中山大学学报（自然科学版）
第30卷 第1期 ACTA SCIENTIARUM NATURALIUM Vol.30 No.1
1991年 UNIVERSITATIS SUNYATSENI 1991

Hubbard模型的铁磁相变

李定国 郑瑞林
（海军工程学院）

胡 连
（中山大学微电子研究所）

余建华
（香港理工学院应用物理系）

摘 要

用Zou-Anderson有效哈密顿量计算了 spinon-holon系统的动态横向磁化率。由讨论holon 涨落效应，导出一铁磁相互作用，这一相互作用对解释Hubbard模型的铁磁相变有重要的意义。

关键词 Hubbard模型，holon涨落，铁磁相变

高温氧化物超导的发现[1]，对 Hubbard 模型产生了新的兴趣，Anderson[2]指出基于强关联Hubbard模型可能解高T_c氧化物超导。这些新高T_c超导材料具有明显的二维导电性，并显示出超导电性与磁性有密切关系，使得对二维大 U-Hubbard 模型相图研究成为必要。Yokoyama和Shiba[3]用Variational Monte-Carlo (VMC)方法研究了二维大U-Hubbard模型，给出的相图显示，在大U偏离半满的空穴数密度比较小时，存在一个铁磁相区。Loffe和Larkin[4]利用自旋波的格林函数方法，得到二维Hubbard模型铁磁相存在的区域是空穴密度$n<0.25$，$t/U<0.1$，二者的结果一致，并与Nagaoka定理[5]相符合。本文用Zou和Anderson[6]引入的哈密顿量，讨论二维平方格点系统的铁磁相。

在探讨掺杂La_2CuO_4材料的高T_c超导机制时，Zou 和 Anderson[6] 基于大U-Hubbard 模型，采用电荷与自旋的方法，建立Spinon-holon有效哈密顿量

$$H_{eff}=H_0+H_J \tag{1}$$

$$H_0=-t\sum_{\langle ij\rangle\sigma}(e_ie_j^+-d_i d_j^+)S_{i\sigma}^+S_{i\sigma}+U\sum_i d_i^+d_i+\mu\sum_i(e_i^+e_i-d_i^+d_i-1) \tag{1a}$$

$$H_J=-J\sum_{\langle ij\rangle}\left(S_{i\uparrow}^+S_{j\downarrow}^+S_{j\downarrow}S_{i\uparrow}+S_{i\uparrow}^+S_{j\uparrow}S_{j\downarrow}^+S_{i\downarrow}\right) \tag{1b}$$

且有约束条件

$$e_i^+e_i+d_i^+d_i+\sum_\sigma(S_{i\sigma}^+S_{i\sigma})=1 \tag{2}$$

式中$J=4t^2/U$，e,d,s分别代表带正电的空穴玻色子holon，带负电的双占据态玻色子

本文1989年8月31日收到

和中性费密子Spinon。

在大U情况，可以忽略能带中的双占据态，取$\langle d_i^+ d_i\rangle = 0$。假设holon的量子涨落也可忽略，取$e_i \to \langle e_i\rangle = \sqrt{\delta}$，$\delta$表征偏离半满的空穴数，即为掺杂量。对(1)式进行富氏变换，并注意到约束条件(2)，得到K表象的有效哈密顿量[7]

$$H_{eff} = H_t + H_J \tag{3}$$

$$H_t = \sum_{K\sigma}(\varepsilon_{\vec{K}} - \mu)\, S^+_{\vec{K}\sigma} S_{\vec{K}\sigma}$$

$$H_J = -\frac{JZ}{2N}\sum_{KK'q\sigma}\gamma_{\vec{q}}\left[S^+_{\vec{K}+\vec{q},\sigma} S^+_{\vec{K}'-\vec{q},\bar{\sigma}}\left(S_{\vec{K}',\sigma} S_{\vec{K},\sigma} - S_{\vec{K}',\sigma} S_{\vec{K},\bar{\sigma}}\right)\right]$$

这里$\varepsilon_{\vec{K}} = -tZ\delta\gamma_{\vec{K}}$，$\gamma_{\vec{K}} = \frac{1}{Z}\sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{\delta}}$，$\vec{\delta}$代表最近邻格点的位置矢量，$Z$为最近邻的配位数，$N$为总的格点数。约束条件式(2)变为

$$N(1-\delta) = \sum_{K\sigma} S^+_{\vec{K},\sigma} S_{\vec{K},\sigma} \tag{4}$$

文献[7]利用这些结果，在$\delta > 8t/\pi^2 U$基于无规相近似(RPA)讨论顺磁涨落。通过对顺磁涨落对能带的修正，化学势μ与掺杂δ及温度T的关系的计算，结果得S波超流相变温度和反铁磁相变温度。与Baskaran,Zou和Anderson(BZA)[8]结果相比，定性一致，且有显著的修正。下面我们由此出发计算动态磁化率。

