

# 强关联 Hubbard 模型的统计问题\*

吴深尚·纪哲锐

(中山大学物理学系, 广州 510275)

**摘 要** 用 Slave-Fermion 方案研究低温小掺杂下强关联 Hubbard 模型的磁性和反铁磁序的问题. 比较 Slave-Boson 方案与 Slave-Fermion 方案, 表明二种方案的结果大致相同, 但用 Slave-Fermion 方案能更好地解释低温出现的反铁磁长程序.

**关键词** 高温超导体, Slave-Fermion 方案, 统计性

**分类号** O414.2

自从发现高温超导体 (HTSC) 以来, 有大量的理论工作研究 Hubbard 模型和  $t-J$  模型. 由于 HTSC 材料的电子出现强关联, 因此, Zou 和 Anderson<sup>[1]</sup> 首先提出强关联电子的自旋自由度与电荷自由度分离. 这二种自由度的元激发准粒子称为 Spinon 和 Holon. 关于 Spinon 和 Holon 的统计性自然成为研究 HTSC 超导机制时首先必须考虑的问题. 到目前为止, 在平均场理论框架上已出现了三种不同的统计方案: ① Slave-Boson 方案. 由 Anderson 提出, 他认为自旋元激发 Spinon 服从费米统计, 而电荷的元激发 Holon 服从 Bose 统计. ② Slave-Fermion 方案<sup>[2,3]</sup>. 这种方案假定 Spinon 服从 Bose 统计而 Holon 服从费米统计. ③ 分数统计. 这种方案认为 Spinon 与 Holon 均服从分数统计, 所以亦称它们为 anyon.

目前多数人认为 anyon 理论不可能对 THSC 有用. 对另外两种统计方案的适用性还没有达到一致的看法. 本文利用 Slave-Fermion 方案计算低温小掺杂下的磁化率, 研究 AFMLRO, 求出 Spinon 的低温凝聚将出现 Spiral 反铁磁序、Spinon 的最低能量以及 gap 方程. 所得结果与我们已有的工作<sup>[4,5]</sup> 比较, 明显地看出在研究低温小掺杂系统的磁性问题时 Slave-Fermion 方案更为适用.

## 1 Slave-Fermion 方案

在 2D 平方格点上引入大  $U$  Hubbard 模型, 哈密顿量为

$$H = -t \sum_{\langle i-j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + hc) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

引入辅助场算子  $e_i$ ,  $d_i$ ,  $s_{i\sigma}$  来表示电子算符  $c_{i\sigma}$ , 它们的关系为

收稿日期: 1994-04-07

\* 中山大学高等学术研究中心资助项目

$$c_{i\sigma}^+ = e_i s_{i\sigma}^+ + \text{sgn}(\sigma) d_i^+ s_{i\sigma} \quad (2)$$

Slave-Fermion 方案将 Holon 场  $e_i$  当做 Fermion, 将自旋 1/2 的 Spinon 当做 Boson, 它们满足如下的对易关系及约束条件:

$$\begin{aligned} [e_i, e_j]_+ &= \delta_{ij}, & [s_{i\sigma}, s_{j\sigma'}]_- &= \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \\ e_i^+ e_i + d_i^+ d_i + \sum_{\sigma} s_{i\sigma}^+ s_{i\sigma} &= 1 \end{aligned} \quad (3)$$

在大  $U$  ( $U \geq 5t$ ) 及小掺杂 ( $\delta \leq t/U$ ) 下, 我们得到有效哈密顿量

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} = & -t \sum_{i,j} (e_i e_j^+ s_{i\sigma}^+ s_{j\sigma} + \text{h.c.}) - (J/2) \sum_{i,j,\sigma} (s_{i\uparrow}^+ s_{j\uparrow}^+ s_{j\downarrow} s_{i\downarrow} + s_{i\uparrow}^+ s_{j\downarrow} s_{j\uparrow}^+ s_{i\downarrow}) \\ & - \mu_e \sum_i e_i^+ e_i - \mu_s \sum_{i\sigma} s_{i\sigma}^+ s_{i\sigma} \end{aligned} \quad (4)$$

(4) 式中  $\mu_e, \mu_s$  分别是 Holon 及 Spinon 的化学势, 是依照 Yoshioka 的方式引入, 使约束条件 (3) 式得以满足.

