

Hubbard模型的holon涨落和铁磁相变*

余建华

胡连 吴深尚

(香港中文大学物理系)

(广州中山大学物理学系)

摘要 从Zou-Anderson有效哈密顿量出发,考虑holon涨落效应,导出一铁磁相互作用。用RPA计算Spinon静态磁化率,在 $T=0$ 及 $U=\infty$ 情形,求出当掺杂 $\delta > \delta_c \approx 0.55$ 时,铁磁相不稳定。

关键词 Zou-Anderson哈密顿量, holon涨落, 铁磁相变

最近由于高温超导电(HTSC)的研究,人们又重新对Hubbard模型的铁磁相的稳定性问题产生兴趣^[1~4]。Hubbard模型的铁磁相的研究始于六十年代。在巡游电子的图象下, D. R. Penn用平均场近似得出:当同一格点上的库仑斥力 U 大于或等于电子的能带宽度时,单带Hubbard模型的基态处于铁磁相^[5]。而Y. Nagaoka则严格的证明了在 $U \rightarrow \infty$ 极限,仅有一个空穴的Hubbard模型的基态的总自旋最大^[6],这个基态我们称之为Nagaoka态。然而有些工作显示^[1~3],即使在 $U = \infty$ 的极限下,如果系统存在两个或两个以上的空穴,则Nagaoka态将不再稳定。因为真正有意义的问题是在热力学极限下,仍具有一定比例的空穴的多体系统的性质。所以在有限空穴的情形下,研究Hubbard模型的铁磁相的稳定性很有必要。

为了研究Hubbard模型的铁磁相,本文从Zou-Anderson的Spinon-holon有效哈密顿量出发^[7],在近半满填充情形下,考虑holon涨落效应,由此导出一铁磁相互作用,其耦合常数 $J' \propto \delta t$ 。同时,得到在小 δ 及 $U \gg t$ 时,Hubbard模型等价于一 $t-J-J'$ 模型。

1 有效哈密顿量

首先从二维Hubbard模型出发

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

Zou-Anderson引入以下算符变换

$$C_{i\sigma}^\dagger = e_i S_{i\sigma}^\dagger + \text{sgn}(\sigma) d_i^\dagger S_{i\sigma} \quad (2)$$

上式中 e_i 和 d_i 分别为holon及doublon,它们是带电相反及自旋为零的玻色场。 $S_{i\sigma}$ 为自旋1/2的中性费米场。算符 e, d, S 满足以下约束条件

本文1991年2月27日收到

• 香港中文大学科研基金、广州中山大学科研基金和国家自然科学基金资助项目

$$e_i^+ e_i + d_i^+ d_i + \sum_{\sigma} S_{i\sigma}^+ S_{i\sigma} = 1 \quad (3)$$

由以上变换, Zou-Anderson导出以下的有效哈密顿量

$$H_{ZA} = H_0 - J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_{i\uparrow}^+ S_{j\downarrow}^+ S_{i\downarrow} S_{j\uparrow} + S_{i\uparrow}^+ S_{i\uparrow} S_{j\downarrow}^+ S_{j\downarrow} \right) \quad (4)$$

这里, $H_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (e_i^+ e_j^+ - d_i^+ d_j^+) S_{i\sigma}^+ S_{j\sigma} + U \sum_i d_i^+ d_i + \mu \sum_i (e_i^+ e_i - d_i^+ d_i - 1)$

下面对玻色场 e_i , d_i 取平均及对spinon场做富氏变换

$$e_i \rightarrow \langle e_i \rangle = \sqrt{\delta}$$

$$d_i \rightarrow \langle d_i \rangle = 0$$

及
$$S_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{i}} \eta_{\sigma} S_{\vec{k}, \sigma}$$

$$\eta_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \eta_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

再应用方程(3), 导出 H_{ZA} 在 \vec{k} 表象的形式为

$$H_{ZA} = H_t + H_J + \text{const} \quad (5)$$

$$H_t = \sum_{\vec{k}, \sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) S_{\vec{k}, \sigma}^+ S_{\vec{k}, \sigma} \quad (6)$$

$$H_J = - \left(\frac{ZJ}{2N} \right) \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma} \gamma_{\vec{q}} \left[S_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^+ S_{\vec{k}', -\vec{q}, \sigma}^+ (S_{\vec{k}', \sigma} S_{\vec{k}, \sigma} - S_{\vec{k}', \sigma} S_{\vec{k}, \sigma}) \right] \quad (7)$$