由久保的线性响应公式可以得到用自旋密度算符表示的动态磁化率[9]

$$\chi_{\mu\nu}(\vec{q}\cdot\omega) = (g\mu_B)^2 \langle\langle \hat{S}_\mu(\vec{q}) \,|\, \hat{S}_\nu(-\vec{q}) \rangle\rangle_{\omega+i\eta} \tag{5}$$

如果取
$$\hat{S}^-(\vec{q}) = \sum_K S^+_{\vec{K}+\vec{q}\downarrow} S_{\vec{K}\uparrow}$$

$$\hat{S}^+(-\vec{q}) = \sum_K S^+_{\vec{K}-\vec{q}\uparrow} S_{\vec{K}\downarrow} \tag{6}$$

这里$\hat{S}^-(\vec{q})$，$\hat{S}^+(-\vec{q})$表示横向自旋密度算符，得到以$(g\mu_B)^2$为单位的横向动态磁化率

$$\chi^{-+}(\vec{q}\cdot\omega) = \langle\langle \hat{S}^-(\vec{q}) \,|\, \hat{S}^+(-\vec{q}) \rangle\rangle_{\omega+i\eta} \tag{7}$$

由(3)式的有效哈密顿量，利用格林函数的运动方程[9]

$$\omega\langle\langle A|B\rangle\rangle_\omega = \langle [A,H] \rangle + \langle\langle [H,A] \,|\, B\rangle\rangle_\omega \tag{8}$$

得到RPA下的横向动态磁化率

$$\chi^{-+}(\vec{q},\omega) = \Gamma^{-+}(\vec{q},\omega)\Big/\left[1 + \frac{JZ}{N}\gamma_{\vec{q}}\Gamma^{-+}(\vec{q},\omega)\right] \tag{9}$$

$$\Gamma^{-+}(\vec{q},\omega) = \sum_K\left\{\left(f_{\vec{K}+\vec{q}\downarrow} - f_{\vec{K}\uparrow}\right)\Big/\left[\omega - \left(\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}+\vec{q}\downarrow} - \tilde{\varepsilon}_{\vec{K}\uparrow}\right) + JZm + i\eta\right]\right\} \tag{10}$$

其中：
$$\tilde{\varepsilon}_{K\sigma} = \varepsilon_K - (JZ/N)\sum_K \gamma_{\vec{K}-\vec{k}'} f_{\vec{K}\bar{\sigma}} \tag{11}$$

$$m = n\uparrow - n\downarrow = (1/N)\sum_K\left(f_{\vec{K}\uparrow} - f_{\vec{K}\downarrow}\right) \tag{12}$$

$\tilde{\varepsilon}_{K\sigma}$为Spinon的修正能量，$m$为磁化参量，$f_{K\sigma} = \langle S^+_{\vec{K}\sigma} S_{\vec{K}\sigma}\rangle$。

在顺磁相，$f_{\vec{K}\uparrow}=f_{\vec{K}\downarrow}$，$m=0$，得到

$$R(\vec{q},\omega)=\mathrm{Re}\Gamma^{-+}(\vec{q},\omega)=\sum_{\vec{K}}\left\{\left(f_{\vec{K}+\vec{q}}-f_{\vec{K}}\right)\Big/\left[\omega-\left(\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}+\vec{q}}-\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}\right)\right]\right\} \tag{13}$$

顺磁涨落的能量修正，使得Spinon的能带增宽，修正能量

$$\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}=\varepsilon_{\vec{K}}-(JZ/N)\sum_{\vec{K}'}\gamma_{\vec{K}-\vec{k}'}f_{\vec{k}'} \tag{14}$$

其中，
$$f_{\vec{K}}=1/(e^{\beta(\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}-\mu)}+1);\quad \beta=1/K_BT \tag{15}$$

在 $\vec{q}\to 0$，$\vec{q}\cdot\nabla_{\vec{K}}\varepsilon_{\vec{K}}\gg\omega$ 条件下，对 $R(\vec{q},\omega)$ 的变换式

$$R(\vec{q},\omega)=\frac{1}{2}\sum_{k}\left(f_{\vec{K}}-f_{\vec{K}+\vec{q}}\right)\left[1\Big/\left(\tilde{\omega}_{\vec{K}\vec{q}}-\omega\right)+1\Big/\left(\tilde{\omega}_{\vec{K}\vec{q}}+\omega\right)\right] \tag{16}$$

$$\tilde{\omega}_{\vec{K}\vec{q}}=\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}+\vec{q}}-\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}} \tag{17}$$

