

2D大U Hubbard模型核自旋弛豫研究*

吴深尚 胡 连 纪哲锐

(物理学系)

摘 要

本文从Spinon与2D格点上 Cu^{++} 离子的自旋耦合作用出发,讨论 CuO_2 平面的2D Hubbard模形的自旋格点弛豫率 $1/T_1$ 。理论计算的结果与氧化物高温超导材料的 $1/T_1$ 实验结果比较,说明可以用S波超流理论解释实验现象。

关键词 Spinon-核自旋耦合, 自旋格点弛豫率, 高温超导

自从氧化物高温超导体发现以来,作为探索高温超导机制重要手段之一的核磁弛豫率研究已有不少报导。大部份工作集中在对 $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$, $\text{YBa}_2\text{CuO}_{7-y}$ 的 CuO_2 平面上核自旋弛豫率 $1/T_1$ 的测量^[1~4]。实验结果表明:不论是 ^{17}O ,还是 ^{63}Cu ,其弛豫率 $1/T_1$ 都出现两个显著特征。其一是弛豫率 $1/T_1$ 与温度 T 的关系明显不同于传统BCS理论所得到的结果,整个 $1/T_1$ 与 T 的关系曲线是温度的单调下降曲线。其二是氧化物高温超导材料的核磁弛豫率 $1/T_1$ 与温度的关系与重费米子超导系统的 $1/T_1-T$ 关系极为相似。目前有关核自旋弛豫的理论工作主要从不同的模型出发计算高温超导材料 CuO_2 平面上核磁弛豫率^[5]。理论工作的中心是如何解释 $1/T_1-T$ 关系在 T_c 附近所出现在不同于BCS理论的反常行为。P.C.Hammel和C.Tien等人认为, $1/T_1$ 的实验结果说明高温超导属于d波自旋局域对。然而T.Kayama和M.Tachiki则认为完全可以用S波理论加以解释同样的实验结果。

纵观目前提出的高温超导机制,可以归结为两大类即电荷涨落引起高温超导及自旋涨落引起高温超导。后一种机制的主要代表是Anderson的RVB理论。我们从Zou-Anderson的RVB理论出发已经计算并讨论了高温超导体的反铁磁性、结构变相^[6]以及铁磁性等问题,所得的结果与实验定性符合,这说明Anderson的Holon-Spinon有效哈密顿量是描述高温超导体的一个较好出发点。本文从Zou-Anderson有效哈密顿量出发,假设Spinon与 CuO_2 平面上 Cu^{++} 核磁矩有一个超精细耦合作用,求出Spinon超流相的能隙方程以及弛豫率 $1/T_1$ 与温度 T 的关系,在零场情况下与实验结果定性符合。

1 Spinon自能与化学势

考虑平方格点上2D Hubbard模型,其哈密顿量为

本文1991年1月25日收到

●国家自然科学基金资助项目

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

按Zou-Anderson在大U条件下^[7], 我们得到有效哈密顿量

$$\begin{aligned} H_{eff} &= H_0 + H_J \\ H_0 &= -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (e_i e_j^+ - d_i d_j^+) S_{i\sigma}^+ S_{j\sigma} + U \sum_i d_i^+ d_i + \mu \sum_i (e_i^+ e_i + d_i^+ d_i - 1) \\ H_J &= -J \sum_{i,j} (S_{i\uparrow}^+ S_{j\downarrow}^+ S_{j\downarrow} S_{i\uparrow} + S_{i\uparrow}^+ S_{j\downarrow} S_{j\downarrow}^+ S_{i\downarrow}) \end{aligned} \quad (2)$$

这里 $J \equiv 4t^2/U$, e_i, d_i 是带电的玻色场, $S_{i\sigma}$ 是自旋为 1/2 的费米场。

在大U ($U \geq 5t$) 及小掺杂 ($\delta \geq t/U$, δ 为掺杂量) 的条件下取

$$e_i \rightarrow \langle e_i \rangle = e = \sqrt{\delta}, \quad d_i \rightarrow \langle d_i \rangle = 0 \quad (3)$$

并作Spinon场的动量空间变换

$$S_{i\sigma} = (1/\sqrt{N}) \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \eta_{\sigma} S_{\mathbf{k},\sigma} \quad (4)$$