式中, $\epsilon_{\vec{k}} = -Z \delta t \gamma_{\vec{k}}, \quad \gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{Z} \sum_{\hat{\delta}} e^{i\vec{k} \cdot \hat{\delta}}$

Z 为近邻数, $\sum_{\hat{\delta}}$ 表示对所有方向上的单位矢量求和。

下面推导由于holon涨落所引起的铁磁相互作用。首先从(4)式中的 spinon-holon 散射项出发

$$H_t = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} e_i^+ e_j^+ S_{i\sigma}^+ S_{j\sigma} \quad (8)$$

取

$$e_i = \langle e_i \rangle + B_i = \sqrt{\delta} + B_i$$

其中 B_i 表示格点 i 上holon场相对于其平均场值 $\langle e_i \rangle = \sqrt{\delta}$ 的涨落算子。由此 H_t 可表为

$$H_t = -\delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} S_{i\sigma}^+ S_{j\sigma} + H_{tl} \quad (9)$$

H_{tl} 表示涨落部份

$$H_{tl} = -\sqrt{\delta} t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(S_{i\sigma}^+ S_{j\sigma} B_i + h.c. \right) - t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} S_{i\sigma}^+ S_{j\sigma} B_i B_j^+ \quad (10)$$

在 δ 较小时, 假设基态

$$|\Omega\rangle = \prod_i |0\rangle_i \quad (11)$$

holon涨落场算子的作用为

$$B_i |0\rangle_i = 0, \quad B_i^\dagger |0\rangle_i = |1\rangle_i$$

我们可以忽略(10)式的二级涨落部份,用二阶微扰公式求出holon涨落对有效哈密顿量的贡献为

$$H_{J'} = \sum_n \frac{\langle \Omega | H_{ij}^1 | n \rangle \langle n | H_{ij}^1 | \Omega \rangle}{E_0 - E_n} \quad (12)$$

中间态 $|n\rangle$ 表示比初态多一个holon的状态.假设上式中的三格点相互作用项对铁磁相的产生的原因可以忽略,在此近似下可将 $H_{J'}$ 写为

$$H_{J'} = \sum_n \frac{\sum_{\langle ij \rangle, \sigma, \sigma'} \delta t^2 \langle \Omega | S_{i, \sigma}^\dagger S_{i, \sigma'} B_i | n \rangle \langle n | S_{i, \sigma}^\dagger S_{j, \sigma} B_j^\dagger | \Omega \rangle}{E_0 - E_n} \quad (13)$$

由于 $B_i^\dagger |\Omega\rangle$ 相当于在 j 格点上产生一个holon,假设holon的能量约为 $-4t$,即假设此holon产生在负能带上.这样我们看到 $E_0 - E_n$ 将大于零,也就是说假设的真空态不稳定.为了包含holon涨落效应,必须在等效哈密顿量中加入 $H_{J'}$ 的贡献.由上述考虑以及

$$B_i |n\rangle = |\Omega\rangle$$

求得

$$H_{J'} = J' \sum_{\langle ij \rangle, \sigma, \sigma'} S_{i, \sigma}^\dagger S_{j, \sigma'}^\dagger S_{i, \sigma} S_{j, \sigma'} + J' \sum_{i, \sigma} S_{i, \sigma}^\dagger S_{i, \sigma} \quad (14)$$

$$J' = \delta t/4$$

注意上述考虑和(1)式中 t 项的符号无关,关键在于假定holon产生在负能带上.(14)式的第二项为对角项,它仅对spinon化学势有贡献.可以证明,在近半满填充下,第一项为一铁磁相互作用.在近半满填充及大 U 情况下,方程(3)可以近似写为

$$\sum_{\sigma} S_{i, \sigma}^\dagger S_{i, \sigma} = 1 \quad (15)$$

从这一近似条件,可以导出如下的spinon算子和Pauli矩阵的关系

$$\sigma_i^z = S_{i, \uparrow}^\dagger S_{i, \uparrow} - S_{i, \downarrow}^\dagger S_{i, \downarrow}$$

$$\sigma_i^+ = 2S_{i, \uparrow}^\dagger S_{i, \downarrow}$$

$$\sigma_i^- = 2S_{i, \downarrow}^\dagger S_{i, \uparrow}$$

由此可以证明

$$H_{J'} = -\frac{J'}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + \text{const}) \quad (16)$$