展开得到

$$R(\vec{q},\omega)=-\sum_{\vec{K}}\frac{\partial f_{\vec{K}}}{\partial\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}+\frac{1}{2}\sum_{\vec{K}}\frac{\partial f_{\vec{K}}}{\partial\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}\frac{\left(\vec{q}\cdot\nabla_{\vec{K}}\right)^2\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}{\left(\vec{q}\cdot\nabla_{\varepsilon}\right)\tilde{\varepsilon}_{K}}-\sum_{\vec{K}}\frac{\partial f_{\vec{K}}}{\partial\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}\left(\frac{\omega}{\vec{q}\cdot\nabla_{\vec{K}}\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}\right)^2$$
$$-\frac{1}{4}\sum_{\vec{K}}\frac{\partial f_{\vec{K}}}{\partial\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}\left(\frac{\left(\vec{q}\cdot\nabla_{\vec{K}}\right)^2\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}{\left(\vec{q}\cdot\nabla_{\vec{K}}\right)\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}\right)^2 \tag{18}$$

注意到二维平方格点，采取对数态密度$g(\varepsilon)=(2/\pi^2D)\ln|4D/\varepsilon|$，$2D$代表带宽，有$\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}=-\tilde{D}\gamma_{\vec{K}}$，$\tilde{D}$为顺磁涨落修正后的Spinon带宽[7]，若取$\vec{q}$在$x$轴方向，(18)式可简化为

$$R(qx,\omega)=R(0,0)+Aq_x^2+B(\omega^2/q_x^2) \tag{19}$$

其中：
$$R(0,0)=-\sum_{\vec{K}}\frac{\partial f_{\vec{K}}}{\partial\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}=\frac{\beta}{\pi^2\tilde{D}}\int_{-\tilde{D}}^{\tilde{D}}\ln\left|\frac{4\tilde{D}}{\varepsilon}\right|\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

$$A=-\frac{1}{4}\sum_{\vec{K}}\frac{\partial f_{\vec{K}}}{\partial\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}\mathrm{ctg}^2k_x=\frac{\beta}{8(2\pi)^2}\iint_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y\frac{\mathrm{ctg}^2k_x}{\cosh\left[\beta(\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}-\mu)\right]+1}$$

$$B=-\frac{4}{\tilde{D}^2}\sum_{\vec{K}}\frac{\partial f_{\vec{K}}}{\partial\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}}\frac{1}{\sin^2k_x}=\frac{2\beta}{\tilde{D}^2(2\pi)^2}\iint_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y\frac{1}{\cosh\left[\beta(\tilde{\varepsilon}_{\vec{K}}-\mu)\right]+1}\frac{1}{\sin^2k_x}$$

由计算机给出顺磁动态磁化率曲线，结果见另文。

在顺磁相，$\vec{q}=0$，$\omega=0$时，由(9)式给的动态磁化率分母等于零，得到通常决定居

里温度的方程

$$\frac{\pi^2}{16J}k_\beta T_c=\int_0^{\frac{1}{4}}\ln x\left(1\Big/\left\{\cosh\left[\frac{4\tilde{D}}{K\beta T_c}(x-y)\right]+1\right\}\right.$$
$$\left.+1\Big/\left\{\cosh\left[\frac{4\tilde{D}}{K\beta T_c}(x+y)\right]+1\right\}\right)dx \tag{20}$$

其中$y=\mu/4\tilde{D}$。但此方程并不能得到铁磁相转变的居里温度，分析(1)式有效哈密顿量，在$U>U_c$(U_c为$Mott$转变临界值)时把高于$(t/U)^2$次的高阶项忽略是合理的，且此哈密顿量能够表征大U小掺杂δ时的铁磁相区，在把(1)变到K表象时，库仑排斥U足够大时，对双占据态的忽略也是合理的，这样看来，对于铁磁相的讨论，holon玻色场e_i的量子涨落不能简单忽略。近半满填充Hubbard模型的基态是反铁磁的，一定holon的涨落运动，会吸引周围的自旋(Spinon)形成铁磁极化子(Ferromagnetic polarons)[10]，导致反铁磁序的破坏。(3)式中把e_i凝聚取平均，就忽略了holon跳跃产生的效应，把铁磁相出现的本质因素去掉了。基于这样的思想，考虑到holon的涨落运动，我们采取一种超出平均场的作法[11]，认为

$$e_i=\langle e_i\rangle+B_i \tag{21}$$

其中平均场部分$\langle e_i\rangle=\sqrt{\delta}$，涨落部分为$B_i$。重新由(1)式的有效哈密顿量出发，忽略双占据态，探讨铁磁相的存在。由(1a)式利用(21)式变换，得到表征holon涨落部分

$$H_{tL}=-t\sqrt{\delta}\sum_{\langle ij\rangle\sigma}S_{i\sigma}^+S_{j\sigma}(B_i+B_j^+)-t\sum_{\langle ij\rangle\sigma}B_iB_j^+S_{i\sigma}^+S_{j\sigma} \tag{22}$$

