

UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, INGENIERÍA Y
AGRIMENSURA

TESIS PARA OPTAR AL TÍTULO DE
Doctor en Física

Plasmones, correlaciones electrónicas y superconductividad en cupratos y niquelatos

Autor:

Lic. Luciano S. Zinni

Director:

Dr. Matías H. Bejas

Codirector:

Dr. Andrés F. Greco



Realizada en la Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura - UNR

Rosario, Argentina - 2025

*“Cuando digo que la magia ya existe;
es un concepto tan viejo como el hombre.
Y lo mágico tiene la función del horizonte,
que se corre para ir más lejos.
El relámpago fue algo mágico, hasta que el hombre lo entendió.
Y siempre va a haber cosas que no podamos entender.
De lo contrario, el mundo sería horrible.”*

— Liliana Bodoc

Agradecimientos

En primer lugar quiero dedicarle unas palabras a mis directores, el Dr. Matías Bejas y el Dr. Andrés Greco, por haberme abierto las puertas a su grupo de investigación. También por su constante acompañamiento durante todo el doctorado a través de sus consejos, su paciencia y su gran dedicación; el apoyo de ambos durante este proceso fue determinante para mi formación, tanto profesional como humana, y por ello estaré siempre en deuda.

A mis amigos y amigas doctorandos, con quienes compartimos charlas, discusiones, almuerzos, meriendas, cenas y mucho más, todos momentos que guardaré en mi memoria como más que felices.

Agradezco a mi familia, por su sostén incondicional que me ha brindado siempre.

Al Timmy y al Chiqui, por su amor y consuelo ilimitado en forma de ronroneos, maullidos y caricias peludas.

Quiero agradecer también al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) por brindarme el sustento económico a través del programa de becas doctorales para llevar a cabo mi doctorado. El apoyo de organismos estatales para el desarrollo de la ciencia nacional en todos sus escalafones es necesario para el progreso hacia una sociedad justa, por lo que le doy las gracias al CONICET por haberme hecho parte de dicho proceso.

Por último pero no menos importante, le agradezco inmensamente a la Universidad

Nacional de Rosario, la cual considero como mi segunda casa. Me acogió desde mis estudios secundarios, pasando por los de grado y hoy en día, siendo docente y finalizando esta etapa de posgrado también en ella, siento más que nunca la necesidad de expresar mi infinita gratitud a la Universidad Pública, Gratuita y de Calidad. Sin universidad no hay futuro.

Resumen

Desde su descubrimiento en 1986, los cupratos superconductores de alta temperatura crítica han sido objeto de intensos estudios. Su elevado valor de temperatura crítica y la coexistencia de múltiples fases interactuantes han revelado un diagrama de fase complejo y universal en todos estos materiales. Sin embargo, los mecanismos que los gobiernan siguen siendo enigmáticos, especialmente debido a sus altas correlaciones electrónicas que desafían las teorías convencionales. En este contexto, entender las excitaciones colectivas de carga, como los plasmones, y las correlaciones electrónicas resulta esencial para el desarrollo de modelos que capturen con precisión su física compleja.

Entre las diversas propuestas para estudiar los cupratos, el modelo t - J es uno de los más destacados. Aunque presenta una relativa simplicidad, sus restricciones hacen que no cuente con una solución analítica, lo cual exige técnicas avanzadas para su análisis. En esta tesis se emplea este modelo, ampliado con la interacción coulombiana de largo alcance (el modelo t - J - V), y se aplica una técnica de teoría cuántica de campos mediante integrales de camino de los operadores de Hubbard y una expansión $\text{large-}N$ para analizar excitaciones colectivas de carga y el mecanismo de superconductividad en cupratos y niquelatos, estos últimos con características similares a los cupratos, como superconductividad no convencional. Inicialmente, se estudian las propiedades de los plasmones de tipo acústico en cupratos mediante la comparación de resultados teóricos con datos experimentales de dispersión inelástica y resonante de rayos X (RIXS). Este análisis muestra que los modelos que incluyen las altas correlaciones electrónicas, como

el modelo t - J - V , son fundamentales. En cambio, la comparación con un enfoque de correlaciones débiles (la aproximación de fase aleatoria, RPA) arroja que es necesaria la inclusión manual de una masa efectiva m^* para representar estas correlaciones, cuando el modelo t - J - V las contiene de forma natural. Estos resultados indican que los plasmones de tipo acústico contienen información sobre las correlaciones electrónicas y reflejan directamente la naturaleza de los portadores de carga en estos sistemas altamente correlacionados.

Por otra parte, el estudio de los niquelatos superconductores plantea un enfoque comparativo con los cupratos. Se evalúan las propiedades de los plasmones en función de dos regímenes de correlación electrónica contrapuestos: uno análogo a los cupratos, caracterizado por altas correlaciones electrónicas, y otro correspondiente a interacciones débiles, mejor representado por el enfoque de RPA. Se obtienen predicciones que sugieren que los resultados experimentales futuros podrían esclarecer el grado de similitud entre ambos sistemas y aportar nueva información sobre el régimen electrónico en que se encuentran los niquelatos.

Finalmente, se explora el rol de los plasmones en el mecanismo de apareamiento que da lugar a la superconductividad en cupratos, evaluando si estas excitaciones colectivas pueden contribuir a la formación de pares de Cooper. Los resultados dentro del modelo t - J - V y la expansión $large-N$ sugieren que, aunque los plasmones son excitaciones colectivas relevantes en estos materiales, su contribución al mecanismo superconductor es apantallada por las altas correlaciones y es la interacción de intercambio de espín la que da origen al acoplamiento efectivo, incluso pese a la presencia de repulsión coulombiana de largo alcance.

Publicaciones

Gran parte del contenido de esta tesis doctoral está basado y fue presentado en las siguientes publicaciones científicas y congresos.

Publicaciones científicas

- **Título:** Impact of electron correlations on two-particle charge response in electron- and hole-doped cuprates

Autores: Abhishek Nag, Luciano Zinni, Jaewon Choi, J. Li, Sijia Tu, A. C. Walters, S. Agrestini, S. M. Hayden, Matías Bejas, Zefeng Lin, H. Yamase, Kui Jin, M. García-Fernández, J. Fink, Andrés Greco y Ke-Jin Zhou

Resumen: Estimating many-body effects that deviate from an independent particle approach has long been a key research interest in condensed matter physics. Layered cuprates are prototypical systems, where electron-electron interactions are found to strongly affect the dynamics of single-particle excitations. It is, however, still unclear how the electron correlations influence charge excitations, such as plasmons, which have been variously treated with either weak or strong correlation models. In this work, we demonstrate the hybridized nature of collective valence charge fluctuations leading to dispersing acoustic-like plasmons in hole-doped $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$ and electron-doped $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$ using the two-particle probe, resonant inelastic x-ray scattering. We then describe the plasmon

dispersions in both systems, within both the weak-coupling mean-field random phase approximation (RPA) and strong-coupling t - J - V model in a large- N scheme. The t - J - V model, which includes the correlation effects implicitly, accurately describes the plasmon dispersions as resonant excitations outside the single-particle intraband continuum. In comparison, a quantitative description of the plasmon dispersion in the RPA approach is obtained only upon explicit consideration of renormalized electronic band parameters. Our comparative analysis shows that electron correlations significantly impact the low-energy plasmon excitations across the cuprate doping phase diagram, even at long wavelengths. Thus, complementary information on the evolution of electron correlations, influenced by the rich electronic phases in condensed matter systems, can be extracted through the study of two-particle charge response.

Revista científica: Physical Review Research **6**, 043184 (2024)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.6.043184>

- **Título:** Evolution of plasmon excitations across the phase diagram of the cuprate superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

Autores: M. Hepting, T. D. Boyko, V. Zimmermann, M. Bejas, Y. E. Suyolcu, P. Puphal, R. J. Green, L. Zinni, J. Kim, D. Casa, M. H. Upton, D. Wong, C. Schulz, M. Bartkowiak, K. Habicht, E. Pomjakushina, G. Cristiani, G. Logvenov, M. Minola, H. Yamase, A. Greco y B. Keimer

Resumen: We use resonant inelastic x-ray scattering (RIXS) at the O K - and Cu K -edges to investigate the doping dependence and temperature dependence of low-energy plasmon excitations in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. We observe a monotonic increase of the energy scale of the plasmons with increasing doping x in the underdoped regime, whereas a saturation occurs above optimal doping $x \gtrsim 0.16$ and persists at least up to $x = 0.4$. Furthermore, we find that the plasmon excitations show only a marginal temperature dependence, and possible effects due to the superconducting transition and the onset of strange metal behavior are either

absent or below the detection limit of our experiment. Taking into account the strongly correlated character of the cuprates, we show that layered t - J - V model calculations accurately capture the increase of the plasmon energy in the underdoped regime. However, the computed plasmon energy continues to increase even for doping levels above $x \gtrsim 0.16$, which is distinct from the experimentally observed saturation and reaches a broad maximum around $x = 0.55$. We discuss whether possible lattice disorder in overdoped samples, a renormalization of the electronic correlation strength at high dopings, or an increasing relevance of nonplanar Cu and O orbitals could be responsible for the discrepancy between experiment and theory for doping levels above $x = 0.16$.

Revista científica: Physical Review B **107**, 214516 (2023)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.214516>

- **Título:** Low-energy plasmon excitations in infinite-layer nickelates

Autores: Luciano Zinni, Matías Bejas, Hiroyuki Yamase y Andrés Greco

Resumen: The discovery of superconductivity in infinite-layer nickelates is presently an important topic in condensed-matter physics, and potential similarities to and differences from cuprates are under intense debate. We determine general features of the charge excitation spectrum in nickelates from two opposite viewpoints: (i) Nickelates are regarded as strongly correlated electron systems like cuprate superconductors and thus can be described by the t - J model, and (ii) electron correlation effects are not as strong as in cuprates, and thus, random-phase approximation (RPA) calculations may capture the essential physics. We find that in both cases, plasmon excitations are realized around the momentum transfer $\mathbf{q} = (0, 0, q_z)$, although they tend to be damped more strongly in the RPA. In particular, this damping is enhanced by the relatively large inter-layer hopping expected in nickelates. Besides reproducing the optical plasmon at $\mathbf{q} = (0, 0, 0)$ observed in $\text{Nd}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{NiO}_2$, we obtain low-energy plasmons with gaps of ~ 360 and ~ 560 meV at $\mathbf{q} = (0, 0, q_z)$ for finite q_z in cases (i) and (ii),

respectively. The present work offers a possible theoretical hint to answer whether nickelates are cupratelike or not and contributes to the general understanding of the charge dynamics in nickelates.

Revista científica: Physical Review B **107**, 014503 (2023)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.014503>

- **Título:** Superconductivity with and without glue and the role of the double-occupancy forbidding constraint in the t - J - V model

Autores: Luciano Zinni, Matías Bejas y Andrés Greco

Resumen: The occurrence of retarded (with glue) and unretarded (without glue) pairing is thoroughly discussed in cuprates. We analyze some aspects of this problem in the context of the t - J - V model in a large- N approximation. When $1/N$ renormalizations are neglected the mean-field result is recovered, where the unretarded d -wave superconducting pairing triggered by the spin-exchange interaction J is obtained. However, the presence of a nonnegligible nearest-neighbors Coulomb interaction $V(\mathbf{q})$ kills superconductivity. If the non-double-occupancy constraint and its fluctuations are considered, the situation changes drastically. In this case, $V(\mathbf{q})$ is screened making d -wave superconductivity very robust. In addition, we show that the early proposal for the presence of an unretarded pairing contribution triggered by the spin-exchange interaction J can be discussed in this context.

Revista científica: Physical Review B **103**, 134504 (2021)

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.134504>

Ponencias en congresos

- **Título:** Los plasmones presentan trazas de correlaciones electrónicas en cupratos superconductores de alta temperatura crítica

Resumen de la charla: Los plasmones son excitaciones colectivas fundamentales en sólidos. Los primeros estudios se centraron principalmente en materiales 2D y 3D convencionales, pero, luego, los plasmones fueron analizados en sistemas de capas en el contexto de la aproximación de fase aleatoria (RPA), la cual es utilizada para abordar sistemas débilmente correlacionados. A pesar de que el rol de las correlaciones electrónicas ya fue discutido, la existencia de los plasmones en sistemas altamente correlacionados, en particular en cupratos superconductores de alta temperatura crítica, no fue estudiada tanto como en sistemas más convencionales, e incluso estuvo en discusión en los últimos años. Originalmente, excitaciones colectivas de carga han sido observadas en cupratos pero no fueron interpretadas como plasmones. Pero nuevos estudios en cupratos que se realizaron usando dispersión de rayos x inelástica y resonante (RIXS) determinaron inequívocamente la existencia de plasmones. Recientemente, experimentos de RIXS más precisos en $\text{Sr}_{0.9}\text{La}_{0.1}\text{CuO}_2$ han observado la existencia de un gap en el espectro de energía de los plasmones en el centro de la zona de Brillouin (ZB) bidimensional. Este gap de plasmones fue predicho en el contexto de una expansión large- N del modelo t - J - V de capas. Además, este modelo teórico capturó correctamente los plasmones observados en RIXS e incluso la tendencia de la frecuencia de plasma en el diagrama de fase en la zona de bajo dopaje del cuprato $\text{La}_{2-\delta}\text{Sr}_\delta\text{CuO}_4$. Aunque hay evidencia a favor del modelo t - J - V para explicar plasmones, aún se debate si RPA es capaz de reproducir las mediciones en RIXS. En esta exposición, compararemos los plasmones que se obtienen en estos dos modelos opuestos y contrastaremos sus resultados con datos experimentales de varios cupratos. Mostraremos que los plasmones contienen información sobre las correlaciones electrónicas y que el tratamiento usual con RPA no describe correctamente los plasmones en cupratos. Sin embargo, para un dopaje fijo, los plasmones medidos pueden ser capturados por RPA con la introducción de parámetros de banda efectivos, pero RPA no tiene un argumento intrínseco sobre cómo generar esta renormalización. Demostraremos que, al utilizar argumentos

del modelo t - J - V que tienen en cuenta las altas correlaciones para renormalizar los parámetros de banda en RPA, obtenemos plasmones que coinciden con los experimentos y con los del modelo t - J - V en la zona de bajo momento \mathbf{q} .

Lugar y fecha: IX Reunión Nacional de Sólidos - Rosario, Argentina, 15 al 17 de noviembre de 2023.

- **Título:** Plasmones de baja energía en niquelatos superconductores: posibles analogías y diferencias con cupratos superconductores.

Resumen de la charla: El estudio de los niquelatos ha cobrado importancia en los últimos años debido al reciente descubrimiento de superconductividad en dichos materiales a tal punto que se dice que hemos entrado en “la era del níquel de la superconductividad”. Su estructura cristalina es similar a la de los cupratos, los cuales presentan propiedades superconductoras y del estado normal de gran interés que se vienen estudiando hace más de 35 años y aún se encuentran vigentes. Por esto, sumado a que el níquel es vecino del cobre en la tabla periódica y ambos elementos tienen estructuras electrónicas semejantes, es natural argumentar que los niquelatos podrían presentar propiedades análogas a la de los cupratos. Recientemente se han detectado plasmones de baja energía en cupratos a través de la técnica experimental “resonant inelastic X-ray scattering”(RIXS), los cuales han sido bien descritos en el contexto del modelo t - J de capas con interacción coulombiana de largo alcance V . Asumiendo que los niquelatos también son sistemas altamente correlacionados, presentaremos resultados de plasmones con el modelo t - J - V para estos sistemas. Además expondremos cálculos en el contexto de la aproximación de fase aleatoria (RPA), la cual es adecuada para explicar sistemas débilmente correlacionados. De esta manera, mostraremos diferencias entre ambos modelos y aportaremos a la discusión sobre las similitudes entre los niquelatos y los cupratos.

Lugar y fecha: 107° Reunión de la Asociación Física Argentina - Bariloche, Argentina, 27-30 de septiembre de 2022.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	v
Publicaciones	vii
INTRODUCCIÓN	1
Superconductividad no convencional	1
Plasmones y superconductividad	3
Diagramación de la tesis	7
1. EL MODELO t-J-V Y EL FORMALISMO LARGE-N	9
1.1. Introducción	9
1.2. Los operadores de Hubbard y el modelo t - J - V	10
1.3. Representación en integral de camino de los operadores de Hubbard y expansión large- N	12
1.3.1. Fermiones	16
1.3.2. Bosones	19

1.3.3. Vértices de interacción	19
1.4. Correlaciones de carga	22
1.5. La fase de flujo o d CDW	23
2. PLASMONES EN CUPRATOS SUPERCONDUCTORES DE ALTA TEMPERATURA CRÍTICA	27
2.1. Introducción	27
2.2. Análisis para dopaje fijo	30
2.2.1. Determinación experimental de los plasmones	30
2.2.2. Masas efectivas y velocidades de Fermi	32
2.2.3. La aproximación de fase aleatoria (RPA)	37
2.2.4. El modelo t - J - V	42
2.2.5. Discusiones	43
2.3. Análisis en función del dopaje	50
3. LOS NIQUELATOS SUPERCONDUCTORES	55
3.1. Introducción	55
3.2. Similitudes y diferencias con cupratos superconductores de alta tempe- ratura crítica	57
3.3. Los niquelatos como sistemas análogos a los cupratos	59
3.4. Los niquelatos como sistemas débilmente correlacionados	61
3.5. Comentarios finales	65

4. ROL DE LOS PLASMONES EN LA SUPERCONDUCTIVIDAD	67
4.1. Introducción	67
4.2. La interacción superconductor efectiva	68
4.3. Repulsión coulombiana de corto alcance	72
4.3.1. Contribuciones de los sectores de Π_{ab}	75
4.4. Repulsión coulombiana de largo alcance	79
CONCLUSIONES	83
Plasmones en cupratos superconductores de alta temperatura crítica	84
Los niquelatos superconductores	85
El rol de los plasmones en la superconductividad	86
Conclusión general	88
Perspectivas a futuro	88
APÉNDICE	91
Deducción de la interacción coulombiana de largo alcance en sistemas de capas infinitas	93
Detalles experimentales de las mediciones en LSCO y LCCO	95
Crecimiento y caracterización de las muestras	95
Estructura electrónica	97
Mediciones en RIXS y extracción de plasmones	98

Deducción de la fórmula de Fetter	101
¿Qué dice RPA sobre el término $\langle v_F \rangle$ en el modelo de Fetter?	103
REFERENCIAS	107

INTRODUCCIÓN

Superconductividad no convencional

El fenómeno físico de la superconductividad, descubierto en 1911 por el equipo de Heike Kamerlingh-Onnes [1], marcó un hito en la física de la materia condensada al observarse que, al enfriar el mercurio por debajo de la temperatura de 4K, su resistencia eléctrica caía abruptamente a cero. A esta sorprendente propiedad se le sumó años más tarde el descubrimiento del efecto Meissner [2], que mostró cómo los superconductores expulsaban completamente los campos magnéticos en su interior, desafiando las leyes electromagnéticas de la época y requiriendo nuevas teorías para su explicación. Estos avances en la física de los superconductores desembocaron en la teoría BCS en 1957 [3], que durante tres décadas fue el marco teórico dominante para entender la superconductividad. Sin embargo, el descubrimiento en 1986 de los cupratos superconductores de alta temperatura crítica (CSAT) [4], con temperaturas críticas por encima de todos los materiales conocidos hasta esa fecha (ver Fig. 1), desató una revolución en el campo y trajo consigo una serie de preguntas fundamentales que aún, a casi cuarenta años desde su hallazgo, continúan sin respuesta.

Inmediatamente al descubrimiento de los cupratos, quedó claro que los principios de la teoría cuántica tradicional sobre las propiedades electrónicas de los sólidos, que había explicado con éxito los metales y superconductores convencionales, eran incapaces de describir muchos de los fenómenos presentes en estos nuevos materiales [6]. Su estudio

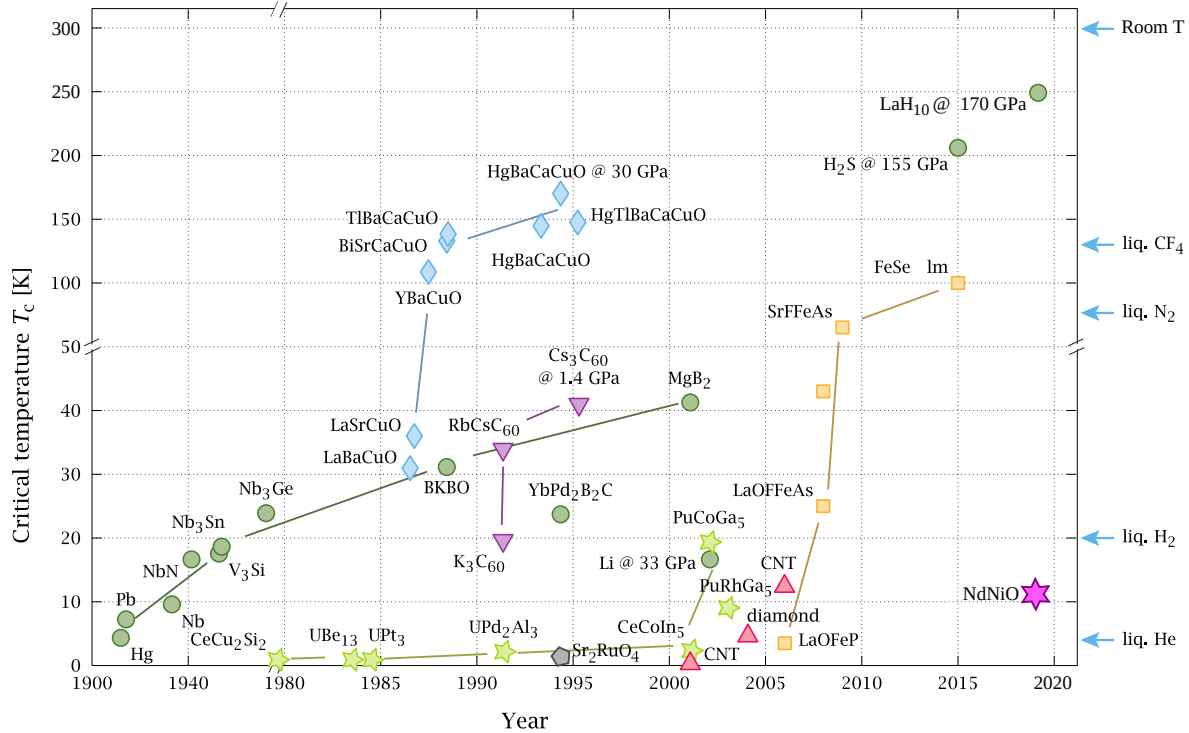


Figura 1: Temperatura crítica de distintos superconductores versus año de su descubrimiento. Los círculos verdes corresponden a superconductores convencionales (BCS), las estrellas verde claro a los basados en fermiones pesados, los diamantes azules a los cupratos, los triángulos invertidos púrpura a fulerenos, los triángulos rojos a alótropos de carbono, los cuadrados naranjas a los basados en hierro, el pentágono gris al rutanato de estroncio y la estrella rosa a un niquelato. En el eje vertical derecho se identifica con flechas la temperatura correspondiente a distintos puntos de fusión de materiales utilizados para enfriamiento, junto a la temperatura ambiente. Figura extraída de [5].

exhaustivo produjo un diagrama de fase muy interesante que se observa en la Fig. 2. A medio llenado (sin dopar), los cupratos son aislantes de Mott de transferencia de carga antiferromagnéticos. Al dopar, el orden magnético se debilita hasta que aparece el estado superconductor caracterizado por un domo en el diagrama de fase. Además, también se han descubierto otras fases igualmente interesantes que compiten con ellas, como la fase de pseudogap [7], de metal extraño [8] y de orden de carga y espín [9]. Desde el punto de vista teórico, fue necesario la búsqueda de modelos distintos a los que se aplicaban a los superconductores convencionales, y que intentaran explicar todas las fases que coexisten en los CSAT. En 1987, P. W. Anderson fue el primero en proponer un modelo de Hubbard bidimensional de una banda para caracterizar la física de los planos Cu-O [10]. Luego, F. C. Zhang y T. M. Rice plantearon que la hibridación de los

orbitales del Cu y O produce lo que se conoce como singlete de Zhang y Rice (ZRS, por sus siglas en inglés) que se mueve bajo un modelo efectivo t - J de una banda (derivado de un modelo de Hubbard más general) [11]. Si bien hubieron otras propuestas a lo largo de los años, las propiedades físicas descritas por el ZRS se asemejan considerablemente a las de los CSAT, por lo que el modelo t - J de una banda sigue siendo uno de los principales modelos prototípicos para el estudio de cupratos.

Los cupratos abrieron las puertas a una nueva era científica, en la cual la búsqueda de materiales superconductores de alta temperatura crítica experimentó una notable aceleración. En la Fig. 1 se ilustra la gran cantidad de nuevos superconductores descubiertos tras 1986, entre los que se destacan materiales como el rutanato de estroncio y los superconductores basados en hierro, cada uno con características singulares que amplían la comprensión de la superconductividad. Un hito significativo en esta búsqueda se alcanzó en 2019, cuando se reportó superconductividad en un material basado en óxido de níquel con una estructura cristalina análoga a la de los cupratos de capas infinitas. Este descubrimiento no solo amplió la familia de superconductores no convencionales, sino que también proporcionó una plataforma única para explorar las similitudes y diferencias en las propiedades físicas entre los cupratos y niquelatos, pesquisa que en esta tesis se realiza a través de las excitaciones de carga.

Plasmones y superconductividad

Los plasmones son excitaciones colectivas de la densidad de los portadores de carga, inducidas por la interacción coulombiana de largo alcance. En un metal tridimensional isotrópico, sólo existe una rama de plasmones, conocida como la rama óptica. Por otro lado, en los sistemas formados por planos apilados entre sí (llamados de capas infinitas) aparecen, además del plasmón óptico, varias ramas de plasmones acústicos, las cuales presentan una dispersión prácticamente lineal hacia el centro de la zona de Brillouin bidimensional [12-16]. Muchos cupratos tienen una estructura de capas

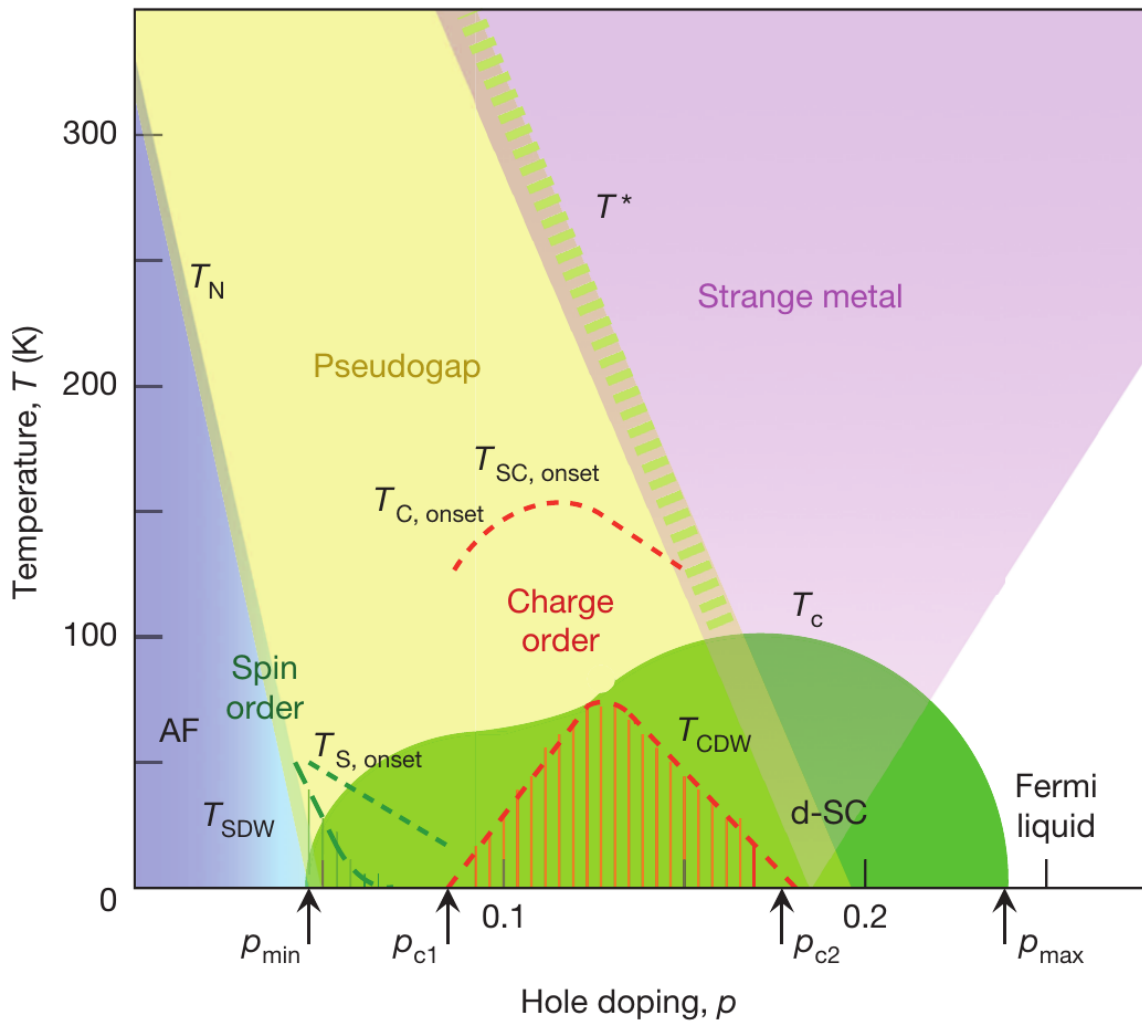


Figura 2: Temperatura versus dopaje de agujeros para los cupratos superconductores de alta temperatura crítica. Las regiones azules y verdes, delimitadas por T_N y T_c , muestran donde los órdenes antiferromagnético (AF) y superconductor d -wave (d-SC), respectivamente, se encuentran conformados completamente. El área de rayas rojas bajo T_{CDW} indica la formación completa de un orden de carga. T_{SDW} muestra lo mismo pero para un orden de onda de densidad de espín incommensurado bajo el área de rayas verdes. $T_{s,onset}$ (línea de trazos verde), $T_{c,onset}$ y $T_{sc,onset}$ (línea de trazos roja para ambos) representan las temperaturas a las cuales aparecen fluctuaciones de espín, de carga y superconductoras, respectivamente. T^* representa la temperatura a la cual se produce el cruce al régimen de pseudogap. Las flechas en el eje horizontal muestran distintos puntos críticos cuánticos para el orden de carga y la superconductividad. Figura extraída de [6].

infinitas, pero las distintas fases presentes en estos sistemas, como la de pseudogap y la de metal extraño, desafiaron el entendimiento contemporáneo a su descubrimiento y generaron una pregunta muy importante: ¿existen los plasmones en estos materiales

tan complejos?

Una de las primeras propuestas para explicar la superconductividad de alta temperatura crítica observada en los cupratos fue la presentada por V. Z. Kresin y H. Morawitz [17], quienes sugirieron que el mecanismo superconductor podría estar mediado por plasmones, además de los fonones tradicionales. Dado que su modelo se enfocaba en sistemas de capas infinitas, anticipaban que tanto los plasmones ópticos como los acústicos contribuirían al apareamiento electrónico. No obstante, el enfoque de su modelo era similar al BCS, es decir, era de acoplamiento débil, y rápidamente se conoció que los cupratos entraban en la categoría de sistemas altamente correlacionados. Además, los experimentos de espectroscopía de pérdida de energía de electrones (EELS, por sus siglas en inglés), específicamente en su variante de transmisión (T-EELS), y de espectroscopía óptica, detectaron únicamente la presencia de plasmones ópticos. Estos plasmones se manifestaban como una caída característica en el espectro de reflectancia y un pico en la función de pérdida de energía alrededor de 1 eV [18, 19]. Por el contrario, los plasmones acústicos permanecieron elusivos durante décadas, dejando abierto el interrogante sobre su existencia y su posible rol en la superconductividad.

En años recientes, el desarrollo de técnicas avanzadas como la dispersión inelástica y resonante de rayos X (RIXS, por sus siglas en inglés) ha permitido resolver este misterio. Gracias a la capacidad de esta técnica para explorar el momento transferido dentro y fuera de los planos, fue posible analizar la dispersión de los plasmones en diferentes direcciones de la zona de Brillouin, confirmando la existencia de las ramas acústicas, tanto en cupratos dopados con electrones [20, 21] como en los dopados con agujeros [22, 23]. Sin embargo, esto pudo realizarse gracias al refinamiento de la técnica junto con los estudios teóricos, ya que en los primeros experimentos en RIXS, si bien se habían detectado la presencia de excitaciones de carga, no se habían interpretado originalmente sus resultados como plasmones [24]. Incluso algunas teorías iban más allá, sugiriendo que en la fase de metal extraño la descripción convencional de las cuasipartículas de Landau colapsa, proponiendo modelos basados en teorías holográficas

y en la correspondencia AdS/CFT (conjetura de Maldacena) para abordar dicha propuesta [25-27]. Según estas teorías, la ausencia de cuasipartículas bien definidas podría inhibir la formación de excitaciones colectivas de carga, como los plasmones. Esta falta de excitaciones colectivas podría dificultar la propagación de plasmones en los metales extraños ya que decaerían en el continuo [28]. De hecho, la ausencia de un pico de plasmón bien definido en experimentos de R-EELS (EELS de reflexión) ha sido interpretada como evidencia de este decaimiento anómalo en cupratos sobredopados [29, 30]. Sin embargo, esta interpretación sigue siendo objeto de controversia y discusión en la comunidad científica [31, 32] ya que no es capaz de reconciliar las observaciones de RIXS, en donde se logró detectar inequívocamente los plasmones acústicos. De hecho, la continua mejora de la técnica de RIXS permitió observar una predicción realizada en 2016 [33]: cuando el sistema permite un hopping entre planos, denotado por t_z , estos plasmones acústicos dejan de ser estrictamente acústicos y exhiben un gap de energía en el centro de la zona de Brillouin, el cual es proporcional a t_z . Este gap fue observado por primera vez en el cuprato $\text{Sr}_{0.9}\text{La}_{0.1}\text{CuO}_2$ [34]. Debido a este fenómeno, estas excitaciones se denominan plasmones de tipo acústico, en contraposición a sólo acústicos.

Estos avances han revitalizado el interés por el papel de los plasmones en la física de los cupratos y han abierto nuevas perspectivas para comprender sus posibles contribuciones al mecanismo superconductor. En esta tesis, se realiza un estudio teórico exhaustivo de la dispersión de los plasmones de tipo acústico en cupratos y niquelatos superconductores, explorando su influencia en la superconductividad de alta temperatura crítica. Para ello, se emplea el modelo t - J - V , que integra altas correlaciones electrónicas y la interacción coulombiana de largo alcance, y se comparan sus resultados con enfoques de acoplamiento débil. Los resultados teóricos se contrastan con mediciones experimentales obtenidas mediante técnicas avanzadas (RIXS), permitiendo no solo interpretar las observaciones actuales, sino también proponer predicciones que contribuirán a esclarecer el debate sobre si los plasmones desempeñan un rol fun-

damental en el mecanismo superconductor.

Diagramación de la tesis

La presente tesis está diagramada de la siguiente manera:

- En el Capítulo 1 se presenta el formalismo completo utilizado en esta tesis. El mismo consiste en un modelo t - J - V tratado con la representación en integral de camino de los operadores de Hubbard y una expansión $\text{large-}N$, y se muestran los resultados analíticos de las propiedades físicas de interés.
- En el Capítulo 2 se analizan los plasmones en cupratos de capas infinitas. Se comparan mediciones realizadas por grupos experimentales con los que se trabajó en conjunto frente a resultados teóricos del modelo t - J - V , contrastando también con un enfoque de acoplamiento débil, el cual es ampliamente utilizado en la comunidad científica. Primero se realiza un análisis a dopaje fijo y luego a dopaje variable. Se cotejan ambos modelos teóricos y se predicen diferencias que pueden ser estudiadas en futuros experimentos de RIXS.
- En el Capítulo 3 se presentan los niquelatos de capas infinitas junto a sus similitudes y diferencias respecto a los cupratos. Se calculan los plasmones para dos regímenes contrapuestos: uno con un modelo altamente correlacionado (el modelo t - J - V) y otro con un enfoque de acoplamiento débil (la aproximación de fase aleatoria). Se muestran los resultados para ambos y se predicen diferencias observables en RIXS para determinar a qué régimen pertenecen los niquelatos de capas infinitas.
- En el Capítulo 4 se analiza el apareamiento superconductor dado por el modelo t - J - V para distintos tipos de interacciones coulombianas (a primeros vecinos y de largo alcance). Se calcula la influencia de los plasmones y las correlaciones en la

superconductividad estudiando cuidadosamente las diferencias que existen a nivel de campo medio y más allá de él. Finalmente, se cierra el capítulo conectando los anteriores con las conclusiones sobre la influencia de los plasmones en la superconductividad dentro del modelo t - J - V .