在小 δ 及 $U \gg t$ 情形,考虑到holon涨落效应,有效哈密顿量为

$$H_{t-J-J'} = H_t + H_J + H_{J'} + (\text{化学势项}) \quad (17)$$

H_t 和 H_J 的 \vec{k} 表象形式如(6)式和(7)式, $H_{J'}$ 的 \vec{k} 表象形式由付氏变换求出为

$$H_{J'} = \frac{Z\delta t}{4N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma'} \gamma_{\vec{q}} S_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^+ S_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma'}^+ S_{\vec{k}, \sigma'} S_{\vec{k}', \sigma} \quad (18)$$

2 Spinon自能修正及化学势

以下用Hartree-Fork近似去计算Spinon算子的运动方程

$$\begin{aligned} \partial_t S_{\vec{p}, \rho} &= [H_{t-J-J'}, S_{\vec{p}, \rho}] \\ &= -(\epsilon_{\vec{p}, \rho} - \mu') S_{\vec{p}, \rho} + \frac{ZJ}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \gamma(\vec{q}) S_{\vec{k}+\vec{q}, \rho}^+ (S_{\vec{p}, \rho}^- S_{\vec{p}+\vec{q}, \rho}^- \\ &\quad - S_{\vec{k}, \rho} S_{\vec{p}+\vec{q}, \rho}^-) + \frac{Z\delta t}{4N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma} \gamma(\vec{q}) S_{\vec{k}, \sigma}^+ S_{\vec{k}, \rho} S_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma} \quad (19) \end{aligned}$$

对上式做Hartree-Fork近似, 取方程式右边的 $\vec{q} = 0$ 及 $\vec{k} = \vec{p}$ 分别求得化学势及Spinon的修正。(19)式可表示为

$$\partial_t S_{\vec{p}, \rho} = -(\tilde{\epsilon}_{\vec{p}} - \mu) S_{\vec{p}, \rho} \quad (20)$$

$$\tilde{\epsilon}_{\vec{p}} = \epsilon_{\vec{p}} - \frac{ZJ_{eff}}{N} \sum_{\vec{p}'} \gamma(\vec{p} - \vec{p}') f_{\vec{p}'} \quad (21)$$

这里, $f_{\vec{p}'} = 1 / [e^{\beta(\epsilon_{\vec{p}'} - \mu)} + 1]$, $J_{eff} = J - \delta t$

μ 为Spinon的有效化学势。(21)式右边费米分布中的Spinon能量为裸能量, 用对数态密度近似计算Spinon自能修正

$$\rho(\epsilon) = \frac{2}{\pi^2 D} \ln \left| \frac{4D}{\epsilon} \right| \quad (22)$$

这里 $2D = 8\delta t$ 表示裸的Spinon能带宽度。由计算得

$$\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} = -\bar{D} \gamma_{\vec{k}} \quad (23)$$

此处 $2\bar{D}$ 表示Spinon重整化后的能带宽度。

$$\bar{D} = D + 2J_{eff} P \quad (24)$$

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{\pi^2} \left\{ \left[1 + 4 \ln 2 - \left| \frac{\mu}{D} \right|^2 \left(1 + \ln \left| \frac{4D}{\mu} \right|^2 \right) \right] \right. \\ &\quad + \frac{2}{D'^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \left[\ln \frac{4D'}{|\mu'|} \left(\left(|\mu'| + \frac{1}{2k} \right) - e^{-2k(D' - |\mu'|)} \left(D' + \frac{1}{2k} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{2k} \left(1 - e^{2k|\mu'|} Ei(-2k|\mu'|) - \ln 4D' \left(e^{-2k(D' - \mu')} \left(D' + \frac{1}{2k} \right) - \left(\mu' + \frac{1}{2k} \right) \right) \right) \right] \right. \\ &\quad \left. - e^{2k\mu'} \left(\frac{1 - C - \ln 2k}{2k} - \ln |\mu'| \left(e^{2k|\mu'|} \left(|\mu'| - \frac{1}{2k} \right) + \frac{1}{2k} \right) \right) \right\} \end{aligned}$$

$$-|\mu'| \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} \left(\sum_{j=1}^i \frac{l(l-1)\dots(l-j+1)}{(2k|\mu'|)^i} - \sum_{j=1}^{i+1} \frac{(l+1)l(l-1)\dots(l-j+1)}{(2k|\mu'|)^{i+1}} \right) \right) \} \quad (25)$$

