

2D Hubbard模型正常态的NMR研究*

吴深尚 纪哲锐
(中山大学物理学系)

摘要 从Zou-Anderson有效哈密顿量出发,研究正常态下高温超导材料 CuO_2 平面 Cu^{2+} 核自旋弛豫问题.假设Spinon与铜核自旋之间存在一超精细耦合作用,计算了各种掺杂下核自旋弛豫率 $1/T_1$ 与温度 T 的关系.

关键词 自旋涨落,超精细耦合作用,核自旋弛豫率,高温超导体

1 引言

自从发现氧化物高温超导体(HTcSC)以来,人们致力于探索新的超导机制.作为了解电子性质,探索超导机制的重要手段之一的NMR实验和理论研究已广泛展开^[1~3].HTcSC的NMR实验结果表明,不仅在超导态下HTcSC有不同于BCS超导体的反常弛豫行为,其正常态的核自旋弛豫行为也有别于通常金属的弛豫行为.我们已在Zou-Anderson哈密顿量的基础上计算并讨论了在Spinon的S波Singlet Pair超流态下 Cu^{++} 的弛豫率 $1/T_{1s}$ ^[4].由于正常态的性质与超导机制有着密切的关系,本文对HTcSC正常态的核自旋弛豫问题进行研究.

HTcSC正常态的核自旋弛豫实验一直未被理论很好地解释,其中一个重要的原因是电子系统与核自旋之间的超精细作用令人困惑(Puzzling),至今它一直是一种唯象的假设.另一个原因是反铁磁自旋涨落(AFMSF)对 $1/T_1$ 的贡献问题仍然没有清晰的结论.

Tanamto等在平均场近似下研究了t-J模型正常态的NMR弛豫率^[5],他们提出反铁磁自旋涨落的权重在低温或低能激发时将从 $Q(\pi, \pi) = \vec{q}$ 发生漂移,只有在高温及高能激发时最大权重才位于 $\vec{q} = Q(\pi, \pi)$.Imai对正常态的NMR实验的唯象分析中认为高温时 $1/T_1$ 行为主要应与 $\vec{q} \sim 0$ 的自旋涨落相联系^[6].

我们从Zou-Anderson有效哈密顿量出发,依照Bulet^[2]引入唯象的超精细耦合作用计算各种掺杂下由自旋引起的核弛豫率.所得结果与Bulet研究2D Hubbard模型的结果定性一致.我们也将结果与Imai的理论分析进行比较讨论.

本文1991年10月21日收到

* 国家自然科学基金资助项目

2 Spinon自能修正及化学势

在2D平方格点上引入Hubbard模型, 其哈密顿量为

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

依照Zou-Anderson^[6]引入玻色场 e_i , 双占据态算子 d_i , 以及自旋为1/2的费米场 $S_{i\sigma}$, 作如下变换

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

其约束条件为

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

得到有效哈密顿量

$$H_{eff} = H_0 - J \sum_{i,j} (S_{i\uparrow}^{\dagger} S_{j\downarrow}^{\dagger} S_{j\downarrow} S_{i\uparrow} + S_{i\uparrow}^{\dagger} S_{j\uparrow}^{\dagger} S_{j\downarrow} S_{i\downarrow}) \quad (4)$$

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

(4)式中 $J \equiv 4t^2/U$, 在 $U \geq 5t$ 及掺杂量 $\delta \geq t/U$ 的条件下, 有效哈密顿量是Hubbard模型的一个很好近似。在上述条件下, 取

$$e_i \longrightarrow \langle e_i \rangle = c = \sqrt{\delta}, \quad d_i \longrightarrow \langle d_i \rangle = 0 \quad (5)$$

将Spinon算子变换到动量空间:

$$S_{i\sigma} = (1/\sqrt{N}) \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \eta_{\sigma} S_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \eta_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \eta_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

则(4)式变为

$$H_{eff} = H_t + H_J \quad (7)$$

$$H_t = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu) S_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} S_{\mathbf{k}\sigma}$$

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

(7)式中, $\epsilon_{\mathbf{k}, \sigma} \equiv -Zt\delta\gamma_{\mathbf{k}}$, μ 为Spinon的化学势, $\gamma_{\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{Z} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta}$, \sum_{δ} 表示对最近邻格