Capítulo 1

EL MODELO t - J - V Y EL FORMALISMO LARGE- N

1.1. Introducción

Desde el descubrimiento de los cupratos superconductores de alta temperatura crítica se ha discutido ampliamente cuál es el modelo microscópico más apto para describir sus propiedades físicas. Una de las primeras propuestas, realizada por P. W. Anderson [10], fue el uso del modelo de Hubbard consistente con una repulsión coulombiana entre electrones en un mismo sitio U considerablemente alta, planteando la importancia de las altas correlaciones electrónicas en estos materiales. Luego, Zhang y Rice [11] desarrollaron un modelo que consiste en tomar primeramente un hamiltoniano de Hubbard de dos bandas que describe la física de los planos Cu-O de los cupratos e ir al límite de alto U , para el cual este hamiltoniano se mapea a un modelo t - J de una sola banda en donde los orbitales de ambos elementos se hibridizan y forman el ZRS, y aparece una prohibición de doble ocupación en cada sitio. A partir de estos trabajos, el modelo t - J se volvió el modelo prototípico para analizar los CSAT. Sin embargo, no existe una solución analítica conocida para el modelo y, por lo tanto, a lo largo de los años se desarrollaron distintos enfoques con el objetivo de extraer resultados físicos

relevantes. En este capítulo se presenta el formalismo en el cual se basan todas las investigaciones realizadas durante esta tesis, cuyo desarrollo puede referirse para más detalle a las Refs. [35-38].

1.2. Los operadores de Hubbard y el modelo t - J - V

El hamiltoniano del modelo t - J - V corresponde al modelo t - J prototípico al que se le agrega un término proveniente de la interacción coulombiana V . Esto resulta en

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} V_{ij} n_i n_j, \quad (1.1)$$

donde i y j corren sobre los sitios de la red tridimensional compuesta por planos de redes cuadradas apilados en capas, t_{ij} es la integral de hopping que toma los valores t , t' , t'' , etc, entre los primeros, segundos, terceros vecinos, etc., respectivamente. Además, el hopping entre planos es t_z (ver Fig. 1.1). $\langle i, j \rangle$ denota un par de sitios vecinos. La interacción de intercambio $J_{ij} = J$ es considerada sólo dentro de cada plano (el intercambio entre planos, J_\perp , es mucho menor que J [39]). $\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger$ y $\tilde{c}_{i\sigma}$ son los operadores de creación y destrucción de electrones con espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$, respectivamente, en el espacio de Fock sin doble ocupación. $n_i = \sum_\sigma \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i\sigma}$ es el operador densidad electrónica y \vec{S}_i es el operador de espín. V_{ij} es la interacción coulombiana entre los electrones sobre la red.

En el modelo t - J - V existen sólo tres estados posibles que puede adoptar un sitio de la red, los cuales son $|\alpha\rangle = |0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. Estos estados corresponden a un sitio vacío, un sitio ocupado por un electrón con espín arriba y un sitio ocupado por un electrón con espín abajo, respectivamente. La doble ocupación está prohibida en el modelo t - J - V . Es particularmente útil introducir los operadores de Hubbard \hat{X} , los cuales, en

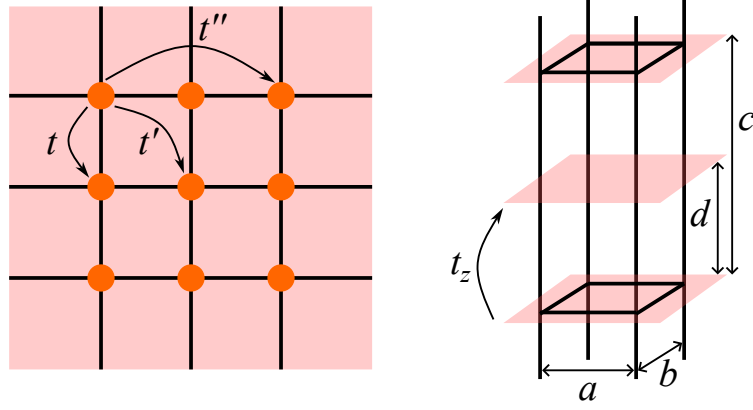


Figura 1.1: Izquierda: esquema de cada plano con la red cuadrada bidimensional sobre la que se trabaja. Se muestran los hoppings a primeros (t), segundos (t') y terceros vecinos (t''). Derecha: esquema tridimensional de la celda unidad, donde se muestran los planos conductores en color rojizo, el hopping entre planos (t_z) y las constantes de red. Los planos de líneas negras representan los límites de la celda unidad.

términos de estos estados, se escriben operando sobre el sitio i como

$$\hat{X}_i^{\alpha\beta} = |i\alpha\rangle\langle i\beta|. \quad (1.2)$$

Cuando uno de los índices superiores de los operadores de Hubbard es 0 y el otro es diferente de 0, a ese operador se le dice de tipo fermiónico ($\hat{X}_i^{\uparrow 0}$, $\hat{X}_i^{\downarrow 0}$, $\hat{X}_i^{0\uparrow}$ y $\hat{X}_i^{0\downarrow}$) ya que la diferencia entre los espines de los estados anterior y posterior a la operación es semi-entera; y en los otros casos se les dice de tipo bosónico (\hat{X}_i^{00} , $\hat{X}_i^{\uparrow\downarrow}$, $\hat{X}_i^{\downarrow\uparrow}$, $\hat{X}_i^{\uparrow\uparrow}$ y $\hat{X}_i^{\downarrow\downarrow}$) ya que la diferencia de espines es entera. Estos operadores siguen las reglas de conmutación

$$[\hat{X}_i^{\alpha\beta}, \hat{X}_j^{\gamma\delta}]_{\pm} = \delta_{ij} (\delta^{\beta\gamma} \hat{X}_i^{\alpha\delta} \pm \delta^{\alpha\delta} \hat{X}_i^{\gamma\beta}), \quad (1.3)$$

en donde el signo $+$ debe usarse cuando ambos operadores son de tipo fermiónico, y en cualquier otro caso debe usarse el signo $-$.

Los operadores electrónicos y de espín pueden escribirse en función de los operadores de Hubbard como $\tilde{c}_{i\sigma}^{\dagger} = X_i^{\sigma 0}$, $\tilde{c}_{i\sigma} = X_i^{0\sigma}$, $S_i^+ = X_i^{\uparrow\downarrow}$, $S_i^- = X_i^{\downarrow\uparrow}$ y $n_i = X_i^{\uparrow\uparrow} + X_i^{\downarrow\downarrow}$.

Esto permite escribir el hamiltoniano de la Ec. (1.1) como

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \bar{\sigma}} J_{ij} \left(X_i^{\sigma \bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma} \sigma} - X_i^{\sigma \sigma} X_j^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j,i \neq j, \\ \sigma, \bar{\sigma}}} V_{ij} X_i^{\sigma \sigma} X_j^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} \\
 & - \mu \sum_{i,\sigma} X_i^{\sigma \sigma},
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

donde el término del potencial químico μ fue agregado.

Si bien el hamiltoniano t - J - V es cuadrático al escribirse en operadores de Hubbard [Ec. (1.4)], se presentan dos grandes dificultades a la hora de calcular cantidades físicas: (a) las reglas de conmutación son complicadas [Ec. (1.3)] y (b) cualquiera de los parámetros del modelo pueden ser considerados pequeños a la hora de hacer un cálculo perturbativo de los observables. Para lidiar con (a) se han propuesto los métodos de partículas esclavas (bosón y fermión esclavo) para separar un operador de Hubbard original en operadores bosónicos y fermiónicos usuales [40], sin embargo, esto introdujo dificultades adicionales (por ejemplo, tratamientos de gauge). Para (b), una de las técnicas no perturbativas es la expansión large- N , en la cual N es el número de grados de libertad electrónicos por sitio y $1/N$ puede considerarse como un parámetro pequeño. Esta expansión va a ser relevante en el desarrollo del formalismo utilizado en esta tesis.

1.3. Representación en integral de camino de los operadores de Hubbard y expansión large- N

El formalismo para abordar el tratamiento del modelo t - J - V tiene como punto de partida la construcción de un lagrangiano clásico de primer orden utilizando los métodos de Faddeev-Jackiw (FJ) y Dirac [41-43] (para mayor detalle, puede consultarse el capítulo 8 de la Ref. [44]).

En la representación de integral de camino se asocian variables de Grassmann y variables bosónicas usuales a los operadores de Hubbard tipo fermiónicos y bosónicos, respectivamente. Primero se construye el mencionado lagrangiano en términos de los operadores de Hubbard como

$$L = \sum_i a_{i\alpha\beta}(X) \dot{X}_i^{\alpha\beta} - H(X), \quad (1.5)$$

donde $H(X)$ es el hamiltoniano t - J - V de la Ec. (1.4) y $\dot{X}_i^{\alpha\beta} = \partial_t X_i^{\alpha\beta}$. Los coeficientes $a_{i\alpha\beta}(X)$ son desconocidos y deben obtenerse de tal manera que se cumplan las relaciones de conmutación de la Ec. (1.3) según el método de FJ. Luego se introduce un conjunto de vínculos $\Omega^{\alpha\beta}$ a través de multiplicadores de Lagrange $\lambda_{\alpha\beta}$, los cuales también deben ser determinados. Esto permite construir la supermatriz simpléctica M_{AB} para imponer las reglas de conmutación de los operadores de Hubbard. Con esto, se obtiene un conjunto de ecuaciones diferenciales para los coeficientes $a_{i\alpha\beta}(X)$ y los vínculos $\Omega^{\alpha\beta}$. Una solución particular para los coeficientes es

$$a_{i0\sigma} = \frac{i}{2X_i^{00}} X_i^{\sigma 0}, \quad (1.6)$$

$$a_{i\sigma 0} = \frac{i}{2X_i^{00}} X_i^{0\sigma}, \quad (1.7)$$

y para los vínculos

$$\Omega_i^{00} = X_i^{00} + \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} - 1 = 0, \quad (1.8)$$

$$\Omega_i^{\sigma\sigma'} = X_i^{\sigma\sigma'} - \frac{X_i^{\sigma 0} X_i^{0\sigma'}}{X_i^{00}} = 0. \quad (1.9)$$

Los coeficientes de tipo bosónico del lagrangiano resultan todos nulos. El primer vínculo corresponde a la condición de completitud que indica que la doble ocupación en cada sitio está prohibida. El segundo vínculo aparece por la imposición de que se cumplan las reglas de conmutación de los operadores de Hubbard dentro del formalismo. La dinámica del sistema entonces está dada por los vínculos (1.8) y (1.9) y el lagrangiano

euclidiano

$$L_E(X, \dot{X}) = \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} \frac{(\dot{X}_i^{0\sigma} X_i^{\sigma 0} + \dot{X}_i^{\sigma 0} X_i^{0\sigma})}{X_i^{00}} + H(X), \quad (1.10)$$

donde ahora la derivada temporal es respecto al tiempo euclidiano $\tau = it$.

Para escribir la representación en integral de camino se utiliza el método de Faddeev y Senjanovich [45, 46], el cual es ampliamente usado en teoría cuántica de campos para obtener la integral de camino de sistemas con vínculos.

La función de partición euclidiana se escribe como

$$Z = \int \mathcal{D}X_i^{\alpha\beta} \delta(\Omega_i^{00}) \delta(\Omega_i^{\sigma\sigma'}) (sdet M_{AB})_i^{\frac{1}{2}} e^{-\int d\tau L_E(X, \dot{X})}, \quad (1.11)$$

donde $sdet M_{AB}$ es el superdeterminante de la matriz simpléctica, y resulta

$$(sdet M_{AB})_i^{\frac{1}{2}} = 1 / \left(-X_i^{00} \right). \quad (1.12)$$

De las ecuaciones anteriores se desprende que esta teoría corresponde a una configuración en la cual los bosones están restringidos y la dinámica está dada por los fermiones. En la Ref. [35] se demuestra que esta teoría se puede mapear a una representación de bosón esclavo.

Se toman ahora las siguientes acciones en la integral de camino de la Ec. (1.11):

- (a) Se integra sobre las variables bosónicas $X_i^{\sigma\sigma'}$ utilizando la segunda función δ .
- (b) El índice de espín $\sigma = \uparrow, \downarrow$ se lo extiende a un nuevo índice p que va de 1 a N .
Para obtener una teoría finita en el límite de N infinito, se reescalan los hoppings t_{ij} , la interacción de intercambio J_{ij} y la interacción coulombiana V_{ij} a t_{ij}/N , J_{ij}/N y V_{ij}/N , respectivamente.
- (c) La condición de completitud, que toma ahora la forma $X_i^{00} + \sum_p X_i^{pp} = N/2$, se exponentia utilizando los multiplicadores de Lagrange λ_i .

- (d) Los términos de carga del hamiltoniano [tercer y cuarto término en la Ec. (1.4)], después de extenderse a alto N , se los escribe en términos de la variable X_i^{00} a través de la condición de completitud.
- (e) Se escribe a X_i^{00} y a λ_i en términos de valores de campo medio estáticos y fluctuaciones dinámicas como $X_i^{00} = Nr_0(1 + \delta R_i)$ y $\lambda_i = \lambda_0 + \delta\lambda_i$, respectivamente.
- (f) Se realiza el cambio de variables $f_{ip}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{Nr_0}} X_i^{p0}$ y $f_{ip} = \frac{1}{\sqrt{Nr_0}} X_i^{0p}$.

Siguiendo los pasos de (a) a (f), se reescribe el lagrangiano efectivo como

$$\begin{aligned}
L_{\text{eff}} = & -\frac{1}{2} \sum_{i,p} \left(\dot{f}_{ip} f_{ip}^\dagger + f_{ip}^\dagger \dot{f}_{ip} \right) \frac{1}{1 + \delta R_i} + \sum_{i,j,p} t_{ij} r_0 f_{ip}^\dagger f_{jp} - (\mu - \lambda_0) \sum_{i,p} f_{ip}^\dagger f_{ip} \frac{1}{1 + \delta R_i} \\
& + Nr_0 \sum_i \delta\lambda_i \delta R_i + \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle, p, p'} \frac{J_{ij}}{N} \frac{f_{ip}^\dagger f_{ip'}}{1 + \delta R_i} \frac{f_{jp}^\dagger f_{jp'}}{1 + \delta R_j} + Nr_0^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \left(V_{ij} - \frac{1}{2} J_{ij} \right) \delta R_i \delta R_j \\
& + \frac{Nr_0^2}{2} \sum_{rdt} V_{ij} \delta R_i \delta R_j + \sum_{i,p} f_{ip}^\dagger f_{ip} \frac{1}{1 + \delta R_i} \delta\lambda_i + L_{\text{fant.}}, \tag{1.13}
\end{aligned}$$

donde rdt en el séptimo término significa “resto de términos” refiriéndose a los términos restantes correspondientes a la suma de la interacción coulombiana, y $L_{\text{fant.}} = -\sum_{i,p} \mathcal{Z}_{ip}^\dagger \left(\frac{1}{1 + \delta R_i} \right) \mathcal{Z}_{ip}$ es un término que sale de exponenciar el factor $(\text{sdet} M_{AB})^{\frac{1}{2}}$ a través de campos bosónicos fantasmas [36]. La interacción de intercambio es descrita por cuatro campos fermiónicos, los cuales se desacoplan a través de una transformación de Hubbard-Stratonovich introduciendo un campo asociado a una variable de enlace de la forma

$$\Delta_{ij} = \sum_p J_{ij} \frac{f_{jp}^\dagger f_{ip}}{\sqrt{(1 + \delta R_i)(1 + \delta R_j)}}. \tag{1.14}$$

El campo Δ_{ij} se lo parametriza como

$$\Delta_i^\eta = \Delta \left(1 + r_i^\eta + iA_i^\eta \right), \tag{1.15}$$

donde r_i^η y A_i^η corresponden a la parte real e imaginaria de las fluctuaciones de la variable de enlace, respectivamente, y Δ es su valor de campo medio estático. El índice

η toma los valores x, y .

Para implementar la expansión en $1/N$, el lagrangiano efectivo debe expandirse en potencias de δR . Hasta el orden $1/N$ basta con quedarse con los términos hasta δR^2 . De esta manera, el lagrangiano efectivo resulta

$$\begin{aligned}
L_{\text{eff}} = & -\frac{1}{2} \sum_{i,p} \left(f_{ip}^\dagger f_{ip} + f_{ip}^\dagger f_{ip} \right) \left(1 - \delta R_i + \delta R_i^2 \right) + \sum_{i,j,p} t_{ij} r_0 f_{ip}^\dagger f_{jp} \\
& - \mu \sum_{i,p} f_{ip}^\dagger f_{ip} \left(1 - \delta R_i + \delta R_i^2 \right) + N r_0 \sum_i \delta \lambda_i \delta R_i + \sum_{i,p} f_{ip}^\dagger f_{ip} \left(1 - \delta R_i \right) \delta \lambda_i \\
& + \frac{2N}{J} \Delta^2 \sum_{i,\eta} \left[\left(r_i^\eta \right)^2 + \left(A_i^\eta \right)^2 \right] \\
& - \Delta \sum_{\langle i,j \rangle, p, p'} \left(f_{ip}^\dagger f_{jp'} + f_{jp'}^\dagger f_{ip} \right) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\delta R_i + \delta R_j \right) + \frac{1}{4} \delta R_i \delta R_j + \frac{3}{8} \left(\delta R_i^2 + \delta R_j^2 \right) \right] \\
& - \Delta \sum_{\langle i,j \rangle, p, p'} \left(f_{ip}^\dagger f_{jp'} + f_{jp'}^\dagger f_{ip} \right) \left(r_i^\eta + i A_i^\eta \right) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\delta R_i + \delta R_j \right) \right] \\
& + N r_0^2 \sum_{\langle i,j \rangle} \left(V_{ij} - \frac{1}{2} J_{ij} \right) \delta R_i \delta R_j + \frac{N r_0^2}{2} \sum_{rdt} V_{ij} \delta R_i \delta R_j \\
& - \sum_{i,p} \mathcal{Z}_{ip}^\dagger \left(1 - \delta R_i + \delta R_i^2 \right) \mathcal{Z}_{ip}, \tag{1.16}
\end{aligned}$$

donde se cambió $\mu - \lambda_0 \rightarrow \mu$ y se descartaron los términos lineales en los campos. De la condición de completitud se deriva que $r_0 = \delta/2$, donde δ es el dopaje. Así, en el formalismo de integral de camino y expansión large- N , el modelo t - J - V es mapeado a una teoría efectiva descrita en términos de fermiones, bosones y sus interacciones.

1.3.1. Fermiones

A partir del lagrangiano de la Ec. (1.16), las reglas de Feynman se obtienen directamente: las partes bilineales generan los propagadores y el resto de los términos se representan por vértices. Luego de hacer una transformada de Fourier, se asocia en orden principal de $1/N$ con el campo fermiónico de N componentes f_p , que conecta

dos componentes genéricas p y p' , al propagador fermiónico

$$G_{pp'}^{(0)}(\mathbf{k}, i\nu_n) = \frac{-\delta_{pp'}}{i\nu_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (1.17)$$

donde \mathbf{k} y $i\nu_n$ son el momento y la frecuencia de Matsubara fermiónica, respectivamente. El propagador fermiónico resulta de $O(1)$ y su representación como diagrama de Feynman corresponde a la línea sólida en la Fig. 1.2(a). En la Ec. (1.17), $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es la dispersión electrónica, la cual depende de la red. Los cupratos son sistemas de capas con planos apilados entre sí, donde en cada plano hay una red cuadrada, resultando

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\parallel} + \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\perp}, \quad (1.18)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\parallel}$ es la dispersión en el plano y $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\perp}$ es la dispersión fuera del plano, dadas, respectivamente, como

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{\parallel} = & -2 \left(t \frac{\delta}{2} + \Delta \right) (\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \frac{\delta}{2} \cos k_x \cos k_y \\ & - 2t'' \frac{\delta}{2} (\cos 2k_x + \cos 2k_y) - \mu, \end{aligned} \quad (1.19)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\perp} = -2t_z \frac{\delta}{2} (\cos k_x - \cos k_y)^2 \cos k_z. \quad (1.20)$$

La forma $(\cos k_x - \cos k_y)^2$ en $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\perp}$ se utiliza frecuentemente en cupratos [47]. La unidad de los momentos la tomamos en unidades de la inversa de las constantes de red. Para un dado dopaje δ , el potencial químico μ y el valor de Δ deben determinarse autoconsistentemente resolviendo en conjunto

$$1 - \delta = \frac{2}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} n_F(\varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad (1.21)$$

y

$$\Delta = \frac{J}{4N_s} \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_x + \cos k_y) n_F(\varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad (1.22)$$

1.3.2. Bosones

Del lagrangiano efectivo de la Ec. (1.16) se obtiene un campo bosónico de 6 componentes

$$\delta X^a = (\delta R, \delta\lambda, r^x, r^y, A^x, A^y), \quad (1.23)$$

al cual se le asocia la inversa de un propagador bosónico de 6×6 (línea de trazo en la Fig. 1.2(a)) que conecta dos componentes genéricos a y b como

$$\left[D_{ab}^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n) \right]^{-1} = N \begin{pmatrix} \frac{\delta^2}{2} [V(\mathbf{q}) - J(\mathbf{q})] & \delta/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \delta/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{J}\Delta^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{4}{J}\Delta^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{J}\Delta^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{4}{J}\Delta^2 \end{pmatrix}, \quad (1.24)$$

donde \mathbf{q} y $i\omega_n$ son el momento y la frecuencia de Matsubara bosónica, respectivamente, y $V(\mathbf{q})$ y $J(\mathbf{q})$ son la transformada de Fourier de la interacción coulombiana y de la interacción de intercambio, respectivamente. Esta última resulta $J(\mathbf{q}) = \frac{J}{2}(\cos q_x + \cos q_y)$, y la forma de $V(\mathbf{q})$ dependerá de si se considera la interacción coulombiana de largo o corto alcance. El factor N muestra que el propagador $D_{ab}^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)$ es de $O(1/N)$, y es independiente de la frecuencia.

1.3.3. Vértices de interacción

Para calcular las cantidades hasta $O(1/N)$, el presente formalismo de large- N lleva a vértices de tres y cuatro patas [Fig. 1.2(a)]. Cabe destacar que la naturaleza de los vértices son producto del álgebra de los operadores de Hubbard y no de las interacciones del hamiltoniano como sucede en formalismos más convencionales. El vértice de tres

patas es

$$\Lambda_a^{pp'} = (-1) \left[\frac{i}{2} (\nu_n + \nu_{n'}) + \mu + 2\Delta \sum_{\eta} \cos \left(k_{\eta} - \frac{q_{\eta}}{2} \right) \cos \frac{q_{\eta}}{2}; 1; -2\Delta \cos \left(k_x - \frac{q_x}{2} \right); \right. \\ \left. -2\Delta \cos \left(k_y - \frac{q_y}{2} \right); 2\Delta \sin \left(k_x - \frac{q_x}{2} \right); 2\Delta \sin \left(k_y - \frac{q_y}{2} \right) \right] \delta^{pp'}, \quad (1.25)$$

el cual representa la interacción entre dos fermiones y un bosón.

El vértice de cuatro patas $\Lambda_{ab}^{pp'}$ representa la interacción entre dos fermiones y dos bosones, y cumple la simetría $\Lambda_{ab}^{pp'} = \Lambda_{ba}^{pp'}$. Los únicos elementos que no son nulos resultan

$$\Lambda_{\delta R \delta R}^{pp'} = \left[\frac{i}{2} (\nu_n + \nu_{n'}) + \mu \right. \\ \left. + \Delta \sum_{\eta} \cos \left(k_{\eta} - \frac{q_{\eta} + q'_{\eta}}{2} \right) \left(\cos \frac{q_{\eta}}{2} \cos \frac{q'_{\eta}}{2} + \cos \frac{q_{\eta} + q'_{\eta}}{2} \right) \right] \delta^{pp'}, \quad (1.26)$$

$$\Lambda_{\delta R \delta \lambda}^{pp'} = \frac{1}{2} \delta^{pp'}, \quad (1.27)$$

$$\Lambda_{\delta R r \eta}^{pp'} = -\Delta \cos \left(k_{\eta} - \frac{q_{\eta} + q'_{\eta}}{2} \right) \cos \frac{q'_{\eta}}{2} \delta^{pp'}, \quad (1.28)$$

$$\Lambda_{\delta R A \eta}^{pp'} = \Delta \sin \left(k_{\eta} - \frac{q_{\eta} + q'_{\eta}}{2} \right) \cos \frac{q'_{\eta}}{2} \delta^{pp'}. \quad (1.29)$$

Cada vértice conserva momento y energía, y es de $O(1)$. La dependencia en frecuencia y momento no fue escrita de manera explícita, pero puede observarse en la Fig. 1.2(a).

De la ecuación de Dyson [Fig. 1.2(b)], el propagador bosónico $D_{ab}^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)$ es re-normalizado en orden $1/N$ como

$$[D_{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n)]^{-1} = \left[D_{ab}^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n) \right]^{-1} - \Pi_{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n), \quad (1.30)$$

donde la matriz de autoenergía bosónica de 6×6 Π_{ab} [Fig. 1.2(c)] es

$$\begin{aligned} \Pi_{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n) = & -\frac{N}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} h_a(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \times \frac{n_F(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) - n_F(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} h_b(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \\ & - \delta_{a1} \delta_{b1} \frac{N}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{2} n_F(\varepsilon_{\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (1.31)$$

donde $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$ es igual a $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ con $\Delta = 0$ y h_a está dado por

$$\begin{aligned} h_a(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu) = & \left\{ \frac{2\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \nu + 2\mu}{2}; 1; -2\Delta \cos\left(k_x - \frac{q_x}{2}\right); -2\Delta \cos\left(k_y - \frac{q_y}{2}\right); \right. \\ & \left. 2\Delta \sin\left(k_x - \frac{q_x}{2}\right); 2\Delta \sin\left(k_y - \frac{q_y}{2}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Los vértices no sólo contienen las interacciones del hamiltoniano t - J - V de la Ec. (1.1), sino que, dado que provienen de la integral de camino, también contienen contribuciones del álgebra de los operadores de Hubbard y de la prohibición de doble ocupación, lo que introduce una dependencia en frecuencia. Producto de esta dependencia, al calcular el primer y segundo término de la autoenergía [Fig. 1.2(c)] se obtienen contribuciones finitas e infinitas. Sin embargo, los campos fantasmas generan términos que cancelan exactamente estos infinitos.

El propagador bosónico revestido $D_{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n)$ contiene todas las posibles fluctuaciones de carga del modelo t - J - V , las cuales son tratadas en igualdad de condiciones [38]. La expansión large- N debilita la interacción efectiva de espín comparada con la correspondiente a los grados de libertad de carga. Esto puede verse directamente en la condición de completitud, en donde el operador de carga X_i^{00} es $O(N)$ mientras que los operadores X_i^{pp} son $O(1)$.

Si $a, b = 1, 2$ en el propagador $D_{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n)$ se tiene el sector llamado 2×2 , que describe fluctuaciones de carga locales asociadas a δR y $\delta \lambda$. La presencia de $\delta \lambda$ indica que la prohibición de doble ocupación y sus fluctuaciones son tenidas en cuenta a la hora de calcular cantidades físicas a través de este sector. Por otro lado, si $a, b = 3-6$,

el propagador describe fluctuaciones de carga de enlace asociadas a r^x , r^y , A^x y A^y . A este sector se lo llama el sector 4×4 . A pesar de que $D_{ab}(\mathbf{q}, i\omega_n)$ también contiene la mezcla de ambos sectores, ha sido demostrado que esta mezcla es despreciable [48].

1.4. Correlaciones de carga

Usualmente, la función de correlación de carga-carga está definida como $\chi_c(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) = \langle T_\tau n_i(\tau) n_j(0) \rangle$, donde T_τ es el ordenador cronológico en tiempo euclidiano. En el contexto de la expansión large- N y de los operadores de Hubbard, la misma se escribe como

$$\chi_c(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{pp'} \langle T_\tau X_i^{pp} X_j^{p'p'} \rangle. \quad (1.33)$$

Utilizando la condición de completitud se sabe que $\sum_p X_i^{pp} = N/2 - X_i^{00}$, y pasando al espacio de Fourier se puede demostrar que

$$\chi_c(\mathbf{q}, i\omega_n) = N \left(\frac{\delta}{2} \right)^2 D_{11}(\mathbf{q}, i\omega_n). \quad (1.34)$$

Así, la función de correlación de carga-carga en el formalismo large- N es esencialmente el elemento (1, 1) del propagador. En la Ec. (1.34) se observa que las correlaciones de carga son de $O(1)$, pero necesitan todas las contribuciones de $O(1/N)$. Además, para obtener χ_c es necesario realizar la continuación analítica $i\omega_n \rightarrow \omega + i\Gamma$, donde Γ representa el ensanchamiento (o ancho) de línea. A pesar de que en general $\Gamma (> 0)$ es infinitésimamente pequeño, un valor finito de Γ acarrea contribuciones extrínsecas (por ejemplo, efectos de la resolución experimental) y contribuciones intrínsecas a las correlaciones electrónicas [49].

En la componente $D_{11}(\mathbf{q}, i\omega_n)$, la forma de la interacción coulombiana da lugar a distintos fenómenos físicos. Por ejemplo, en el caso de $V(\mathbf{q}) = 0$, la parte imaginaria de la función de correlación de carga-carga [$\text{Im}\chi_c(\mathbf{q}, \omega)$] da lugar a picos colectivos producto de la interacción que se llama “de sonido cero”, y es independiente del valor de

J [37]. Lo mismo ocurre para el caso de una interacción coulombiana de corto alcance a primeros vecinos, $V(\mathbf{q}) = 2V(\cos q_x + \cos q_y)$, donde los picos colectivos también corresponden a la interacción de sonido cero. Esto es una distinción importante respecto a otros enfoques de electrones débilmente interactuantes, como la aproximación de fase aleatoria (RPA, por sus siglas en inglés), para las cuales, si no hay interacción coulombiana, no existen interacciones colectivas y la función de carga-carga resulta el continuo de partícula-agujero [50]. El tercer caso es si la interacción coulombiana es de largo alcance, en el cual las interacciones colectivas corresponden a plasmones [33]. La forma de $V(\mathbf{q})$ se obtiene al resolver la ecuación de Poisson en la red del sistema que se esté analizando. En el caso de cupratos de capas infinitas, la red corresponde a una red cuadrada bidimensional con planos apilados entre sí, lo que da lugar a

$$V(\mathbf{q}) = \frac{V_c}{A(q_x, q_y) - \cos q_z}, \quad (1.35)$$

donde $V_c = e^2 d (2\epsilon_{\perp} a^2)^{-1}$ y

$$A(q_x, q_y) = \alpha (2 - \cos q_x - \cos q_y) + 1. \quad (1.36)$$

Aquí resulta $\alpha = \tilde{\epsilon}/(a/d)^2$, donde $\tilde{\epsilon} = \epsilon_{\parallel}/\epsilon_{\perp}$, con ϵ_{\parallel} y ϵ_{\perp} las constantes dieléctricas paralela y perpendicular a los planos, respectivamente, e la carga eléctrica del electrón, a la constante de red dentro del plano y d la distancia entre planos. El momento dentro del plano $\mathbf{q}_{\parallel} = (q_x, q_y)$ está en unidades de la inversa de a y el momento q_z fuera del plano está en unidades de la inversa de d . La deducción de esta ecuación puede verse en el Apéndice 4.4.

1.5. La fase de flujo o d CDW

Dentro del formalismo large- N del modelo t - J - V que se trata en esta tesis aparecen distintas inestabilidades de la fase paramagnética. Todas ellas están ampliamente estu-

diadas en [38, 51]. Aquí se centrará solo en la llamada fase de flujo que será relevante en el Capítulo 4.4.

Una inestabilidad de la fase paramagnética se manifiesta cuando aparece una divergencia en las susceptibilidades estáticas definidas dentro del propagador $D_{ab}(\mathbf{q}, \omega)$, es decir, cuando un autovalor cruza el valor cero a un dado dopaje δ , temperatura T y momento \mathbf{q} con $\omega = 0$ ocurre una inestabilidad hacia una fase caracterizada por su correspondiente autovector V^a . La fase de flujo aparece cuando $V^a \propto (0, 0, 0, 0, 1, -1)$, para el cual se paralizan las partes imaginarias de la variable de enlace [Ec. (1.15)], es decir, sólo el sector 5-6 es relevante en este caso. Cuando la inestabilidad se da con un vector de modulación $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ es conmensurada y cuando $\mathbf{q} \neq (\pi, \pi)$ es inconmensurada. En la Fig. 1.3 se observa la temperatura crítica de esta inestabilidad en función del dopaje para el caso de $J/t = 0.3$ y $t'/t = t''/t = 0$ (extraída de [38]). La fase de flujo conmensurada describe corrientes escalonadas, tal como se bosqueja en la miniatura de la Fig. 1.3.

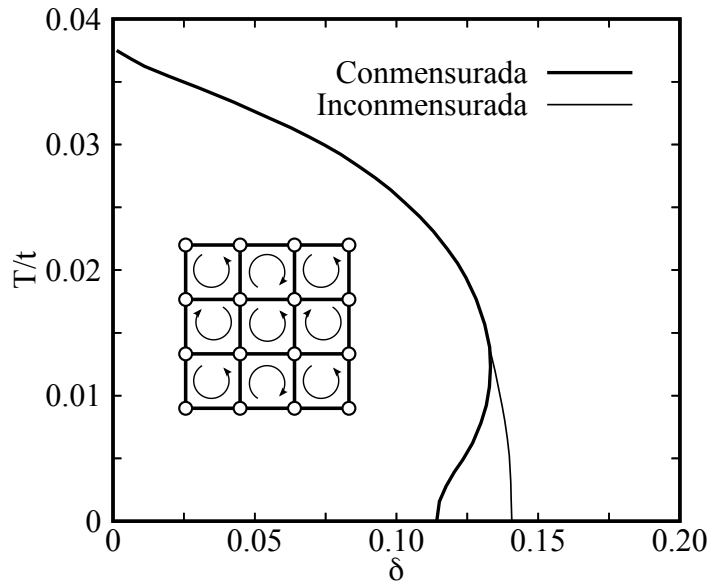


Figura 1.3: Temperatura crítica de la fase de flujo versus dopaje para el caso $J/t = 0.3$ y $t'/t = 0$. Insertado: esquema de las corrientes escalonadas generadas en esta fase conmensurada. Figura compuesta a partir de la Ref. [38].

En la fase de flujo se abre un gap d -wave, similar al pseudogap en cupratos, y aparecen Fermi pockets de baja intensidad [52] en vez de una superficie de Fermi amplia.

Las características de esta fase hace que sea equivalente a la d CDW que fue propuesta fenomenológicamente para describir el pseudogap [53]. Sin embargo, su existencia en los modelos de Hubbard y t - J - V es controversial aún, tanto teórica como experimentalmente. Desde el lado teórico, algunos reportes muestran la presencia de la inestabilidad de flujo o sus fluctuaciones [54, 55], pero otros no [56]. Desde un punto de vista experimental, algunos autores muestran que varios experimentos en la fase de pseudogap pueden describirse en el contexto de la fase de flujo [53, 57, 58], aunque experimentos de espectroscopia de fotoemisión resuelta en ángulo (ARPES, por sus siglas en inglés) no muestran Fermi pockets, sino que muestran arcos de Fermi [59, 60], los cuales se consideran como una indicación de que la simetría de traslación no se rompió en la fase de pseudogap (en la fase de flujo, la simetría de traslación se rompe). En las Refs. [61-63], la interacción entre las fluctuaciones de la fase de flujo y los portadores en la proximidad de la inestabilidad de la fase de flujo lleva a una descripción razonable de los arcos de Fermi y de la dispersión de Raman sin la necesidad de la rotura de simetría de traslación. Recientemente se propuso que la fase de flujo es una buena candidata para describir el pseudogap [64].

Capítulo 2

PLASMONES EN CUPRATOS SUPERCONDUCTORES DE ALTA TEMPERATURA CRÍTICA

2.1. Introducción

A lo largo de más de tres décadas de investigaciones intensivas, tanto teóricas como experimentales, los cupratos superconductores de alta temperatura crítica han logrado conservar su naturaleza enigmática y fascinante. Se sabe que la superconductividad en estos materiales emerge cuando los planos Cu-O se dopan con portadores de carga, lo que suprime el orden antiferromagnético que caracteriza a los aislantes de Mott, es decir, a los compuestos padres de los cupratos [6, 58, 65, 66]. Por ejemplo, en el cuprato prototípico $\text{La}_{2-\delta}\text{Sr}_\delta\text{CuO}_4$, un dopaje de $\delta = 0.07$ agujeros por unidad de CuO_2 es suficiente para inducir la superconductividad [67], alcanzando su temperatura crítica máxima para un valor de dopaje cercano a $\delta = 0.16$.

A pesar de este entendimiento parcial, el mecanismo microscópico que da lugar a la superconductividad en los cupratos sigue siendo objeto de intenso debate. A diferencia de los superconductores convencionales, donde los pares de Cooper emergen de un

estado metálico bien entendido, los cupratos son sistemas altamente correlacionados, lo que añade una capa de complejidad a su descripción. El domo superconductor que presentan en función del dopaje está acompañado por una serie de fases electrónicas igualmente intrigantes, que no sólo interactúan con la superconductividad, sino que también la promueven o compiten con ella de manera no trivial, todas ellas caracterizadas por interacciones electrónicas fuertes y altamente correlacionadas.

