

Superconductivity and Magnetism in the Extended Hubbard Model

A dissertation submitted to the
ETH Zürich
for the degree of the
Doctor of Natural Sciences

presented by
CARSTEN HONERKAMP
Dipl. Phys. ETH
born December 14th, 1971,
German citizen

Examiner Prof. T.M. Rice
Co-Examiner Prof. D. Vollhardt
Co-Examiner Prof. M. Salmhofer

ETH Diss. No. 13868
September 2000

Abstract

The general topic of this thesis is the interplay between superconductivity and magnetism in the extended Hubbard model on the two-dimensional square lattice. In the longer first part we investigate a system with infinite extension by a weak-coupling renormalization group method and describe how superconducting and magnetic tendencies can lead to a breakdown of the Landau-Fermi liquid state.

After introductory chapters focusing on certain aspects of two-leg Hubbard ladders and the two-patch model relevant for us, we describe a general renormalization group (RG) formalism for the one-particle irreducible vertex functions. Then we discuss the implementation of this scheme for the two-dimensional t - t' Hubbard model using a so-called N -patch technique which takes into account the full Brillouin zone.

Applying this scheme, we find a RG flow to strong coupling in a broad particle density and temperature range. This means that the interaction energies become larger than the bandwidth of the system and signals the breakdown of the weakly coupled Fermi-liquid state existing in normal metals at low temperatures. From the character of the flow to strong coupling we derive conjectures on the nature of the true strong coupling state of the system.

In the hole-doped parameter region of the model at band fillings smaller than one particle per site we compare the RG flow for the 2D case with the RG flow and other results for the half-filled two-leg Hubbard ladder. Due to the striking analogies between the RG flows of these two systems in a certain parameter region, we argue that in the two-dimensional t - t' -Hubbard model besides an antiferromagnetic phase around half-filling and a d -wave superconducting phase far away from half-filling there exists an additional intermediate phase with a partially truncated Fermi surface. The \vec{k} -space regions where the Fermi surface becomes destroyed exhibit the properties of an insulating spin liquid. This state, known to be the ground state of the half-filled two-leg Hubbard ladder, has a fully gapped spectrum (spin and charge gaps) and is not related to any kind of spontaneous symmetry breaking, i.e. all correlations remain purely short ranged. The saddle point regions of the two-dimensional dispersion close to the Fermi surface are identified as causing a mutual reinforcement between antiferromagnetic and d -wave superconducting fluctuations responsible for the formation of the unconventional strong coupling state. We further discuss the relevance of the insulating spin liquid state to the

pseudogap phase of the high- T_c cuprates and present results for the scattering rates of quasiparticles at the Fermi surface.

For the electron-doped side of the phase diagram we find a different picture which suggests that upon changing the electron density the ground state of the system changes abruptly from an antiferromagnetic phase with high characteristic energy scales to a d -wave superconducting state with low energy scale without the occurrence of an anomalous intermediate phase.

Further we briefly describe renormalization group results for special cases like the half-filled band and large values of the next-nearest neighbor hopping t' . There we find strong g -wave (or extended s -wave) pairing tendencies.

In the last chapter of this thesis we study the local interplay between magnetism and superconductivity at surfaces with $[110]$ orientation. Within a mean-field analysis we compare different possible time-reversal symmetry breaking surface states leading to a split of the otherwise degenerate zero energy Andreev bound states observable in the tunneling conductance. Depending on the parameters we either find $s+id$ superconducting surface states or surface states with local magnetization due to the onsite Coulomb interaction as energetically most stable states.

Zusammenfassung

Das allgemeine Thema dieser Arbeit ist das Zusammenwirken von Supraleitung und Magnetismus im erweiterten Hubbard Modell auf dem zweidimensionalen Quadratgitter. Im längeren ersten Teil untersuchen wir ein unendlich ausgedehntes System mit Hilfe einer Renormierungsgruppen-Methode für schwache Kopplung und beschreiben, wie supraleitende und magnetische Tendenzen den Landau-Fermi Flüssigkeitszustand zerstören.