上式中 $\mu' = \frac{1}{2} \beta \mu$, $D' = \frac{1}{2} \beta D$, $C = 0.577215$ 是欧拉常数, E_i 为爱里函数

$$\frac{-E_i(-v)}{v} = \int_1^{\infty} e^{-vx} \ln x \, dx \quad (v > 0)$$

以上的自能修正显含 Spinon 化学势 μ , 而在大 U 时, μ 由方程

$$1 - \delta = \sum_{\sigma} S_{i\sigma}^+ S_{i\sigma} \quad (26)$$

决定. 求 μ 时, 用重整化的费米分布函数及态密度, 这样就有

$$1 - \delta = \int d\tilde{\epsilon} N(\tilde{\epsilon}) \left[2 / (e^{\beta(\tilde{\epsilon} - \mu)} + 1) \right] \quad (27)$$

其中, $N(\tilde{\epsilon}) = \frac{2}{\pi D^2} \ln \left| \frac{4\tilde{D}}{\tilde{\epsilon}} \right|$

将 (27) 式的积分做低温展开, 直接计算求得

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{2}{\pi D^2} \int_{-\tilde{D}-\mu}^{\tilde{D}-\mu} \ln \left| \frac{4\tilde{D}}{x+\mu} \right| \tanh \frac{\beta x}{2} \, dx \\ &= \frac{4}{\pi^2 \beta \tilde{D}} \left\{ \ln(2\beta \tilde{D}) \ln \frac{\cosh(\beta/2)(\tilde{D}-\mu)}{\cosh(\beta/2)(\tilde{D}+\mu)} + \beta \mu \left(\ln \frac{\beta|\mu|}{2} - 1 \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k e^{-\beta k |\mu|}}{k} \left[(\ln 2\beta k |\mu| + e^C) - e^{2\beta k |\mu|} E_i(-2\beta k |\mu|) \right] \right\} \quad (28) \end{aligned}$$

联立方程组 (24) 及 (28), 只能用数值方法求解, 但在零温极限, 这组方程的解相当简单. 可以证明, 在 $T = 0$ 时,

$$P = \frac{1}{\pi^2} \left[1 + 4 \ln 2 - \left| \frac{\mu}{D} \right|^2 \left(1 + 2 \ln \left| \frac{4D}{\mu} \right| \right) \right] \quad (29)$$

$$\delta = \frac{4|\mu|}{\pi^2 \tilde{D}} \ln \frac{4e\tilde{D}}{|\mu|} \quad (30)$$

图 1 给出零温时有效化学势 $|\mu|/4\tilde{D}$ 与掺杂 δ 的关系, 这个关系对求零温相图是很重要的.

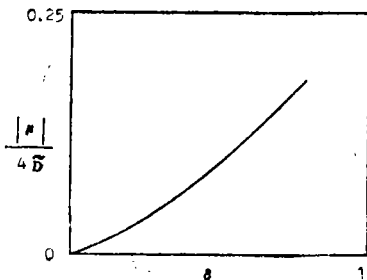


图 1 有效化学势 $|\mu|/4\tilde{D}$ 与掺杂 δ 的关系 ($T = 0$)
Fig. 1 Effective chemical potential vs doping fraction δ

3 铁磁相变

用RPA方法计算静态磁化率. 引入恒定外磁场

$$\vec{B} = \hat{Z}B \cos \vec{q} \cdot \vec{r}$$

此处 \hat{Z} 为沿Z轴的单位矢量, \vec{q} , \vec{r} 在XY面上. Zceman能为

$$H_z = -\frac{B}{2} [M_z(\vec{q}) + M_z(-\vec{q})] \quad (31)$$

$$M_z(\vec{q}) = \frac{1}{2} g\mu_s \sum_{\vec{k}} \left(S_{\vec{k}-\vec{q}, \uparrow}^+ S_{\vec{k}, \uparrow} - S_{\vec{k}-\vec{q}, \downarrow}^+ S_{\vec{k}, \downarrow} \right) \quad (32)$$

g 为Lande因子, μ_s 为spinon自旋磁矩. 求 $M_z(\vec{q})$ 的运动方程

$$\frac{d}{dt} M_z(\vec{q}) = [H_t - J - J', M_z(\vec{q})] \quad (33)$$

由RPA求出

$$\begin{aligned} & \left(\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} - \tilde{\epsilon}_{\vec{k}-\vec{q}} \right) m_{\vec{k}, \vec{q}} - \frac{ZJ_{eff}}{N} \gamma_{\vec{q}} \left(f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}-\vec{q}} \right) \sum_{\vec{k}'} m_{\vec{k}', \vec{q}} \\ & = - (g\mu_s B/2) \left(f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}-\vec{q}} \right) \end{aligned} \quad (34)$$