Diversas técnicas de espectroscopía han permitido profundizar en la comprensión de la estructura electrónica y la dinámica de los portadores de carga en las distintas fases de los cupratos. Por ejemplo, la espectroscopía de absorción de rayos X (XAS, por sus siglas en inglés) y la espectroscopía de pérdida de energía de electrones (EELS) han proporcionado información crucial sobre la distribución de los portadores dopados en los planos Cu-O. Estos estudios han demostrado que los portadores residen principalmente en los orbitales hibridizados entre el Cu $3d_{x^2-y^2}$ y el O $2p_{x,y}$, con una mayor contribución de los orbitales de oxígeno en el caso de los dopados con agujeros, y con una mayor contribución de los orbitales del cobre en el caso de los dopados con electrones [68]. Este hallazgo ha sido fundamental para entender el rol que juegan los enlaces Cu-O en la superconductividad y otras propiedades electrónicas de estos materiales.

Por otro lado, la espectroscopía óptica, que incluye técnicas en el rango infrarrojo, ha sido ampliamente utilizada para estudiar la dinámica de los portadores de carga tanto en el estado normal como en el estado superconductor de los cupratos [69-71]. Sin embargo, a diferencia de EELS, que permite acceder a toda la zona de Brillouin, la espectroscopía óptica se limita a explorar el centro de la misma debido al momento reducido de los fotones ópticos. A pesar de esta limitación, la espectroscopía óptica sigue siendo una herramienta valiosa para investigar las propiedades electrónicas y las transiciones energéticas en estos materiales altamente correlacionados.

La dispersión inelástica y resonante de rayos X (RIXS) [72] se ha consolidado como una herramienta clave para investigar excitaciones magnéticas y de carga en cupratos,

con la capacidad de resolver tanto el momento como la energía de estas excitaciones. Mientras que RIXS de rayos X blandos se ha utilizado para estudiar excitaciones de espín [73-76], RIXS de rayos X duros ha permitido explorar transiciones electrónicas entre y dentro de diferentes bandas [77-82]. En estos experimentos se han detectado excitaciones colectivas de carga bien definidas, identificadas como plasmones acústicos, tanto en cupratos dopados con electrones [20, 21] como con agujeros [22, 23]. Estudios recientes de alta resolución han revelado que estas ramas no son estrictamente acústicas, sino que presentan un gap de energía en el centro de la zona de Brillouin bidimensional [34], indicando una dinámica de carga más compleja y planteando nuevas preguntas sobre el comportamiento colectivo de los portadores en estos sistemas fuertemente correlacionados, lo cual acarreó el desarrollo de nuevas perspectivas teóricas para su análisis.

En este capítulo se investigan los plasmones de tipo acústico en cupratos bajo dos escenarios diferentes: a dopaje fijo y a dopaje variable. Se comparan los resultados teóricos obtenidos en ambos casos directamente con mediciones experimentales, proporcionando una perspectiva unificada que abarca tanto los distintos tipos de cupratos como los diversos modelos teóricos utilizados para analizar los plasmones. Este estudio permite evaluar cómo varían sus propiedades y cómo se pueden reconciliar los enfoques teóricos con las observaciones experimentales, brindando una visión más completa sobre el comportamiento colectivo de los portadores de carga en estos sistemas.

Los resultados de este capítulo se encuentran publicados en:

- Abhishek Nag, Luciano Zinni, Jaewon Choi, J. Li, Sijia Tu, A. C. Walters, S. Agrestini, S. M. Hayden, Matías Bejas, Zefeng Lin, H. Yamase, Kui Jin, M. García-Fernández, J. Fink, Andrés Greco y Ke-Jin Zhou, “Impact of electron correlations on two-particle charge response in electron- and hole-doped cuprates”, *Phys. Rev. Research* **6**, 043184 (2024).
- M. Hepting, T. D. Boyko, V. Zimmermann, M. Bejas, Y. E. Suyolcu, P. Puphal,

R. J. Green, L. Zinni, J. Kim, D. Casa, M. H. Upton, D. Wong, C. Schulz, M. Bartkowiak, K. Habicht, E. Pomjakushina, G. Cristiani, G. Logvenov, M. Minola, H. Yamase, A. Greco y B. Keimer, “Evolution of plasmon excitations across the phase diagram of the cuprate superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ”, *Phys. Rev. B* **107**, 214516 (2023).

2.2. Análisis para dopaje fijo

2.2.1. Determinación experimental de los plasmones

Se midieron los plasmones utilizando la técnica experimental de RIXS en dos muestras pertenecientes al grupo de cupratos superconductores de capas infinitas: una dopada con agujeros $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$ (LSCO) y la otra dopada con electrones $\text{La}_{1.84}\text{Ce}_{0.16}\text{CuO}_4$ (LCCO). Todos los detalles experimentales, tanto de las muestras como de las mediciones en RIXS se encuentran en el Apéndice 4.4.

Es importante aclarar previo a la presentación de las mediciones en RIXS que los valores de momento \mathbf{q} se escriben de la manera usual utilizada en estos experimentos, es decir, $\mathbf{q} = (Ha^*, Kb^*, Lc^*)$, donde H , K y L representan las direcciones a lo largo de q_x , q_y y q_z , respectivamente, en unidades de la red recíproca ($a^* = 2\pi/a$, $b^* = 2\pi/b$ y $c^* = 2\pi/c$, y $a = b$ y c son los parámetros de la red dentro y fuera del plano, respectivamente, ver Tabla 1 en el Apéndice 4.4). El uso de la notación H , K y L se extiende en todo el capítulo, tanto para la parte experimental como para los cálculos teóricos. Además, todos los análisis se realizan para $K = 0$ y $L = 1$.

En la Fig. 2.1 se muestran los mapas de intensidad de momento-energía de RIXS tomados en los Cu L_3 -edge y O K -edge en LSCO y LCCO. Se observan los plasmones como picos bien definidos para las dos transiciones a la banda de Hubbard superior (UHB, por sus siglas en inglés) en los Cu L_3 -edge y O K -edge para LCCO. En el

caso de LSCO, los plasmones son prominentes en el O K -edge cuando se excitan tanto a la energía del ZRS como a la energía de la UHB, siendo esto consistente con un reporte anterior [23]. Sorprendentemente, en una investigación anterior en LSCO y en $B_2Sr_{1.6}La_{0.4}CuO_{6+\delta}$ [22], junto a algunos estudios en otros cupratos dopados con agujeros [83-85], no se encontró ninguna presencia de plasmones en el Cu L_3 -edge. Sin embargo, las mediciones descritas aquí se realizaron para valores de $L = 1$ en LSCO, donde se espera que el peso espectral de los plasmones sea el más intenso [86]. Es posible identificar un leve peso espectral en el Cu L_3 -edge, el cual se expone en la Fig. 2.1(c), similar a la dispersión de plasmones en el O K -edge. El hecho de observar plasmones tanto en el estado de agujeros como en la UHB del O K -edge no es suficiente para determinar que las cargas se encuentren hibridizadas, como se menciona en un estudio anterior [23]. Es por esto que haber medido plasmones en el Cu L_3 -edge en LSCO, más allá de ser débiles, es una novedad experimental importante ya que no se había logrado antes y, además, valida su naturaleza híbrida en un cuprato dopado con agujeros.

De los mapas de RIXS de la Fig. 2.1 se extrajeron las energías y el amortiguamiento de los plasmones a través del ajuste explicado en el Apéndice 4.4. En la Fig. 2.2(a) se muestran estos resultados, a partir de los cuales se deduce que, debido a la similitud entre las energías de los plasmones, se midieron las mismas excitaciones de carga en los Cu L_3 -edge y O K -edge para LCCO, y en los picos de los estados de agujeros y la UHB en el O K -edge para LSCO. Los plasmones exhiben una dispersión casi lineal para valores pequeños de H . Sin embargo, dado que experimentalmente no fue posible extraer información de plasmones por debajo de $H = 0.02$, y que podría existir un gap en $H = K = 0$ debido al hopping entre planos [33, 34], estas excitaciones son descritas como de tipo acústico. Se debe tener en cuenta que fue estimado un límite máximo para el valor de t_z de 7meV en LSCO y LCCO [22, 34], el cual es lo suficientemente pequeño para considerarse despreciable en este análisis.

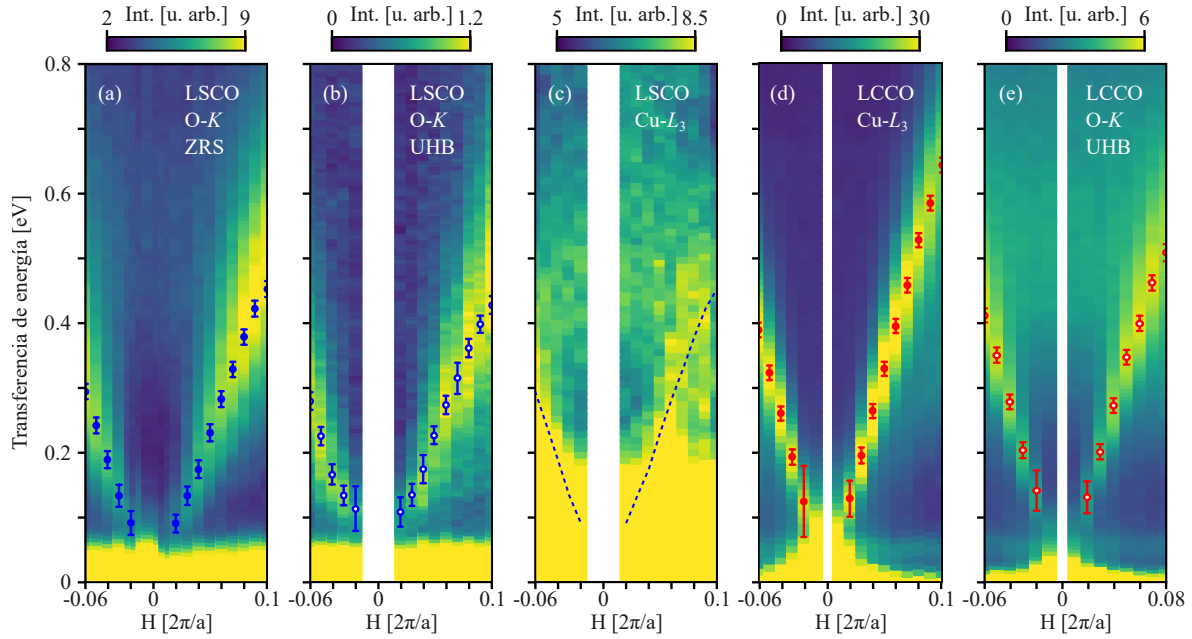


Figura 2.1: Mapas de intensidad de RIXS medidos en LSCO en los (a) O K -edge ZRS, (b) O K -edge UHB y (c) Cu L_3 -edge. Mapas de intensidad de RIXS medidos en LCCO en los (d) Cu L_3 -edge y (e) O K -edge UHB. Para todas las mediciones, $K = 0$ y $L = 1$. Los colores representan la intensidad de las dispersiones en unidades arbitrarias. Los marcadores denotan las frecuencias de los plasmones extraídas. En (c), la línea de trazo corresponde a la dispersión de los plasmones extraída de (a). Las líneas verticales blancas corresponden a zonas en donde no fue posible adquirir datos experimentales por limitaciones del dispositivo (todas alrededor de $H = 0$).

2.2.2. Masas efectivas y velocidades de Fermi

La linealidad que presentan a bajo H las dispersiones de plasmones medidas en RIXS, tanto en LSCO como en LCCO, permiten extraer de allí la velocidad de los plasmones v_p , la cual es equivalente a $v_p = \frac{\partial \omega_p}{\partial q_{\parallel}}$, donde ω_p es la frecuencia de los plasmones, que se escribirá en unidades de energía (eV). Para el caso de LSCO se obtuvo entonces $v_p^{\text{LSCO}} = 2.79 \pm 0.04 \text{ eV\AA}$ y para LCCO $v_p^{\text{LCCO}} = 4.20 \pm 0.01 \text{ eV\AA}$. Esta información, proveniente directamente de las observaciones experimentales, puede relacionarse con las propiedades físicas de los portadores de carga. Para ello, primeramente se describirán de forma cualitativa las dispersiones observadas utilizando un modelo de capas del gas de electrones libres homogéneo (LHEG, por sus siglas en inglés) desarrollado originalmente por A. Fetter [13]. Aquí sólo se expondrán las características del modelo

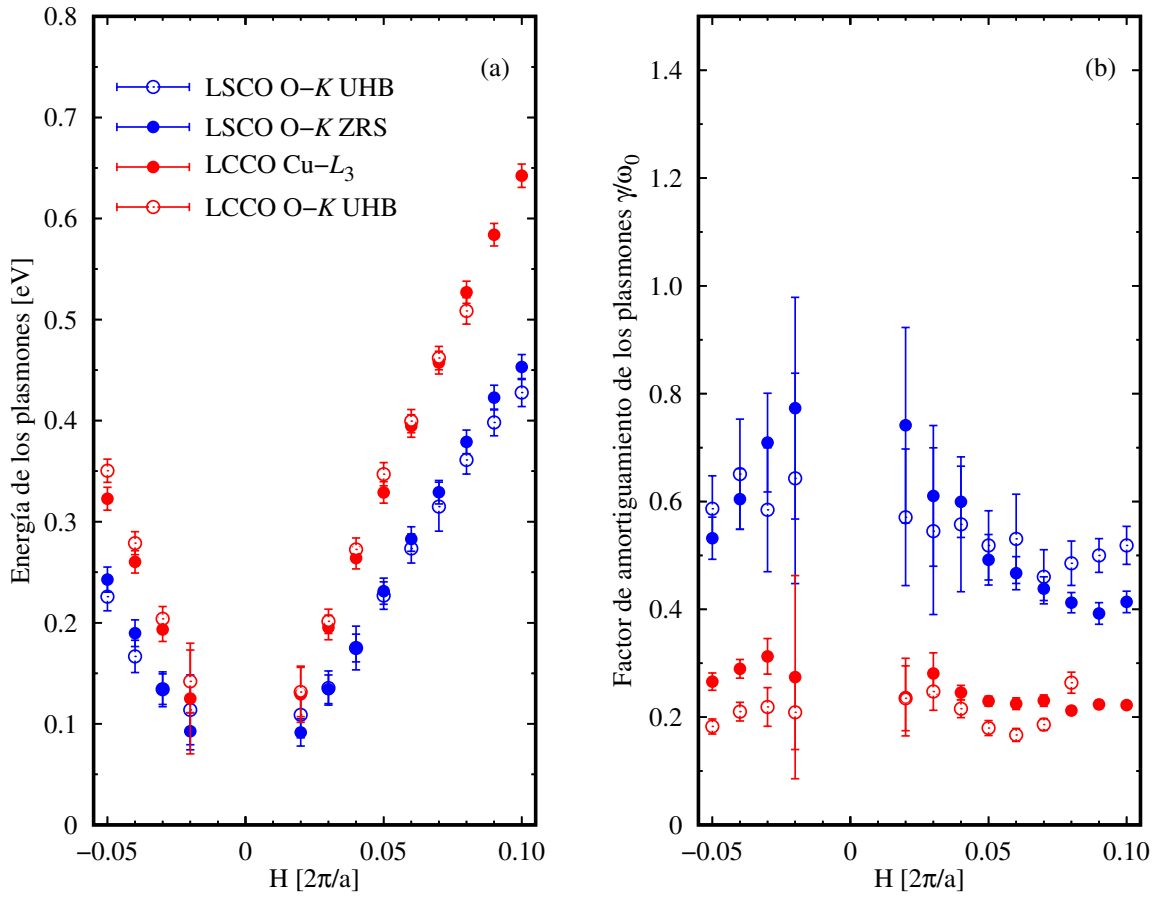


Figura 2.2: (a) Energía de los plasmones extraídas a través de los ajustes a los mapas de RIXS de la Fig. 2.1 versus el momento H . (b) Factor de amortiguamiento de los plasmones (γ/ω_0) extraído de los mismos ajustes.

más relevantes para este análisis; para su desarrollo completo se refiere al lector a la referencia citada.

El modelo de Fetter es un modelo en el que se obtiene una forma analítica de la dispersión de los plasmones. En él existen dos hipótesis relevantes: (a) el sistema no presenta hopping entre planos (t_z); y (b) se supone que el LHEG se encuentra en el límite hidrodinámico, es decir, que existe equilibrio termodinámico local. Con respecto a la primer hipótesis (a), se mencionó previamente que los cupratos presentan t_z , lo que se manifiesta en un gap en la dispersión de los plasmones de tipo acústico, sin embargo, para LSCO y LCCO se argumentó que el gap sería mínimo, por lo que los efectos de la no linealidad, incluso a muy bajos H , serían tan débiles que no afectarían

significativamente este análisis. Por el contrario, la hipótesis (b) hace que, a priori, el modelo de Fetter sea difícil de aplicar a cupratos ya que, en principio, estos materiales no operan en el límite hidrodinámico. Sin embargo, será argumentado a lo largo del capítulo que las implicancias de esta hipótesis sí pueden observarse en la dispersión de los plasmones en cupratos, lo que justifica su uso en estos materiales.

Los plasmones surgen debido a la presencia de la interacción coulombiana de largo alcance. En el modelo de Fetter se utiliza una $V(\mathbf{q})$ para el LHEG como

$$V(\mathbf{q}) = V(q_{\parallel}, q_z) = \frac{q_{\parallel}d}{2} \frac{\sinh(q_{\parallel}d)}{\cosh(q_{\parallel}d) - \cos(q_zd)}. \quad (2.1)$$

Con esta forma de la interacción coulombiana, se deduce que la relación de dispersión de los plasmones es

$$\omega_p = \sqrt{\frac{\langle v_F \rangle^2}{2} q_{\parallel}^2 + \Omega_p^2 \frac{q_{\parallel}d}{2} \frac{\sinh(q_{\parallel}d)}{\cosh(q_{\parallel}d) - \cos(q_zd)}}, \quad (2.2)$$

donde $\langle v_F \rangle$ es el promedio de la velocidad de Fermi sobre la superficie de Fermi, Ω_p es la frecuencia de plasma óptica y d la distancia entre planos Cu-O. El primer término del lado derecho de la Ec. (2.2) es un término que proviene exclusivamente de la hipótesis (b). Si esta hipótesis no es tenida en cuenta, es decir, no hay equilibrio termodinámico local (lo que suele llamarse límite de baja disipación por conducción), ese término puede descartarse [87]. A veces es argumentado dentro de la comunidad que los cupratos entran en este último régimen, por lo que se debería descartar el primer término (ver, por ejemplo, la sección 5.3.3 en [88]). Sin embargo, esto no se cumple para el rango de energía-momento en el que se midieron los plasmones aquí, por lo que la inclusión de dicho término es pertinente. También ha sido utilizado en cupratos en distintos trabajos anteriores [17, 89, 90], y su uso será apoyado con cálculos en las siguientes secciones.

De la Ec. (2.2) se deduce la velocidad de los plasmones para el caso de $L = 1$ como

$$v_p = \sqrt{\frac{\langle v_F \rangle^2}{2} + \frac{\Omega_p^2 d^2}{4}}, \quad (2.3)$$

cuya derivación se encuentra en el Apéndice 4.4. Esta fórmula es, hasta donde se conoce, la única que relaciona la velocidad de los plasmones de tipo acústico con la masa efectiva de los portadores de carga (a través de la velocidad de Fermi v_F). Esto es muy importante, ya que permite tener una idea cualitativa de cómo las correlaciones electrónicas impactan en los plasmones. Vale aclarar que el $1/2$ que acompaña a $\langle v_F \rangle$ en el primer término del lado derecho de la Ec. (2.3) es debido a que el modelo de Fetter es calculado en el contexto de la mecánica clásica. Un cálculo más exhaustivo dentro del contexto de la mecánica cuántica de muchos cuerpos fue dado por Apostol en [91], cuyo resultado es el mismo que Fetter en el límite clásico salvo que el término de $\langle v_F \rangle$ es acompañado por el factor $3/4$ en vez de $1/2$. Aquí se decidió utilizar la fórmula original de Fetter [Eq. (2.3)] dado que es la que más se utiliza en la bibliografía y, como se verá más adelante, el uso de $1/2$ o $3/4$ no cambia en absoluto las conclusiones de estos análisis.

El primer análisis que se realizó consiste en suponer que los plasmones no son afectados por correlaciones electrónicas. De esta manera, se calculó $\langle v_F \rangle$ utilizando la dispersión electrónica dada por un tight-binding común, es decir,

$$E_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}^{\parallel} + E_{\mathbf{k}}^{\perp}, \quad (2.4)$$

donde $E_{\mathbf{k}}^{\parallel}$ y $E_{\mathbf{k}}^{\perp}$ son las dispersiones dentro y fuera del plano, respectivamente, cuyas formas son

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}}^{\parallel} = & -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y \\ & - 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) - \mu, \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$E_{\mathbf{k}}^{\perp} = -2t_z(\cos k_x - \cos k_y)^2 \cos k_z. \quad (2.6)$$

Los parámetros de banda desnudos aquí utilizados fueron extraídos de cálculos ab initio de la Ref. [92], los cuales son totalmente independientes a la presente teoría, es decir, no son parámetros de ajuste de ningún tipo. Sus valores se encuentran en la Tabla 2.1. Es importante aclarar que los parámetros de banda de LCCO corresponden en realidad a los del cuprato NCCO debido a la falta de disponibilidad de ellos para LCCO, siendo también NCCO el más cercano en estructura. Para los cálculos, en el término correspondiente a la dispersión fuera del plano $E_{\mathbf{k}}^{\perp}$ no se consideró a $\cos k_z$, es decir, que dicha contribución a la energía es independiente de k_z , lo que lleva a la ausencia de un gap de plasmón en el centro de zona, incluso para un t_z finito. Esto se justifica debido a que, como se explicó anteriormente, el gap de plasmón tanto en LSCO y LCCO, si es que existe, resulta insignificante y es inaccesible experimentalmente en el presente. Por lo tanto, la contribución de $E_{\mathbf{k}}^{\perp}$ es prácticamente despreciable. Por eso, sin perder generalidad, se supuso un valor de $t_z/t = 0.00125$ para ambos sistemas. Para obtener el μ utilizando la dispersión del tight-binding se empleó la Ec. (1.21) para $\delta = 0.16$, lo que arrojó los valores de $\mu = -0.24\text{eV}$ y $\mu = 0.038\text{eV}$ para LSCO y LCCO, respectivamente.

	t [eV]	t'/t	t''/t	t_z/t	Ω_p [eV]
LSCO	0.4	-0.09	0.07	0.00125	0.8 [71]
LCCO	0.4	-0.24	0.15	0.00125	1.2 [21]

Tabla 2.1: Parámetros de banda y valor experimental de la frecuencia de plasma óptica de LSCO y LCCO.

Con estos parámetros, se obtuvieron los promedios desnudos de las velocidades de Fermi en $\langle v_F \rangle^{\text{LSCO,desn}} = 2.86\text{eV}\text{\AA}$ y $\langle v_F \rangle^{\text{LCCO,desn}} = 4.58\text{eV}\text{\AA}$. Luego, utilizando la Ec. (2.3) y los valores experimentales de Ω_p (ver Tabla 2.1) se calcularon los valores de la velocidad de los plasmones en $v_p^{\text{LSCO,desn}} = 3.31\text{eV}\text{\AA}$ y $v_p^{\text{LCCO,desn}} = 4.94\text{eV}\text{\AA}$. En principio es esperable que la velocidad de los plasmones en los cupratos dopados con agujeros sea menor que en los dopados con electrones con un dopaje similar debido a un menor $\langle v_F \rangle$; sin embargo, como se muestra en la Fig. 2.3, el modelo de Fetter con los

parámetros desnudos sobrestima la velocidad de los plasmones en aproximadamente un 18 % con respecto a los valores extraídos de las mediciones de RIXS. Además, de manera opuesta, si se utiliza la Ec. (2.3) y las v_p extraídas de RIXS se pueden calcular las velocidades de Fermi correspondientes, lo que resulta en $\langle v_F \rangle^{\text{LSCO,RIXS}} = 1.36 \text{eV\AA}$ y $\langle v_F \rangle^{\text{LCCO,RIXS}} = 2.71 \text{eV\AA}$. Estos valores difieren en un promedio del 85 % con respecto a los obtenidos con parámetros desnudos para ambos sistemas. Por lo tanto, para explicar los valores experimentales dentro de este modelo, se necesita utilizar parámetros de banda renormalizados que tengan en cuenta el crecimiento de las masas efectivas de $m^*/m = 2.0$ y $m^*/m = 1.7$ para LSCO y el LCCO, respectivamente. Esto da un primer indicio de que hay manifestaciones de las altas correlaciones electrónicas en los plasmones de tipo acústico.

2.2.3. La aproximación de fase aleatoria (RPA)

En la sección anterior se utilizó un modelo de forma cualitativa para tener una primera idea sobre cómo impactan las correlaciones electrónicas en las excitaciones de carga entre dos partículas (plasmones), lo que se manifestó en masas efectivas mayores a 1. Ahora, para hacer un análisis más riguroso, se empleará uno de los principales métodos utilizados para describir plasmones en la materia condensada, llamado aproximación de fase aleatoria (RPA), cuyo enfoque es de acoplamiento débil. Este método ha sido estudiado a lo largo de décadas, por lo que aquí sólo se expondrán sus resultados útiles para este trabajo. Para ver su desarrollo completo, se sugiere ver la Ref. [50].

En RPA, la función de correlación de carga-carga resulta

$$\chi_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{\chi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)}{1 - V(\mathbf{q})\chi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)}, \quad (2.7)$$

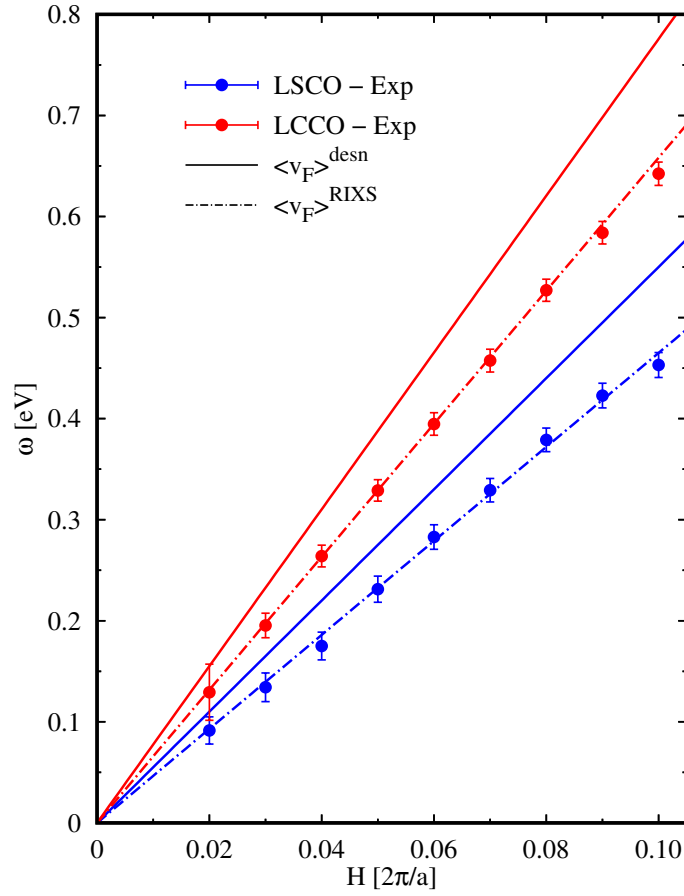


Figura 2.3: Frecuencia de los plasmones versus momento. Los marcadores son las mediciones de RIXS (O K -edge ZRS en LSCO y Cu L_3 -edge en LCCO), las líneas sólidas corresponden a las frecuencias de los plasmones calculadas con el modelo de Fetter utilizando los parámetros de banda desnudos y las líneas de trazo corresponden a las extraídas de las mediciones.

donde $\chi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)$ es la función de Lindhard

$$\chi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{2}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) - n_F(E_{\mathbf{k}})}{i\omega_n - E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}, \quad (2.8)$$

la cual representa el continuo de partícula-agujero. \mathbf{q} es el vector momento, $i\omega_n$ es la frecuencia de Matsubara bosónica y el factor 2 proviene de la suma en espines. N_s es el número de sitios en cada plano y n_F es la distribución de Fermi. El denominador en la Ec. (2.7) es la función dieléctrica de RPA $\varepsilon(\mathbf{q}, i\omega_n) = 1 - V(\mathbf{q})\chi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)$. Luego de realizar la continuación analítica $i\omega_n \rightarrow \omega + i\Gamma$ en la Ec. (2.7), los plasmones se obtienen a través de la parte imaginaria $\chi''_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$, la cual puede ser comparada directamente

con las mediciones en RIXS. El valor elegido para el ensanchamiento es de $\Gamma = 0.04\text{eV}$ [49, 86, 93]. Dado que RPA es un enfoque de acoplamiento débil, aquí se utiliza la dispersión electrónica dada por el tight-binding de la Ec. (2.4). En principio, en esta dispersión entran los parámetros de banda desnudos, sin embargo, los mismos pueden ser renormalizados utilizando las masas efectivas $m^*/m > 1$ obtenidas en la sección anterior.

La forma de la interacción coulombiana $V(\mathbf{q})$ en la Ec. (2.7) es la correspondiente a la red cuadrada bidimensional en capas [Ec. (1.35)]. Esta interacción presenta, a priori, dos parámetros libres: V_c y α . Sin embargo, éstos están vinculados con la frecuencia de plasma óptica a través de la relación

$$\Omega_p = c\sqrt{\frac{V_c}{\alpha}}, \quad (2.9)$$

donde c es una constante que depende de cada cuprato. Así, dada una dispersión de plasmones, es posible obtener los mejores parámetros V_c y α que se adecúan a ella (utilizando mínimos cuadrados) respetando a su vez el valor de Ω_p observado experimentalmente en cada cuprato.

Se utilizó RPA con dicha minimización para obtener las mejores dispersiones para LSCO y LCCO que se ajusten a las dispersiones observadas en RIXS. Esto se lo realizó para dos casos: utilizando los parámetros de banda desnudos ($m^*/m = 1$) y renormalizando dichos parámetros con las masas efectivas obtenidas anteriormente ($m^*/m = 2.0$ y $m^*/m = 1.7$ para LSCO y LCCO, respectivamente). El uso de masas efectivas $m^*/m > 1$ equivale a incluir correlaciones electrónicas en el cálculo. RPA, por ser de acoplamiento débil, no presenta una forma intrínseca de incluir tales correlaciones, es decir, esta inclusión se debe realizar manualmente con argumentos fuera de la misma teoría. En la Fig. 2.4 se muestran los resultados de las dispersiones calculadas para (a) LSCO y (b) LCCO. Para ambos sistemas, en el límite de larga longitud de onda ($H \rightarrow 0$), los experimentos concuerdan levemente mejor con el caso de $m^*/m = 1$,

mientras que por encima de $H = 0.06$, los resultados obtenidos para $m^*/m > 1$ presentan menores desviaciones con respecto a las mediciones. Sin embargo, para el caso de $m^*/m = 1$, RPA arroja un continuo de partícula-agujero muy alto, y la dispersión de los plasmones se encuentra dentro del mismo, tanto para LSCO como para LCCO. Esto puede verse mejor en las Figs. 2.4(c) y (d), en donde se muestran $\chi''_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ en función de ω para $H = 0.06$. Allí se observa que para el caso de $m^*/m = 1$, en ambos cupratos la parte real de la función dieléctrica (ε') no cambia de signo, indicando que el pico que se ve en $\chi''_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ no es una resonancia verdadera. En cambio, para el caso de $m^*/m > 1$, ε' cambia de signo en ambos cupratos y los plasmones calculados resultan resonancias reales. Esto puede compararse directamente con la Fig. 2.2(b), la cual muestra el factor de amortiguamiento de los plasmones medidos en RIXS, esto es, el cociente entre el amortiguamiento γ y la frecuencia de los plasmones ω_0 extraída del ajuste. El hecho de que γ/ω_0 es menor a 1 para todas las mediciones indica que experimentalmente los plasmones se observan como excitaciones que se propagan coherentemente, es decir, como verdaderas resonancias. Además, dados los valores de V_c y α obtenidos en la minimización, es posible calcular el ratio entre las constantes dieléctricas dentro y fuera del plano que arroja el análisis en RPA (ver Tabla 2.2). Para el caso de $m^*/m > 1$, esto arrojó los resultados de 1.22 para LSCO y 1.33 para LCCO, mientras que para $m^*/m = 1$ el cálculo dio valores irreales ($\ll 1$): 1/6 y 1/4, respectivamente. De esta manera, RPA en una red cuadrada en capas sugiere también que la mejor forma de describir los plasmones de tipo acústico observados en RIXS es a través de la renormalización de los parámetros de banda.

El efecto que genera la inclusión de masas efectivas $m^*/m > 1$ produce un aplastamiento del continuo de partícula-agujero [Figs. 2.4(a) y (b)], lo que promueve a las curvas obtenidas con $\chi''_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ a verdaderas resonancias [Figs. 2.4(c) y (d)], asemejándose a los resultados experimentales. Los valores de $m^*/m = 2.0$ para LSCO y de $m^*/m = 1.7$ para LCCO fueron obtenidos en la sección anterior a través de la Ec. (2.3) exclusivamente debido al factor 1/2 del término de $\langle v_F \rangle$. Si en lugar de dicho factor se

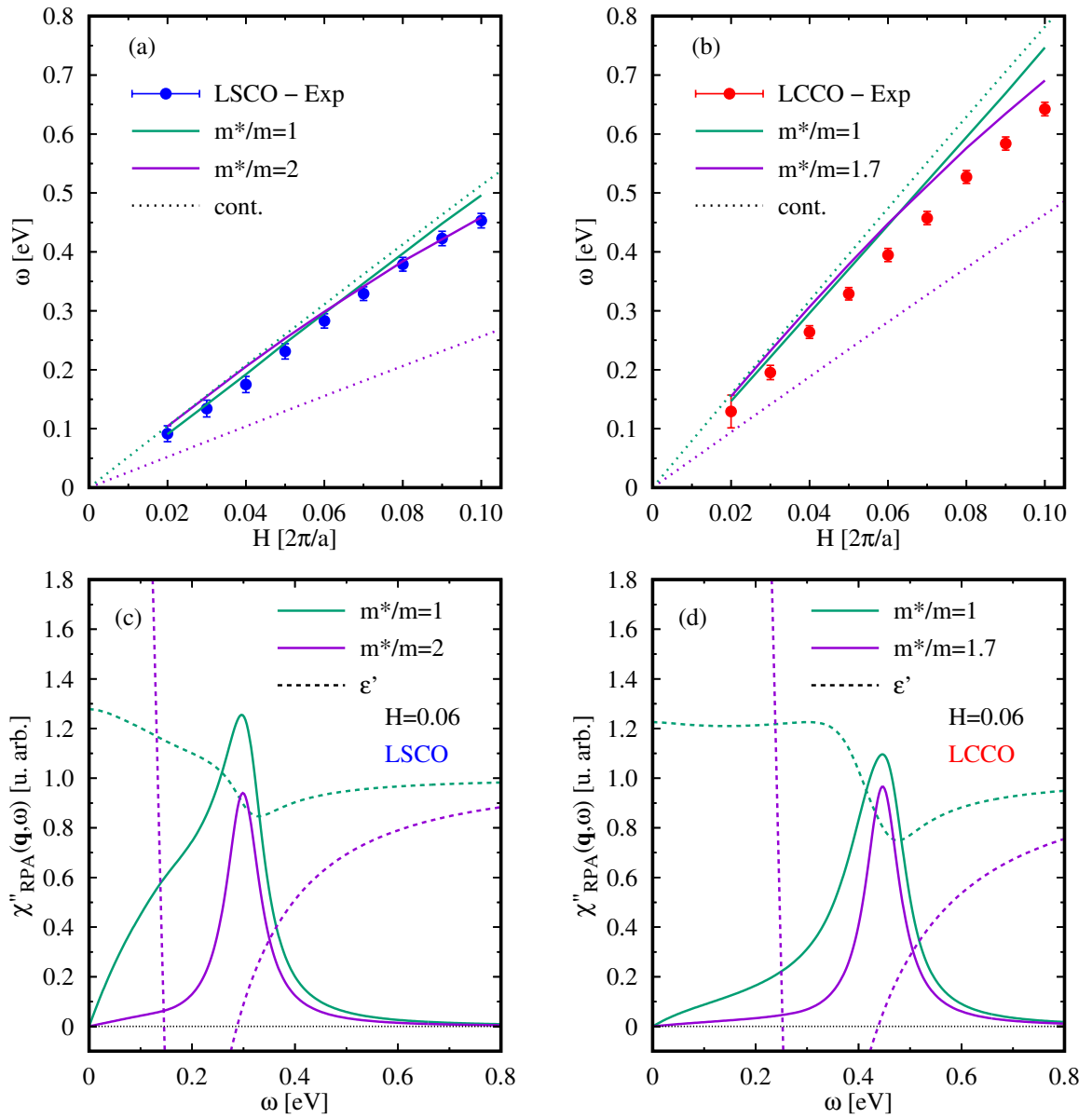


Figura 2.4: (a) y (b): Frecuencia de los plasmones versus momento para LSCO y LCCO, respectivamente. Los marcadores son las mediciones de RIXS (O K -edge ZRS en LSCO y Cu L_3 -edge en LCCO), las líneas sólidas corresponden a las frecuencias de los plasmones calculadas con RPA y las líneas de puntos corresponden al continuo de partícula-agujero. (c) y (d): Parte imaginaria de la susceptibilidad de carga-carga calculada en RPA versus frecuencia de los plasmones en $H = 0.06$ para LSCO y LCCO, respectivamente. Las líneas sólidas corresponden a los plasmones y las líneas de trazo a la parte real de la función dieléctrica, la cual cruza el cero sólo para el caso $m^*/m > 1$ en ambos cupratos, indicando que para el caso de $m^*/m = 1$ los picos formados en la susceptibilidad no son resonancias verdaderas.

utilizaba el valor $3/4$ obtenido en un contexto más riguroso por Apostol [91], los valores para las masas efectivas pasarían de 2.0 a 2.6 para LSCO y de 1.7 a 2.1 para LCCO.