在认为玻色场的涨落B_i比较小时，忽略H_{tL}中的第二项，在约束条件(2)式给出的子空间，采用二级微扰，消去玻色场B_i，得到Spinon的有效作用

$$H_{fL}^{eff}=H_0'+H_{J'} \tag{23}$$

$$H_0'=t^2\delta\left[\sum_{\langle ij\rangle\sigma}\left(S_{j\sigma}^+S_{j\sigma}\Big/-E_h\right)+\sum_{\langle ij\rangle\sigma}\left(S_{i\sigma}^+S_{i\sigma}\Big/-E_h\right)\right] \tag{23a}$$

$$H_{J'}=2t^2\delta\sum_{\langle ij\rangle\sigma\sigma'}\left(1/-E_h\right)S_{i\sigma}^+S_{j\sigma'}^+S_{i\sigma'}S_{j\sigma} \tag{23b}$$

这里E_h为单个准粒子holon的能量，(23a)实际上表明holon的运动，对$-\mu\sum_{i\sigma}S_{i\sigma}^+S_{i\sigma}$项的影响；(23b)代表由holon涨落引起的Spinon交换作用，与(1b)给出的H_J形成对比。容易看到，在半满填充时，$\delta=0$，(1b)的H_J可以写成反铁磁Heisenberg哈密顿，(23b)没有贡献。但是当能带因掺杂偏离半满时，$\delta\neq0$，必须考虑到$H_{J'}$的贡献。

在K表象，Spinon的能谱可写成$\varepsilon_{\vec{K}}=-t\delta Z\gamma_{\vec{K}}$，对应的holon能谱是

$$E_h=-tZ(1-\delta)\gamma_{\vec{K}} \tag{24}$$

对于较小的$\vec{K}$，$E_h<0$，且$E_h\propto Zt(1-\delta)$。(23b)可改写成

$$H_{J'}=J'\sum_{\langle ij\rangle\sigma\sigma'}S_{i\sigma}^+S_{j\sigma'}^+S_{i\sigma'}S_{j\sigma} \tag{25}$$

这里粗略估计可认为

$$J' \propto [\delta t/(1-\delta)] \quad (26)$$

可以看出，在一定的掺杂δ，$H_{J'}$是具有铁磁性的相互作用。对整个系统而言，比较H_J和$H_{J'}$，可以看出，只要在一定t/U和掺杂δ的合适区域，可以出现铁磁相。大致估计，由$J'-J>0$得到要求铁磁相出现的区域是

$$t/U<\delta/4$$

在δ小及较大U/t区域，以上结果与Yokoyama等给出的二维平方格点铁磁相存在的区域定性一致。

本文在对Zou-Anderson的Spinon-holon有效哈密顿量[6]进行分析的基础上，讨论了holon凝聚时的磁化率。同时，考虑到holon涨落是研究二维大U-Hubbard模型铁磁相的关键，本文在平均场基础上，考虑到e_i的涨落，得到了铁磁相存在的一个定性区域。

参考文献

[1] Bednorz J G et al., *Z. Phys.*, 64 (1986), 188

[2] Anderson P W, *Scince*, 235 (1987), 1196

[3] Yokoyama H et al., *J. Phys. Soc. Japan*, 56 (1987) 10, 3570

[4] Loffe L B et al., *Phys. Rev.*, *B* 37 (1988) 10, 5730

[5] Nagaoka Y, *Phys. Rev.*, 147 (1966), 392

[6] Zou Z et al., *Phys. Rev.*, *B* 37 (1988), 1, 627

[7] Hu L et al., *Phys. Rev.*, *B*40 (1989), 1,1306
Hu L et al., *Accepted by J. Phys: Condensed Matter*
Hu L et al., *Proc. Int. Conf. on Superconductivity Bangalore*, India, January, 1990

[8] Baskaran G et al., *Solid. State Comm.*, 63 (1987), 11, 973

[9] Wolff P A, *Phys. Rev.*, 120 (1960), 814
Izuyama I et al., *J. Phys. Soc. Japan*, 18 (1963), 7, 1025

[10] Inui M et al., *Phys. Rev.*, B 37 (1988), 4, 2320

[11] Tesanovic Z *et al.*, *Phys. Rev.*, B 34 (1986), 1, 1918

Ferromagnetic Transition of Hubbard Model

*Li Dingguo** *Zheng Reilin* *Hu Lian* *K. W. Yu*

Abstract

The spinon-holon effective Hamiltonian proposed by Zou and Anderson is used to calculate the dynamic susceptibility. By considering holon flucluations effect We derive a ferromagnetie interaction which is fundamental important for gain a ferromagnetic phase with our RPA scheme.

Keywords Hubbard model, holon fluctuations, ferromagnetic transitions

* Navy Engineering Institute