点求和, Z 为近邻数, N 为格点数, H_t 表示Spinon的动能, H_J 表示交换作用。

这个模型有3个独立参数 t, J, δ 。在准确的半满填充下, 这个哈密顿量等价于AF作用 $(J/4) \sum_{i,j} (S_i \cdot S_j - 1)$ 。用APA近似, 计算结果表明 H_J 项代表的自旋涨落将Spinon的能带加宽, 并将Spinon的能量重整化。这一能量重整化在小掺杂时是不容忽视, 下面的讨论中我们采用重整化能量宽度 \tilde{D} 及重整化能量 $\tilde{\epsilon}$ 。

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - \frac{ZJ}{N} \sum_{k'} \gamma_{k-k'} f_{k'}, \quad \tilde{D} = -\tilde{\epsilon}_k / \gamma_k \quad (8)$$

$$f_k = \left\{ 1 + \exp[\beta(\tilde{\epsilon}_k - \mu)] \right\}^{-1} = \langle S_k^+ S_k \rangle$$

上式 $\beta = 1/k_B T$ 是温度的倒数。

为计算化学势, 我们用Spinon数与掺杂量 δ 的近似关系:

$$N_s = N(1 - \delta) = \sum_{k\sigma} \langle S_k^+ S_k \rangle \quad (9)$$

并取Spinon的态密度为

$$\rho(\tilde{\epsilon}) = \frac{2}{\pi^2 \tilde{D}} \ln \left| \frac{4\tilde{D}}{\tilde{\epsilon}} \right| \quad (10)$$

得到Spinon化学势与掺杂的关系式:

$$\delta = \frac{4}{\pi^2 \tilde{D} \beta} \left\{ \ln(2\tilde{D}\beta) \ln \frac{\cosh \frac{\beta}{2}(\tilde{D} - \mu)}{\cosh \frac{\beta}{2}(\tilde{D} + \mu)} + \beta\mu \left(\ln \frac{\beta|\mu|}{2} - 1 \right) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k e^{-\beta k |\mu|}}{k} \left[\ln 2\beta k |\mu| + e^c - e^{-2\beta k |\mu|} E_i(-2\beta k |\mu|) \right] \right\} \quad (11)$$

其中 $c = 0.577215$ 是尤拉常数, $E_i(x)$ 是Airy函数。 N_s 是Spinon数。

3 正常态核自旋弛豫率 $1/T_1$ 的计算

在自旋弛豫率的计算中, 如何选取电子自旋与核自旋之间的耦合作用常数是一个复杂的问题。通常都作唯象假设。Mila-Rice对 CuO_2 平面引入超精细耦合系数^[7]:

$$\sum_{\nu} A_{\nu}^2(q) = A_0 + A_1 \gamma_q + A_2 \gamma_q^2 \quad (12)$$

$$\gamma_q = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \hat{\delta}}$$

Bulet在讨论掺杂系统时对2D Hubbard模型引入一个局域接触的超精细耦合 $A\vec{I}_i \cdot \vec{S}_i$, 他考虑了各向同性及各向异性的耦合系数。结果一致得到反铁磁自旋涨落增大自旋弛豫率的结论。

基于上述考虑, 我们在讨论2D Hubbard模型的正常态的自旋弛豫率时, 引入Spinon与 Cu^{++} 核自旋之间存在一个局域接触超精细耦合作用:

$$H_{hf} = \sum_i A \vec{I}_i \cdot \vec{S}_i \quad (13)$$

上式 A 是超精细耦合常数, \vec{I}_i 及 \vec{S}_i 分别是 Cu^{++} 的核自旋及Spinon的自旋。

根据费米关于自旋翻转跃迁率黄金定则, 得到正常态下 Cu^{++} 核自旋弛豫率:

$$T_1^{-1} \sim \lim_{\omega \rightarrow 0} 2\pi |A|^2 \sum_{kk'} f(\tilde{\epsilon}_k) \left[1 - f(\tilde{\epsilon}_{k'}) \right] \delta(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_{k'} - \omega) \quad (14)$$