则有效哈密顿量变为

$$\begin{aligned} H_{eff} &= H_i + H_J \\ H_i &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \mu) S_{\mathbf{k},\sigma}^+ S_{\mathbf{k},\sigma} \end{aligned} \quad (5)$$

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

上式中, $\epsilon_{\mathbf{k},\sigma} \equiv -Zt\gamma_{\mathbf{k}}\delta$, μ 为Spinon化学势, $\gamma_{\mathbf{k}} \equiv (1/Z) \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\delta}}$, \sum_{δ} 表示对近邻格点求和, Z 为近邻数。

用RPA计算结果表明, (5) 式的 H_J 项所代表的自旋涨落 (顺磁涨落) 将 Spinon 的有效能带加宽并将 Spinon 的能量重整化。这一效应在小掺杂时是不容忽视的。所以在下面的讨论中我们采用的重整化后的能带宽度 \tilde{D} 以及 Spinon 的重整化能量 $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} &= \epsilon_{\mathbf{k}} - (ZJ/N) \sum_{\mathbf{k}'} \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'} \\ f_{\mathbf{k}'} &= \left\{ 1 + \exp \left[\beta (\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}'} - \mu) \right] \right\}^{-1} = \langle S_{\mathbf{k}'}^+, S_{\mathbf{k}'}' \rangle \\ \tilde{D} &= 4t\delta + 2PJ \end{aligned} \quad (6)$$

这里我们取热平均值 $\langle S_{\mathbf{k}'}^+, S_{\mathbf{k}'}' \rangle$ 作为温度 T 时的 Fermi-Dirac 分布函数, $\beta = 1/k_B T$ 。

Spinon 的态密度近似地取为

$$\rho(\tilde{\epsilon}) = (2/\pi^2 \tilde{D}) \ln | 4 \tilde{D} / \tilde{\epsilon} | \quad (7)$$

则由 Spinon 数与掺杂量的近似关系式

$$N_s = N(1 - \delta) = \sum_{K\sigma} \langle S_{K\sigma}^+ S_{K\sigma} \rangle \quad (8)$$

我们得到极为重要的化学势与掺杂量的关系式^[8]

$$\delta = \frac{4}{\pi^2 \bar{D} \beta} \left\{ \ln(2\bar{D}\beta) \ln \frac{\cosh(\beta/2)(\bar{D} - \mu)}{\cosh(\beta/2)(\bar{D} + \mu)} + \beta\mu \left(\ln \frac{\beta|\mu|}{2} - 1 \right) \right. \\ \left. + \sum_{K=1}^{\infty} \frac{(-1)^K e^{-\beta K} |\mu|}{K} \left[(\ln 2\beta K |\mu| + e^c) - e^{-\beta K} |\mu| E_i(-2\beta K |\mu|) \right] \right\} \quad (9)$$

其中 $E_i(x)$ 是 Airy 函数, (8) 式中 N_s 是 Spinon 数, N 是格点数。

2 Spinon 超流相的 Gap 方程

由于在重费米子系统中 Hirsh 及 Miyaka 已证明了在布里渊区, $Q = (2K_F, \pi/b, \pi/c)$ 上反铁磁自旋涨落有利于自旋单态对 (spin singlet pair) 超导态的出现, 而高温超导体的 $1/T_1$ 实验极类似于重费米子系统, 所以我们引入 Spinon 的 Spin singlet pair 算符 b_{ij}, b_{ij}^+ 用来计算超导态下的核弛豫率 $1/T_1$ 。

$$b_{ij} = (1/\sqrt{2}) (S_{i\uparrow} S_{j\downarrow} - S_{i\downarrow} S_{j\uparrow}) \quad (10)$$

将得到动量表示的能量重整化后的有效哈密顿量

$$H_{eff} = \sum_{K\sigma} \left(\tilde{\epsilon}_{K\sigma} - \mu \right) S_{K\sigma}^+ S_{K\sigma} - J \sum_K \left(\Delta_K^* S_{-K\downarrow} S_{K\uparrow} \right. \\ \left. + \Delta_K S_{K\uparrow}^+ S_{-K\downarrow}^+ \right) + \text{const} \quad (11)$$

式中 $\Delta_K \equiv \sqrt{2} ZJ \gamma_K \langle b_{ij} \rangle$, 是 Spinon 超流相的序参量。