Estos nuevos valores no difieren demasiado con los anteriores y, de hecho, no cambian en absoluto las conclusiones de este análisis, ya que el continuo de partícula-agujero también es aplanado y genera verdaderas resonancias en los plasmones calculados, mostrando la importancia de las correlaciones electrónicas para coincidir con las observaciones experimentales. En el Apéndice 4.4 se extiende aún más el análisis sobre el término que depende de $\langle v_F \rangle$ en el modelo de Fetter dentro del contexto de RPA.

2.2.4. El modelo t - J - V

Más allá de que RPA puede describir los plasmones de tipo acústico como se demostró en la sección anterior, se debió introducir artificialmente una masa efectiva $m^*/m > 1$ en ambos cupratos para generar plasmones como resonancias verdaderas, tal como se observa experimentalmente en RIXS, además de constantes dieléctricas físicamente razonables. Dicha teoría carece de una forma intrínseca para introducir las altas correlaciones electrónicas ya que es un modelo de acoplamiento débil. Además, la introducción de $m^*/m > 1$ significa que hay interacciones, pero la justificación de que las mismas corresponden a altas correlaciones electrónicas las dará el modelo t - J - V , el cual se utilizará en esta sección dentro del formalismo large- N expuesto en el Cap. 1, modelo que contiene de manera intrínseca las altas correlaciones electrónicas y su efecto sobre los plasmones aparece naturalmente dentro de la teoría.

Se calcularon las dispersiones de los plasmones utilizando la susceptibilidad de carga-carga dada por la Ec. (1.34) con la interacción coulombiana de largo alcance para la red cuadrada en capas [Eq. (1.35)], tanto para LSCO como para LCCO, cuyos parámetros de entrada son únicamente los parámetros de banda desnudos de dichos cupratos. Se aseguró que el cálculo fuera consistente con los valores experimentales de sus frecuencias de plasma óptica Ω_p a través de la relación con V_c y α de la Ec. (2.9), la cual también se cumple dentro del modelo t - J - V . En la Fig. 2.5(a) se muestra que las dispersiones experimentales y las obtenidas dentro del modelo t - J - V concuerdan y que

los plasmones aparecen por encima del continuo de partícula-agujero. La Ec. (1.34) muestra que los plasmones son proporcionales a la componente D_{11} del propagador bosónico. Debido a esto, los plasmones serán resonancias verdaderas cuando la parte real del determinante de la inversa del propagador cambie de signo, hecho que se observa en la Fig. 2.5(b) para ambos cupratos. Además, el ratio entre las constantes dieléctricas dentro y fuera del plano obtenidas dentro del modelo t - J - V es 1.36 para LSCO y 1.46 para LCCO (ver Tabla 2.2). Así, el modelo de electrones altamente correlacionados describe apropiadamente las dispersiones observadas en RIXS, sin la necesidad de invocar parámetros renormalizados.

	Modelo	m^*/m	V_c [eV]	α	$\epsilon_{\parallel}/\epsilon_0$	$\epsilon_{\perp}/\epsilon_0$
LSCO	RPA	1.0	0.49	0.5	14.1	85.1
	RPA	2.0	7.6	3.7	6.72	5.49
	t - J - V	-	18.8	4.1	3.01	2.22
LCCO	RPA	1.0	0.9	0.6	10.1	40.8
	RPA	1.7	9.2	3.2	5.05	3.81
	t - J - V	-	30.0	3.5	1.71	1.17

Tabla 2.2: Parámetros obtenidos del ajuste a las dispersiones de los plasmones utilizando los distintos modelos.

2.2.5. Discusiones

A pesar de la gran diversidad que existe con respecto a las propiedades de los materiales, la presencia de las altas correlaciones electrónicas en los cupratos es altamente conocida y aceptada. Mientras que las excitaciones electrónicas de una sola partícula muestran claramente el efecto de las correlaciones, como por ejemplo, el crecimiento de la masa efectiva y las propiedades incoherentes, las excitaciones de carga entre dos partículas (como los plasmones) han sido descritas utilizando teorías que van desde modelos de electrones libres, pasando por acoplamiento débil y también acoplamiento fuerte. La frecuencia de plasma óptica Ω_p en un campo medio en RPA del LHEG es proporcional a $\sqrt{1/m^*}$ [19, 94]. La dispersión de los plasmones ópticos en este modelo

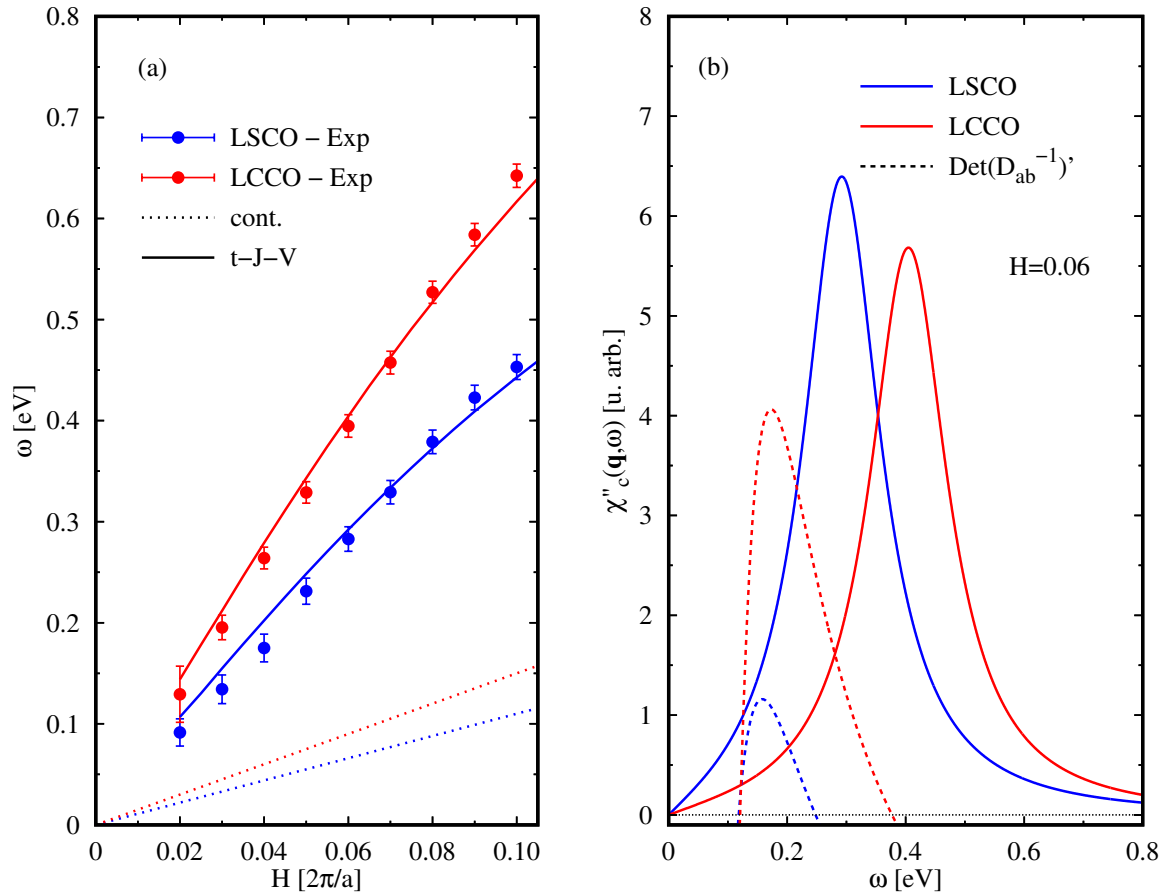


Figura 2.5: (a) Frecuencia de los plasmones versus momento para LSCO y LCCO obtenidos dentro del modelo t - J - V . Los marcadores son las mediciones de RIXS (O K -edge ZRS en LSCO y Cu L_3 -edge en LCCO), las líneas sólidas corresponden a las frecuencias de los plasmones calculados y las líneas de puntos corresponden al continuo de partícula-agujero. (b) Parte imaginaria de la susceptibilidad de carga-carga calculada dentro del modelo t - J - V versus frecuencia de los plasmones en $H = 0.06$ para LSCO y LCCO. Las líneas sólidas corresponden a los plasmones y las líneas de trazo a la parte real del determinante de la inversa del propagador bosónico. El hecho de que cruce el cero para ambos cupratos indica que los plasmones son verdaderas resonancias.

resulta, hasta segundo orden, $\Omega_p + Aq^2$, donde A es un coeficiente de dispersión dependiente de m^* . Pero, incluso así, la dispersión de los plasmones ópticos observada en $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ usando T-EELS pudo ser descrita utilizando parámetros de banda desnudos [19, 94]. Notablemente, en Sr_2RuO_4 , un sistema en el que ARPES estima una masa efectiva de $m^*/m = 4$, los plasmones de tipo acústico observados en EELS fueron modelados utilizando parámetros de banda desnudos [95, 96].

Como se puede ver de los resultados en las secciones anteriores, la velocidad de los

plasmones en LSCO es aproximadamente 1.5 veces menor que en LCCO para el mismo dopaje $\delta = 0.16$. Dado que los plasmones son excitaciones colectivas que involucran a los electrones cerca de la superficie de Fermi, se podría explicar de manera cualitativa esta diferencia considerando que la $\langle v_F \rangle$ en el cuprato dopado con agujeros es 1.5 veces más pequeña. Sin embargo, cuando se utilizan las $\langle v_F \rangle$ derivadas de las bandas desnudas, las energías de los plasmones resultan sobrestimadas para ambos sistemas en el modelo de electrones libres. Por lo tanto, es necesario considerar el efecto de las correlaciones para una comparación cuantitativa con los experimentos en RIXS. Dentro del enfoque de RPA, la concordancia de la dispersión para $m^*/m = 1$ empeora a medida que H crece, mientras que mejora para $m^*/m > 1$. A pesar de que parecería que los efectos de las correlaciones son insignificantes en el límite de larga longitud de onda, al usar $m^*/m = 1$, es decir, parámetros de banda desnudos, los plasmones surgen dentro del continuo de partícula-agujero y el modelo arroja constantes dieléctricas con valores no físicos. El valor que se obtuvo de masa efectiva de $m^*/m = 2$ para LSCO es numéricamente idéntico al valor experimental medido en ARPES en el punto nodal [97]. Sin embargo, no debe ponerse demasiado énfasis en esta correspondencia ya que el resultado para los plasmones representa un efecto promedio de toda la zona de Brillouin, lo que incluye también la región antinodal cercana al punto de silla $(\pi, 0)$ con baja velocidad de Fermi, por ejemplo. Además, para LCCO se observa un valor de masa efectiva menor que para LSCO, lo que podría atribuirse al hecho de que se consideran sistemas menos correlacionados a los cupratos dopados con electrones que a los dopados con agujeros [98-105]; pero, debe notarse que los valores de m^*/m de LCCO fueron obtenidos usando parámetros de banda de NCCO en los cálculos debido a que para LCCO no hay disponibles.

De las figuras de las dispersiones de los plasmones de las secciones anteriores se observa que la correspondiente al modelo t - J - V , en el cual el efecto de las correlaciones está implícito dentro de la misma teoría, presenta una desviación respecto a los experimentos similar al caso de RPA con $m^*/m > 1$, es decir, es menor a alto H y

mayor a bajo H . En el modelo t - J - V , los parámetros de banda desnudos son renormalizados naturalmente por el dopaje δ y la interacción de intercambio J , además de que la susceptibilidad de carga-carga contiene fluctuaciones de la restricción que prohíbe la doble ocupación en un dado sitio. Para realizar una comparación más directa con los resultados de RPA, se calcularon los valores de los parámetros de banda dentro del modelo t - J - V y se los utilizaron como parámetros de banda en RPA. De esta manera, comparando las energías electrónicas de las Ecs. (1.18)-(1.20) con las del tight-binding usual [Eqs. (2.4)-(2.6)] se obtienen los parámetros efectivos

$$\begin{aligned}
 t_{\text{eff}} &= t\delta + \Delta, \\
 t'_{\text{eff}} &= t'\delta, \\
 t''_{\text{eff}} &= t''\delta, \\
 t_{z\text{eff}} &= t_z\delta,
 \end{aligned}
 \tag{2.10}$$

donde los hoppings t , t' , t'' y t_z son los parámetros de banda desnudos. De allí se puede tener un estimado de la renormalización de la banda dada por el modelo t - J - V y el formalismo large- N , lo que arroja un valor alrededor de $m^*/m = 4.5$ para ambos cupratos. Este valor es mayor que los obtenidos en RPA, y el origen de esta discrepancia no está claro en su totalidad, pero se considera que proviene de que el orden calculado en el formalismo no contiene la contribución de los grados de libertad de espín a la banda, o por una sobreestimación de las correlaciones.

Introduciendo los parámetros efectivos en el cálculo de RPA se obtuvieron los resultados expuestos en la Fig. 2.6. Allí se observa que en el límite de larga longitud de onda, el modelo t - J - V y RPA con los parámetros efectivos arrojan dispersiones de plasmones coincidentes. Sin embargo, a corta longitud de onda, la dispersión obtenida en RPA se desvía de la obtenida con el modelo t - J - V . Esto indica que a medida que el momento H crece, aparece un efecto de correlaciones presentes en el modelo t - J - V y ausentes en RPA que afecta a la dispersión de plasmones.

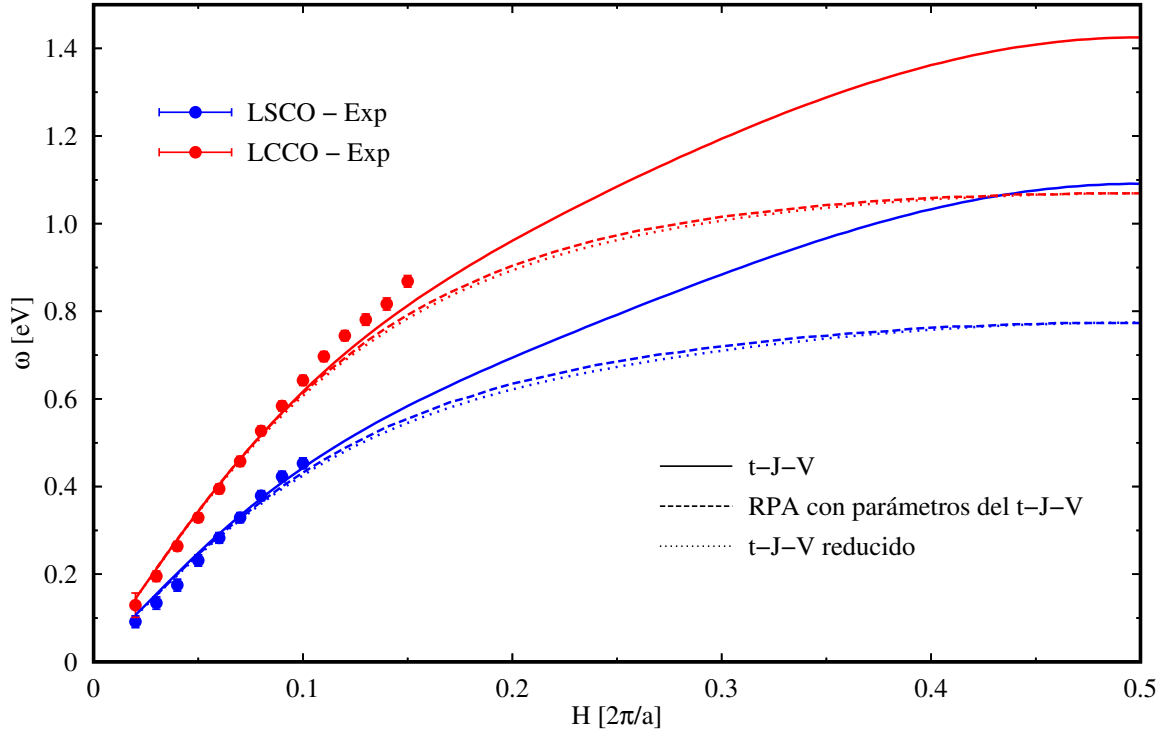


Figura 2.6: Frecuencia de los plasmones versus momento para LSCO y LCCO. Los marcadores son las mediciones de RIXS (O K -edge ZRS en LSCO y Cu L_3 -edge en LCCO), las líneas sólidas corresponden a las frecuencias de los plasmones calculados con el modelo t - J - V completo, las líneas de trazo corresponden a los plasmones calculados en RPA con los parámetros de banda provenientes del modelo t - J - V y la línea de puntos corresponde a los plasmones obtenidos al reducir el modelo t - J - V (ver texto).

Al enfocarse en el sector 2×2 del propagador bosónico D_{ab} para el cálculo de plasmones, si al renormalizar dicho propagador a través de la ecuación de Dyson [Ec. (1.30)] se establecen manualmente a cero las componentes de la autoenergía Π_{11} y Π_{12} , sólo resulta relevante la componente Π_{22} . Puede deducirse de las Ecs. (1.31) y (1.32) que

$$\begin{aligned} \Pi_{22}(\mathbf{q}, i\omega_n) &= -N \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) - n_F(E_{\mathbf{k}})}{i\omega_n - E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \\ &= -N \frac{\chi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)}{2}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Este resultado muestra que la función de Lindhard [$\chi^{(0)}$, Ec. (2.8)] y la componente Π_{22} tienen una forma matemática muy similar, incluso cuando su origen físico es distinto, ya

que la primera representa al continuo de partícula-agujero dentro de RPA y la segunda contiene la información de las fluctuaciones del multiplicador de Lagrange asociado a la restricción que prohíbe la doble ocupación dentro del modelo t - J - V . En este contexto, se obtiene una susceptibilidad de carga-carga con un modelo t - J - V reducido utilizando el valor físico $N = 2$, lo que arroja

$$\chi_c^{\text{redu.}}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{\chi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)}{1 - V'(\mathbf{q})\chi^{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)}, \quad (2.12)$$

donde $V'(\mathbf{q}) = 2[V(\mathbf{q}) - J(\mathbf{q})]$. La Ec. (2.12) muestra que la forma reducida del modelo t - J - V presenta una forma matemática de tipo RPA al considerar únicamente la componente Π_{22} . La contribución de $J(\mathbf{q})$ puede ser despreciada respecto a la de $V(\mathbf{q})$ ya que ésta es significativamente más grande para los parámetros que se utilizan aquí, y el factor 2 está presente debido a la transformación a eV al utilizar el valor de t renormalizado en el formalismo large- N . De esta manera, la omisión de las componentes Π_{11} y Π_{12} da dispersiones de los plasmones idénticas a RPA, lo que puede observarse en la Fig. 2.6, donde las curvas de los plasmones calculados en RPA con parámetros efectivos y con el modelo t - J - V reducido son idénticas para todo H . Todo esto hace evidente que el uso de los parámetros de banda renormalizados en RPA tiene en cuenta las correlaciones electrónicas a través del crecimiento de la masa efectiva a larga longitud de onda, mientras que los efectos de las altas correlaciones locales provenientes de la prohibición de la doble ocupación (que están ausentes en RPA), llevan a desviaciones sólo a corta longitud de onda.

Es pertinente mencionar también que en la Ref. [106], los plasmones fueron obtenidos incluyendo apropiadamente efectos de la autoenergía de una partícula y correcciones de vértices debido a correlaciones. La inclusión de efectos de la autoenergía lleva a un ensanchamiento de los plasmones además de un crecimiento de las masas efectivas, cuya dependencia en energía no puede descartarse en principio [107-109]. Dichos efectos son esperados en la interacción entre los portadores y la gran variedad de excitaciones de carga de baja energía en la escala de J [48, 110, 111], lo que lleva a diferencias en el

amortiguamiento de los plasmones en LSCO y en LCCO y podría explicar las razones de por qué se observa un factor de amortiguamiento mayor en LSCO que en LCCO en las mediciones de RIXS [Fig. 2.2(b)].

Resumiendo, en esta sección se investigaron los plasmones en LSCO y LCCO a igual valor de dopaje de $\delta = 0.16$. Experimentalmente se observó que los plasmones de tipo acústico presentan diferentes velocidades. Además, los parámetros de los plasmones (su energía y su amortiguamiento) son idénticos para un dado sistema sin importar qué sitio haya sido explorado (O o Cu), mostrando que las excitaciones de carga que se midieron son no locales e independientes del sitio, tal como sucede con las excitaciones magnéticas, debido a la naturaleza híbrida de las fluctuaciones de carga. Además, se demostró que para describir apropiadamente la dispersión de los plasmones de tipo acústico en cupratos utilizando un enfoque de RPA es necesario considerar parámetros de banda renormalizados. Una renormalización similar de los parámetros de banda desnudos ocurre implícitamente dentro del modelo t - J - V que es de altas correlaciones. Esto ocurre para ambos tipos de dopaje dentro del diagrama de fase: se obtuvieron masas efectivas $m^*/m > 1$ tanto para LSCO como para LCCO. La comparación con el modelo t - J - V justifica el uso de parámetros de banda renormalizados en RPA para representar de manera fehaciente el crecimiento de la masa efectiva originado por las correlaciones electrónicas a larga longitud de onda. Por lo tanto, la naturaleza de acoplamiento débil que tiene RPA no debe utilizarse para descartar su uso en cupratos sin una debida consideración. El rol de las correlaciones en la susceptibilidad de carga-carga, es decir, en la respuesta de excitaciones de dos partículas, se extiende más allá de un simple ajuste de parámetros. Una masa efectiva mayor reduce la velocidad de Fermi promedio y empuja el continuo de partícula-agujero debajo de las energías de los plasmones, permitiendo la observación de plasmones como excitaciones colectivas verdaderas.

2.3. Análisis en función del dopaje

Se ha demostrado en las secciones anteriores que si se tratan correctamente las correlaciones electrónicas en RPA es posible capturar el comportamiento de las dispersiones de plasmones de tipo acústico medido en RIXS. Además, el modelo t - J - V , que contiene naturalmente a las correlaciones, también describe de manera fehaciente las dispersiones observadas. Incluso se mostró que en el régimen de larga longitud de onda, ambas teorías dan las mismas dispersiones para los mismos parámetros de banda. Sin embargo, dicho análisis fue realizado para un dopaje fijo de $\delta = 0.16$. En esta sección se exploran las diferencias entre ambas teorías al variar el dopaje a lo largo del diagrama de fase del cuprato dopado con agujeros LSCO (en dopados con electrones ya fue abordado previamente [20, 21]).

El enfoque de RPA predice una frecuencia de los plasmones ópticos proporcional a \sqrt{n} , donde n es la densidad de electrones [50]. Al dopar un sistema con agujeros, esto genera que la energía de los plasmones tenga un comportamiento decreciente a medida que aumenta el dopaje para H , K y L fijos, debido a que n disminuye. Esto ocurre ya que en RPA se utiliza una banda proveniente de un tight-binding, es decir, es una banda rígida (sus parámetros de banda no cambian cuando el dopaje se modifica). Por el contrario, en el modelo t - J - V , los parámetros de banda en la dispersión electrónica [Ecs. (1.18)-(1.20)] son renormalizados por el dopaje δ y el valor de J a través de Δ , lo que hace que, si bien los parámetros desnudos son los mismos, los valores renormalizados cambian y el modelo no presenta una banda rígida. Esta diferencia es crucial para analizar el comportamiento de los plasmones en función del dopaje.

Se utilizaron los mismos parámetros de banda para LSCO que en la sección anterior tanto en RPA como en el modelo t - J - V (ver Tabla 2.1). Además, dado que en RPA el uso de una masa efectiva $m^*/m = 1$ resulta en constantes dieléctricas con valores no físicos, se eligió el valor de $m^*/m = 2$ y sus correspondientes V_c y α (ver Tabla 2.2)

para el estudio de esta sección.

En la Fig. 2.7 se muestran los resultados de la energía de los plasmones en función del dopaje calculados con el modelo t - J - V (línea sólida) y con RPA utilizando $m^*/m = 2$ (línea de trazo) para distintos valores de H y para la rama óptica. Para todos los casos, RPA presenta un comportamiento decreciente con el aumento del dopaje de agujeros, es decir, sigue el efecto de llenado de banda. Si bien esto es esperado para la rama óptica ya que depende de \sqrt{n} como se explicó anteriormente, aquí se comprueba el mismo comportamiento para los plasmones de tipo acústico para $H = 0.04$, $H = 0.08$ y $H = 0.12$, con $K = 0$ y $L = 0.74$. Estos valores de momento, tanto de H como de L , fueron elegidos para coincidir con las mediciones realizadas en LSCO en la Ref. [112] (figura insertada en la Fig. 2.7). Allí se midieron los plasmones en función del dopaje, dando una tendencia creciente en el sector de bajo dopaje. Esta tendencia es capturada correctamente por los plasmones obtenidos con el modelo t - J - V . Si bien los parámetros utilizados en esta tesis y los de ese trabajo son distintos, la tendencia calculada aquí es también creciente en el modelo t - J - V , lo que demuestra que no depende de los parámetros de banda desnudos. Esta tendencia se observa en la Fig. 2.7, donde se muestra con claridad los resultados opuestos para ambos modelos. Sin embargo, el modelo t - J - V presenta un máximo en la zona de sobre dopaje en el cual cambia su tendencia a decreciente. Esto sucede ya que a medida que la cantidad de agujeros aumenta en el sistema, las altas correlaciones electrónicas disminuyen y, por lo tanto, el efecto de la autoenergía dentro del modelo t - J - V es menor y éste resulta cada vez más similar a RPA. También es posible generar una tendencia similar a la del modelo t - J - V en RPA si se utilizan parámetros efectivos como en la Ec. (2.10), pero esto implica que debe modificarse la banda manualmente y con argumentos de un formalismo con un origen físico distinto. Por el contrario, el modelo t - J - V toma los parámetros desnudos obtenidos con cálculos ab initio para un sólo dopaje y reproduce la tendencia experimental de manera correcta para los demás dopajes, resaltando la potencia del modelo t - J - V y el formalismo large- N .

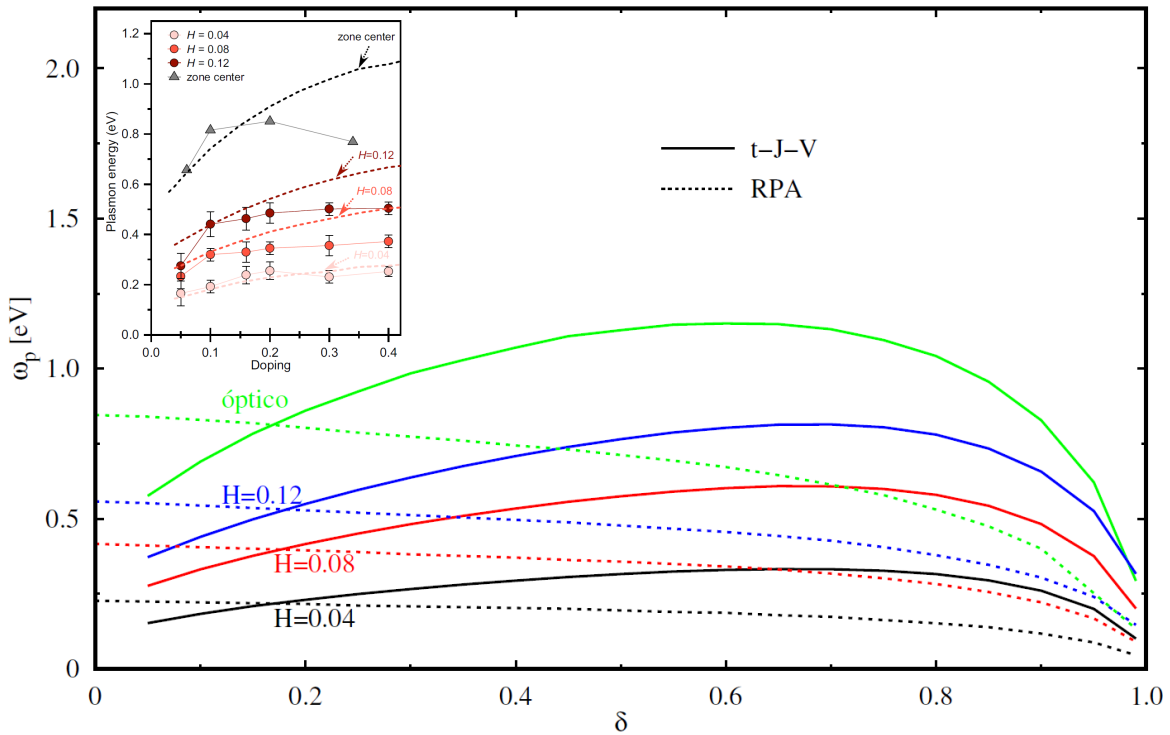


Figura 2.7: Energía de los plasmones versus dopaje calculada con el modelo t - J - V (línea sólida) y con RPA con $m^*/m = 2$ (línea de trazo). Los parámetros de banda de ambos modelos son los mismos. Insertado: Figura extraída directamente de la Ref. [112], donde se muestran las mediciones de los plasmones en función del dopaje en LSCO junto a las curvas teóricas dadas con el modelo t - J - V (estos resultados fueron obtenidos con parámetros distintos a los que se utilizaron en esta tesis).

El modelo t - J - V tiene en cuenta altas correlaciones que son las responsables del estado aislante a medio llenado ($\delta = 0$) [58]. De acuerdo a la Fig. 2.7, la energía de los plasmones que se calculó con el modelo t - J - V debería tender a cero a medida que se acerca a dopaje nulo, lo que es consistente con la noción de que los aislantes no pueden exhibir excitaciones plasmónicas. Sin embargo, se debe notar que en el cálculo realizado aquí se espera que a $\delta = 0$ la energía de los plasmones sea no nula debido a una interacción de intercambio J no nula, que induce un ancho de banda finito incluso a medio llenado si el orden antiferromagnético no es considerado [33]. Sin embargo, la presente teoría es aplicable al menos hasta $\delta = 0.05$, que es el valor más bajo de dopaje para el cual se midieron los plasmones en la Ref. [112].

Estos resultados, junto con los análisis presentados en secciones anteriores, permiten

concluir que, aunque RPA puede ser útil para describir los plasmones de tipo acústico en cupratos a un dopaje específico, su aplicación debe hacerse con cautela y teniendo en cuenta las altas correlaciones electrónicas. Sin embargo, esta teoría no logra capturar las tendencias en función del dopaje para ningún valor de momento. En contraste, las dispersiones de plasmones obtenidas a partir del modelo t - J - V demuestran ser más robustas y precisas, reflejando de manera más fiel las interacciones electrónicas y las características de los plasmones de tipo acústico. Éstas coinciden de manera correcta tanto para un dopaje fijo como para las tendencias observadas en el diagrama de fase, lo que refuerza la conclusión de que los plasmones de tipo acústico presentan trazas de las altas correlaciones electrónicas en el sistema, lo que subraya la necesidad de emplear un modelo que integre estas interacciones de forma natural y adecuada para una descripción precisa: el modelo t - J - V .

Capítulo 3

LOS NIQUELATOS SUPERCONDUCTORES

3.1. Introducción

El descubrimiento de los cupratos superconductores ha marcado una amplia e interesante línea de investigación sobre materiales superconductores de alta temperatura crítica y de sistemas de electrones altamente correlacionados. Un enfoque particularmente relevante para comprender las propiedades de los cupratos es que sean contrastados con materiales que, aunque no contienen cobre, exhiben características relacionadas de manera estrecha. Entre estos, se fueron descubriendo y analizando materiales como los cobaltatos [113], superconductores orgánicos [114], los pnictógenos de hierro y de fermiones pesados [65], y los materiales de kagome más recientes [115].

En 1999 fueron argumentadas las posibilidades de construir materiales basados en níquel con una estructura de capas infinitas que resultarían análogos a los cupratos [116], los cuales fueron llamados niquelatos. Luego de varias décadas, más específicamente en 2019, fue descubierta por primera vez superconductividad con una $T_c = 9-15\text{K}$ en el niquelato dopado con agujeros $\text{Nd}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{NiO}_2$ [117], hito que continuó con la observación de superconductividad en PrNiO_2 [118] y LaNiO_2 [119], con características

similares en todos los niquelatos, marcando una tendencia universal de sus propiedades superconductoras análoga a los cupratos. Estos sucesos fueron tan importantes que se considera que se ha entrado en “la era de la superconductividad del níquel” [120, 121], expresión que se ha validado aún más con la detección de superconductividad con una temperatura crítica cercana a 80K en los niquelatos de dos capas bajo presiones moderadas de 14GPa [122]. Más allá de las similitudes entre niquelatos y cupratos, existen también diferencias importantes que hacen a los primeros una plataforma muy interesante de estudio tanto desde enfoques experimentales como teóricos.

En este capítulo primero se comparan a los niquelatos con los cupratos, remarcando sus diferencias y parecidos en las propiedades físicas de interés, luego se adopta un marco teórico con modelos de una banda para analizar propiedades de carga (en particular, plasmones) en dos escenarios distintos que se discuten actualmente en la comunidad: (i) los niquelatos son considerados sistemas de electrones altamente correlacionados, tal como los cupratos, por lo que pueden ser descritos en el marco del modelo t - J - V , y (ii) las correlaciones electrónicas no son tan altas como en cupratos, por lo que RPA es suficiente para capturar las propiedades físicas de carga. De estos casos contrapuestos se realizan predicciones que podrán ser probadas directamente en experimentos de RIXS, con el objetivo de contribuir a la determinación de si los niquelatos se encuentran dentro del régimen (i) o del (ii), siendo esto tan importante para el estudio de ellos como de los cupratos y de otros superconductores no convencionales [123]. Vale aclarar que cuando se utilice la palabra niquelato siempre se referirá específicamente a los niquelatos de capas infinitas.

Los resultados de este capítulo se encuentran publicados en:

- Luciano Zinni, Matías Bejas, Hiroyuki Yamase y Andrés Greco, “Low-energy plasmon excitations in infinite-layer nickelates”, *Phys. Rev. B* **107**, 014503 (2023).

3.2. Similitudes y diferencias con cupratos superconductores de alta temperatura crítica

Los primeros niquelatos en los que se observó superconductividad presentan la fórmula química general $R_{1-x}A_x\text{NiO}_2$, siendo R una tierra rara (La, Pr, Nd) que determina el compuesto base, y A el elemento que se utiliza para dopar (Sr, Ca). A estos tipos de niquelatos se los llama de capas infinitas, ya que su estructura cristalina consiste en planos de Ni-O apilados, con el átomo R intercalado entre ellos [ver Fig. 3.1(izquierda)], los cuales resultan isoestructurales a los estudiados en el Cap 2 [124, 125]. Otro ejemplo de éstos es el cuprato $\text{Sr}_{1-\delta}\text{La}_\delta\text{CuO}_2$ (SLCO), cuya estructura cristalina se encuentra esquematizada en la Fig. 3.1(derecha).

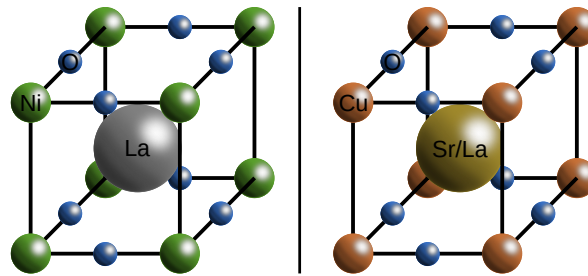


Figura 3.1: Esquema de la estructura cristalina del niquelato LaNiO_2 (izquierda) y del cuprato $\text{Sr}_{1-\delta}\text{La}_\delta\text{CuO}_2$ (derecha). Ambos compuestos tienen el mismo tipo de estructura (son isoestructurales).

Fue sugerido recientemente que al dopar los niquelatos con agujeros, éstos van al orbital $\text{Ni } 3d_{x^2-y^2}$ [126, 127], mientras que se sabe que los agujeros con los que se dopan los cupratos van principalmente al orbital $\text{O } 2p_{x,y}$. En este aspecto, los niquelatos dopados con agujeros resultan más cercanos a los cupratos dopados con electrones, ya que en estos últimos los electrones residen en los orbitales del Cu [68]. Además, experimentos en RIXS han detectado paramagnones para varios dopajes similares a los observados en cupratos [73], con un acople a primeros vecinos significativo de $J \sim 64\text{meV}$. Otras similitudes con los cupratos es que los niquelatos muestran un domo de la T_c en función del dopaje [128], que la superconductividad tiene un carácter bidimensional [129] y que

la resistividad del estado normal se comporta de manera análoga en todo el diagrama de fase [130].