上式中 $\tilde{\epsilon}_k$ 是 Pinon 的能量, 由 (11) 式及 (14) 式进行数值计算时, 采用 Spinon 的重整化能带宽度 \tilde{D} 及态密度 (10) 式. 计算所用的参数为 $t/U = 0.2$, $\tilde{D} = 0.4\text{eV}$. 图 1 给出 $T_1^{-1}\tilde{D}$ 与 T/\tilde{D} 的关系曲线, 与 Bulet 的计算结果 (图 2) 做比较, 定性符合. 图 3 给出正常态下 $1/T_1$ 与温度 T 的关系, 所用参数为 $A = -20\text{kOe}/\mu_B$, 这是依据 Imai 文中所给. 图 3 的结果与 Imai 所得的 $q \sim 0$ 自旋涨落对 $1/T_1$ 的贡献 ($1/T_1$) 定性一致.

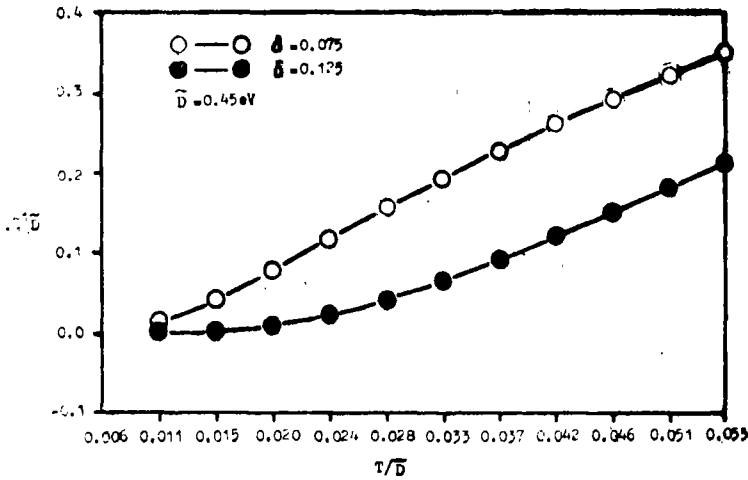


图 1 $T_1^{-1}\tilde{D} \sim T/\tilde{D}$ 的关系图. T_1^{-1} 是弛豫率, $\tilde{D} = 0.45\text{eV}$ 是 Spinon 的能带宽度

Fig. 1 The normalized spin relaxation rate $T_1^{-1}\tilde{D}$ Vs the normalized temperature T/\tilde{D}

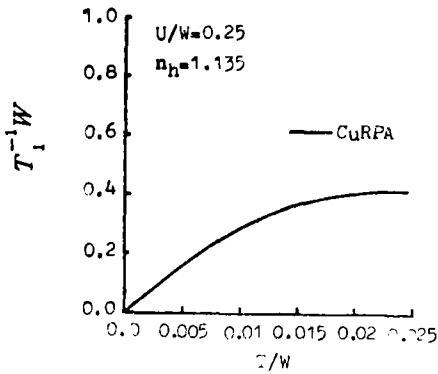


图 2 $T_1^{-1}W \sim T/W$ 的关系图

W 是电子能带宽度, U 是库仑作用, n_h 是 hole 填充数

Fig. 2 The normalized relaxation rate $T_1^{-1}W$ Vs the normalized temperature T/W