将  $H_{\text{eff}}$  变换到动量空间并做平均场近似.

则  $H_{\text{eff}} = H_{\text{holon}} + H_{\text{spinon}}$

$$H_{\text{holon}} = \sum_k (t \gamma_k \rho_{\delta}^B - \mu_e) e_k^+ e_k$$

上式中  $\gamma_k \equiv \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}$ ,  $\sum_{\delta}$  表示对最近邻格点求和.

$$\rho_{\delta}^B \equiv \sum_{\sigma} \langle s_{i\sigma}^+ s_{i+\delta\sigma} \rangle$$

我们仅考虑  $\rho_x^B = \rho_y^B = \rho^B$ , 因此 Holon 部分的哈密顿量成为

$$H_{\text{holon}} = \sum_k (\epsilon_k - \mu_e) e_k^+ e_k, \quad \epsilon_k \equiv 2t \rho^B (\cos k_x + \cos k_y)$$

Spinon 部分的有效哈密顿量为

$$H_{\text{spinon}} = \sum_{k\sigma} (\omega_k - \mu_s) s_{k\sigma}^+ s_{k\sigma} + H_J \quad (5)$$

这里  $\omega_k = 2t \rho^F (\cos k_x + \cos k_y)$ ,  $\rho_{\delta}^F \equiv \langle e' e_{i+\delta} \rangle$ ,  $\rho_x^F = \rho_y^F = \rho^F$ ,

$$H_J = -\frac{J}{2} \frac{1}{N} \sum_{k,k',q\sigma} [s_{k+q\sigma}^+ s_{k'-q\sigma}^+ (s_{k'\sigma} s_{k\sigma} - s_{k'\sigma} s_{k\sigma})]$$

对  $H_J$  做 RPA 计算, 结果表明  $H_J$  项的自旋交换作用部分代表自旋涨落将 Spinon 的能量重整, 使原有的能带加宽. 重整后的能量  $\tilde{\omega}_k$  及加宽的能带分别为

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_k &= \omega_k - (ZJ/N) \sum_{k'} \gamma_{R-k'} f_{k'}, & \tilde{D} &= -\tilde{\omega}_k / \gamma_k \\ f_k &= \{\exp \beta (\tilde{\omega}_k - \mu_s) - 1\}^{-1} = \langle s_k^+ s_R \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

上面的结果与我们已有的 Slave-Boson 方案的结果<sup>[4]</sup>定性一致, 但现本文中 Spinon 的分布函数已是 Bose 分布函数, 因此  $T \rightarrow 0$  时将出现 Spinon 的 Bose 凝聚, 预期将有新的物理结果.

## 2 反铁磁涨落

为分析系统的磁性, 我们用 Slave-Fermion 方案求静态磁化率. 依标准方法, 引入一静外磁场

$$\vec{B} = \vec{e}_z B \cos(\vec{q} \cdot \vec{r})$$

其中  $\vec{e}$  是沿  $z$  方向的单位矢量,  $\vec{q}, \vec{r}$  是  $x-y$  平面的矢量. 系统的 Zeeman 能量为

$$H_{\text{zee}} = (B/2) [M_z(q) + M_z(-q)]$$

$$M_z(q) = (1/2) g_L \mu_B \sum_k (s_{k-q}^+ s_{k+} - s_{k-q}^- s_{k+})$$

上式中  $g_L, M_B$  分别是 Lande 因子和 Bohr 磁矩. 经过 RPA 计算我们得到静态磁化率:

$$\chi(q) = \chi_0(q) / [1 + \frac{4\tilde{J}(q)}{g_L^2 \mu_B^2} \chi_0(q)] \quad (7)$$

(6) 式的  $\tilde{J}(q) = (1/2) J \gamma_q = J [\cos q_x + \cos q_y]$ ,  $\chi_0(q)$  是 RPA Pauli 磁化率.

$$\chi_0(q) = \frac{g_L^2 \mu_B^2}{4N} \sum_k \frac{f_k - f_{k-q}}{\tilde{\omega}_{k-q} - \tilde{\omega}_k} \quad (8)$$

(7) 式和 (8) 式与 Slave-Boson 方案的结果<sup>[4,5]</sup>形式一致. 两者的差别也仅在于不同的分布函数. 因此从 (7) 式出发两种统计方案都能由分母为零的条件求出磁相变温度.

