mismo comportamiento lo muestra el carácter antiferromagnético de la solución IAF. Por lo tanto se sugiere que ambas soluciones pueden evolucionar hacia un estado básico común cuando el sistema se dopa con huecos. Tales fueron efectivamente los resultados obtenidos al considerar el dopaje con huecos.

E. Transición de fase cuántica

Los estados aislantes y de pseudogap descritos antes fueron obtenidos en [6, 7] para el caso de dopaje nulo de huecos (semilleno). Sin embargo, como antes se mencionó, la misma predicción acerca de la existencia del estado de pseudogap llevó a imaginar la posibilidad de que incrementando el dopaje pudiera también predecirse la existencia de la transición de fase cuántica, que los experimentos indican que está presente para valores del dopaje cercanos a 0.2 [1]. Esta posibilidad llevó en el trabajo [8] a considerar la inclusión del dopaje en la solución del modelo formulado en las referencias [6, 7] solo para semilleno. Así, en el trabajo [8] se resolvieron las ecuaciones para el sistema pero considerando la existencia de un número dado de huecos.

Los resultados permitieron verificar la existencia de la mencionada transición de fase cuántica para los valores de los siguientes valores de los parámetros.

La figura 6 muestra como el estado aislante, el cual tiene la energía más baja a semilleno, evoluciona y se torna degenerado con el estado de pseudogap en el valor crítico de dopaje cercano a $x_c = 0.2$.

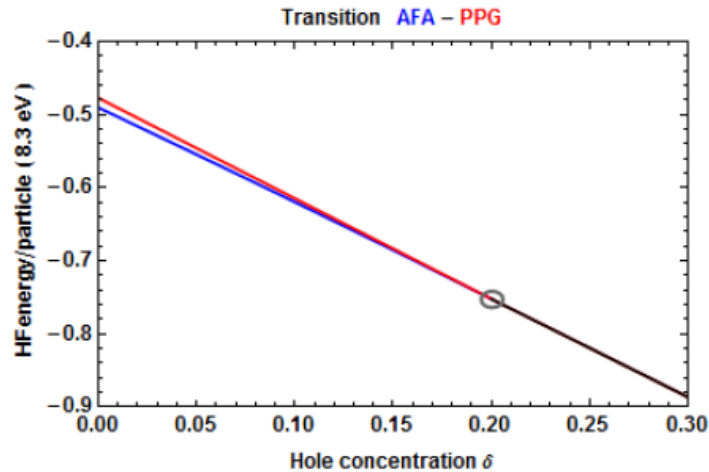


FIG. 6: Dependencia de las energías de HF por partícula con el dopaje para los estados *AFI* y *PPG*.

Resultados análogos fueron también evaluados en el trabajo [9] para valores más optimizados de los parámetros que reproducen el gap del material de 2 eV y su constante dieléctrica cercano a 21. Los dos ploteos mostrados en la figura 6 definen la transición como de segundo orden. En conclusión los resultados asociados a esta investigación brindan respuestas a las preguntas que se plantean hoy en día acerca de la transición de fase cuántica que yace "bajo" el Domo superconductor: la transición es continua (de segundo orden) y presenta fuertes correlaciones antiferromagnéticas que pueden afectar las propiedades físicas en el entorno del dopaje crítico [1, 2].

Referencias

- [1] J. L. Tallon y J. W. Loram, *Physica C* 349, 53 (2001).
- [2] D. M. Broun, What lies beneath the dome?, *Nature Physics* 4, 170 (2008).
- [3] J. C. Davis y D. H. Lee, Concepts relating magnetic interactions, intertwined electronic orders, and strongly correlated superconductivity. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* (2013). Inaugural Article: www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1316512110.
- [4] R. B. Laughlin, Hartree-Fock computation of the high-Tc cuprate phase diagram, arXiv:1306.5359v1 [condmat.supr-con] (2013).
- [5] J. M. Tranquada, *Treatise of High Temperature Superconductivity*, J. R. Schrieffer and J. Brooks, eds., (Springer-Verlag, 2007) pp. 257–298.
- [6] A. Cabo-Bizet y A. Cabo Montes de Oca, *Phys. Lett. A* 373, 1865-1869 (2009).
- [7] A. Cabo-Bizet y A. Cabo Montes de Oca, *Symmetry* 2, 388 (2010).
- [8] V. M. Martínez Álvarez, A. Cabo-Bizet y A. Cabo Montes de Oca, *Int. J. Mod. Phys. B* 28, 1450146 (2014).
- [9] Y. Vielza, Optimización de un modelo de capas CuO₂ del La₂CuO₄, Tesis de Diploma, Fac. de Física UH, (2014).

- [10] A. Cabo Montes de Oca, N. H. March y A. Cabo-Bizet Int. J. Mod. Phys. B 28, 1450027 (2014).
- [11] Y. Vazquez-Ponce, D. O. Agüero y A. Cabo Montes de Oca, Phys. Lett. A 353, 255 (2006).
- [12] M. Imada, Rev. Mod. Phys. 70, 4 (1998).
- [13] P. W. Anderson, Science 235, 1196, (1987).
- [14] L. F. Mattheiss, Phys. Rev. Lett. 58, 1028 (1987).
- [15] W. E. Pickett, Rev. Mod. Phys. 61, 2 (1999).