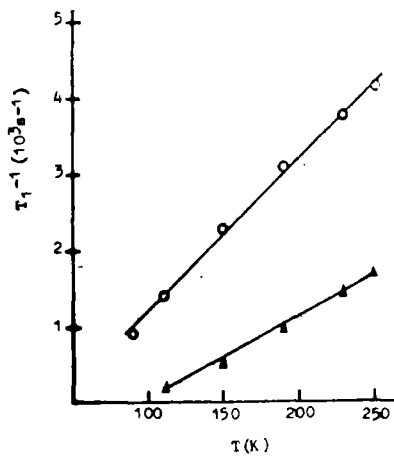


图 3 $T_1^{-1} \sim T$ 的关系图

Fig. 3 The spin relaxation rate T_1^{-1} as the function of temperature T

4 讨 论

我们从Zou-Anderson的有效哈密顿量出发,唯象地假定Spinon与 Cu^{++} 核自旋之间存在一个超精细作用计算 Cu^{++} 的核自旋弛豫率 $1/T_1$,由于所考虑的掺杂区($0.075 \leq \delta \leq 0.125$)的正常态属于顺磁金属态,这是一种自旋关联较弱的态.自旋磁化率 $\chi(q)$ 及波矢为 \vec{q} 的自旋涨落频宽 $\Gamma(q)$ 对波矢 \vec{q} 的依赖关系很弱.同样,Bulet在讨论2D Hubbard模型时,采用tight-binding模型及RPA近似计算 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 的 $1/T_1$.他所考虑的掺杂量也是属于弱关联的顺磁金属态.不过Bulet的工作中,每个Cu原子上的平均电子数 n 是一个RPA范围内控制自旋关联强度的参数,并不是真正的载流子数.而我们工作中的掺杂量 δ 是真正的物理掺杂,因此我们的结果与Bulet结果做定性上比较.

为了更直接与实验结果比较,我们又作出 $1/T_1 \sim T$ 的关系图(图3),从图中可以看出 $1/T_1$ 与 T 的关系基本满足:

$$1/T_1 = a + bT \quad (15)$$

这种结果在正常的高温区($T \geq 150\text{K}$)与实验结果定性一致.温度处于 $T_c \leq T \leq 150\text{K}$ 时实验结果并不存在(15)式的关系.HTcSC正常态核自旋弛豫的反常现象引起广泛的兴趣,存在各种不同的理论解释,Moriya^[8]用SCR理论计算 $1/T_1$,他强调 $\vec{q} \sim Q(\pi, \pi)$ 的自旋涨落贡献,但是很难用同样的出发点处理 $q \sim 0$ 涨落.Fukuyama则认为不能象唯假设 $\vec{q} \sim 0$ 的自旋涨落权重最大,并认为最大权重将因低温及低能激发而偏离 $q = Q(\pi, \pi)$.

事实上,我们的计算工作是基于整个 q 范围内自旋涨落对 $1/T_1$ 有平权的贡献,这是一种背景贡献.由于实验证实即使在超导态下AFS关联仍然存在,所以应该考虑在某些温度区间AFMSF的权重增加.Imai唯象假定 $T < 150\text{K}$ 时 $1/T_1$ 的贡献主要来源于 $q \sim Q(\pi, \pi)$ 的AFMSF可能是正确的,我们的理论计算支持了这种看法.

感谢史隆培教授有益的讨论和帮助.

参 考 文 献

- 1 Imai T, Yoshimura K, Uemura T *et al.* J Phys Soc JPN, 1990, 59: 3846
- 2 Bulet N, Hone D W, Scalapino D J *et al.* Phys Rev, 1990, 41: 1797
- 3 Imai T. J Phys Soc JPN, 1990, 59: 2508
- 4 Wu S S, Hu L, Ji Z R. Acta Scienliarum Naturalium University Sunyatseni, 1991, 30
- 5 Tanamoto T, Kuboki K, Fukuyama H. ISSN 0082-4798, Ser A, 1991, 2421
- 6 Zou Z, Anderson P W. Phys Rev B, 1988, 37: 627
- 7 Mila F, Rice T M. Physica C, 1989, 157: 561
- 8 Moriya T, Takahashi Y, Ueda K. J Phys Soc JPN, 1990, 59: 2905

The Normal State's Nuclear Spin Relaxation Rates for 2D Large U Hubbard Model

Wu Shenshang* Ji Zherui

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

Keywords spin relaxation rates, hyperfine interaction, high temperature superconductivity

· 简 讯 ·

《计算机科学理论与技术》出版

由本校学报编辑部出版的《中山大学学报论丛[26]—计算机理论与技术》，于1992年校庆前出版(国内外公开发行)。本集收录的论文是从我校岭南(大学)学院计算机科学系的教师近年来投送学报的稿件中精选出来的，经校内外专家审定，具有较高的学术水平。

本论文集的内容主要有：计算理论、人工智能、计算机软件技术及其应用等，本文集内容对有关专业的师生与科研人员有较好的参考价值。

(陈 华)

* Department of Physics, Zhongshan University