Nach einleitenden Kapiteln, die sich auf gewisse für uns bedeutsame Aspekte der halbgefüllten Hubbard Zwei-Bein-Leiter und des Zwei-Zonen-Modells konzentrieren, beschreiben wir ein allgemeines Renormierungsgruppen(RG)-Schema für die Ein-Teilchen irreduziblen Vertex-Funktionen. Anschliessend diskutieren wir die Implementierung dieses Schemas für das zweidimensionale t - t' Hubbard Modell. Dabei benutzen wir eine sogenannte N -Zonen-Technik, welche die gesamte Brillouin-Zone berücksichtigt.

Bei Anwendung dieses Schemas finden wir einen RG-Fluss zu starker Kopplung in einer weiten Teilchendichte- und Temperaturspanne. Dies bedeutet, dass die Wechselwirkungsenergien grösser als die Bandbreite des Systems werden, und signalisiert die Zerstörung des schwach gekoppelten Fermi-Flüssigkeitszustandes, welcher in normalen Metallen bei tiefen Temperaturen vorliegt. Aus der Art und Weise, wie der Fluss zu starker Kopplung von statten geht, leiten wir Vermutungen über den wahren stark gekoppelten Zustand des Systems ab.

In dem lochdotierten Parameter-Bereich des Modells bei Bandfüllungen mit weniger als einem Teilchen pro Gitterplatz vergleichen wir den RG-Fluss im zweidimensionalen Modell mit dem RG-Fluss und anderen Resultaten für die Zwei-Bein Hubbard-Leiter bei halber Füllung. Aufgrund der prägnanten Analogien zwischen den RG-Flüssen in diesen beiden Systemen in einem bestimmten Parameterbereich argumentieren wir, dass im zweidimensionalen t - t' -Hubbard Modell neben einer antiferromagnetischen Phase nahe halber Füllung und einer d -Wellen supraleitenden Phase entfernt von halber Füllung eine Zwischenphase existiert, in der die Fermifläche auf Teilabschnitten zerstört wird. Die \vec{k} -Raum-Gebiete, wo die Fermifläche fehlt, weisen die Eigenschaften einer isolierenden Spinflüssigkeit auf. Dieser Zustand, bekannt als Grundzustand der zweibeinigen Hubbard-Leiter bei halber Füllung, weist keinerlei lückenlose Anregungen auf (Energilücken für Spin- und Ladungsanregungen) und beinhaltet keine spontane Symme-

triebrechung. Das bedeutet, dass alle Korrelationen kurzreichweitig sind.

Die Sattelpunktsgebiete der zweidimensionalen Dispersion werden als Ursache einer gegenseitigen Verstärkung zwischen antiferromagnetischen und d -Wellen supraleitenden Fluktuationen erkannt, welche letztendlich für das Auftreten des unkonventionellen stark gekoppelten Zustandes verantwortlich ist. Desweiteren diskutieren wir die Relevanz des isolierenden Spin-Flüssigkeitszustandes für die Pseudogap-Phase der Hoch- T_c -Kuprate und beschreiben Resultate für die Streurate von Quasiteilchen an der Fermifläche.

Für die elektrondotierte Seite des Phasendiagramms finden wir ein anderes Bild, welches nahelegt, dass hier bei Änderung der Elektronendichte der Grundzustand abrupt von einer antiferromagnetischen Phase mit hoher charakteristischer Energieskala zu einem d -Wellen supraleitenden Zustand auf niedriger Energieskala wechselt, ohne dass ein anormaler Zwischenzustand auftritt.

Weiter beschreiben wir kurz Renormierungsgruppen-Resultate für Spezialfälle wie halbe Füllung und grosse Werte des Hopping-Parameters zwischen übernächsten Nachbarn. Dort finden wir starke Tendenzen zu g -Wellen-(oder extended s -Wellen-) Paarbildung.

Im letzten Kapitel dieser Arbeit betrachten wir das lokale Zusammenwirken von Supraleitung und Magnetismus an Oberflächen mit $[110]$ Orientierung. Im Rahmen einer Mean-Field-Analyse vergleichen wir verschiedene Oberflächenzustände, welche die Zeitumkehr-Invarianz brechen und zur Aufspaltung des sonst bei Energie null entarteten Andreev Bindungszustandes führen. In Abhängigkeit von den Parametern finden wir entweder $s + id$ supraleitende Oberflächenzustände oder solche mit lokaler Magnetisierung aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung als energetisch stabilste Zustände.