式中, $m_{\vec{k}, \vec{q}} = S_{\vec{k}-\vec{q}, \uparrow}^+ S_{\vec{k}, \uparrow} - S_{\vec{k}-\vec{q}, \downarrow}^+ S_{\vec{k}, \downarrow}$

通过计算求出静态磁化率

$$x(\vec{q}) = x_0(\vec{q}) / \left[1 + \frac{ZJ_{eff}}{N} \gamma_{\vec{q}} \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}-\vec{q}}}{\tilde{\epsilon}_{\vec{k}-\vec{q}} - \tilde{\epsilon}_{\vec{k}}} \right] \quad (35)$$

上式中, $x_0(\vec{q}) = (g^2 \mu_s^2 / 4N) \sum_{\vec{k}} \left[\left(f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}-\vec{q}} \right) / \left(\tilde{\epsilon}_{\vec{k}-\vec{q}} - \tilde{\epsilon}_{\vec{k}} \right) \right]$

铁磁相变由(35)式的分母在 $\vec{q} = 0$ 的条件下为零确定, 如同确定 $\mu(\delta)$ 关系, 用对数态密度, 求出确定铁磁相变的积分方程

$$\frac{\pi^2 k_B T_c}{16 J_{eff}} = \int_0^{\frac{1}{2}} \ln x \left\{ \left[\cosh \left(\frac{4\tilde{D}}{k_B T_c} (x-y) \right) + 1 \right]^{-1} + \left[\cosh \left(\frac{4\tilde{D}}{k_B T_c} (x+y) \right) + 1 \right]^{-1} \right\} dx \quad (36)$$

由于上式右边的积分总小于零, 可以看出铁磁相变只能出现在 $J_{eff} < 0$ 的情况. 在温度为零时, 铁磁相变方程为

$$1 + 4J_{eff} (2/\pi^2 \tilde{D}) \ln |4\tilde{D}/\mu| = 0 \quad (37)$$

在 $U/t \rightarrow \infty$ 情形, $J_{eff} \rightarrow \delta t$, 由此得出铁磁相在 $\delta > \delta_c \approx 0.55$ 时不稳定. Monte Carlo 所给出的 δ_c 在0.4~0.5之间, 与文献[2~4]的计算结果近似.

我们注意到, 当 δ 增大, 一方面铁磁相互作用耦合常数 $J' = \delta t$ 增大; 但随 δ 增大, Spinon 费米面上的 Spinon 数减小, 这个因素不利于铁磁相. 由于这两个原因, 我们求出 $\delta > \delta_c \approx 0.55$ 时, 铁磁相不稳定. 本文的方法还可以求 $T \neq 0$ 及 $U/t \neq \infty$ 时的相图, 目前尚未见到有文献用 Monte Carlo 方法计算 $T \neq 0$ 及 $U/t \neq \infty$ 时的铁磁相变.

参 考 文 献

- 1 Doucot B, Wen X G. *Phys Rev B*, 1989, 40: 2719
- 2 Riera J A, Young A P. *Phys Rev B*, 1989, 40: 5285
- 3 Shastry B S, Krishnamurthy H R, Anderson P W. *Phys Rev B*, 1990, 41: 2735
- 4 Basile A G, Elser V. *Phys Rev B*, 1990, 41: 4842
- 5 Penn D R. *Phys Rev*, 1966, 42: 350
- 6 Nagaoka Y. *Phys Rev*, 1966, 47: 392
- 7 Zou Z, Anderson P W. *Phys Rev B*, 1988, 37: 627

Holon Fluctuations and Ferromagnetic Phase Transition of Hubbard Model

K. W. Yu Hu Lian Wu Shenshang*

Abstract Starting from Zou-Anderson effective Hamiltonian, we derive a ferromagnetic interaction by considering holon fluctuations. On $T=0$ and $U=\infty$, RPA calculation for static susceptibility shows that the ferromagnetic phase is unstable for doping fraction larger than 0.55.

Keyword Zou-Anderson Hamiltonian, holon fluctuations, ferromagnetic phase transition

*Department of Physics, Chinese University of Hong Kong