用标准的正则变换将 (11) 式变换到准粒子表象中, 则有

$$H_{eff} = \sum_{K\alpha} E_K b_{K\alpha}^+ b_{K\alpha} + \text{new const} \quad (12)$$

其中 $E_K = \left[\xi_K^2 + |\Delta_K|^2 \right]^{1/2}$, $\xi_K = \tilde{\epsilon}_K - \mu$ 是准粒子的激发谱。而 Spinon 超流相序参量 Δ_K 所满足的方程为

$$\Delta_K = (ZJ/N) \sum_{K'} \frac{\gamma_{K'}}{E_{K-K'}} \frac{\Delta_{K-K'}}{2} \tanh \frac{1}{2} \beta E_{K-K'} \quad (13)$$

超流相变温度由下面积分方程确定

$$\frac{\pi^2 \bar{D}}{8J} = \int_0^1 X^2 \ln(4/X) \left\{ \frac{\tanh[\beta_c(\bar{D}/2)(x+y)]}{x+y} \right. \\ \left. + \frac{\tanh[\beta_c(\bar{D}/2)(x-y)]}{x-y} \right\} dx \quad (14)$$

式中 $y \equiv \mu/\bar{D}$, $\beta_c = 1/K_B T_c$, T_c 为相变温度。

将 (9) 式求出的化学势与掺杂的关系 $\mu(\delta)$ 代入 (13)、(14) 式做数值计算, 我

们求出 $\Delta(T)-T$ 的关系。图1、图2分别给出 $\mu-\delta$ 的关系及S波条件下一定掺杂的 $\Delta(T)-T$ 关系。由图2我们知道 T_c 之下温度越低能隙越大,当材料掺杂增加时在 T_c 附近对BCS能隙曲线的偏离越大。这一点说明高温超导材料更容易出现低能自旋涨落。

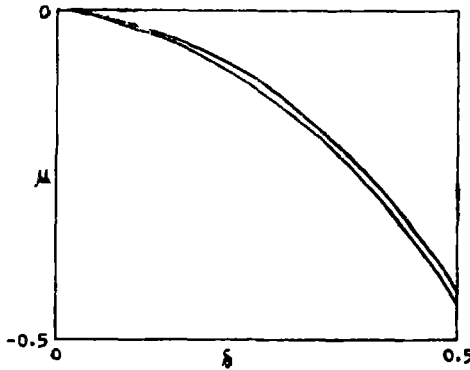


图1 Spinon化学势与掺杂的关系
Fig.1 Spinon's chemical potential vs doping fraction

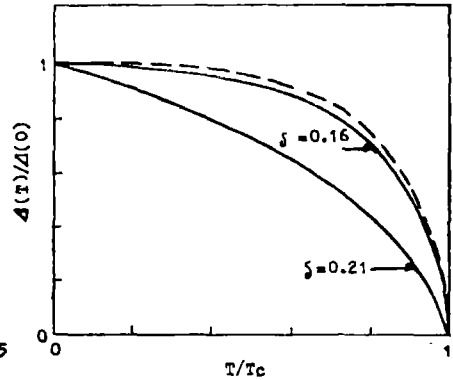


图2 在各种掺杂下, Spinon 超流能隙与温度的关系, 虚线是BCS理论结果
Fig.2 Spinon superfluid gap vs temperature at various doping fractions. The dashed line is BCS prediction

3 1/T₁ 的计算

为了计算CuO₂平面上核磁弛豫率1/T₁,我们依照N.Bulut^[5]对2D Hubbard模型引入一个局域接触超精细耦合作用

$$H_{hf} = \sum_i A \vec{I}_i \cdot \vec{S}_i \tag{15}$$

这里A是超精细耦合常数, \vec{I}_i 是第i个元胞上核自旋磁矩, \vec{S}_i 表示在i个元胞上Spinon的自旋磁矩,利用超流相序参量 Δ_k 的方程,我们求出超流态下的核磁弛豫率1/T_{1s},用正常态下的核磁弛豫率1/T_{1n}归一化,则得到

$$\frac{T_{1n}}{T_{1s}} = \left[\int \frac{\sqrt{(\bar{D}-\mu)^2 + |\Delta|^2}}{\sqrt{\mu^2 + |\Delta|^2}} \frac{E^2 + |\Delta|^2}{E^2 - |\Delta|^2} \ln^2 \left| \frac{4\bar{D}}{\sqrt{E^2 - |\Delta|^2 + \mu}} \right| \frac{dE}{\cosh \beta E + 1} \right] / \left[\int_0^{\bar{D}} \ln^2 \left| \frac{4\bar{D}}{\tilde{\epsilon}} \right| \frac{d\tilde{\epsilon}}{\cosh \beta(\tilde{\epsilon} - \mu) + 1} \right] \tag{16}$$