Una importante diferencia entre niquelatos y cupratos es el hecho de que los niquelatos sin dopar, es decir, a medio llenado de la banda Ni $3d_{x^2-y^2}$, no presentan orden antiferromagnético de largo alcance [131]; en su lugar, presentan comportamiento paramagnético y débilmente metálico [117]. Sin embargo, sí se ha observado fluctuaciones antiferromagnéticas por resonancia magnética nuclear (NMR, por sus siglas en inglés) [132, 133].

La física de baja energía de los cupratos de capas infinitas puede ser descrita por un modelo correlacionado de una banda. Sin embargo, el caso de los niquelatos de capas infinitas $R\text{NiO}_2$ es más controversial [134, 135]. Mientras que algunos autores proponen un modelo de una banda para describirlos [136-138], otros sugieren una descripción multiorbital, en donde además de los orbitales Ni $3d_{x^2-y^2}$ y O $2p_{x,y}$, otros Ni $3d$ [139, 140] y Ni $3s$ [141, 142] deberían incluirse. También, el orbital $5d$ de la tierra rara R podría tener un rol directo [140], en los que se destaca el proceso de autodopaje, el cual podría ser responsable de que se esté encontrando superconductividad en niquelatos sin dopar químicamente en experimentos muy recientes [143, 144]. Un modelo efectivo de dos bandas respaldado por espectroscopía de rayos X en el compuesto padre indica que los planos Ni-O presentan estados Ni $3d_{x^2-y^2}$ altamente correlacionados, pero que los planos intermedios de R dan lugar a un estado metálico $5d$ débilmente interactuante y tridimensional [145]. El rol de las correlaciones en las bandas Ni $3d$ se discute en la Ref. [139], donde se argumenta que, aunque la banda Ni $3d_{x^2-y^2}$ está fuertemente correlacionada, la banda Ni $3d_{z^2}$ tiene un carácter itinerante, al igual que la banda Ni s [141]. Como consecuencia, se sugiere que los niquelatos podrían no comportarse de manera similar a los cupratos. En contraste, un estudio de NdNiO_2 y CaCuO_2 utilizando la teoría de campo medio dinámico en clusters (DMFT, por sus siglas en inglés) [125] llegó a la conclusión de que los niquelatos son sistemas análogos a los cupratos, es decir, que pueden considerarse sistemas fuertemente correlacionados de

una banda.

Las similitudes de las propiedades electrónicas entre los niquelatos y los cupratos sugieren que ambos materiales podrían compartir mecanismos subyacentes en su superconductividad no convencional. Sin embargo, la naturaleza de los estados normales y el papel de las correlaciones electrónicas en los orbitales involucrados indican que los niquelatos presentan una plataforma para el estudio de fenómenos colectivos, especialmente los plasmones. En los cupratos, los plasmones han sido y continúan demostrando ser fundamentales para entender la dinámica colectiva de los portadores de carga y su posible conexión con el mecanismo de superconductividad. Por lo tanto, investigar los plasmones en los niquelatos no solo podría revelar principios comunes que gobiernan ambos sistemas, sino también ayudar a discernir cómo las interacciones electrónicas y las excitaciones colectivas contribuyen a sus propiedades físicas. Este enfoque comparativo tiene el potencial de aportar nuevas perspectivas sobre la superconductividad de alta temperatura crítica.

3.3. Los niquelatos como sistemas análogos a los cupratos

Primeramente se supone que los niquelatos superconductores pertenecen al conjunto de sistemas altamente correlacionados del que los cupratos también son parte. De esta manera, en esta sección se aplica el modelo t - J - V y el formalismo large- N desarrollado en el Cap. 1 para calcular la dispersión de los plasmones. Se utilizaron los parámetros de banda desnudos obtenidos en la Ref. [124] por cálculos ab initio para LaNiO_2 , los cuales son $t'/t = -0.25$ y $t_z/t = 0.084$. Para pasar a eV se utilizó $t/2 = 0.368\text{eV}$. A diferencia del Cap. 2, se eligió no utilizar t'' , es decir, para los cálculos de los plasmones se usó $t''/t = 0$ ya que este mismo criterio se había utilizado en el estudio de los plasmones en SLCO con parámetros extraídos también de la Ref. [124]

y se capturaron las dispersiones de manera correcta [34]. Además, en este capítulo sí se utilizó la versión completa de la banda [Ec. (1.18)], es decir, no se descartó el $\cos k_z$ como sí se lo hizo en el Cap. 2, ya que el gap del plasmón juega un rol fundamental en los cálculos y las predicciones para niquelatos.

El valor de J en los niquelatos no está bien definido y varía en la literatura [146]; aquí se eligió $J/t = 0.3$. No obstante, el valor de J tiene un rol menor en la discusión sobre los plasmones [33, 48]. Para definir los valores de los parámetros de la interacción coulombiana es necesario conocer el valor experimental de la frecuencia de plasma óptica. Sin embargo, no existe un valor consensuado del mismo para los niquelatos, por lo que se adoptó el valor informado en el único trabajo experimental disponible hasta la fecha, el cual corresponde a $\omega_p = 1.05\text{eV}$ [147]. Este valor es similar al de los cupratos, por lo que se lo consideró factible para su uso en este estudio. Así, se utilizaron como parámetros los valores $V_c = 17.3\text{eV}$ y $\alpha = 2.2$ que arrojan dicha frecuencia de plasma óptica. Las constantes dieléctricas que surgen a partir de esos parámetros son $\epsilon_{\parallel}/\epsilon_0 = 3.41$ y $\epsilon_{\perp}/\epsilon_0 = 1.12$, las cuales fueron obtenidas utilizando los parámetros de red $a = 3.96\text{\AA}$ y $d = 3.37\text{\AA}$ correspondientes al niquelato LaNiO_2 [124]. Se tomó $K = 0$ para todos los cálculos de plasmones, tal como en el Cap. 2. Los resultados de las dispersiones de los plasmones se exponen en la Fig. 3.2, donde (a) corresponde a la rama óptica, es decir, $L = 0$ y (b) corresponde a una de las ramas de tipo acústico, para la cual se eligió $L = 1$ ya que corresponde a la de menor energía [20, 86]. Tanto para la rama óptica como para la de tipo acústico, los plasmones están bien definidos para todo H . En la Fig. 3.2(b) se observa un gap del plasmón de 319meV , consistente con el valor alto de $t_z/t = 0.084$, y mucho mayor al gap del plasmón de 120meV observado en el cuprato isoestructural SLCO [34]. El valor de 319meV del gap lo hace factible de observarse en experimentos de RIXS, los cuales no han sido capaces de observar plasmones hasta la fecha, lo que convierte a dicho valor en una predicción.

En las Figs. 3.3(a)-(c) se muestran los resultados de los plasmones para $L = 1$ y los momentos $H = 0.05$, $H = 0.1$ y $H = 0.2$, respectivamente. Los plasmones se

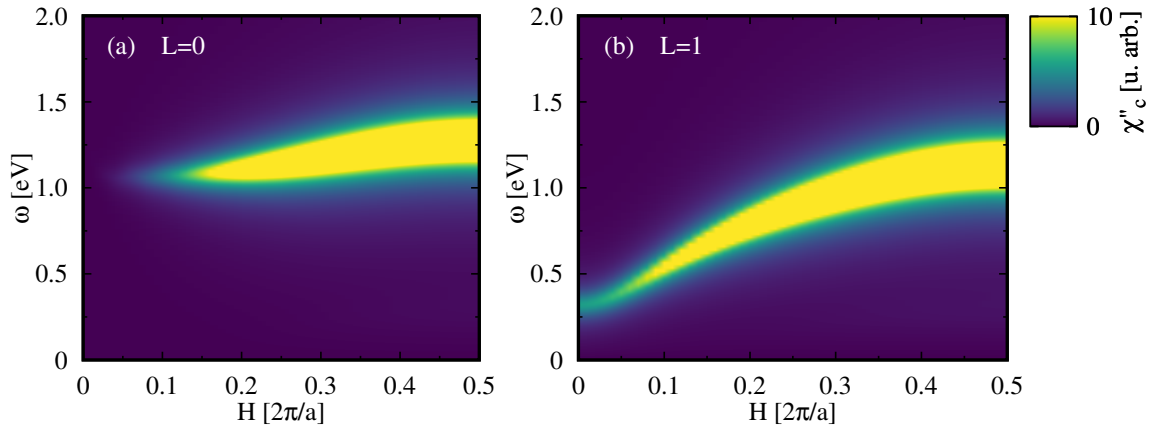


Figura 3.2: Frecuencia versus momento cuyo mapa de intensidad son los plasmones, siendo (a) la rama óptica ($L = 0$) y (b) una de las ramas de tipo acústico ($L = 1$), calculadas con el modelo t - J - V y el formalismo $\text{large-}N$.

observan bien definidos para los tres momentos y sus intensidades crecen al crecer el valor de H . Todo esto, sumado al hecho de que no hay un rastro claro del continuo de partícula-agujero en la Fig. 3.2(b), indica que el peso espectral de carga está mayormente distribuido en las excitaciones colectivas de plasmones. Esto se confirma al observar las Figs. 3.3(d)-(i), ya que cuando el determinante de la inversa del propagador bosónico D cambia de signo, es decir, a la energía que se produce la resonancia, el valor del continuo de partícula-agujero es prácticamente nulo, incluso para el alto valor de t_z , el cual lo extiende a energías mayores a comparación del caso de $t_z/t = 0$.

3.4. Los niquelatos como sistemas débilmente correlacionados

Dado que en esta sección se consideran a los niquelatos como sistemas con correlaciones electrónicas débiles, se calculan los plasmones con RPA y una masa efectiva $m^*/m = 1$. Se utilizaron los mismos parámetros de banda que en la sección anterior, pero los parámetros de la interacción coulombiana aquí corresponden a $V_c = 6.07\text{eV}$ y $\alpha = 3.0$ que generan el valor de $\omega_p = 1.05\text{eV}$. Para pasar a eV se utiliza el valor

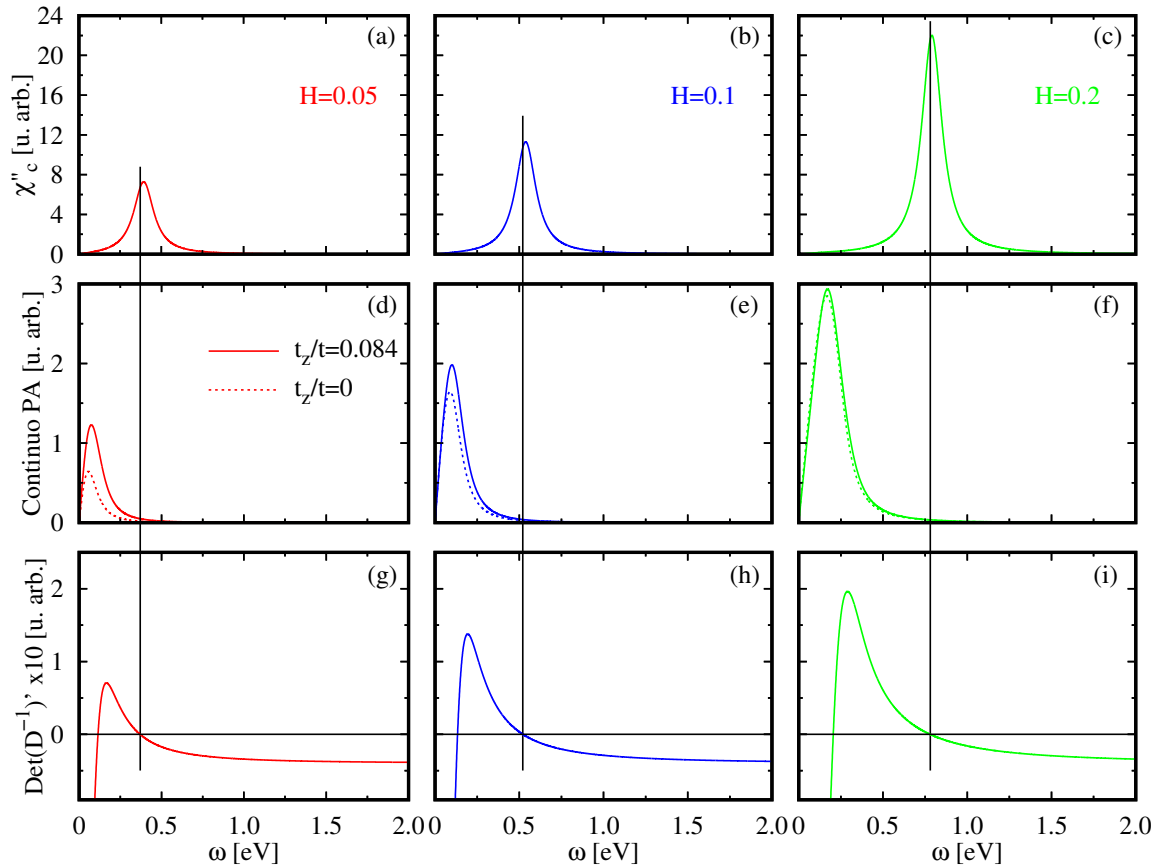


Figura 3.3: (a)-(c): Plasmones versus frecuencia en niquelatos calculados con el modelo t - J - V para los momentos $H = 0.05$, $H = 0.1$ y $H = 0.2$, respectivamente. (d)-(f) El continuo de partícula-agujero para los mismos momentos. Las líneas de trazo corresponden al caso de $t_z/t = 0$, para comparación directa con el caso de $t_z/t = 0.084$. (g)-(i): Parte real del determinante de la inversa del propagador bosónico D_{ab} para los momentos mencionados (la escala vertical se encuentra multiplicada $\times 10$ para mejor visualización).

$t = 0.368\text{eV}$, el mismo valor que en el formalismo large- N con la diferencia de que en RPA se utiliza sin la renormalización de $1/2$.

En la Fig. 3.4(a) se muestra el mapa de intensidad para $\chi''_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ con $L = 0$, lo que corresponde a la rama óptica de los plasmones. Tal como ocurre en la Fig. 3.2(a), se reproduce de manera fehaciente la frecuencia de plasma óptica observada experimentalmente. Los plasmones se encuentran bien definidos a bajo H , pero, a diferencia del modelo t - J - V , los plasmones pierden intensidad más allá de $H = 0.2$ ya que la dispersión se mezcla con el continuo de partícula-agujero. En la Fig. 3.4(b) se

expone el mapa de intensidad para $\chi''_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ con $L = 1$, es decir, la rama de tipo acústico de menor energía. Los plasmones en RPA se vuelven cada vez menos definidos al incrementar el momento H ya que son afectados fuertemente por el continuo de partícula-agujero, incluso para bajos valores de H . Sin embargo, es posible observar un gap de plasmón de 567meV en RPA, el cual es significativamente mayor que el calculado con el modelo t - J - V . Ambos valores son lo suficientemente altos y diferentes para discernir en experimentos de RIXS en cuál régimen se encuentran los niquelatos de capas infinitas.

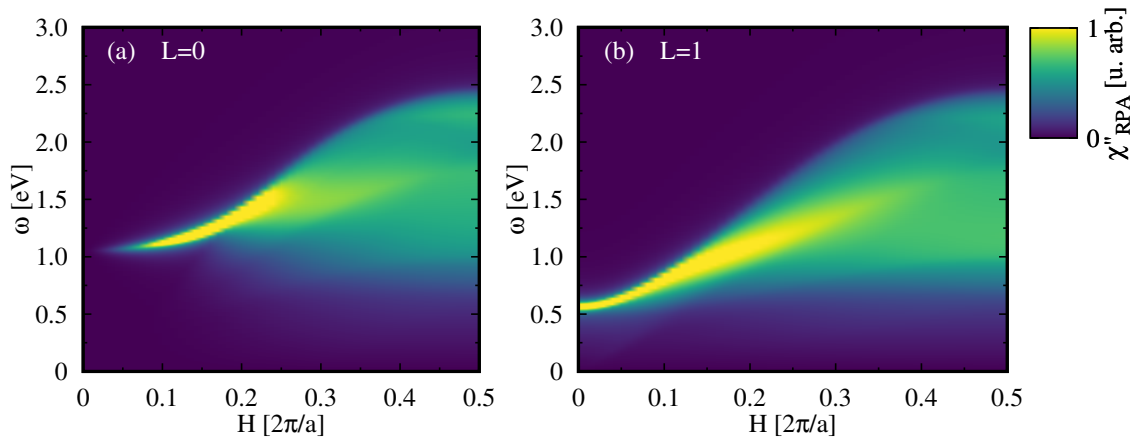


Figura 3.4: Frecuencia versus momento cuyo mapa de intensidad son los plasmones, siendo (a) la rama óptica ($L = 0$) y (b) una de las ramas de tipo acústico ($L = 1$) calculadas utilizando RPA.

En las Figs. 3.5(a)-(c) se muestra $\chi''_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ en función de la energía para $L = 1$ y los momentos $H = 0.05$, $H = 0.1$ y $H = 0.2$, respectivamente. Los plasmones no resultan picos tan angostos como sí ocurría en el modelo t - J - V , y se vuelven más anchos y la intensidad de sus máximos decrece al incrementar el momento [ver Figs. 3.3(a)-(c) para comparación]. En las Figs. 3.5(d)-(f) se expone el continuo de partícula-agujero para los mismos valores de H . Para comparación se añadió el continuo de partícula-agujero para los mismos parámetros excepto por $t_z/t = 0$ (línea de trazo). El alto valor de t_z extiende el continuo en energía y afecta a la formación de los plasmones a bajo H . Por ello, existe un gran continuo cerca del centro de zona bidimensional y los plasmones de baja energía tienden a estar más amortiguados que en el modelo t - J - V ,

en el cual los plasmones se hallan siempre bien definidos.

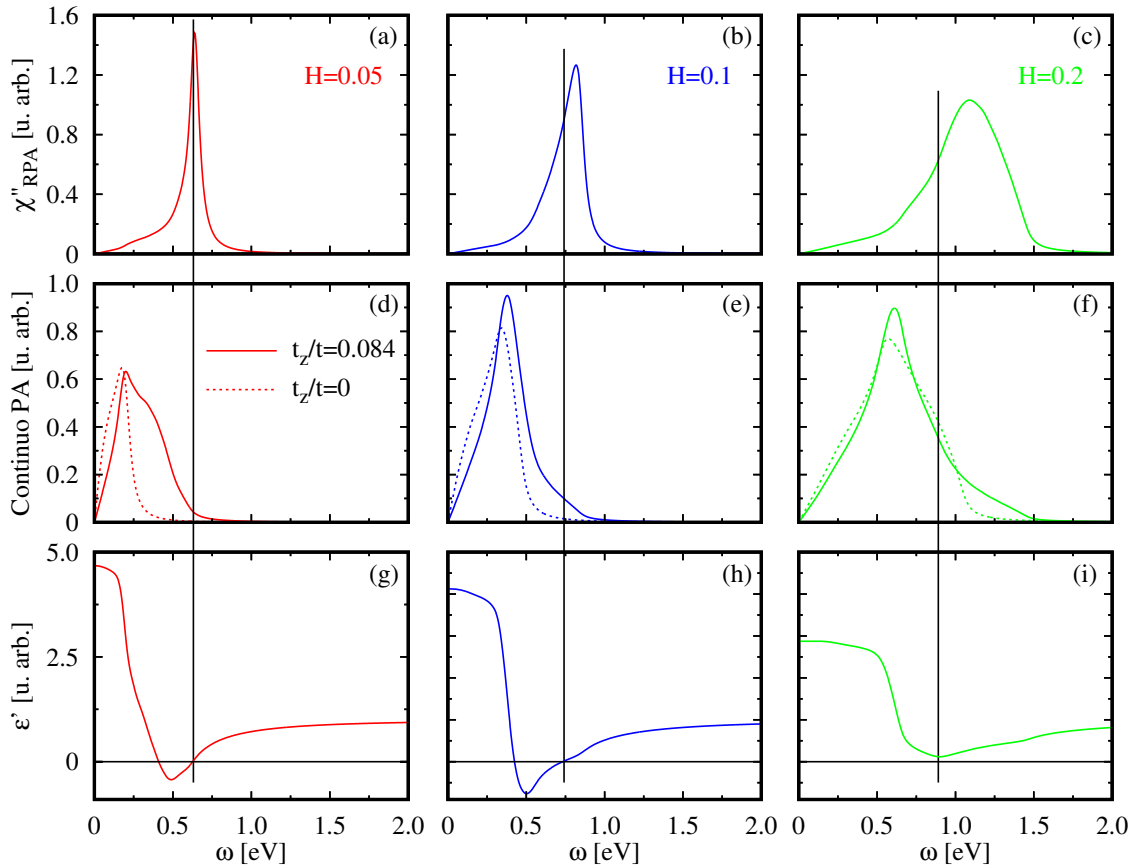


Figura 3.5: (a)-(c): Plasmones en niquelatos calculados con RPA para los momentos $H = 0.05$, $H = 0.1$ y $H = 0.2$, respectivamente. (d)-(f) El continuo de partícula-agujero para los mismos momentos. Las líneas de trazo corresponden al caso de $t_z/t = 0$, para comparación directa con el caso de $t_z/t = 0.084$. (g)-(i): Parte real de la función dieléctrica en RPA para los momentos mencionados.

Al comparar las Figs. 3.5(d) y 3.5(e) con la Fig. 3.5(f), se observa que el efecto de t_z es menos pronunciado para un momento alto como el que se muestra de $H = 0.2$. Para valores finitos de L es necesario distinguir entre dos tipos de regímenes. Un valor finito de t_z extiende el continuo a energías más altas, lo que tiende a degradar los plasmones a bajo H . Por otro lado, para valores altos de H , el continuo originado en la estructura de bandas bidimensional es el principal responsable de la desaparición de los plasmones. Es importante destacar que el comportamiento del continuo de partícula-agujero en las Figs. 3.5(d)-(f) es, en general, diferente al mostrado en las Figs. 3.3(d)-(f) para el modelo t - J - V . En este último caso, el continuo de partícula-agujero siempre

se encuentra por debajo del pico del plasmón. En resumen, para momentos bajos, como los que se estudian en los experimentos de RIXS, el continuo generado por un t_z grande cerca del centro de zona bidimensional puede amortiguar considerablemente los plasmones de baja energía en el marco de RPA.

En las Figs. 3.3(g)-(i) se muestra la parte real de la función dieléctrica $[\varepsilon'(\mathbf{q}, \omega)]$ en RPA, que corresponde al denominador de la Ec. (2.7). Cuando esta cantidad cambia de signo y el valor del continuo de partícula-agujero es insignificante, es decir, no hay amortiguamiento, el plasmón surge como una verdadera resonancia a la energía donde $\varepsilon'(\mathbf{q}, \omega)$ cruzó el 0. Sin embargo, en la Fig. 3.5 se observa que esta energía no corresponde al valor donde ocurre el máximo de $\chi''_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ (ver líneas verticales). Esto se debe mayoritariamente a que el continuo de partícula-agujero tiene un valor muy significativo a la energía de cruce, producto del valor alto de t_z . Incluso para el momento $H = 0.2$, $\varepsilon'(\mathbf{q}, \omega)$ no cambia de signo. Esto contrasta con los resultados de la sección anterior para el modelo t - J - V , en donde para todo valor de H , la parte real del determinante de la inversa del propagador D_{ab} (que es el análogo a la función dieléctrica en RPA) cambia de signo y, además, el valor del continuo de partícula-agujero resulta prácticamente nulo, por lo que el plasmón emerge a la energía de cruce. Por lo tanto, en RPA se deduce que los plasmones no resultan resonancias verdaderas, como si ocurre en el modelo t - J - V , tal como se concluyó en el Cap. 2 para los cupratos.

3.5. Comentarios finales

Se ha demostrado en este capítulo que si los niquelatos resultan análogos a los cupratos, los experimentos de RIXS deberían observar plasmones de tipo acústico bien definidos, similares a los que se han encontrado en cupratos y que han sido capturados de manera correcta con el modelo t - J - V . Por el contrario, si los niquelatos de capas infinitas resultan sistemas débilmente interactuantes de una banda, o si son sistemas multiorbitales con una contribución significativa de electrones débilmente interactuantes

como se espera de los orbitales Ni distintos al Ni $3d_{x^2-y^2}$, se obtuvo que el valor alto de t_z genera un continuo de partícula-agujero significativamente grande para valores finitos de L . En consecuencia, los plasmones resultan amortiguados. Por ejemplo, si el Ni $3d_{z^2}$ y los orbitales de las tierras raras resultan relevantes, podrían aumentar el hopping entre planos y hacer incluso más difícil la formación de plasmones como resonancias verdaderas.

Ante la presencia de electrones débilmente interactuantes, como se mostró en las Figs. 3.5(a)-(c), el espectro de excitaciones de carga resulta ancho y podría dificultar la separación de plasmones con respecto al fondo. Notablemente, algunos estudios previos de RIXS en niquelatos de capas infinitas no mostraron signos de plasmones en sus mediciones [148-151]. Sin embargo, las condiciones experimentales de dichos trabajos estaban optimizadas para la detección de excitaciones magnéticas, no para la búsqueda de plasmones. Por esto, es muy deseable que nuevos experimentos en RIXS se realicen en los niquelatos de capas infinitas ya que proveerían un panorama más concluyente sobre la existencia de plasmones de baja energía en estos sistemas y, por lo tanto, sobre la naturaleza de sus interacciones electrónicas.

Capítulo 4

ROL DE LOS PLASMONES EN LA SUPERCONDUCTIVIDAD

4.1. Introducción

El origen y la naturaleza de la superconductividad en cupratos superconductores de alta temperatura crítica ha sido un misterio desde su descubrimiento. Una de las primeras y principales ideas para explicar dicho fenómeno físico consiste en que los plasmones cumplen un rol fundamental en la superconductividad [17, 89, 152]. En dicha propuesta, los plasmones resultan mediadores bosónicos entre un par de Cooper y suman su contribución a los mediadores fonónicos. Allí se sugiere que la coexistencia de ambas contribuciones podría ser la responsable de las altas temperaturas críticas en los cupratos. Además, como ya fue expuesto en los capítulos anteriores, la presencia de plasmones ópticos y acústicos en los cupratos ha sido observada de manera inequívoca, tanto en los dopados con electrones como en los dopados con agujeros. Esto indica también que la interacción coulombiana de largo alcance opera en estos sistemas, algo que, a priori, parece perjudicial para la superconductividad ya que la misma presenta una proyección *d*-wave repulsiva. Esta aparente contradicción, sumada al hecho de que hasta el día de hoy no existe una evidencia clara de que los plasmones contribuyan al

mecanismo que origina la superconductividad, hacen imperativo el análisis exhaustivo de estos interrogantes. Algunas teorías fenomenológicas han estudiado la posibilidad de un apareamiento a través de fluctuaciones antiferromagnéticas para explicar el gap superconductor en las proximidades de antiferromagnetismo [153, 154]. En este escenario, las fluctuaciones antiferromagnéticas bidimensionales juegan el rol de un mecanismo retardado, tal como los fonones en superconductores convencionales. Dentro del modelo t - J , la discusión de si el mecanismo de apareamiento es retardado o instantáneo también continúa [155, 156]. Mientras que en la Ref. [156] el mecanismo analizado presenta contribuciones retardadas e instantáneas, en la Ref. [155] sólo se considera relevante un mecanismo instantáneo.

En este capítulo se presenta un análisis sobre el rol que juega la repulsión coulombiana (y, por ende, los plasmones) en la superconductividad dentro del modelo t - J - V utilizando el formalismo large- N , investigando también cuál es el origen físico del mecanismo de apareamiento, su naturaleza instantánea o retardada, y la importancia de las correlaciones electrónicas.

Los resultados de este capítulo se encuentran publicados en:

- Luciano Zinni, Matías Bejas y Andrés Greco, “Superconductivity with and without glue and the role of the double-occupancy forbidding constraint in the t - J - V model”, Phys. Rev. B **103**, 134504 (2021).

4.2. La interacción superconductor efectiva

El mecanismo de apareamiento entre dos fermiones está generado por la interacción superconductor efectiva $V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; i\nu_n, i\nu'_n)$. A ésta se la calculó a través del formalismo explicado en el Cap. 1, utilizando el diagrama en la Fig. 4.1, el cual muestra que en la expansión large- N el apareamiento es mediado por las fluctuaciones de carga contenidas en el propagador D_{ab} . Además, de la observación del diagrama se desprende que V_{eff}

es $O(1/N)$. Sería posible añadir un diagrama que contuviese dos vértices $\Lambda_{ab}^{pp'}$ y dos propagadores D_{ab} pero esta contribución fue omitida ya que sería $O(1/N^2)$.

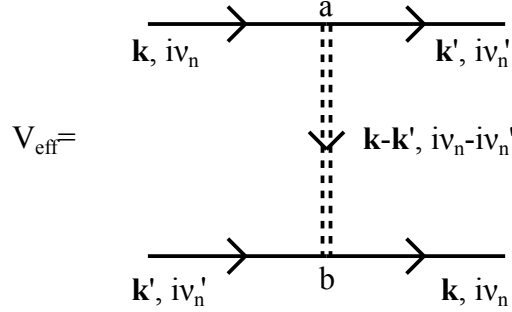


Figura 4.1: Representación diagramática de la interacción efectiva entre dos fermiones.

La expresión analítica de la interacción efectiva resulta entonces

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; i\nu_n, i\nu_n') = \Lambda_a D_{ab}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', i\nu_n - i\nu_n') \Lambda_b, \quad (4.1)$$

donde Λ_a y Λ_b son los vértices de tres patas de la Eq. (1.25) con $p = p'$. En el término del lado derecho de la Ec. (4.1), en el propagador D_{ab} las dependencias son $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ y $i\omega = i\nu_n - i\nu_n'$. Para su cálculo se realizó la continuación analítica $i\omega_n \rightarrow \omega + i\Gamma$.

En la Ec. (4.1), el hecho de que V_{eff} esté mediada a través del propagador bosónico D_{ab} implica que los plasmones participan en esta interacción entre pares de Cooper, ya que, como fue demostrado en los capítulos anteriores, los mismos son proporcionales a la componente D_{11} . Pero, a diferencia de los análisis previos, el fenómeno de superconductividad en los cupratos es bidimensional y ocurre dentro de los planos; por esto, se utilizará a continuación una versión bidimensional de la Ec. (1.35), la cual resulta [157]

$$V(\mathbf{q}) = \frac{V_c}{\sqrt{A(\mathbf{q})^2 - 1}}, \quad (4.2)$$

donde $A(\mathbf{q}) = \alpha(2 - \cos q_x - \cos q_y) + 1$.

En este capítulo se trabajaron las escalas de energía en unidades del hopping t y se eligió $\Gamma = 0.01$ para la continuación analítica. Además, por simplicidad, la dispersión

electrónica se la tomó sólo a primeros vecinos, ya que no es el objetivo de este capítulo explorar la dependencia con los demás hoppings. Sin embargo, cabe aclarar que, como se ve en la Ref. [112], no se ven efectos de una singularidad de van Hove en los plasmones para ningún valor de dopaje. Aquí fue chequeado también que un t' finito no cambia significativamente los resultados de este capítulo.

Así resulta

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2 \left(t \frac{\delta}{2} + \Delta \right) (\cos k_x + \cos k_y) - \mu. \quad (4.3)$$

Se tomó también $J = 0.3$ (este valor está justificado en los capítulos anteriores) y $T = 0$.

Primeramente se muestra que el modelo efectivamente contiene plasmones bidimensionales. Para ello se eligió como parámetros $V_c = 31$ y $\alpha = 3.5$ ya que son los presentes en la Ref. [34] que, a pesar de que sí presenta t' y t_z , la dispersión electrónica es más cercana a la utilizada aquí. Se adoptó también $K = 0$ y se efectuaron los mismos cálculos que en el Cap. 2 pero utilizando la repulsión coulombiana de la Ec. (4.2). En la Fig. 4.2(a) se observa el espacio de ω - H (frecuencia-momento) cuyo mapa de color corresponde a la parte imaginaria del elemento D_{11} del propagador bosónico, que representa a la función de correlación de carga-carga de la Ec. (1.34). La dispersión más intensa corresponde a la única rama de plasmones que existe en un sistema bidimensional. Estos plasmones se encuentran bien definidos para cada H , tal como se espera dentro del modelo t - J - V . En dicha figura también se observa un remanente del peso espectral del continuo de partícula-agujero para frecuencias $\omega < 0.45$ (señalado con una flecha blanca). La Fig. 4.2(b) muestra las frecuencias de los máximos extraídos del mapa en (a) que corresponde a la frecuencia de los plasmones ω_p para cada H . Se observa que el modelo captura la tendencia esperable a bajo H : la frecuencia de los plasmones es proporcional a la ley funcional \sqrt{H} , demostrado a través del ajuste (línea verde en la figura) a la función $a\sqrt{H}$, con $a = 2.92$.

Para el estudio sobre el rol de los plasmones en superconductividad es necesario

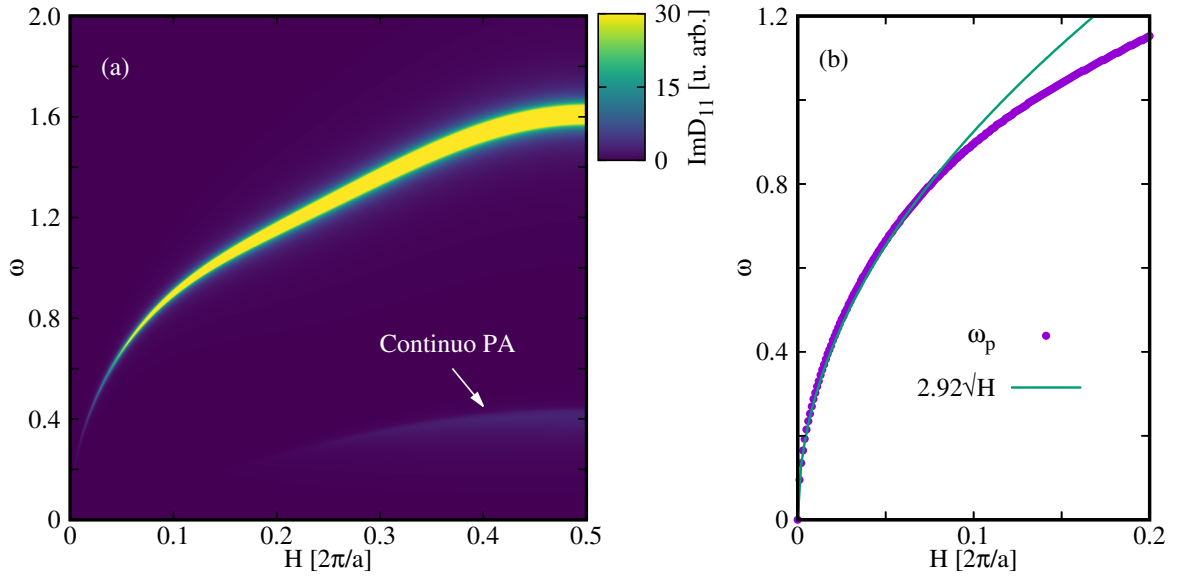


Figura 4.2: (a) Espacio ω - H cuyo mapa de color corresponde a la parte imaginaria de la componente D_{11} del propagador bosónico (plasmones). La flecha blanca señala el peso espectral remanente del continuo de partícula-agujero. (b) Espacio ω - H donde los puntos violetas corresponden a la frecuencia de los plasmones ω_p para cada H y la curva de color verde corresponde a un ajuste para bajo H a la función $a\sqrt{H}$, con $a = 2.92$.

optar por una forma de analizar qué contribuciones y qué simetrías de apareamiento son las relevantes dentro del modelo. Para esto se adoptó una aproximación de acoplamiento débil [158, 159] para calcular el acople efectivo λ_i en los distintos canales i [$i = (d_{x^2-y^2}, d_{xy}, s', p)$] (representaciones irreducibles de los parámetros de orden en la red cuadrada), con

$$\lambda_i = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\int (d\mathbf{k}/v_{\mathbf{k}}) \int (d\mathbf{k}'/v_{\mathbf{k}'}) g_i(\mathbf{k}') V_{\text{eff}}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) g_i(\mathbf{k})}{\int (d\mathbf{k}/v_{\mathbf{k}}) g_i(\mathbf{k})^2}, \quad (4.4)$$

donde las funciones $g_i(\mathbf{k})$ contienen las distintas simetrías de apareamiento, $g_{d_{x^2-y^2}}(\mathbf{k}) = \cos(k_x) - \cos(k_y)$, $g_{d_{xy}}(\mathbf{k}) = \cos(k_x) \cos(k_y)$, $g_{s'}(\mathbf{k}) = \cos(k_x) + \cos(k_y)$ y $g_p(\mathbf{k}) = \sin(k_x)$. $v_{\mathbf{k}}$ es la velocidad de la cuasipartícula con momento \mathbf{k} . Las integraciones están restringidas a la superficie de Fermi, es decir, \mathbf{k} y \mathbf{k}' se mueven sobre los momentos de la superficie de Fermi y $\nu_n = \nu'_n = 0$. λ_i mide la fuerza de interacción entre fermiones sobre la superficie de Fermi en un dado canal de simetría i . Si $\lambda_i > 0$, los electrones

son repelidos, por lo tanto, la superconductividad sólo es posible cuando $\lambda_i < 0$. La temperatura crítica T_c se puede estimar de la expresión BCS $T_{ci} = 1.13\omega_0 \exp(-1/|\lambda_i|)$, donde ω_0 es una frecuencia de corte adecuada que contiene efectos de retardo. Si λ_i es despreciable no se espera que haya superconductividad, sin importar el valor de ω_0 . Más allá de que este criterio sea una aproximación, el mismo otorga una forma de seleccionar, en principio, los canales de apareamiento dominantes de todas las contribuciones, independientemente de su naturaleza instantánea o retardada. Fue introducido para los casos retardados tales como el de la interacción electrón-fonón [160], además de ser utilizado para la interacción de fluctuaciones de espín en cupratos [153].