按照文 [5] 的分析, 在  $T \rightarrow 0$  的极限下,  $\chi(Q) \sim \ln^2(T/\tilde{D})$ ,  $Q = (\pi, \pi)$  恰好是 AF nesting 矢量, 也即是说系统在温度趋于零时处于 AF nect 态. 但是我们考虑 Slave-Fermion 方案中 Spinon 是 Boson, 在  $T \rightarrow 0$  时必定出现凝聚. 是否形成 nect 态? 其最低能量如何求? 我们发现 Slave-Fermion 方案能够回答.

### 3 Spinon 的 Bose 凝聚

考虑低温 Spinon 发生 Bose 凝聚, 依照 Flensberg 对 Spinon 哈密顿量做平均场处理: 引入 3 个序参量, 它们分别是:

$$\rho_\delta^F = \langle e_i^+ e_{i+\delta} \rangle, \quad \rho_\delta^B \equiv \sum_\sigma \langle s_{i\sigma}^+ s_{i+\delta, \sigma} \rangle$$

$$\Delta_k = - (i/\sqrt{2}) \sum_\delta \Delta_\delta \sin \vec{k} \cdot \vec{\delta}, \quad \Delta_\delta \equiv (J/\sqrt{2}) \langle s_{i+} s_{i+\delta-} - s_{i-} s_{i+\delta+} \rangle$$

只讨论  $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_0$  的情况. 则由 (5) 式的哈密顿量可以得到有效哈密顿量如下:

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k\sigma} (\tilde{\omega}_k - \tilde{\mu}_s) s_{k\sigma}^+ s_{k\sigma} - \sum_k (\Delta_k^* s_{k+}^+ s_{-k+} + \Delta_k s_{k+} s_{-k+}) \quad (9)$$

式中  $\tilde{\omega}_k = [2t\rho^F + (J/2)\rho^B] (\cos k_x + \cos k_y)$  与 (6) 式是一致的.

$$\tilde{\mu}_s = (J/4)(1-\delta) - \lambda$$

我们容易将 (9) 式对角化. 做如下的 Bogoliubov 变换

$$s_{k+} = u_k \gamma_{k+} + v_k \gamma_{-k+}^+, \quad s_{-k+} = v_k \gamma_{k+}^+ + u_k \gamma_{-k+}$$

得到 Spinon 的能谱为

$$E_k = [(\tilde{\omega}_k - \tilde{\mu}_s)^2 - |\Delta_k|^2]^{1/2} \quad (10)$$

从 (10) 式可求出 Spinon 的最低能量为

$$E_y = 2\sqrt{2}\Delta_0 [(t_B - \tilde{\mu}_s)^2 / 2\Delta_0^2 - 1]^{1/2} \quad (11)$$

其中  $t_B \equiv 2t\rho^F + (J/2)\rho^B$ . 当  $E_k$  取最小值  $E_k$  时, Spinon 凝聚于动量为  $K_0 = \pm(\pi/2, \pi/2)$  的态. 这是典型的 AF spiral 序, 而不是 nect 态. 这一结果与 Nagaosa<sup>[6]</sup>的结论一致.