利用(8)、(13)、(16)式进行数值计算,我们得到各种掺杂(0.16 ≤ δ ≤ 0.21)下弛豫率与温度的关系(图3)。

从图3,我们看到Spinon的S波单态超流相的核磁弛豫率在温度低于T_c时并不出现上升峰,整个曲线随温度下降而下降,随掺杂量的增加曲线不断变陡,定性符合高温超导材料YBa₂Cu₃O_{7-y}的1/T₁实验结果。

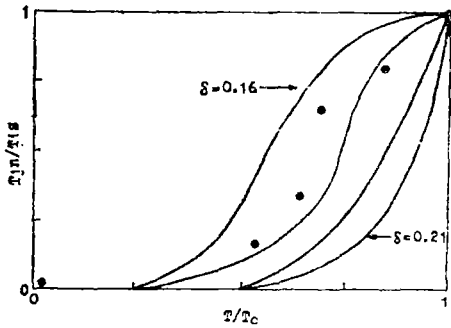


图3 在各种掺杂下超导相的核自旋弛豫率(用正常态归一化)与约化温度的关系。黑点是 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ 的实验数据

Fig.3 The nuclear spin relaxation rate at the superconducting phase (normalized to that of normal state) vs reduced temperature at various doping fraction. The circles are experimental data of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$

4 结论

由氧化物高温超导材料的ac约席夫逊效应,磁通穿透深度随温度变化关系,以及准粒子的隧道效应特性,都说明超导机制可能属于具有低温各向同性的S波单态。因此在求解超流相的能隙方程及计算 $1/T_1$ 时,我们采用Spinon的S波单态配对,得到的结果与实验定性符合,说明高温超导是S波型更为可能。

态密度为 $\rho(\tilde{\epsilon}) = (2/\pi^2\tilde{D}) \ln|4\tilde{D}/\tilde{\epsilon}|$,说明低能区,准粒子态密度更大,低能激发更为可观。因此受激的Spinon的自旋涨落促使费米面的能隙变模糊,导致 $1/T_{1s}$ 的反常行为,即 $1/T_{1s}$ 与 T 的关系在 T_c 附近不出现上升峰。

参 考 文 献

- 1 Markert J T, Russek S E, Noh T W *et al.* Solit state Commun, 1987; 63:847
- 2 Mali M, Brinkmann D, Pauli L *et al.* Phys Lett A, 1987; 124:112
- 3 Warren W W, Walstedt Jr R E, Brenner G F *et al.* Phys Rev Lett, 1987; 59:1860
- 4 Kitaoka Y, Hiramatsu S, Kondo T *et al.* J of Phys Soc of JPN, 1988; 57:30
- 5 Bulut N, Hone D W *et al.* phys Rev B, 1990; 41:1797
- 6 Wu S S, Hu L, Ji Z R *et al.* Phys Lette A, 1990; 144:393
- 7 Zou Z, Anderson P W. Phys Rev B, 1988; 37:627
- 8 Hu L, Shi L P, Ji Z R *et al.* Chemical Potential and Self-Energy of Spinons in the Large-U Hubbard Model, in Proc Beijing Conf on High-Temperature Superconductivity, 1989

Nuclear Spin Relaxation Rates for 2D Large-U Hubbard Model

Wu Shenshang* Hu Lian Ji Zherui

Abstract

We propose a hyperfine interaction between copper's nuclei and spinon to account for the Nuclear Spin Relaxation $1/T_1$ in the copper-oxygen plane. Based on the framework of Zou-Anderson's effective Hamiltonian, $1/T_1$ of Cu is calculated and a possible explanation to the experimental results is presented.

Keywords spin relaxation rates, hyperfine interaction, high temperature superconductivity

*Department of Physics