4.3. Repulsión coulombiana de corto alcance

Primeramente, para fijar ideas, se estudia el rol de la interacción coulombiana de corto alcance con el objetivo de hacer un análisis de base y tener una comprensión preliminar del mecanismo de superconductividad. Si bien el hecho de que sea de corto alcance (a primeros vecinos) no genera plasmones que son efectos colectivos, su análisis permite tener un punto de partida para comparar con trabajos previos y luego extenderlo a la interacción coulombiana de largo alcance.

El modelo de Hubbard tratado en el contexto de acoplamiento débil con la aproximación de fase aleatoria muestra superconductividad d -wave [161], donde el mecanismo de apareamiento efectivo es mediado por la susceptibilidad dinámica de espín. Allí, la interacción coulombiana de corto alcance, cuya forma en el espacio de Fourier es $V(\mathbf{q}) = 2V[\cos(q_x) + \cos(q_y)]$ y que se espera que sea significativa en cupratos [162], afecta negativamente la superconductividad porque tiene una proyección d -wave repulsiva. El mismo efecto de $V(\mathbf{q})$ se espera en las teorías fenomenológicas antiferromagnéticas [153, 154].

Para el presente estudio se aseguró que la intensidad de la repulsión coulombiana

se encuentre entre $0 \leq V \ll V_{\text{CDW}}$, donde V_{CDW} es el valor para el que aparece una inestabilidad de onda de densidad de carga tipo tablero de ajedrez [37, 163]. Utilizando el propagador D_{ab} en la Ec. (4.1) se calcula λ_i en función del dopaje para las distintas simetrías. En la Fig. 4.3(a) se muestra el resultado para $V = 0$, en donde sólo hay superconductividad para el canal $d_{x^2-y^2}$ ya que $\lambda_i < 0$, todas las demás simetrías presentan $\lambda_i > 0$. Por esto, todo lo que sigue estará centrado sólo en el canal $d_{x^2-y^2}$, y, por simplicidad, se escribirá a $\lambda_{d_{x^2-y^2}}$ como λ . En dicha figura también se observa que alrededor de $\delta \approx 0.13$ las curvas presentan un comportamiento distinto al que tenían a mayores dopajes. Esto es porque alrededor de ese valor de δ aparece la inestabilidad de flujo (explicada en la Sec. 1.5), cuyo dopaje crítico para estos parámetros es $\delta_c \approx 0.13$ [38].

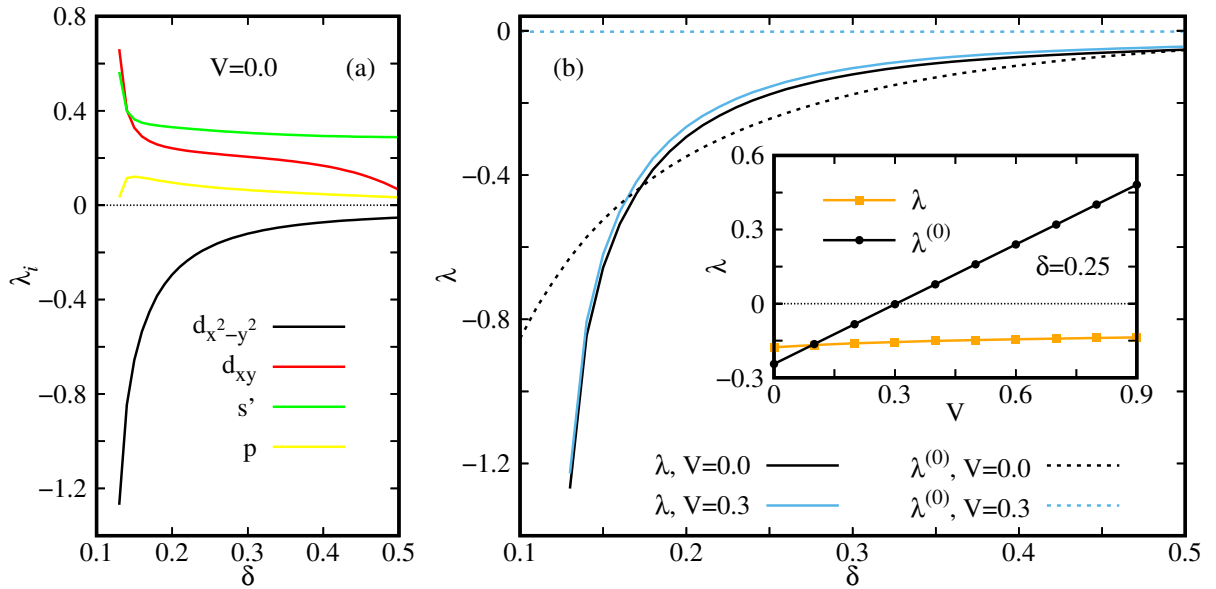


Figura 4.3: (a) El acople efectivo λ_i versus el dopaje para distintas simetrías i y $V = 0$. Sólo se observa superconductividad para la simetría $d_{x^2-y^2}$. (b) El acople efectivo λ y $\lambda^{(0)}$ versus el dopaje para $V = 0$ y $V = 0.3$. Insertado: El acople efectivo λ y $\lambda^{(0)}$ versus V para $\delta = 0.25$ (para este δ , $V_{\text{CDW}} \approx 1.9$).

Considerando nuevamente D_{ab} en la Ec. (4.1), se computó λ en función del dopaje para los valores $V = 0$ y $V = 0.3$. En la Fig. 4.3(b) se muestra que, a pesar de que $V(\mathbf{q})$ tiene una proyección repulsiva d -wave, λ casi no es afectado por V . Este resultado es contrario a otros que sugerían que la superconductividad era destruida por valores de

V del orden de J [164-166].

Utilizando el propagador desnudo $D_{ab}^{(0)}$ en lugar del propagador revestido D_{ab} en la Ec. (4.1), y descartando los términos constantes que no contribuyen al canal d , $V_{\text{eff}}^{(0)}$ resulta

$$V_{\text{eff}}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \nu, \nu') = \left(\frac{J}{2} - V \right) \left[\cos(k_x - k'_x) + \cos(k_y - k'_y) \right] + \frac{J}{2} \left[\cos(k_x + k'_x) + \cos(k_y + k'_y) \right]. \quad (4.5)$$

De esta manera, $V_{\text{eff}}^{(0)}$ es independiente de la frecuencia (resulta una interacción instantánea). El primer término de $V_{\text{eff}}^{(0)}$ que contiene a J y V proviene del sector 2×2 del propagador. El segundo término se origina en el sector 4×4 . Es importante notar que si en el hamiltoniano t - J - V de la Ec. (1.1) se consideran a los operadores \tilde{c} como fermiones convencionales, $V_{\text{eff}}^{(0)}$ se puede recuperar como una aproximación de campo medio del modelo t - J - V . En la Eq. (4.5), a pesar de que se observa que el primer y segundo término presentan signos distintos dentro de los cosenos, la proyección sobre el canal d de ambos es la misma a que si ambos términos tuvieran signos iguales, y la diferencia de signos sólo afecta al canal p .

Considerando $V_{\text{eff}}^{(0)}$, el $\lambda^{(0)}$ correspondiente puede ser calculado. En contraste a λ , si bien la superconductividad es robusta para $V = 0$, $\lambda^{(0)}$ desaparece para $V = 0.3$. Estos resultados se exponen en la Fig. 4.3(b). Los mismos indican que la renormalización de $D_{ab}^{(0)}$ dada por la autoenergía Π_{ab} [Eq. (1.30)] apantalla el efecto de V . Además, $\lambda^{(0)}$ no presenta el comportamiento divergente cercano a $\delta \approx 0.13$ como sí lo tiene λ . Esto se debe a que las inestabilidades, y en particular la de flujo, aparecen al incluir los efectos de la autoenergía Π_{ab} .

En la figura insertada en la Fig. 4.3(b) se muestran λ y $\lambda^{(0)}$ versus V para $\delta = 0.25$. Estos resultados para λ indican que la superconductividad casi no es afectada por la interacción coulombiana cuando se considera al propagador bosónico D_{ab} completamente

revestido, incluso para $V \gg J$. Por otro lado, para el caso del propagador desnudo $D_{ab}^{(0)}$ no se encuentra superconductividad para $V > J = 0.3$, como se desprende de la Ec. (4.5).

4.3.1. Contribuciones de los sectores de Π_{ab}

Ya se ha demostrado que λ , el cual contiene la autoenergía bosónica, es robusto frente a V , pero que dicha robustez no está presente en $\lambda^{(0)}$. A continuación se discutirá qué componentes de Π_{ab} son las relevantes que llevan al comportamiento distinto entre λ y $\lambda^{(0)}$.

Dado que la fase de flujo pertenece al sector 5-6 del propagador D_{ab} , se calculó λ incluyendo sólo las componentes del sector 2×2 Π_{11} , Π_{12} y Π_{22} , y las del sector de flujo Π_{55} , Π_{56} y Π_{66} en la ecuación de Dyson [Eq. (1.30)], estableciendo las demás nulas manualmente. A esto se lo llama $\lambda^{\text{Ch-FP}}$ (las siglas Ch y FP hacen alusión, en inglés, al sector de carga 2×2 y a la fase de flujo, respectivamente), y se muestran los resultados en la Fig. 4.4(a) para $V = 0$ y $V = 0.3$. Por completitud también fue agregada allí la curva para λ que se mostraba en la Fig. 4.3(b). Se desprende de estos resultados que las componentes Π_{11} , Π_{12} , Π_{22} , Π_{55} , Π_{56} y Π_{66} son las más relevantes de la autoenergía bosónica dado que capturan el mismo comportamiento de λ . Es importante notar que la inclusión de Π_{ab} en la ecuación de Dyson introduce una dependencia en frecuencia en el propagador bosónico revestido D_{ab} , es decir, las interacciones efectivas son retardadas en contraste con las interacciones instantáneas del propagador desnudo $D_{ab}^{(0)}$.

Ahora se analizarán las contribuciones de los sectores de carga 2×2 y de la fase de flujo de manera separada.

Considerando sólo las componentes Π_{11} , Π_{12} y Π_{22} en la ecuación de Dyson, la

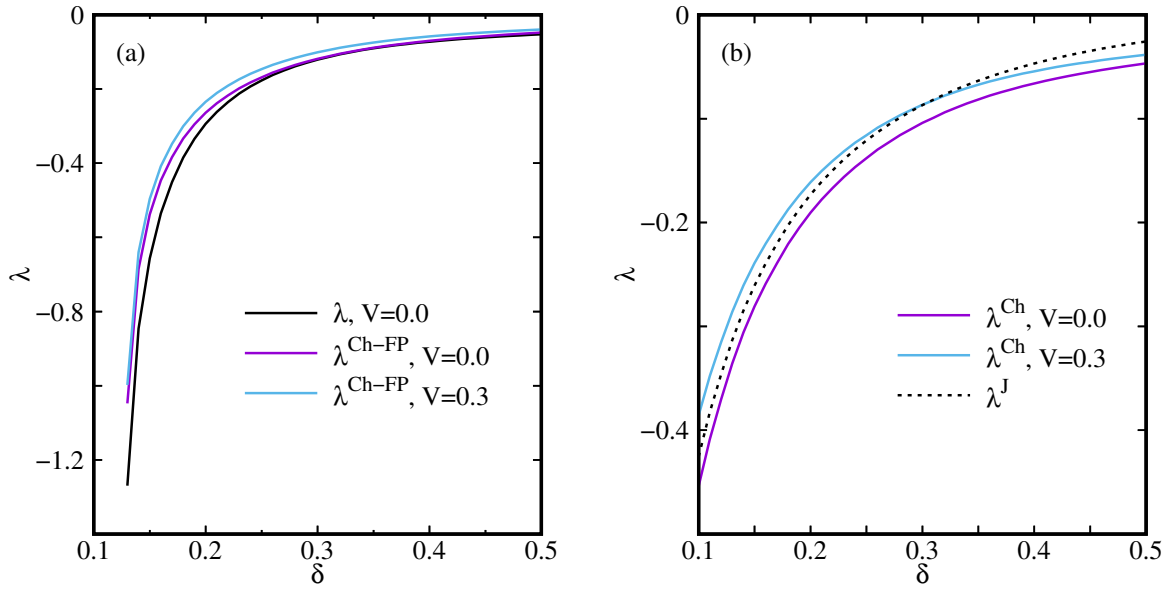


Figura 4.4: (a) El acople efectivo $\lambda^{\text{Ch-FP}}$ versus el dopaje para $V = 0$ y $V = 0.3$. Se incluye λ de la Fig. 4.3(b). (b) El acople efectivo λ^{Ch} para $V = 0$ y $V = 0.3$, y λ^{J} versus el dopaje.

interacción efectiva se escribe como

$$V_{\text{eff}}^{\text{Ch}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \nu, \nu') = \frac{-2\Lambda_1(\delta - \Pi_{12}) + \Lambda_1^2 \Pi_{22} - \left\{ \frac{\delta^2}{2} (2V - J) F_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} - \Pi_{11} \right\}}{(\delta - \Pi_{12})^2 + \Pi_{22} \left\{ \frac{\delta^2}{2} (2V - J) F_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} - \Pi_{11} \right\}} \quad (4.6)$$

$$+ \frac{J}{2} \left[\cos(k_x + k'_x) + \cos(k_y + k'_y) \right],$$

donde $F_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \cos(k_x - k'_x) + \cos(k_y - k'_y)$. Utilizando la Ec. (4.6) se calcula λ^{Ch} . En la Fig. 4.4(b) se muestra este resultado en función del dopaje δ para $V = 0$ y $V = 0.3$. Allí se observa que λ^{Ch} no es afectado por la inclusión de V , mostrando que la repulsión coulombiana es, de hecho, apantallada por las componentes de Π_{ab} que pertenecen al sector de carga 2×2 . El segundo término en el lado derecho de la Ec. (4.6) es el mismo que en la Ec. (4.5) y proviene del sector 4×4 . A esta contribución se la llama λ^{J} y su comportamiento se muestra también en la Fig. 4.4(b). En la misma se observa que las tres curvas son coincidentes, lo que indica que las componentes del sector 2×2 de Π_{ab} apantallan el primer término de la Ec. (4.5) y, de esta manera, sólo la interacción efectiva $(J/2)[\cos(k_x + k'_x) + \cos(k_y + k'_y)]$ del sector 4×4 sobrevive.

Cuando el modelo t - J es tratado a nivel de campo medio, se espera que la superconductividad sea disparada por el término de intercambio $J(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$. Sin embargo, la superconductividad es destruida por una interacción coulombiana de corto alcance. Cuando la prohibición de doble ocupación es tratada apropiadamente, los efectos de la interacción coulombiana son apantallados. Así, los resultados de esta sección muestran una diferencia clara entre el tratamiento de la superconductividad a nivel de campo medio y en el régimen de altas correlaciones. Esto apoya la idea original de P. W. Anderson [155] sobre que la superconductividad viene de una contribución instantánea dada por el término $J(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, pero a su vez estos resultados indican que para que tal mecanismo exista es necesario tratar la prohibición de doble ocupación a un nivel más allá de campo medio.

El apantallamiento producido por el sector 2×2 puede entenderse de la siguiente manera. En el primer término de la Ec. (4.6), la segunda contribución es de tipo s -wave principalmente, y no contribuye al canal d -wave, es decir, este término no es relevante para el análisis de esta sección. La tercera contribución tiene la forma del apantallamiento de la interacción coulombiana del RPA usual ya que Π_{22} es la burbuja electrónica. De todos modos, es importante recordar que Π_{22} proviene en esta teoría de las fluctuaciones del multiplicador de Lagrange introducido para imponer los vínculos. Así, esta contribución apantalla el primer término de $V_{\text{eff}}^{(0)}$ que contiene J y V y proviene del sector 2×2 , mientras que el término J del sector 4×4 (segundo término en $V_{\text{eff}}^{(0)}$) permanece sin ser afectado. Además, la primer contribución, cuyo numerador es $-2\Lambda_1(\delta - \Pi_{12})$, es independiente de J y V y tiene una proyección repulsiva d -wave muy pequeña. De esta manera, si $V = J = 0$, es decir que sólo el sector 2×2 está presente, no se espera que la superconductividad sea mediada por fluctuaciones de carga.

Es importante notar que la dependencia con el dopaje que presentan λ^{Ch} y λ^{J} no muestra la misma caída abrupta cerca de δ_c que se observa en la Fig. 4.3(b). Esto se debe a que no se incluyeron las componentes Π_{55} , Π_{56} y Π_{66} del sector de la fase de flujo. Para entender la influencia que tienen sólo estas componentes en λ , se tomó el

propagador revestido D_{ab} y se calculó V_{eff} proyectando D_{ab} sobre el autovector de la fase de flujo $(0, 0, 0, 0, 1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2})$ [38], lo que resulta

$$V_{\text{eff}}^{\text{FP}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \nu, \nu') = -(\Lambda_5 - \Lambda_6)^2 \text{Re}\chi_{\text{FP}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \nu - \nu'), \quad (4.7)$$

donde Λ_5 y Λ_6 son la quinta y sexta componente de los vértices en la Ec. (1.25), y

$$\chi_{\text{FP}}(\mathbf{q}, \omega) = \left[(8/J) \Delta^2 - \Pi_{\text{FP}}(\mathbf{q}, \omega) \right]^{-1}, \quad (4.8)$$

la cual es la susceptibilidad de la fase de flujo [38]. $\Pi_{\text{FP}}(\mathbf{q}, \omega)$ corresponde a la polarizabilidad electrónica dada por

$$\Pi_{\text{FP}}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\text{FP}}^2(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \frac{n_F(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n_F(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega - i\Gamma}, \quad (4.9)$$

con el factor de forma $\gamma_{\text{FP}}(\mathbf{q}, \mathbf{k}) = 2\Delta[\sin(k_x + q_x/2) - \sin(k_y + q_y/2)]$. Para $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$, el factor de forma $\gamma_{\text{FP}}(\mathbf{q}, \mathbf{k})$ resulta proporcional a $\cos(k_x) - \cos(k_y)$, es decir, la inestabilidad de flujo tiene simetría d -wave. Así, $\chi_{\text{FP}}(\mathbf{q}, \omega)$ juega el rol de una interacción retardada bosónica, como los fonones en superconductores convencionales.

Esta proyección permite aislar la contribución del sector de flujo para analizar su efecto sobre λ . Para esto se calculó λ^{FP} en función del dopaje utilizando $V_{\text{eff}}^{\text{FP}}$, cuyos resultados se muestran en la Fig. 4.5. Mientras que a alto dopaje λ^{FP} va a cero, la curva exhibe la caída abrupta al acercarse a δ_c . En la misma figura también se muestra λ^{J} en función del dopaje, de lo que se concluye que, al comparar ambas curvas, la fase de flujo aumenta la superconductividad sólo cerca del punto crítico cuántico δ_c , asociado con la inestabilidad de flujo. Esta tendencia de aumentar la superconductividad se puede pensar como si estuviera disparada por fluctuaciones cuánticas críticas [167]. Cuando se introduce un ensanchamiento Γ mayor, la fase de flujo es desplazada a dopajes más bajos [168]. En la figura insertada en la Fig. 4.5 se muestran los resultados para λ^{FP} y λ^{J} en función del dopaje para $\Gamma = 0.05$. Para este valor de ensanchamiento, la fase de

flujo no aparece en un dopaje finito.

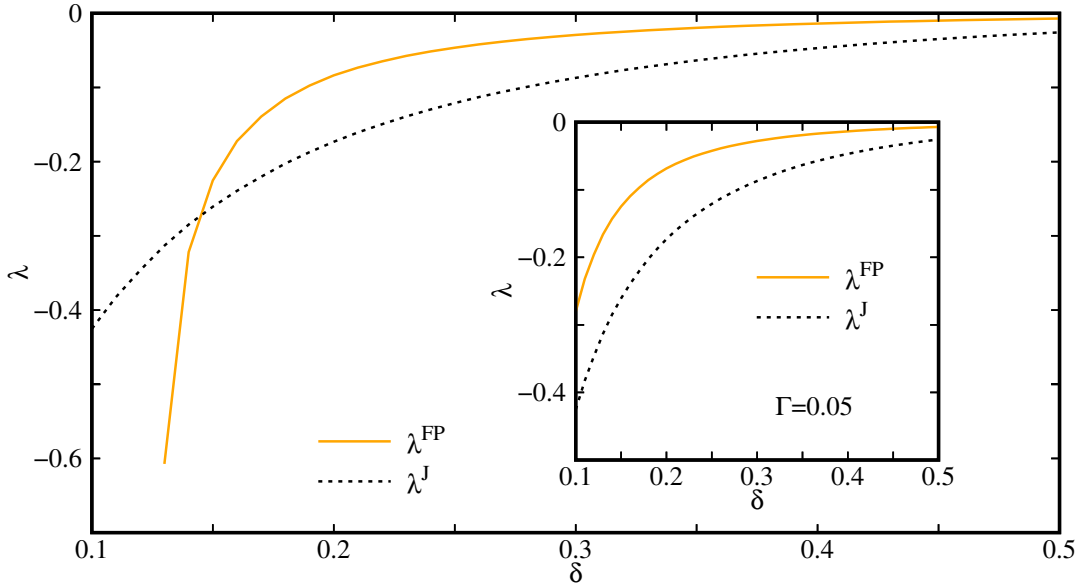


Figura 4.5: El acople efectivo λ^{FP} y λ^{J} versus el dopaje. Insertado: λ^{FP} y λ^{J} versus el dopaje para $\Gamma = 0.05$.

4.4. Repulsión coulombiana de largo alcance

El estudio de la repulsión coulombiana de corto alcance brindó una serie de resultados importantes respecto al mecanismo de apareamiento principal que produce superconductividad dentro del modelo t - J - V , por qué el mismo sobrevive ante una fuerza entre electrones repulsiva significativa y cuáles son todas las contribuciones que aportan a este escenario. Sin embargo, dado que la presencia de plasmones fue probada en cupratos superconductores de alta temperatura crítica de manera inequívoca, es crucial extender este análisis incluyendo una repulsión coulombiana de largo alcance, ya que es la que genera los plasmones.

Dado que se ha probado que el modelo contiene plasmones, se procede a calcular el mecanismo de acoplamiento que media la superconductividad, lo que permite evaluar el rol de los plasmones en dicho mecanismo. Para esto se introdujo la forma bidimensional de la repulsión coulombiana de largo alcance [Ec. (4.2)] en el propagador $D_{ab}^{(0)}$ de la

Ec. (1.24) y, luego de renormalizarlo a través de la Ec. (1.30) (ecuación de Dyson), se calculó la interacción efectiva que contiene a los plasmones, la cual fue llamada $V_{\text{eff}}^{\text{pl}}$, y luego su correspondiente acople efectivo λ^{pl} . En la Fig. 4.6(a) se observa que para los valores realistas de V_c y α que se han usado sólo se encuentra superconductividad para el canal d -wave. El hecho de que esta figura sea casi idéntica a la Fig. 4.3(a), donde se había calculado el acople efectivo pero sin ninguna repulsión coulombiana indica que para todas las simetrías, los efectos de la repulsión coulombiana de largo alcance, es decir, los plasmones, son totalmente apantallados.

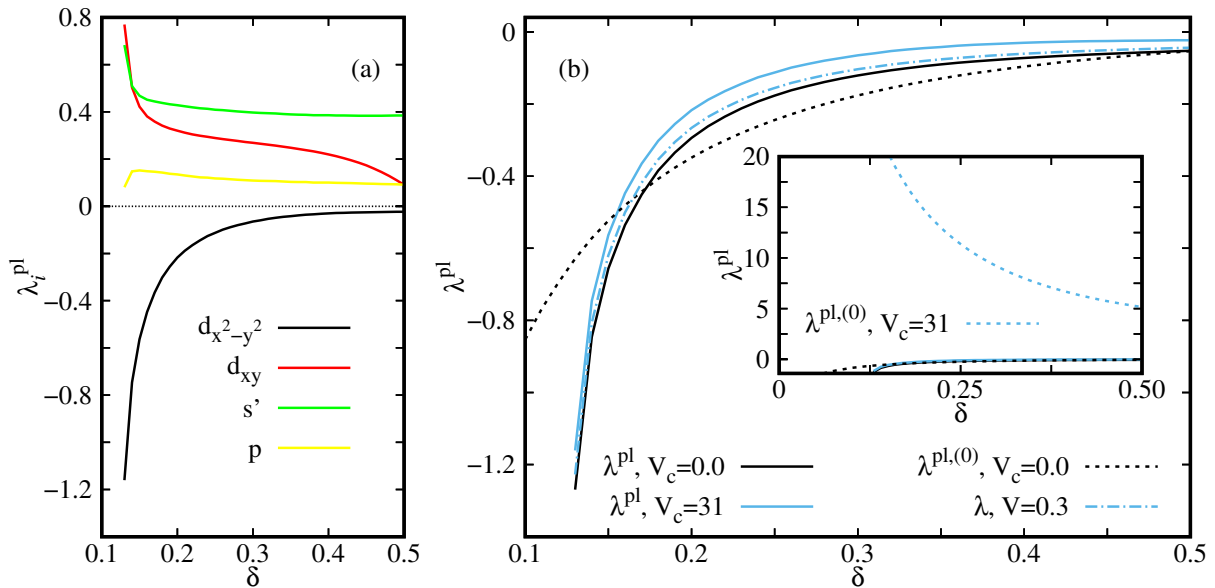


Figura 4.6: (a) El acople efectivo λ_i^{pl} versus el dopaje para distintas simetrías i . Sólo se observa superconductividad para la simetría $d_{x^2-y^2}$. (b) El acople efectivo λ^{pl} y $\lambda^{\text{pl}(0)}$ versus el dopaje para $V_c = 0$ y $V_c = 31$. La curva de trazos y puntos de color celeste corresponde a λ (acople efectivo calculado con la repulsión coulombiana de corto alcance) para $V = 0.3$ [misma curva sólida celeste en la Fig. 4.3(b)] Insertado: Igual que (b) pero con el rango de λ^{pl} ampliado donde aparece $\lambda^{\text{pl}(0)}$ con $V_c = 31$. Aquí se observa que valores realistas de la repulsión coulombiana de largo alcance destruyen ampliamente la superconductividad en el contexto de campo medio.

En la Fig. 4.6(b) se muestra λ^{pl} versus el dopaje para los valores de $V_c = 31$ y $V_c = 0$. Allí, las curvas etiquetadas con $\lambda^{\text{pl}(0)}$ corresponden al acople efectivo calculado con el propagador desnudo $D_{ab}^{(0)}$. Las curvas de color negro (tanto la sólida como la de trazo) que corresponden al caso de $V_c = 0$ resultan las mismas que en la Fig. 4.3(b),

como es de esperarse. El resultado para λ^{pl} con el valor realista $V_c = 31$ se muestra a través de la curva sólida de color celeste, la cual tiene una tendencia muy similar al caso de λ^{pl} con $V_c = 0$, indicando una vez más que la repulsión coulombiana de largo alcance es apantallada en gran medida por la renormalización a través de la autoenergía. Allí se agregó también el resultado para el caso de la repulsión coulombiana de corto alcance (línea de trazos y puntos celeste), que muestra que todos los resultados son similares, indicando una vez más la poca influencia que tiene la repulsión coulombiana en la superconductividad, sea de corto o largo alcance, al incorporar las correlaciones electrónicas. En la figura insertada se observa también $\lambda^{\text{pl},(0)}$ para $V_c = 31$ en una escala ampliada respecto a la figura principal. Para este caso donde las correlaciones electrónicas no fueron incluidas, la repulsión coulombiana destruye la superconductividad en gran manera. Este resultado es consistente con lo observado para la repulsión coulombiana de corto alcance.

Estos resultados indican que los plasmones son en sí perjudiciales para la superconductividad, en contra de las ideas originales expuestas en [17]. Sin embargo, dentro del modelo t - J - V a través del formalismo large- N la repulsión coulombiana es apantallada por las correlaciones electrónicas, permitiendo que la superconductividad sobreviva y sea generada a través de un mecanismo de apareamiento mediado por la interacción de intercambio de espín $J(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, tal como propuso originalmente P. W. Anderson.

CONCLUSIONES

La investigación realizada en esta tesis aborda el papel de las correlaciones electrónicas y las excitaciones colectivas de carga en cupratos y niquelatos de capas infinitas, además del rol de los plasmones en la superconductividad de alta temperatura crítica. A través de un análisis detallado de modelos teóricos, apoyado por comparaciones con resultados experimentales, se han obtenido nuevos conocimientos sobre la naturaleza compleja de estos sistemas.

El modelo base que se ha empleado en toda esta tesis es el modelo t - J - V , el cual fue tratado con técnicas de teoría cuántica de campos (Faddeev-Jackiw), la representación de integral de camino de los operadores de Hubbard y un formalismo basado en una expansión large- N , para arribar a expresiones analíticas que permitieron calcular la susceptibilidad de carga, es decir, los plasmones, y el mecanismo de superconductividad subyacente en el modelo. Además, se contrastaron ciertos resultados con los dados por la aproximación de fase aleatoria (RPA), una técnica ampliamente utilizada en la bibliografía más allá de ser desarrollada para sistemas débilmente correlacionados.

A continuación se resumen las principales conclusiones de cada capítulo, luego se dan unas conclusiones generales y, para finalizar se presentan las perspectivas a futuro.

Plasmones en cupratos superconductores de alta temperatura crítica

En este capítulo, se ha llevado a cabo un análisis detallado de los plasmones en cupratos superconductores mediante enfoques teóricos, basado en resultados experimentales obtenidos por un equipo colaborador a través de la técnica de dispersión inelástica y resonante de rayos X (RIXS) en dos cupratos de capas infinitas, uno dopado con agujeros ($\text{La}_{2-\delta}\text{Sr}_\delta\text{CuO}_4$) y otro con electrones ($\text{La}_{2-\delta}\text{Ce}_\delta\text{CuO}_4$), con un dopaje $\delta = 0.16$ para ambos. Las observaciones experimentales mostraron la presencia de plasmones de tipo acústico en ambos sistemas, cuyas velocidades fueron analizadas con el modelo de Fetter, el cual permitió estimar que los parámetros de banda desnudos de ambos cupratos no pueden capturar las observaciones experimentales de RIXS y que para ello es necesaria la introducción de una masa efectiva por fuera de la teoría, cuyos valores se estimaron en $m^*/m = 2.0$ para LSCO y $m^*/m = 1.7$ para LCCO. Esto permitió concluir que los plasmones de tipo acústico tienen información sobre las correlaciones electrónicas.

El resultado anterior fue apoyado con el cálculo de plasmones en RPA, obteniéndose que para parámetros de banda desnudos, los resultados arrojaron constantes dieléctricas no físicas y la dispersión de los plasmones se encontraba por adentro del continuo de partícula-agujero, indicando que no se habían obtenido resonancias verdaderas, en contraposición con las observaciones experimentales. Se introdujeron manualmente las masas efectivas encontradas con el modelo de Fetter en la dispersión electrónica de RPA generando así parámetros de banda renormalizados y se volvieron a calcular los plasmones, dando como resultado dispersiones que capturaron los experimentos correctamente y con verdaderas resonancias. Además, los valores de las constantes dieléctricas resultaron físicamente aceptables.

Por otro lado, el modelo t - J - V tratado con el formalismo large- N se mostró eficaz

para capturar de manera más natural y robusta el comportamiento de los plasmones, ya que integra intrínsecamente las altas correlaciones electrónicas. Las dispersiones calculadas bajo este marco teórico coincidieron correctamente con todos los resultados experimentales en RIXS, lo que resalta la capacidad de esta teoría para describir la dinámica colectiva de los portadores de carga en cupratos.

Además, si bien RPA con parámetros renormalizados y el modelo t - J - V son capaces de reproducir fehacientemente los plasmones experimentales para un dopaje fijo, al cambiar el dopaje ambos modelos presentaron diferencias claves. Se calcularon los plasmones de tipo acústico en función del dopaje para el cuprato LSCO fijando ciertos valores de momento junto a la rama óptica y se concluyó que, en la zona de bajo dopaje, RPA presenta una tendencia descendiente de la frecuencia de plasma a medida que se dopa con agujeros el sistema, mientras que el modelo t - J - V presenta una tendencia creciente, siendo esta última la que coincide con los experimentos realizados en RIXS.

Los resultados presentados en este capítulo muestran que, aunque enfoques como RPA pueden ser útiles bajo ciertas condiciones, es crucial considerar modelos que incluyan las correlaciones electrónicas de forma explícita para una descripción más precisa de las propiedades de los plasmones en cupratos superconductores. El modelo t - J - V se presenta como una herramienta poderosa para entender la dinámica compleja de las excitaciones colectivas de carga, destacando la necesidad de integrar los efectos de las altas correlaciones para una comprensión más completa de estos sistemas fuertemente correlacionados.

Los niquelatos superconductores

En este capítulo se exploraron las propiedades electrónicas y de carga de los niquelatos superconductores de capas infinitas, evaluando sus similitudes y diferencias con los cupratos superconductores. Se realizó un estudio teórico detallado de los plasmones

en estos materiales bajo dos hipótesis: la primera, que los niquelatos son sistemas de electrones altamente correlacionados análogos a los cupratos, y la segunda, que presentan interacciones electrónicas débiles, más adecuadas a una descripción mediante RPA.

Al calcular los plasmones, se encontraron diferencias significativas entre los resultados obtenidos con el modelo t - J - V y RPA. El modelo t - J - V predijo plasmones de tipo acústico bien definidos para todo momento estudiado y con un gap de energía de 319meV, observable en experimentos de RIXS. Por otro lado, bajo el enfoque de RPA, los plasmones aparecieron más amortiguados y presentaron un gap de energía de 567meV. Si bien este valor es mayor que el del modelo t - J - V y también sería detectable, el alto hopping entre planos t_z de los niquelatos genera la presencia de un gran continuo de partícula-agujero en RPA y produce que los plasmones calculados no sean resonancias verdaderas, lo que podría dificultar su detección experimental. Este contraste teórico proporciona una herramienta para discernir el régimen electrónico en que se encuentran los niquelatos, lo cual podría confirmarse mediante experimentos en RIXS enfocados en la detección de plasmones de baja energía. Estos últimos son muy deseados ya que serían capaces de clarificar el grado de correlación electrónica en los niquelatos y, por lo tanto, aportar una mejor comprensión de los mecanismos de acoplamiento en superconductores de alta temperatura crítica.

El rol de los plasmones en la superconductividad

En este capítulo, se analizó el rol de los plasmones en la superconductividad de los cupratos, utilizando el modelo t - J - V y el formalismo large- N . Para su estudio, primeramente se evaluó la interacción efectiva superconductora en presencia de repulsión coulombiana de corto alcance, se encontró que esta última ejerce una influencia desfavorable sobre la superconductividad debido a su naturaleza repulsiva en el canal d -wave. No obstante, la robustez de la superconductividad se mantuvo cuando se incorporaron

las altas correlaciones electrónicas produciendo el apantallamiento de la repulsión de corto alcance, lo que atenuó sus efectos adversos.

Para entender la influencia de los plasmones sobre la superconductividad, se extendió el análisis a la repulsión coulombiana de largo alcance, adoptándose su forma bidimensional dado que la superconductividad ocurre en los planos. Los resultados mostraron que, aunque los plasmones están presentes en el sistema y, en teoría, podrían actuar como mediadores de interacción entre pares de Cooper, los efectos de la repulsión coulombiana de largo alcance resultaron negativos para la superconductividad, pero, además, fueron ampliamente apantallados por las correlaciones electrónicas en el modelo t - J - V , minimizando la contribución de los plasmones al mecanismo de apareamiento. En este sentido, el formalismo large- N sugiere que los plasmones no cumplen el rol de mediadores de la superconductividad.

Este hallazgo es de gran relevancia, pues sugiere que el mecanismo dominante de la superconductividad en cupratos está mediado por la interacción de intercambio de espín [$J(\mathbf{q})$], en concordancia con la teoría de P. W. Anderson, quien propuso un mecanismo de apareamiento instantáneo basado en interacciones de espín en lugar de un acoplamiento retardado (como los plasmones). En consecuencia, aunque los plasmones forman parte de las excitaciones colectivas en los cupratos y su existencia fue demostrada, su contribución al mecanismo superconductor es prácticamente nula cuando se considera el contexto de altas correlaciones electrónicas.

Finalmente, el marco teórico trabajado en este capítulo refuerza la hipótesis de que el origen de la superconductividad en los cupratos está ligado a las interacciones de espín, siendo las correlaciones electrónicas las que permiten el apantallamiento de las interacciones coulombianas, dejando así que el intercambio de espín actúe como el verdadero mediador en la formación de pares de Cooper. Este análisis aclara que, aunque los plasmones son excitaciones importantes para entender la dinámica de carga en estos sistemas, su influencia en la superconductividad es insignificante.