### 4 化学势与掺杂的关系及 gap 方程

由上节, 我们得到一组自洽的方法, 它们分别为

$$\delta = \langle e_i^+ e_i \rangle = (1/2N) \sum_k n_F(\epsilon_k - \mu_c) \quad (12)$$

$$\rho^F = \langle e_{i+\delta}^+ e_i \rangle = (1/2N) \sum_k (\cos k_x + \cos k_y) n_F(\epsilon_k - \mu_c) \quad (13)$$

$$\rho^B = \sum_\sigma \langle s_{i\sigma}^+ s_{i+\delta\sigma} \rangle = (1/2N) \sum_k (\cos k_x + \cos k_y) \{ [\tilde{\omega}_k - \tilde{\mu}_i]^2 / E_k \} (2n_B(E_k) + 1) - 1 \} \quad (14)$$

$$1 - \delta = (1/N) \sum_k \{ [\tilde{\omega}_k - \tilde{\mu}_i] / E_k \} (2n_B(E_k) + 1) - 1 \} \quad (15)$$

以及 gap 方程

$$1 = (J/2N) \sum_k \{ (\sin k_x + \sin k_y)^2 / E_k \} (2n_B(E_k) + 1) \quad (16)$$

上面的  $n_F(\epsilon_k - \mu_c)$  代表费米分布函数,  $n_B(E_k)$  代表 Bose 分布函数.

在这些方程中自由参数有 3 个, 它们是  $t$ ,  $J$ ,  $\delta$ . 由 (12) (13) 式联立可以求出  $\mu_c$  与  $\delta$  的关系, 以及  $\rho^F$  与  $\delta$  的关系. 由 (14) (15) 式可求出  $\tilde{\mu}_i$  与  $\delta$  的关系以及  $\rho^B$  与  $\delta$  的关系. 然后由  $\tilde{\omega}_k = [2t\rho^F + (J/2)\rho^B](\cos k_x + \cos k_y)$  可以求出 Spinon 能带宽度  $\tilde{D}$ . 详细的数值计算以及进一步的讨论我们将另文给出.

## 5 结 论

我们用 Slave-Fermion 方案在平均场近似下对大 U Hubbard 模型的磁性进行研究, 求出系统的静态磁化率以及低温下 Spinon 凝聚成 RVB pair 的 gap 方程.

定性分析说明随着温度的升高, 系统由反铁磁相转变为顺磁相. 我们得到 Spinon 凝聚的最低能量及与之相应的 AFMLRO, 这是一种 Spiral 态而不是 Nee1 态. 这一点比文献 [5] 用 Slave-Boson 方案所得的结果更进一步并与 Nagaosa 的结论一致. 有关 Spiral 态的进一步详细研究我们将另文发表.

## 参 考 文 献

- 1 Zou Z, Anderson P W. Neutral fermion, charge-boson excitations in the Resonating-Valence-Bond state and superconductivity in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ -based compounds. Phys Rev B, 1988, 37: 627
- 2 Flensberg K, Hedegard P, Pedersen M B. Resonating-Valence-Bond state with fermionic charges and bosonic spins: Mean-Field theory. Phys Rev B, 1989, 40: 850
- 3 Yoshioka D. Slave-Fermion mean field theory of the Hubbard model. J Phys Soc JPN, 1989, 58: 1516
- 4 胡连, 吴深尚, 华小明. 大 U Hubbard 模型的中性费米液描述. 中山大学学报 (自然科学版), 1989, 28 (3): 105
- 5 Hu L, Ji Z R, Shi L P, et al. Spin fluctuations and holon dynamics in large-U Hubbard Model. J Phys Comsens Mattwe, 1991, 3: 2347
- 6 Nagaosa N, Lee P A. Quantum disordered spiral state. Phys Rev B, 1992, 45: 10719

## The Statistics of Strongly Correlated Hubbard Model

*Wu Shenshang\* Ji Zherui*

**Abstract** The statistics of the Spinons and Holons in strongly correlated 2D—Hubbard model is studied. The static magnetic susceptibility and the gap equation of Spinons are calculated by using the slave—Fermion method. We compare the results between slave—Fermion and slave—Boson, and believe that the slave—Fermion method can better explain the AFMLR of  $MT_c$ SC in low temperature.

**Keywords**  $HT_c$ SC, Slave—Fermion method, Slave—Boson method, statistics

---

\* Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275