Conclusión general

En conjunto, los resultados de esta tesis destacan que para comprender el comportamiento colectivo de los electrones en cupratos y niquelatos y su relación con la superconductividad, es indispensable emplear modelos teóricos que capturen adecuadamente las correlaciones electrónicas. Los estudios sobre plasmones revelan que estos materiales exhiben características únicas en sus excitaciones colectivas de carga, influidas directamente por el tipo de dopaje y el régimen de correlación electrónica. El modelo t - J - V y la expansión large- N fueron fundamentales para lograr una descripción precisa de estas propiedades, mientras que enfoques de acoplamiento débil como RPA son insuficientes en el contexto de materiales altamente correlacionados.

En el caso de los niquelatos, los plasmones de tipo acústico tienen el potencial de establecer si presentan una física de altas correlaciones similar a la de los cupratos o si su comportamiento puede entenderse desde un régimen de interacciones más débiles.

Finalmente, el hallazgo dado dentro del modelo t - J - V y la expansión large- N de que las correlaciones electrónicas apantallan la repulsión coulombiana de largo alcance (es decir, los plasmones) y facilitan el acoplamiento de pares de Cooper a través de la interacción de intercambio de espín representa un avance significativo en el entendimiento de la superconductividad en sistemas altamente correlacionados.

Perspectivas a futuro

Los resultados de esta tesis han abierto varias líneas de investigación con respecto a los cupratos y los niquelatos, las cuales se listan a continuación:

- Se espera que las conclusiones de esta tesis motiven rápidamente experimentos en RIXS sobre niquelatos de capas infinitas para la detección de plasmones, de

manera de discernir entre las distintas predicciones dadas por los modelos contrapuestos explorados en esta tesis. Esto permitirá extender el análisis teórico a modelos más particulares a estos sistemas.

- Los nuevos niquelatos de dos y tres capas en los que ha sido descubierta superconductividad de alta temperatura crítica bajo presión son un tema muy candente de investigación. Es de gran interés extender el modelo t - J - V con el formalismo large- N a sistemas multicapas, lo que implica una reformulación prácticamente desde los cimientos de la teoría. Esto luego permitiría analizar tanto la superconductividad como la existencia de plasmones ópticos y acústicos en estos sistemas.
- La extensión a varias capas del modelo utilizado aquí permitirá el análisis de plasmones en cupratos de dos capas, como lo son los basados en itrio (YBCO), por ejemplo, donde sólo existe un trabajo hasta la fecha que haya contrastado mediciones de plasmones con un modelo teórico [169]. Ésto fue realizado sólo en RPA, por lo que contrastar con un modelo que contemple las altas correlaciones electrónicas como lo es el modelo t - J - V y el formalismo large- N resulta de amplio interés y podrían surgir nuevas características e incógnitas físicas sobre los cupratos superconductores de alta temperatura crítica.

APÉNDICE

Deducción de la interacción coulombiana de largo alcance en sistemas de capas infinitas

Para obtener la forma de la interacción coulombiana de largo alcance es necesario resolver la ecuación de Poisson teniendo en cuenta la estructura de la red de los sistemas de capas infinitas, es decir, considerando una red cuadrada dentro de planos, los cuales se encuentran apilados entre sí.

Se parte de la forma discretizada de esta ecuación, la cual resulta [157]

$$\epsilon_{\parallel} \sum_{\eta=x,y} \frac{\phi_{i-j+\eta} + \phi_{i-j-\eta} - 2\phi_{i-j}}{a^2} + \epsilon_{\perp} \frac{\phi_{i-j+z} + \phi_{i-j-z} - 2\phi_{i-j}}{d^2} = -e\delta(r_i - r_j), \quad (10)$$

donde i y j corren sobre los sitios de la red y ϕ es el potencial eléctrico. En esta ecuación se ha utilizado unidades del sistema internacional, por lo que $[\phi_{i-j}] = \text{Vm}^3$.

La transformada de Fourier de ϕ es

$$\phi_i = \sum_q \phi_q e^{iq \cdot r_i}, \quad (11)$$

y sabiendo que $\delta(r_i - r_j) = \sum_q e^{iq \cdot (r_i - r_j)}$ resulta

$$\sum_q e^{iq \cdot (r_i - r_j)} \left[\epsilon_{\parallel} \frac{\phi_q}{a^2} \sum_{\eta=x,y} (e^{iq\eta} + e^{-iq\eta} - 2) + \epsilon_{\perp} \frac{\phi_q}{d^2} (e^{iqz} + e^{-iqz} - 2) \right] = -e \sum_q e^{iq \cdot (r_i - r_j)}, \quad (12)$$

lo que puede ser reescrito como

$$\sum_q e^{iq \cdot (r_i - r_j)} \left[\epsilon_{\parallel} \frac{\phi_q}{a^2} \sum_{\eta=x,y} (2 \cos q_{\eta} - 2) + \epsilon_{\perp} \frac{\phi_q}{d^2} (2 \cos q_z - 2) \right] = -e \sum_q e^{iq \cdot (r_i - r_j)}. \quad (13)$$

De aquí se obtiene que

$$\epsilon_{\parallel} \frac{\phi_q}{a^2} \sum_{\eta=x,y} (2 \cos q_{\eta} - 2) + \epsilon_{\perp} \frac{\phi_q}{d^2} (2 \cos q_z - 2) = -e, \quad (14)$$

o, sacando como factor común $\epsilon_{\perp} 2 \frac{\phi_q}{d^2}$,

$$\epsilon_{\perp} 2 \frac{\phi_q}{d^2} \left[\frac{\epsilon_{\parallel}}{\epsilon_{\perp}} \frac{d^2}{a^2} (\cos q_x + \cos q_y - 2) + (\cos q_z - 1) \right] = -e, \quad (15)$$

de donde se despeja el potencial eléctrico y resulta

$$\phi_q = -\frac{ed^2}{2\epsilon_{\perp} \alpha} \frac{1}{(\cos q_x + \cos q_y - 2) - 1 + \cos q_z}, \quad (16)$$

con $\alpha = \tilde{\epsilon}/(a/d)^2$, donde $\tilde{\epsilon} = \epsilon_{\parallel}/\epsilon_{\perp}$.

La interacción coulombiana $V(\mathbf{q})$ que aparece en el hamiltoniano de la Ec. 1.1 se relaciona con el potencial eléctrico como $V(\mathbf{q}) = \phi_q \text{carga}/\text{volumen}$, donde $\text{carga} = e$ y $\text{volumen} = a^2 d$. De aquí se obtiene

$$V(\mathbf{q}) = \frac{V_c}{\alpha (2 - \cos q_x - \cos q_y) + 1 - \cos q_z}, \quad (17)$$

donde $V_c = e^2 d (2\epsilon_{\perp} a^2)^{-1}$. La Ec. 17 resulta la misma que la Ec. 1.35.

Detalles experimentales de las mediciones en LSCO y LCCO

Crecimiento y caracterización de las muestras

Para el caso de la muestra de LSCO, se utilizó un monocristal crecido a través del método de zona flotante, el cual había sido utilizado previamente en un estudio en plasmones [22]. El cristal fue debidamente preparado antes de cada experimento, en el vacío. Se verificó que su dopaje sea de $\delta = 0.16$ utilizando mediciones de magnetización, las cuales correspondieron a una temperatura crítica superconductora de 38K.

Para el caso de LCCO, se crecieron películas delgadas de alta calidad sobre sustratos de SrTiO_3 a través de la técnica de deposición con pulsado láser, con un grosor de 100nm. Las películas presentaron una variación lineal en la concentración de Ce desde 0.1 a 0.19 a lo largo de la superficie del sustrato, fabricado por la técnica de movimiento continuo de estencil [170]. La dirección de dicha variación estaba alineada de manera perpendicular al plano de dispersión de RIXS. Las constantes de red en el eje c y las temperaturas de transición medidas a lo largo del gradiente de concentración fueron consistentes con los resultados en películas de LCCO con un solo dopaje [171]. Para $\delta = 0.16$, la temperatura crítica fue medida en 7.87K utilizando mediciones de resistividad.

El cuprato dopado con agujeros LSCO y el dopado con electrones LCCO pertenecen a la familia de cupratos de capas infinitas, los cuales se obtienen dopando el compuesto

padre La_2CuO_4 . Tales cupratos cristalizan en estructuras distintas: la T de tipo K_2NiF_4 para el caso de LSCO y la T' de tipo Nd_2CuO_4 para LCCO [98]. En la estructura T , los átomos de O forman una jaula octaédrica alrededor del Cu, mientras que en la estructura T' los átomos en los ápices del octaedro están ausentes (ver Fig. .7), lo que genera estados fundamentales distintos para los sistemas dopados.

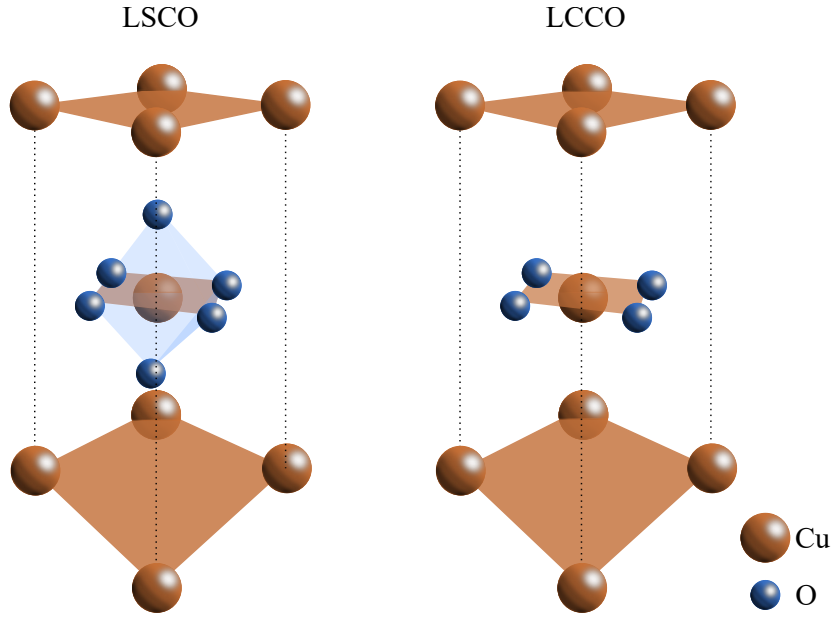


Figura .7: Esquema de las estructuras cristalinas de los cupratos LSCO y LCCO, el cual muestra los planos Cu-O. Se muestran sólo los átomos de O alrededor del átomo central de Cu.

En la Tabla 1 se muestra un resumen de los parámetros obtenidos durante la caracterización de las muestras de LSCO y LCCO.

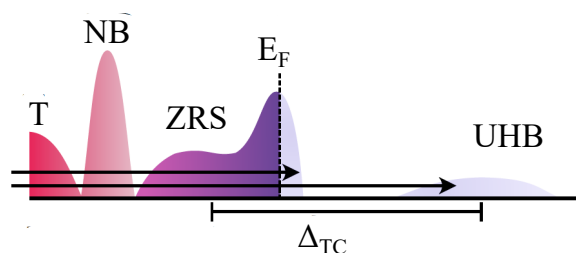
	a [Å]	$d = c/2$ [Å]	δ	T_c [K]
LSCO	3.77	6.55	0.16	38
LCCO	4.01	6.23	0.16	7.87

Tabla 1: Parámetros de las muestras de LSCO y LCCO. a : Constante de red dentro del plano. $d = c/2$: Distancia entre planos Cu-O. δ : Dopaje. T_c : Temperatura de transición superconductora.

Estructura electrónica

Una fuerte hibridización Cu-O y las interacciones coulombianas en un mismo sitio dan lugar a la banda de Hubbard superior (UHB, por sus siglas en inglés) y la banda del singlete de Zhang y Rice (ZRS), como se muestra en la Fig. .8 [58, 66, 99, 172-178]. El potencial electrostático en los sitios del Cu se encuentra elevado debido a la falta de O en los ápices del octaedro en LCCO con respecto a LSCO, lo que resulta en una energía de transferencia de carga menor (Δ_{TC}). El dopaje de agujeros mueve el potencial químico μ hacia el ZRS, mientras que el dopaje de electrones lo mueve hacia la parte inferior de la UHB. De esta manera, la dinámica de los portadores de carga puede investigarse utilizando espectroscopía de rayos X sintonizando la energía de los fotones en las transiciones resonantes de dichas bandas.

Dopado con agujeros:



Dopado con electrones:

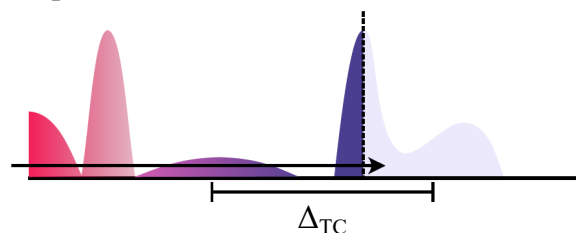


Figura .8: Representación esquemática de las transiciones electrónicas dentro de la estructura de varias bandas para los cupratos dopados con agujeros y con electrones [172]. UHB, ZRS, NB y T representan la banda de Hubbard superior, la del singlete de Zhang y Rice, la del O non-bonding y la del triplete de Zhang y Rice, respectivamente.

En la Fig. .9 se muestra el espectro de absorción de rayos X (XAS, por sus siglas en inglés) de LSCO y LCCO para el dopaje de $\delta = 0.16$, obtenidos en los (a) Cu

L_3 -edge y (b) O K -edge. Las energías de los fotones incidentes utilizados en RIXS se señalan con una flecha en las figuras. El pico XAS en el Cu L_3 -edge corresponde a la transición hacia la UHB en ambos sistemas. En LSCO, el primer pico XAS en O K -edge corresponde a los estados de agujero, mientras que el segundo (alrededor de 1.5eV mayor) corresponde a la transición a la UHB [176-178]. Para LCCO, el pico XAS en O K -edge es la transición a la UHB [177, 178].

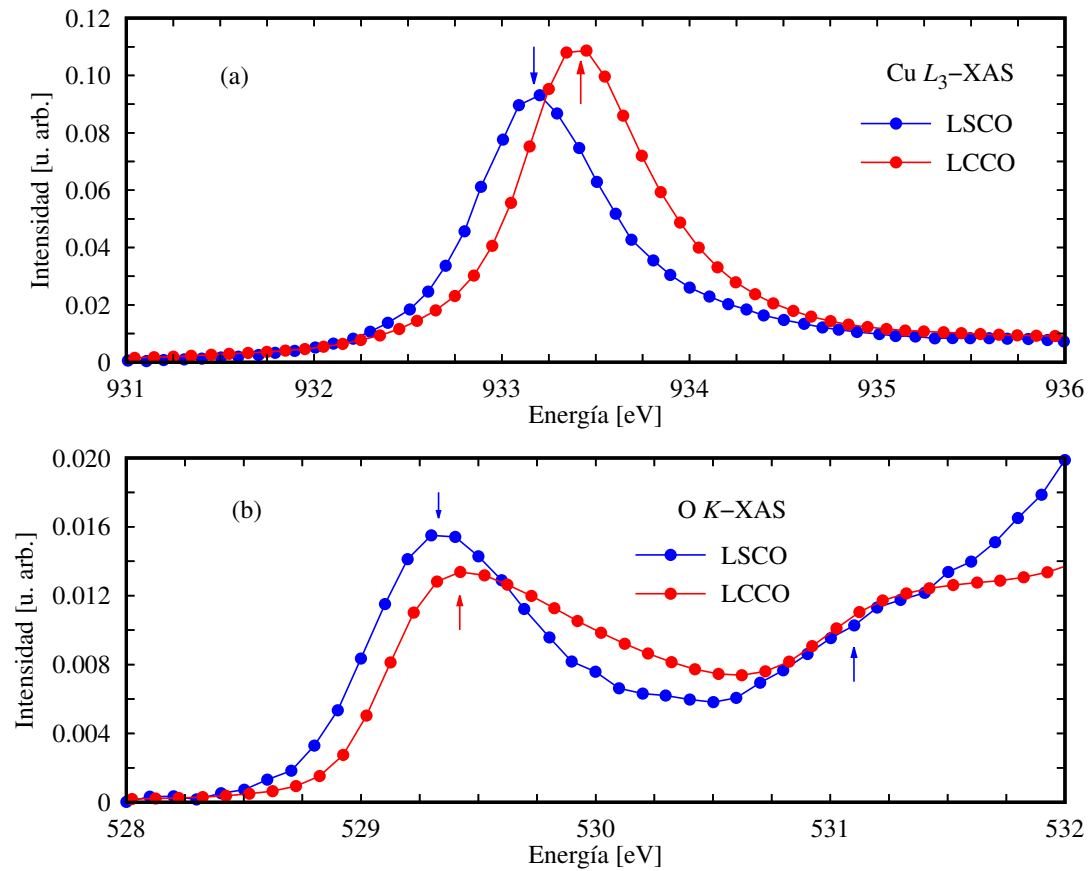


Figura .9: Espectro de absorción de rayos X (XAS) de LSCO y LCCO ($\delta = 0.16$) en los (a) Cu L_3 -edge y (b) O K -edge. Las flechas indican las energía de los fotones incidentes que se utilizaron para medir los plasmones en RIXS.

Mediciones en RIXS y extracción de plasmones

La presión dentro del recipiente se mantuvo alrededor de los 5×10^{-10} mbar. Las muestras fueron enfriadas hasta 25K. Esto significa que la muestra de LSCO estaba

por debajo de su T_c y la de LCCO estaba por encima de su T_c ; sin embargo, un estudio previo encontró que no hay cambios significativos en la dispersión de los plasmones para estos rangos de temperaturas al pasar por sus temperaturas críticas [112]. El espectro de RIXS de alta resolución en energía fue recogido en los Cu L_3 -edge ($\Delta \simeq 0.045\text{eV}$) y O K -edge ($\Delta \simeq 0.043\text{eV}$) con polarización σ , en el I21-RIXS beamline, Diamond Light Source, Reino Unido [179]. La posición de transferencia de energía cero y la resolución en energía fueron determinadas a través de mediciones subsecuentes de los picos elásticos en una cinta de carbono adyacente. Los valores negativos y positivos de H representan las distintas simetrías oblicuas de incidencia y de salida, respectivamente.

Los datos de RIXS fueron normalizados respecto al flujo de fotones incidentes, y luego corregidos por efectos de auto-absorción antes de su ajuste. Se utilizó una forma gaussiana con la resolución experimental en energía para ajustar la línea elástica. También se utilizaron formas gaussianas para ajustar las excitaciones fonónicas alrededor de 0.045eV y sus armónicos. Las intensidades de la dispersión $S(\mathbf{q}, \omega)$ de los plasmones, bimagnones y paramagnones, dependientes de las partes imaginarias de sus respectivas susceptibilidades dinámicas $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$ fueron modeladas como

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{\chi''(\mathbf{q}, \omega)}{1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}}, \quad (18)$$

donde k_B , T y \hbar son las constantes de Boltzmann, la temperatura y la constante reducida de Planck. Para representar la función respuesta fue utilizado un oscilador armónico amortiguado genérico,

$$\chi''(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{\gamma\omega}{[\omega^2 - \omega_0^2]^2 + 4\omega^2\gamma^2}, \quad (19)$$

donde ω_0 y γ son la frecuencia no amortiguada y el amortiguamiento, respectivamente.

Primero se extrajo la energía, amplitud y ancho del centro de zona del modo incoherente en $H = 0.01$ y se concluyó que era un bimagnón; luego se fijó su amplitud

y su ancho para todo el rango de momento [22]. A los valores de energía de los bimagnones se les permitió variar entre ± 20 meV. Una componente paramagnónica fue añadida para el espectro de RIXS en el Cu L_3 -edge para LCCO. Debajo de $H < 0.02$ se encontraron correlaciones significativas entre las amplitudes y energías elásticas, fonónicas y plasmónicas, por lo que la energía de los plasmones que se determinaron en estas regiones no fueron muy conclusivas y no se tuvieron en cuenta para el análisis. Fue incluido un fondo cuadrático de alta energía para incluir al modelo de ajuste la contribución de las excitaciones dd que se encuentran por encima de 1.5 eV.

Deducción de la fórmula de Fetter

En el modelo de Fetter [13], la relación de dispersión para los plasmones acústicos es

$$\omega_p = \sqrt{\frac{\langle v_F \rangle^2}{2} q_{\parallel}^2 + \Omega_p^2 \frac{q_{\parallel} d}{2} \frac{\sinh(q_{\parallel} d)}{\cosh(q_{\parallel} d) - \cos(q_z d)}}, \quad (20)$$

donde $\langle v_F \rangle$ es el promedio de la velocidad de Fermi, Ω_p es la frecuencia de plasma óptica y d es la distancia entre planos. La velocidad del plasmón v_p puede derivarse de la Ec. (20) de la siguiente manera.

Primeramente se nombran a $a = \langle v_F \rangle^2/2$ y $b = \Omega_p^2/2$, lo que resulta

$$\omega_p = \sqrt{a q_{\parallel}^2 + b q_{\parallel} d \frac{\sinh(q_{\parallel} d)}{\cosh(q_{\parallel} d) - \cos(q_z d)}}. \quad (21)$$

La velocidad del plasmón para $q_z d \neq 0$ es

$$v_p = \frac{\partial \omega_p}{\partial q_{\parallel}} = \frac{2a q_{\parallel} + \frac{b q_{\parallel} d^2}{\cosh(q_{\parallel} d) - \cos(q_z d)} \left[\cosh(q_{\parallel} d) + \frac{\sinh(q_{\parallel} d)}{q_{\parallel} d} - \frac{\sinh^2(q_{\parallel} d)}{\cosh(q_{\parallel} d) - \cos(q_z d)} \right]}{2 \sqrt{a q_{\parallel}^2 + b q_{\parallel} d \frac{\sinh(q_{\parallel} d)}{\cosh(q_{\parallel} d) - \cos(q_z d)}}}. \quad (22)$$

Ahora se tiene que evaluar el límite cuando $q_{\parallel} \rightarrow 0$, así que se extrae q_{\parallel} como factor común del numerador y denominador de la Ec. (22), y luego se ejecuta dicho límite, dando

$$\lim_{q_{\parallel} \rightarrow 0} v_p = \frac{2a + \frac{2bd^2}{1 - \cos(q_z d)}}{2 \sqrt{a + \frac{bd^2}{1 - \cos(q_z d)}}}. \quad (23)$$

Se escribe $2 \sin^2(\frac{1}{2}q_z d) = 1 - \cos(q_z d)$, de manera que la Ec. (23) resulta

$$\lim_{q_{\parallel} \rightarrow 0} v_p = \frac{a + \frac{bd^2}{2 \sin^2(\frac{1}{2}q_z d)}}{\sqrt{a + \frac{bd^2}{2 \sin^2(\frac{1}{2}q_z d)}}}. \quad (24)$$

Finalmente, la velocidad del plasmón para $q_z d \neq 0$ cercano a $q_{\parallel} = 0$ es

$$v_p = \sqrt{\frac{\langle v_F \rangle^2}{2} + \frac{\Omega_p^2 d^2}{4} \sin^{-2}(\frac{1}{2}q_z d)}, \quad (25)$$

la cual resulta igual a la Ec. (26) en la Ref. [13].

En el Cap. 2 se ha calculado y comparado con mediciones hechas para $q_z d = \pi$ ($L = 1$), por lo que la Ec. (25) se vuelve

$$v_p = \sqrt{\frac{\langle v_F \rangle^2}{2} + \frac{\Omega_p^2 d^2}{4}}, \quad (26)$$

que es el resultado buscado.

¿Qué dice RPA sobre el término $\langle v_F \rangle$ en el modelo de Fetter?

Como se mencionó en el texto principal, existe el debate sobre el uso del modelo de Fetter y si el mismo es aplicable a cupratos. En particular, la presencia del término que depende de $\langle v_F \rangle$ en la Ec. (2.3) y su uso varía en la bibliografía. En este apéndice se mostrarán resultados dentro del contexto de RPA que apoyan la presencia del mismo en cupratos.

Primeramente, la Ec. (2.3) se reescribe como

$$v_p^2 = \frac{\langle v_F \rangle^2}{2} + \frac{\Omega_p^2 d^2}{4} = a + b\Omega_p^2. \quad (27)$$

Tanto la dispersión de los plasmones de tipo acústico como la frecuencia de plasma óptica Ω_p dependen sólo de los parámetros de banda y de la interacción coulombiana. Se fijaron los parámetros de banda para LSCO en este caso y, de manera teórica, se varió el valor de Ω_p a través de la Ec. (2.9) fijando un valor de α y cambiando V_c . Luego, con los distintos valores de V_c se calcularon las velocidades de los plasmones correspondientes, tanto para $m^*/m = 1.0$ como para $m^*/m = 2.0$. Estos resultados se muestran en la Fig. .10. Allí se observa que los cuadrados de ambas magnitudes se relacionan a través de una función lineal para ambas masas efectivas, y la ordenada al origen tiene un valor significativo. Esta ordenada al origen corresponde al término de $\langle v_F \rangle$, lo que claramente muestra que es no nulo, por lo que inclusión está totalmente

justificada dentro del contexto de RPA, incluso para parámetros de banda de cupratos.

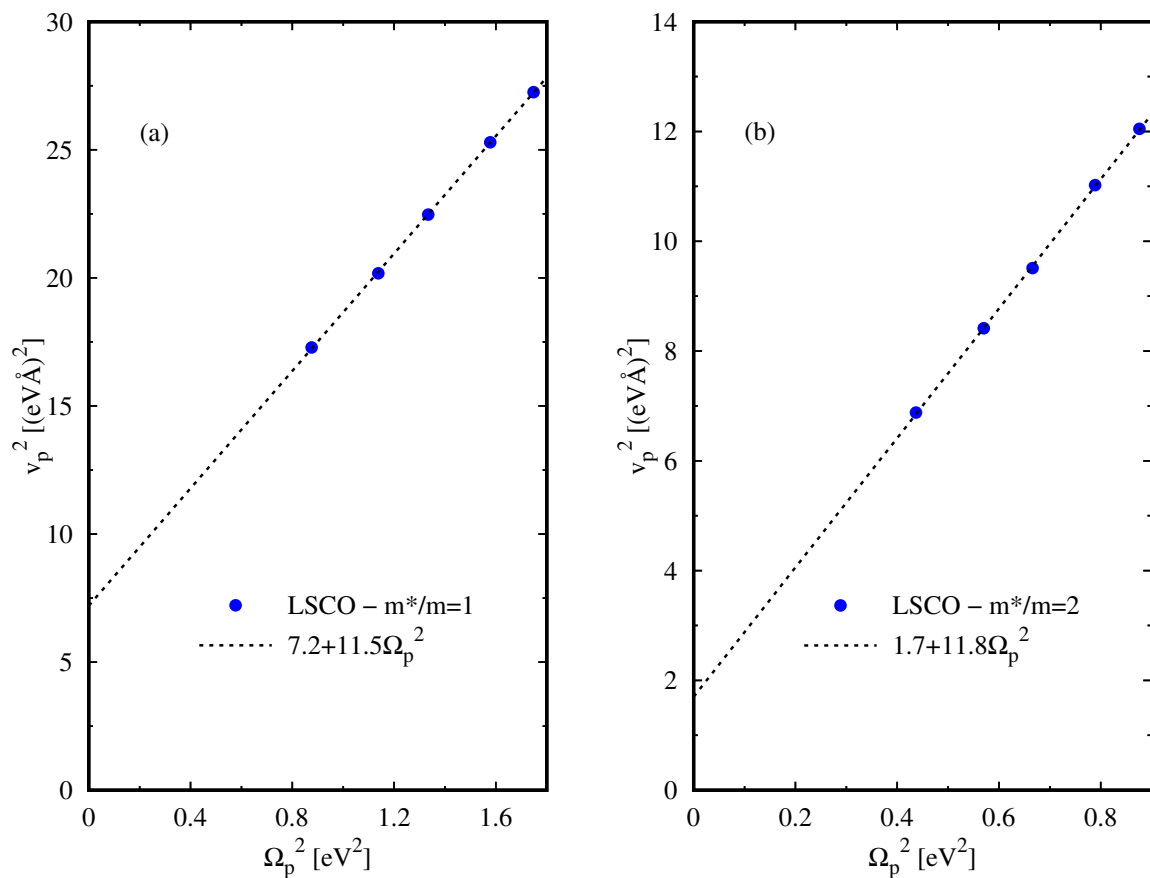


Figura .10: Cuadrado de la velocidad de los plasmones versus cuadrado de la frecuencia de plasma óptica calculado con los parámetros de banda de LSCO para (a) $m^*/m = 1.0$ y (b) $m^*/m = 2.0$.

También se observa en la Fig. .10 que el ajuste lineal arroja una pendiente similar para ambas masas efectivas, lo que se espera de la Ec. 27 ya que sólo depende del parámetro de red d . De hecho, es posible extraer el valor de d de cada ajuste, lo que arroja $d = 6.78\text{\AA}$ y $d = 6.87\text{\AA}$ para $m^*/m = 1.0$ y $m^*/m = 2.0$, respectivamente, los cuales son cercanos al valor experimental de 6.55\AA . Esto muestra la potencia del modelo de Fetter ya que dichos valores de d fueron extraídos sólo con la información de los parámetros de banda y de la interacción coulombiana, sin ningún otro tipo de información de sistema.

Finalmente, las ordenadas al origen difieren en alrededor de un factor 4, lo que

se espera de ese término al depender de $\langle v_F \rangle^2$ cuando se pasa de $m^*/m = 1.0$ a $m^*/m = 2.0$. De esta manera, RPA apoya el uso del término que depende de $\langle v_F \rangle$ en el modelo de Fetter.

REFERENCIAS

- [1] H. Kamerlingh-Onnes, “Further Experiments with Liquid Helium. On the Change of Electric Resistance of Pure Metals at Very Low Temperatures, etc. IV. The Resistance of Pure Mercury at Helium Temperatures”, *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden* **122**, 122 (1911).
- [2] W. Meissner y R. Ochsenfeld, “Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit”, *Naturwissenschaften* **21**, 787 (1933).
- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer, “Theory of Superconductivity”, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [4] J. G. Bednorz y K. A. Müller, “Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system”, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **64**, 189 (1986).
- [5] P. J. Ray - <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=46193149>, CC BY-SA 4.0.
- [6] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida y J. Zaanen, “From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides”, *Nature* **518**, 179 (2015).
- [7] C. Proust y L. Taillefer, “The Remarkable Underlying Ground States of Cuprate Superconductors”, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **10**, 409 (2019).
- [8] N. E. Hussey, “Phenomenology of the normal state in-plane transport properties of high- T_c cuprates”, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 123201 (2008).
- [9] R. Comin, A. Frano, M. M. Yee, Y. Yoshida, H. Eisaki, E. Schierle, E. Weschke, R. Sutarto, F. He, A. Soumyanarayanan, Y. He, M. Le Tacon, I. S. Elfimov, J. E. Hoffman, G. A. Sawatzky, B. Keimer y A. Damascelli, “Charge Order Driven by Fermi-Arc Instability in $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ ”, *Science* **343**, 390 (2014).
- [10] P. W. Anderson, “The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity”, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [11] F. C. Zhang y T. M. Rice, “Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides”, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
- [12] D. Grecu, “Plasma Frequency of the Electron Gas in Layered Structures”, *Phys. Rev. B* **8**, 1958 (1973).
- [13] A. L. Fetter, “Electrodynamics of a layered electron gas. II. Periodic array”, *Annals of Physics* **88**, 1 (1974).
- [14] D. Grecu, “Self-consistent field approximation for the plasma frequencies of an electron gas in a layered thin film”, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **8**, 2627 (1975).

- [15] F. Gabriele, C. Castellani y L. Benfatto, “Generalized plasma waves in layered superconductors: A unified approach”, *Phys. Rev. Res.* **4**, 023112 (2022).
- [16] C. Boyd, L. Yeo y P. W. Phillips, “Probing the bulk plasmon continuum of layered materials through electron energy loss spectroscopy in a reflection geometry”, *Phys. Rev. B* **106**, 155152 (2022).
- [17] V. Z. Kresin y H. Morawitz, *Phys. Rev. B* **37**, 7854 (1988).
- [18] I. Bozovic, “Plasmons in cuprate superconductors”, *Phys. Rev. B* **42**, 1969 (1990).
- [19] J. Fink, M. Knupfer, S. Atzkern y M. S. Golden, “Electronic correlations in solids, studied using electron energy-loss spectroscopy”, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* **117-118**, 287 (2001).
- [20] M. Hepting, L. Chaix, E. W. Huang, R. Fumagalli, Y. Y. Peng, B. Moritz, K. Kummer, N. B. Brookes, W. C. Lee, M. Hashimoto, T. Sarkar, J.-F. He, C. R. Rotundu, Y. S. Lee, R. L. Greene, L. Braicovich, G. Ghiringhelli, Z. X. Shen, T. P. Devereaux y W. S. Lee, “Three-dimensional collective charge excitations in electron-doped copper oxide superconductors”, *Nature* **563**, 374 (2018).
- [21] J. Lin, J. Yuan, K. Jin, Z. Yin, G. Li, K.-J. Zhou, X. Lu, M. Dantz, T. Schmitt, H. Ding, H. Guo, M. P. M. Dean y X. Liu, “Doping evolution of the charge excitations and electron correlations in electron-doped superconducting $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ”, *npj Quantum Materials* **5**, 4 (2020).
- [22] A. Nag, M. Zhu, M. Bejas, J. Li, H. C. Robarts, H. Yamase, A. N. Petsch, D. Song, H. Eisaki, A. C. Walters, M. García-Fernández, A. Greco, S. M. Hayden y K.-J. Zhou, “Detection of Acoustic Plasmons in Hole-Doped Lanthanum and Bismuth Cuprate Superconductors Using Resonant Inelastic X-Ray Scattering”, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 257002 (2020).
- [23] A. Singh, H. Y. Huang, C. Lane, J. H. Li, J. Okamoto, S. Komiya, R. S. Markiewicz, A. Bansil, T. K. Lee, A. Fujimori, C. T. Chen y D. J. Huang, “Acoustic plasmons and conducting carriers in hole-doped cuprate superconductors”, *Phys. Rev. B* **105**, 235105 (2022).
- [24] K. Ishii, M. Fujita, T. Sasaki, M. Minola, G. Dellea, C. Mazzoli, K. Kummer, G. Ghiringhelli, L. Braicovich, T. Tohyama, K. Tsutsumi, K. Sato, R. Kajimoto, K. Ikeuchi, K. Yamada, M. Yoshida, M. Kurooka y J. Mizuki, “High-energy spin and charge excitations in electron-doped copper oxide superconductors”, *Nat. Commun.* **5**, 3714 (2014).
- [25] J. Zaanen, “Planckian dissipation, minimal viscosity and the transport in cuprate strange metals”, *SciPost Phys.* **6**, 061 (2019).
- [26] S. A. Hartnoll y A. P. Mackenzie, “Colloquium: Planckian dissipation in metals”, *Rev. Mod. Phys.* **94**, 041002 (2022).
- [27] D. Chowdhury, A. Georges, O. Parcollet y S. Sachdev, “Sachdev-ye-kitaev models and beyond: Window into non-fermi liquids”, *Rev. Mod. Phys.* **94**, 035004 (2022).
- [28] A. Romero-Bermúdez, A. Krikun, K. Schalm y J. Zaanen, “Anomalous attenuation of plasmons in strange metals and holography”, *Phys. Rev. B* **99**, 235149 (2019).

- [29] M. Mitrano, A. A. Husain, S. Vig, A. Kogar, M. S. Rak, S. I. Rubeck, J. Schmalian, B. Uchoa, J. Schneeloch, R. Zhong, G. D. Gu y P. Abbamonte, “Anomalous density fluctuations in a strange metal”, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **115**, 5392 (2018).
- [30] A. A. Husain, M. Mitrano, M. S. Rak, S. Rubeck, B. Uchoa, K. March, C. Dwyer, J. Schneeloch, R. Zhong, G. D. Gu y P. Abbamonte, “Crossover of Charge Fluctuations across the Strange Metal Phase Diagram”, *Phys. Rev. X* **9**, 041062 (2019).
- [31] J. Fink, “Comment on: Crossover of Charge Fluctuations across the Strange Metal Phase Diagram”, arXiv: 2103.10268, [cond-mat.supr-con].
- [32] A. A. Husain, M. Mitrano, M. S. Rak, S. Rubeck, B. Uchoa, K. March, C. Dwyer, J. Schneeloch, R. Zhong, G. D. Gu y P. Abbamonte, “Reply to arXiv:2103.10268 ‘Comment on “Crossover of Charge Fluctuations across the Strange Metal Phase Diagram”’”, arXiv: 2106.03301, [cond-mat.supr-con].
- [33] A. Greco, H. Yamase y M. Bejas, “Plasmon excitations in layered high- T_c cuprates”, *Phys. Rev. B* **94**, 075139 (2016).
- [34] M. Hepting, M. Bejas, A. Nag, H. Yamase, N. Coppola, D. Betto, C. Falter, M. Garcia-Fernandez, S. Agrestini, K.-J. Zhou, M. Minola, C. Sacco, L. Maritato, P. Orgiani, H. I. Wei, K. M. Shen, D. G. Schlom, A. Galdi, A. Greco y B. Keimer, “Gapped Collective Charge Excitations and Interlayer Hopping in Cuprate Superconductors”, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 047001 (2022).
- [35] A. Foussats, A. Greco, C. Repetto, O. P. Zandron y O. S. Zandron, “Connection between the slave-particle and x-operator path-integral representations. A new perturbative approach”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **33**, 5849 (2000).
- [36] A. Foussats y A. Greco, “Large- N expansion based on the Hubbard operator path integral representation and its application to the t - J model”, *Phys. Rev. B* **65**, 195107 (2002).
- [37] A. Foussats y A. Greco, “Large- N expansion based on the Hubbard operator path integral representation and its application to the t - J model. II. The case for finite J ”, *Phys. Rev. B* **70**, 205123 (2004).
- [38] M. Bejas, A. Greco y H. Yamase, “Possible charge instabilities in two-dimensional doped Mott insulators”, *Phys. Rev. B* **86**, 224509 (2012).
- [39] T. Thio, T. R. Thurston, N. W. Preyer, P. J. Picone, M. A. Kastner, H. P. Jenssen, D. R. Gabbe, C. Y. Chen, R. J. Birgeneau y A. Aharony, “Antisymmetric exchange and its influence on the magnetic structure and conductivity of La_2CuO_4 ”, *Phys. Rev. B* **38**, 905 (1988).
- [40] J. C. Le Guillou y E. Ragoucy, “Slave-particle quantization and sum rules in the t - J model”, *Phys. Rev. B* **52**, 2403 (1995).
- [41] L. Faddeev y R. Jackiw, “Hamiltonian reduction of unconstrained and constrained systems”, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1692 (1988).
- [42] K. Sundermeyer, *Constrained Dynamics* (Springer Berlin, Heidelberg, 1982).
- [43] J. Govaerts, “Hamiltonian reduction of first-order actions”, *Int. J. Mod. Phys. A* **05**, 3625 (1990).

- [44] O. P. Zandron, *La teoría de campos desde la geometría diferencial. Sus técnicas y aplicaciones* (UNR Editora, 2022).
- [45] L. D. Faddeev, “The Feynman integral for singular Lagrangians”, *Theor. Math. Phys.* **1**, 1 (1969).
- [46] P. Senjanovich, “Path integral quantization of field theories with second-class constraints”, *Ann. Phys.* **100**, 227 (1976).
- [47] O. K. Andersen, A. I. Lichtenstein, O. Jepsen y F. Paulsen, “LDA energy bands, low-energy hamiltonians, t' , t'' , $t_{\perp}(k)$, and J_{\perp} ”, *J. Phys. Chem. Solids* **56**, 1573 (1995).
- [48] M. Bejas, H. Yamase y A. Greco, “Dual structure in the charge excitation spectrum of electron-doped cuprates”, *Phys. Rev. B* **96**, 214513 (2017).
- [49] P. Prelovšek y P. Horsch, “Electron-energy loss spectra and plasmon resonance in cuprates”, *Phys. Rev. B* **60**, R3735 (1999).
- [50] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Third Edition (Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000).
- [51] M. Bejas, A. Greco y H. Yamase, “Strong particle-hole asymmetry of charge instabilities in doped Mott insulators”, *New J. Phys.* **16**, 123002 (2014).
- [52] S. Chakravarty, C. Nayak y S. Tewari, “Angle-resolved photoemission spectra in the cuprates from the d -density wave theory”, *Phys. Rev. B* **68**, 100504(R) (2003).
- [53] S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr y C. Nayak, “Hidden order in the cuprates”, *Phys. Rev. B* **63**, 094503 (2001).
- [54] P. W. Leung, “Signatures of a staggered-flux phase in the $t - J$ model with two holes on a 32-site lattice”, *Phys. Rev. B* **62**, R6112 (2000).
- [55] X. Dong y E. Gull, “Short-range charge fluctuations in the two-dimensional Hubbard model”, *Phys. Rev. B* **101**, 195115 (2020).
- [56] A. Macridin, M. Jarrell y T. Maier, “Absence of the d -density-wave state from the two-dimensional Hubbard model”, *Phys. Rev. B* **70**, 113105 (2004).
- [57] C. Honerkamp y P. A. Lee, “Staggered Flux Vortices and the Superconducting Transition in the Layered Cuprates”, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 177002 (2004).
- [58] P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, “Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity”, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
- [59] M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria, J. C. Campuzano, T. Yokoya, T. Takeuchi, T. Takahashi, T. Mochiku, K. Kadowaki, P. Guptasarma, and D. G. Hinks, “Destruction of the Fermi surface in underdoped high- T_c superconductors”, *Nature* **392**, 157 (1998).
- [60] A. Damascelli, Z. Hussain y Z. X. Shen, “Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
- [61] A. Greco, “Evidence for Two Competing Order Parameters in Underdoped Cuprate Superconductors from a Model Analysis of Fermi-Arc Effects”, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 217001 (2009).

- [62] A. Greco and M. Bejas, “Short-ranged and short-lived charge-density-wave order and pseudogap features in underdoped cuprate superconductors”, *Phys. Rev. B* **83**, 212503 (2011).
- [63] A. Greco y M. Bejas, “Pseudogap in cuprates driven by d -wave flux-phase order proximity effects: a theoretical analysis from Raman and ARPES experiments”, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 485701 (2014).
- [64] A. Gourgout, A. Ataei, M.-E. Boulanger, S. Badoux, S. Thériault, D. Graf, J.-S. Zhou, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, N. Doiron-Leyraud y L. Taillefer, “Effect of pressure on the pseudogap and charge density wave phases of the cuprate Nd-LSCO probed by thermopower measurements”, *Phys. Rev. Research* **3**, 023066 (2021).
- [65] D. J. Scalapino, “A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1383 (2012).
- [66] N. P. Armitage, P. Fournier y R. L. Greene, “Progress and perspectives on electron-doped cuprates”, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2421 (2010).
- [67] H. Takagi, B. Batlogg, H. L. Kao, J. Kwo, R. J. Cava, J. J. Krajewski y W. F. Peck Jr., “Systematic evolution of temperature-dependent resistivity in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2975 (1992).
- [68] L. J. P. Ament, M. van Veenendaal, T. P. Devereaux, J. P. Hill y J. van den Brink, “Resonant inelastic x-ray scattering studies of elementary excitations”, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 705 (2011).
- [69] D. N. Basov y T. Timusk, “Electrodynamics of high- T_c superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 721 (2005).
- [70] M. Suzuki, “Hall coefficients and optical properties of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ single-crystal thin films”, *Phys. Rev. B* **39**, 2312 (1989).
- [71] S. Uchida, T. Ido, H. Takagi, T. Arima, Y. Tokura y S. Tajima, “Optical spectra of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$: Effect of carrier doping on the electronic structure of the CuO_2 plane”, *Phys. Rev. B* **43**, 7942 (1991).
- [72] L. J. P. Ament, M. van Veenendaal, T. P. Devereaux, J. P. Hill y J. van den Brink, “Resonant inelastic x-ray scattering studies of elementary excitations”, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 705 (2011).
- [73] M. Le Tacon, G. Ghiringhelli, J. Chaloupka, M. M. Sala, V. Hinkov, M. W. Haverkort, M. Minola, M. Bakr, K. J. Zhou, S. Blanco-Canosa, C. Monney, Y. T. Song, G. L. Sun, C. T. Lin, G. M. De Luca, M. Salluzzo, G. Khaliullin, T. Schmitt, L. Braicovich y B. Keimer, “Intense paramagnon excitations in a large family of high-temperature superconductors”, *Nature Physics* **7**, 725 (2011).
- [74] M. P. M. Dean, G. Dellea, R. S. Springell, F. Yakhov-Harris, K. Kummer, N. B. Brookes, X. Liu, Y.-J. Sun, J. Strle, T. Schmitt, L. Braicovich, G. Ghiringhelli, I. Bozovic y J. P. Hill, “Persistence of magnetic excitations in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ from the undoped insulator to the heavily overdoped non-superconducting metal”, *Nat. Mater.* **12**, 1019 (2013).

- [75] V. Bisogni, L. Simonelli, L. J. P. Ament, F. Forte, M. M. Sala, M. Minola, S. Huotari, J. van den Brink, G. Ghiringhelli, N. B. Brookes y L. Braicovich, “Bimagnon studies in cuprates with resonant inelastic x-ray scattering at the O K edge. I. Assessment on La_2CuO_4 and comparison with the excitation at Cu L_3 and Cu K edges”, *Phys. Rev. B* **85**, 214527 (2012).
- [76] V. Bisogni, M. M. Sala, A. Bendounan, N. B. Brookes, G. Ghiringhelli y L. Braicovich, “Bimagnon studies in cuprates with resonant inelastic x-ray scattering at the O K edge. II. Doping effect in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ”, *Phys. Rev. B* **85**, 214528 (2012).
- [77] Y. J. Kim, J. P. Hill, C. A. Burns, S. Wakimoto, R. J. Birgeneau, D. Casa, T. Gog y C. T. Venkataraman, “Resonant Inelastic X-Ray Scattering Study of Charge Excitations in La_2CuO_4 ”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 177003 (2002).
- [78] K. Ishii, K. Tsutsui, Y. Endoh, T. Tohyama, S. Maekawa, M. Hoesch, K. Kuzushita, M. Tsubota, T. Inami, J. Mizuki, Y. Murakami y K. Yamada, “Momentum Dependence of Charge Excitations in the Electron-Doped Superconductor $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$: A Resonant Inelastic X-Ray Scattering Study”, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 207003 (2005).
- [79] K. Ishii, K. Tsutsui, Y. Endoh, T. Tohyama, K. Kuzushita, T. Inami, K. Ohwada, S. Maekawa, T. Masui, S. Tajima, Y. Murakami y J. Mizuki, “Mott Gap Excitations in Twin-Free $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ($T_c = 93\text{K}$) Studied by Resonant Inelastic X-Ray Scattering”, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 187002 (2005).
- [80] S. Wakimoto, Y.-J. Kim, H. Kim, H. Zhang, T. Gog y R. J. Birgeneau, “Resonant inelastic x-ray scattering study of overdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ”, *Phys. Rev. B* **72**, 224508 (2005).
- [81] D. S. Ellis, J. Kim, H. Zhang, J. P. Hill, G. Gu, S. Komiya, D. C. Y. Ando, T. Gog e Y.-J. Kim, “Electronic structure of doped lanthanum cuprates studied with resonant inelastic x-ray scattering”, *Phys. Rev. B* **83**, 075120 (2011).
- [82] S. Wakimoto, K. Ishii, H. Kimura, K. Ikeuchi, M. Yoshida, T. Adachi, D. Casa, M. Fujita, Y. Fukunaga, T. Gog, Y. Koike, J. Mizuki y K. Yamada, “Resonant inelastic x-ray scattering study of intraband charge excitations in hole-doped high- T_c cuprates”, *Phys. Rev. B* **87**, 104511 (2013).
- [83] G. Dellea, M. Minola, A. Galdi, D. Di Castro, C. Aruta, N. B. Brookes, C. J. Jia, C. Mazzoli, M. Moretti Sala, B. Moritz, P. Orgiani, D. G. Schlom, A. Tebano, G. Balestrino, L. Braicovich, T. P. Devereaux, L. Maritato y G. Ghiringhelli, “Spin and charge excitations in artificial hole- and electron-doped infinite layer cuprate superconductors”, *Phys. Rev. B* **96**, 115117 (2017).
- [84] H. Miao, J. Lorenzana, G. Seibold y M. P. M. Dean, “High-temperature charge density wave correlations in $\text{La}_{1.875}\text{Ba}_{0.125}\text{CuO}_4$ without spin-charge locking”, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **114**, 12430 (2017).
- [85] W. S. Lee, J. J. Lee, E. A. Nowadnick, S. Gerber, W. Tabis, S. W. Huang, V. N. Strocov, E. M. Motoyama, G. Yu, B. Moritz, H. Y. Huang, R. P. Wang, Y. B. Huang, W. B. Wu, C. T. Chen, D. J. Huang, M. Greven, T. Schmitt, Z. X. Shen y T. P. Devereaux, “Asymmetry of collective excitations in electron- and hole-doped cuprate superconductors”, *Nat. Phys.* **10**, 883 (2014).

- [86] A. Greco, H. Yamase y M. Bejas, “Origin of high-energy charge excitations observed by resonant inelastic X-ray scattering in cuprate superconductors”, *Commun. Phys.* **2**, 3 (2019).
- [87] A. A. Zabolotnykh y V. A. Volkov, “Plasmons and magnetoplasmons in partially bounded two-layer electron systems”, *Phys. Rev. B* **102**, 165306 (2020).
- [88] G. F. Giuliani y G. Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid* (Cambridge University Press, 2005).
- [89] J. Ruvalds, “Plasmons and high-temperature superconductivity in alloys of copper oxides”, *Phys. Rev. B* **35**, 8869 (1987).
- [90] É. A. Pashitskii and V. I. Pentegov, “A high energy “kink” in the quasiparticle spectrum as evidence of the importance of charge density fluctuations in the mechanism for high temperature superconductivity in cuprates”, *Low Temp. Phys.* **36**, 716 (2010).
- [91] M. Apostol, “Plasma frequency of the electron gas in layered structures”, *Z. Physik B* **22**, 13 (1975).
- [92] R. S. Markiewicz, S. Sahrakorpi, M. Lindroos, Hsin Lin, and A. Bansil, “One-band tight-binding model parametrization of the high- T_c cuprates including the effect of k_z dispersion”, *Phys. Rev. B* **72**, 054519 (2005).
- [93] A. Greco, H. Yamase y M. Bejas, “Close inspection of plasmon excitations in cuprate superconductors”, *Phys. Rev. B* **102**, 024509 (2020).
- [94] V. G. Grigoryan, G. Paasch y S.-L. Drechsler, “Determination of an effective one-electron spectrum from the plasmon dispersion of nearly optimally doped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ”, *Phys. Rev. B* **60**, 1340 (1999).
- [95] J. Schultz, A. Lubk, F. Jerzembeck, N. Kikugawa, M. Knupfer, D. Wolf, B. Büchner y J. Fink, “Optical and acoustic plasmons in the layered material Sr_2RuO_4 ”, arXiv: 2401.05880, [cond-mat.str-el].
- [96] A. A. Husain, E. W. Huang, M. Mitrano, M. S. Rak, S. I. Rubeck, X. Guo, H. Yang, C. Sow, Y. Maeno, B. Uchoa, T. C. Chiang, P. E. Batson, P. W. Phillips y P. Abbamonte, “Pines’ demon observed as a 3D acoustic plasmon in Sr_2RuO_4 ”, *Nature* **621**, 66 (2023).
- [97] A. Ino, C. Kim, M. Nakamura, T. Yoshida, T. Mizokawa, A. Fujimori, Z.-X. Shen, T. Kakeshita, H. Eisaki y S. Uchida, “Doping-dependent evolution of the electronic structure of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ in the superconducting and metallic phases”, *Phys. Rev. B* **65**, 094504 (2002).
- [98] H. Das y T. Saha-Dasgupta, “Electronic structure of La_2CuO_4 in the T and T' crystal structure using dynamical mean field theory”, *Phys. Rev. B* **79**, 134522 (2009).
- [99] C. Weber, K. Haule y G. Kotliar, “Apical oxygens and correlation strength in electron- and hole-doped copper oxides”, *Phys. Rev. B* **82**, 125107 (2010).
- [100] C. Weber, K. Haule y G. Kotliar, “Strength of correlations in electron- and hole-doped cuprates”, *Nat. Phys.* **6**, 574 (2010).
- [101] A. Kobayashi, A. Tsuruta, T. Matsuura e Y. Kuroda, “The electron–hole asymmetry in the cuprate superconductors”, *Physica C* **388-389**, 39 (2003).

- [102] K. Segawa, M. Kofu, S.-H. Lee, I. Tsukada, H. Hiraka, M. Fujita, S. Chang, K. Yamada e Y. Ando, “Zero-doping state and electron–hole asymmetry in an ambipolar cuprate”, *Nat. Phys.* **6**, 579 (2010).
- [103] R. Mizuno, M. Ochi y K. Kuroki, “DMFT Study on the Electron–hole Asymmetry of the Electron Correlation Strength in the High T_c Cuprates”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 114706 (2017).
- [104] D. Ogura y K. Kuroki, “Asymmetry of superconductivity in hole- and electron-doped cuprates: Explanation within two-particle self-consistent analysis for the three-band model”, *Phys. Rev. B* **92**, 144511 (2015).
- [105] L. de’ Medici, X. Wang, M. Capone y A. J. Millis, “Correlation strength, gaps, and particle-hole asymmetry in high- T_c cuprates: A dynamical mean field study of the three-band copper-oxide model”, *Phys. Rev. B* **80**, 054501 (2009).
- [106] H. Hafermann, E. G. C. P. van Loon, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein y O. Parcollet, “Collective charge excitations of strongly correlated electrons, vertex corrections, and gauge invariance”, *Phys. Rev. B* **90**, 235105 (2014).
- [107] D. Stricker, J. Mravlje, C. Berthod, R. Fittipaldi, A. Vecchione, A. Georges y D. van der Marel, “Optical Response of Sr_2RuO_4 Reveals Universal Fermi-Liquid Scaling and Quasiparticles Beyond Landau Theory”, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 087404 (2014).
- [108] A. Hunter, S. Beck, E. Cappelli, F. Margot, M. Straub, Y. Alexanian, G. Gatti, M. D. Watson, T. K. Kim, C. Cacho, N. C. Plumb, M. Shi, M. Radović, D. A. Sokolov, A. P. Mackenzie, M. Zingl, J. Mravlje, A. Georges, F. Baumberger y A. Tamai, “Fate of Quasiparticles at High Temperature in the Correlated Metal Sr_2RuO_4 ”, *Phys. Rev. Lett.* **131**, 236502 (2023).
- [109] B. Michon, C. Berthod, C. W. Rischau, A. Ataei, L. Chen, S. Komiya, S. Ono, L. Taillefer, D. van der Marel y A. Georges, “Reconciling scaling of the optical conductivity of cuprate superconductors with Planckian resistivity and specific heat”, *Nat. Commun.* **14**, 3033 (2023).
- [110] G. Khaliullin y P. Horsch, “Theory of the density fluctuation spectrum of strongly correlated electrons”, *Phys. Rev. B* **54**, R9600 (1996).
- [111] M. Zafur y H. Yamase, “Spin and bond-charge excitation spectra in correlated electron systems near an antiferromagnetic phaset”, *Phys. Rev. B* **109**, 245127 (2024).
- [112] M. Hepting, T. D. Boyko, V. Zimmermann, M. Bejas, Y. E. Suyolcu, P. Puphal, R. J. Green, L. Zinni, J. Kim, D. Casa, M. H. Upton, D. Wong, S. C., M. Bartkowiak, K. Habicht, E. Pomjakushina, G. Cristiani, G. Logvenov, M. Minola, H. Yamase, A. Greco y B. Keimer, “Evolution of plasmon excitations across the phase diagram of the cuprate superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ”, *Phys. Rev. B* **107**, 214516 (2023).
- [113] K. Takada, H. Sakurai, E. Takayama-Muromachi, F. Izumi, R. A. Dilanian y T. Sasaki, “Superconductivity in two-dimensional CoO_2 layers”, *Nature* **422**, 53 (2003).
- [114] R. H. McKenzie, “Similarities Between Organic and Cuprate Superconductors”, *Science* **278**, 820 (1997).

- [115] B. R. Ortiz, L. C. Gomes, J. R. Morey, M. Winiarski, M. Bordelon, J. S. Mangum, I. W. H. Oswald, J. A. Rodriguez-Rivera, J. R. Neilson, S. D. Wilson, E. Ertekin, T. M. McQueen y E. S. Toberer, “New kagome prototype materials: discovery of KV_3Sb_5 , RbV_3Sb_5 , and CsV_3Sb_5 ”, *Phys. Rev. Materials* **3**, 094407 (2019).
- [116] V. I. Anisimov, D. Bukhvalov y T. M. Rice, “Electronic structure of possible nickelate analogs to the cuprates”, *Phys. Rev. B* **59**, 7901 (1999).
- [117] D. Li, K. Lee, B. Y. Wang, M. Osada, S. Crossley, H. R. Lee, Y. Cui, Y. Hikita y H. Y. Hwang, “Superconductivity in an infinite-layer nickelate”, *Nature* **572**, 624 (2019).
- [118] M. Osada, B. Y. Wang, B. H. Goodge, K. Lee, H. Yoon, K. Sakuma, D. Li, M. Miura, L. F. Kourkoutis y H. Y. Hwang, “A Superconducting Praseodymium Nickelate with Infinite Layer Structure”, *Nano Letters* **20**, 5735 (2020).
- [119] M. Osada, B. Y. Wang, B. H. Goodge, S. P. Harvey, K. Lee, D. Li, L. F. Kourkoutis y H. Y. Hwang, “Nickelate Superconductivity without Rare-Earth Magnetism: $(La,Sr)NiO_2$ ”, *Advanced Materials* **33**, 2104083 (2021).
- [120] M. R. Norman, “Entering the nickel age of superconductivity”, *Physics* **13**, 85 (2020).
- [121] W. E. Pickett, “The dawn of the nickel age of superconductivity”, *Nature Reviews Physics* **3**, 7 (2021).
- [122] H. Sun, M. Huo, X. Hu, J. Li, Z. Liu, Y. Han, L. Tang, Z. Mao, P. Yang, B. Wang, J. Cheng, D.-X. Yao, G.-M. Zhang y M. Wang, “Signatures of superconductivity near 80 K in a nickelate under high pressure”, *Nature* **621**, 493 (2023).
- [123] M. Mitrano, S. Johnston, Y.-J. Kim y M. P. M. Dean, “Exploring Quantum Materials with Resonant Inelastic X-Ray Scattering”, arXiv: 2410.13062, [cond-mat.str-el].
- [124] A. S. Botana y M. R. Norman, “Similarities and Differences between $LaNiO_2$ and $CaCuO_2$ and Implications for Superconductivity”, *Phys. Rev. X* **10**, 011024 (2020).
- [125] J. Karp, A. Hampel y A. J. Millis, “Superconductivity and antiferromagnetism in $NdNiO_2$ and $CaCuO_2$: A cluster DMFT study”, *Phys. Rev. B* **105**, 205131 (2022).
- [126] B. H. Goodge, D. Li, K. Lee, M. Osada, B. Y. Wang, G. A. Sawatzky, H. Y. Hwang y L. F. Kourkoutis, “Doping evolution of the Mott-Hubbard landscape in infinite-layer nickelates”, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **118**, e2007683118 (2021).
- [127] M. Rossi, H. Lu, A. Nag, D. Li, M. Osada, K. Lee, B. Y. Wang, S. Agrestini, M. Garcia-Fernandez, J. J. Kas, Y.-D. Chuang, Z. X. Shen, H. Y. Hwang, B. Moritz, K.-J. Zhou, T. P. Devereaux y W. S. Lee, “Orbital and spin character of doped carriers in infinite-layer nickelates”, *Phys. Rev. B* **104**, L220505 (2021).
- [128] D. Li, B. Y. Wang, K. Lee, S. P. Harvey, M. Osada, B. H. Goodge, L. F. Kourkoutis y H. Y. Hwang, “Superconducting Dome in $Nd_{1-x}Sr_xNiO_2$ Infinite Layer Films”, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 027001 (2020).

- [129] D. Sanchez-Manzano, V. Humbert, A. Gutiérrez-Llorente, D. Zhang, J. Santamaria, M. Bibes, L. Iglesias y Javier E. Villegas, “Purely two-dimensional vortex matter in infinite-layer nickelates”, arXiv: 2410.14341, [cond-mat.supr-con].
- [130] K. Lee, B. Y. Wang, M. Osada, B. H. Goodge, T. C. Wang, Y. Lee, S. Harvey, W. J. Kim, Y. Yu, C. Murthy, S. Raghu, L. F. Kourkoutis y H. Y. Hwang, “Character of the “normal state” of the nickelate superconductors”, arXiv: 2203.02580, [cond-mat.supr-con].
- [131] R. A. Ortiz, P. Puphal, M. Klett, F. Hotz, R. K. Kremer, H. Trepka, M. Hemmida, H.-A. K. von Nidda, M. Isobe, R. Khasanov, H. Luetkens, P. Hansmann, B. Keimer, T. Schäfer y M. Hepting, “Magnetic correlations in infinite-layer nickelates: An experimental and theoretical multimethod study”, *Phys. Rev. Research* **4**, 023093 (2022).
- [132] Y. Cui, C. Li, Q. Li, X. Zhu, Z. Hu, Y.-f. Yang, J. Zhang, R. Yu, H.-H. Wen y W. Yu, “NMR Evidence of Antiferromagnetic Spin Fluctuations in $\text{Nd}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{NiO}_2$ ”, *Chinese Physics Letters* **38**, 067401, 067401 (2021).
- [133] D. Zhao, Y. B. Zhou, Y. Fu, L. Wang, X. F. Zhou, H. Cheng, J. Li, D. W. Song, S. J. Li, B. L. Kang, L. X. Zheng, L. P. Nie, Z. M. Wu, M. Shan, F. H. Yu, J. J. Ying, S. M. Wang, J. W. Mei, T. Wu y X. H. Chen, “Intrinsic Spin Susceptibility and Pseudogaplike Behavior in Infinite-Layer LaNiO_2 ”, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 197001 (2021).
- [134] H. Chen, A. Hampel, J. Karp, F. Lechermann y A. J. Millis, “Dynamical Mean Field Studies of Infinite Layer Nickelates: Physics Results and Methodological Implications”, *Front. Phys.* **10**, 835942 (2022).
- [135] J. Karp, A. Hampel y A. J. Millis, “Dependence of DFT + DMFT results on the construction of the correlated orbitals”, *Phys. Rev. B* **103**, 195101 (2021).
- [136] K. Held, L. Si, P. Worm, O. Janson, R. Arita, Z. Zhong, J. M. Tomczak y M. Kitatani, “Phase Diagram of Nickelate Superconductors Calculated by Dynamical Vertex Approximation”, *Frontiers in Physics* **9**, 810394 (2022).
- [137] M. Kitatani, L. Si, O. Janson, R. Arita, Z. Zhong y K. Held, “Nickelate superconductors—a renaissance of the one-band Hubbard model”, *npj Quantum Materials* **5**, 59 (2020).
- [138] J. Karp, A. S. Botana, M. R. Norman, H. Park, M. Zingl y A. Millis, “Many-Body Electronic Structure of NdNiO_2 and CaCuO_2 ”, *Phys. Rev. X* **10**, 021061 (2020).
- [139] A. Kreisel, B. M. Andersen, A. T. Rømer, I. M. Eremin y F. Lechermann, “Superconducting Instabilities in Strongly Correlated Infinite-Layer Nickelates”, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 077002 (2022).
- [140] F. Lechermann, “Multiorbital Processes Rule the $\text{Nd}_{1-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_2$ Normal State”, *Phys. Rev. X* **10**, 041002 (2020).
- [141] T. Plienbumrung, M. Daghofer, M. Schmid y A. M. Oleś, “Screening in a two-band model for superconducting infinite-layer nickelate”, *Phys. Rev. B* **106**, 134504 (2022).

- [142] C. Peng, H.-C. Jiang, B. Moritz, T. P. Devereaux y C. Jia, “Charge order and superconductivity in a minimal two-band model for infinite-layer nickelates”, *Phys. Rev. B* **108**, 245115 (2023).
- [143] C. T. Parzyck, Y. Wu, L. Bhatt, M. Kang, Z. Arthur, T. M. Pedersen, R. Sutarto, S. Fan, J. Pelliciani, V. Bisogni, G. Herranz, A. B. Georgescu, D. G. Hawthorn, L. F. Kourkoutis, D. A. Muller, D. G. Schlom y K. M. Shen, “Superconductivity in the parent infinite-layer nickelate NdNiO_2 ”, arXiv: 2410.02007, [cond-mat.supr-con].
- [144] H. Sahib, F. Rosa, A. Raji, G. Merzoni, G. Ghiringhelli, M. Salluzzo, A. Gloter, N. Viart y D. Preziosi, “Superconductivity in PrNiO_2 infinite-layer nickelates”, arXiv: 2410.16147, [cond-mat.supr-con].
- [145] M. Hepting, D. Li, C. J. Jia, H. Lu, E. Paris, Y. Tseng, X. Feng, M. Osada, E. Been, Y. Hikita, Y.-D. Chuang, Z. Hussain, K. J. Zhou, A. Nag, M. Garcia-Fernandez, M. Rossi, H. Y. Huang, D. J. Huang, Z. X. Shen, T. Schmitt, H. Y. Hwang, B. Moritz, J. Zaanen, T. P. Devereaux y W. S. Lee, “Electronic structure of the parent compound of superconducting infinite-layer nickelates”, *Nat. Mater.* **19**, 381 (2020).
- [146] Y. Nomura y R. Arita, “Superconductivity in infinite-layer nickelates”, *Reports on Progress in Physics* **85**, 052501 (2022).
- [147] R. Cervasio, L. Tomarchio, M. Verseils, J.-B. Brubach, S. Macis, S. Zeng, A. Ariando, P. Roy, S. Lupi, “Optical Properties of Superconducting $\text{Nd}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{NiO}_2$ Nickelate”, arXiv: 2203.16986v1, [cond-mat.supr-con].
- [148] H. Lu, M. Rossi, A. Nag, M. Osada, D. F. Li, K. Lee, B. Y. Wang, M. Garcia-Fernandez, S. Agrestini, Z. X. Shen, E. M. Been, B. Moritz, T. P. Devereaux, J. Zaanen, H. Y. Hwang, K.-J. Zhou y W. S. Lee, “Magnetic excitations in infinite-layer nickelates”, *Science* **373**, 213 (2021).
- [149] C. C. Tam, J. Choi, X. Ding, S. Agrestini, A. Nag, M. Wu, B. Huang, H. Luo, P. Gao, M. García-Fernández, L. Qiao y K.-J. Zhou, “Charge density waves in infinite-layer NdNiO_2 nickelates”, *Nat. Mater.* **21**, 1116 (2022).
- [150] G. Krieger, L. Martinelli, S. Zeng, L. E. Chow, K. Kummer, R. Arpaia, M. Moretti Sala, N. B. Brookes, A. Ariando, N. Viart, M. Salluzzo, G. Ghiringhelli y D. Preziosi, “Charge and Spin Order Dichotomy in NdNiO_2 Driven by the Capping Layer”, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 027002 (2022).
- [151] M. Rossi, M. Osada, J. Choi, S. Agrestini, D. Jost, Y. Lee, H. Lu, B. Y. Wang, K. Lee, A. Nag, Y.-D. Chuang, C.-T. Kuo, S.-J. Lee, B. Moritz, T. P. Devereaux, Z.-X. Shen, J.-S. Lee, K.-J. Zhou, H. Y. Hwang y W.-S. Lee, “A broken translational symmetry state in an infinite-layer nickelate”, *Nat. Phys.* **18**, 869 (2022).
- [152] A. Bill, H. Morawitz y V. Z. Kresin, “Electronic collective modes and superconductivity in layered conductors”, *Phys. Rev. B* **68**, 144519 (2003).
- [153] P. Monthoux, A. V. Balatsky y D. Pines, “Toward a theory of high-temperature superconductivity in the antiferromagnetically correlated cuprate oxides”, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3448 (1991).

- [154] P. Monthoux y D. Pines, “YBa₂Cu₃O₇: A nearly antiferromagnetic Fermi liquid”, *Phys. Rev. B* **47**, 6069 (1993).
- [155] P. W. Anderson, “Is There Glue in Cuprate Superconductors?”, *Science* **316**, 1705 (2007).
- [156] T. A. Maier, D. Poilblanc y D. J. Scalapino, “Dynamics of the Pairing Interaction in the Hubbard and t - J Models of High-Temperature Superconductors”, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 237001 (2008).
- [157] F. Becca, M. Tarquini, M. Grilli y C. Di Castro, “Charge-density waves and superconductivity as an alternative to phase separation in the infinite- U Hubbard-Holstein model”, *Phys. Rev. B* **54**, 12443 (1996).
- [158] G. Kotliar y J. Liu, “Superconducting Instabilities in the Large- U Limit of a Generalized Hubbard Model”, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1784 (1988).
- [159] D. J. Scalapino, E. Loh Jr. y J. E. Hirsch, “Fermi-surface instabilities and superconducting d -wave pairing”, *Phys. Rev. B* **35**, 6697 (1987).
- [160] G. Rickayzen, *Green’s Functions and Condensed Matter* (Academic Press, 1980).
- [161] N. Bulut y D. J. Scalapino, “ $d_{x^2-y^2}$ symmetry and the pairing mechanism”, *Phys. Rev. B* **54**, 14971 (1996).
- [162] L. F. Feiner, J. H. Jefferson y R. Raimondi, “Intrasublattice Hopping in the Extended t - J Model and T_c^{\max} in the Cuprates”, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4939 (1996).
- [163] A. T. Hoang y P. Thalmeier, “Coherent potential approximation for charge ordering in the extended Hubbard model”, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 6639 (2002).
- [164] N. M. Plakida y V. S. Oudovenko, “Kinematic spin-fluctuation mechanism of high-temperature superconductivity”, *J. Exp. Theor. Phys.* **119**, 554 (2014).
- [165] R. Zeyher y A. Greco, “Effective interactions and superconductivity in the t - J model in the large- N limit”, *Eur. Phys. J. B* **6**, 473 (1998).
- [166] S. Zhou y Z. Wang, “Pseudogap, competing order, and the coexistence of staggered flux and d -wave pairing in high-temperature superconductors”, *Phys. Rev. B* **70**, 020501(R) (2004).
- [167] A. Abanov, Y.-M. Wu, Y. Wang y A. V. Chubukov, “Superconductivity above a quantum critical point in a metal: Gap closing versus gap filling, Fermi arcs, and pseudogap behavior”, *Phys. Rev. B* **99**, 180506(R) (2019).
- [168] H. Yamase, M. Bejas y A. Greco, “Doping dependence of d -wave bond-charge excitations in electron-doped cuprates”, *Phys. Rev. B* **99**, 014513 (2019).
- [169] M. Bejas, V. Zimmermann, D. Betto, T. D. Boyko, R. J. Green, T. Loew, N. B. Brookes, G. Cristiani, G. Logvenov, M. Minola, B. Keimer, H. Yamase, A. Greco y M. Hepting, “Plasmon dispersion in bilayer cuprate superconductors”, *Phys. Rev. B* **109**, 144516 (2024).
- [170] J. Yuan, Q. Chen, K. Jiang, Z. Feng, Z. Lin, H. Yu, G. He, J. Zhang, X. Jiang, X. Zhang, Y. Shi, Y. Zhang, M. Qin, Z. G. Cheng, N. Tamura, Y.-f. Yang, T. Xiang, J. Hu, I. Takeuchi, K. Jin y Z. Zhao, “Scaling of the strange-metal scattering in unconventional superconductors”, *Nature* **602**, 431 (2022).

- [171] A. Sawa, M. Kawasaki, H. Takagi e Y. Tokura, “Electron-doped superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$: Preparation of thin films and modified doping range for superconductivity”, *Phys. Rev. B* **66**, 014531 (2002).
- [172] B. Moritz, F. Schmitt, W. Meevasana, S. Johnston, E. M. Motoyama, M. Greven, D. H. Lu, C. Kim, R. T. Scalettar y Z.-X. Shen, “Effect of strong correlations on the high energy anomaly in hole- and electron-doped high- T_c superconductors”, *New J. Phys.* **11**, 093020 (2009).
- [173] J. Zaanen, G. A. Sawatzky y J. W. Allen, “Band gaps and electronic structure of transition-metal compounds”, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 418 (1985).
- [174] V. J. Emery, “Theory of high- T_c superconductivity in oxides”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [175] C. Varma, S. Schmitt-Rink y E. Abrahams, “Charge transfer excitations and superconductivity in “ionic” metals”, *Solid State Commun.* **62**, 681 (1987).
- [176] C. T. Chen, F. Sette, Y. Ma, M. S. Hybertsen, E. B. Stechel, W. M. C. Foulkes, M. Schulter, S.-W. Cheong, A. S. Cooper, J. L. W. Rupp, B. Batlogg, Y. L. Soo, Z. H. Ming, A. Krol e Y. H. Kao, “Electronic states in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ probed by soft-x-ray absorption”, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 104 (1991).
- [177] J. Fink, N. Nücker, E. Pellegrin, H. Romberg, M. Alexander y M. Knupfer, “Electron energy-loss and x-ray absorption spectroscopy of cuprate superconductors and related compounds”, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* **66**, 395 (1994).
- [178] E. Pellegrin, N. Nücker, J. Fink, S. L. Molodtsov, A. Gutiérrez, E. Navas, O. Strebel, Z. Hu, M. Domke, G. Kaindl, S. Uchida, Y. Nakamura, J. Markl, M. Klauda, G. Saemann-Ischenko, A. Krol, J. L. Peng, Z. Y. Li y R. L. Greene, “Orbital character of states at the Fermi level in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $R_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ($R=\text{Nd,Sm}$)”, *Phys. Rev. B* **47**, 3354 (1993).
- [179] K.-J. Zhou, A. Walters, M. Garcia-Fernandez, T. Rice, M. Hand, A. Nag, J. Li, S. Agrestini, P. Garland, H. Wang, S. Alcock, I. Nistea, B. Nutter, N. Rubies, G. Knap, M. Gaughran, F. Yuan, P. Chang, J. Emmins y G. Howell, “I21: an advanced high-resolution resonant inelastic X-ray scattering beamline at Diamond Light Source”, *J. Synchrotron Radiat.* **29**, 563 (2022).