

2D掺杂大U Hubbard 模型的 自旋Peierls相变研究

吴深尚 胡 连 纪哲锐

余建华

(中山大学物理学系)

(香港理工学院应用物理学系)

摘 要

从Spinor与声子相互作用考虑,讨论 $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$ 中 CuO_2 平面上AFS涨落诱导的Peierls失稳性,求出Spinor声子系统的自由能,计算 La_2CuO_4 结构相变温度与掺杂的关系,得到了随着系统温度下降,系统可能经历二次结构相变的结论,为实验结果提供了一个可能的解释。

关键词 Spinor—声子耦合, 自旋Peierls相变

目前有关 HT_c 材料 $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$ 结构相变的报导已有不少.实验上发现 La_2CuO_4 在高温533K时发生Tetra相 \rightarrow Ortho相的结构相变^[1],并且相变温度 $T_{T\rightarrow O}$ 随着二价元素 S_r 掺杂的增加而降低^[2].在低温区又发现 $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ 发生Tetra相 \rightarrow Ortho相的结构相变^[3].Birgeneau的X射线及中子散射实验进一步观察到 $T\rightarrow O$ 相变过程中有软声子行为的出现^[4].

这些有意义的实验结果引起理论上的争论.尽管Fukuyama^[6]认为 $T\rightarrow O$ 相变并不是直接与费米面上的失稳有关,但是仍然有不少作者^[6,7]认为二维 CuO_2 平面的费米面有很强的nesting并预测Peierls失稳可能会出现CDW或者SDW.

目前,2D Hubbard模型被广泛应用于解释 HT_cSC 材料的物理性质.Zou和Anderson提出的大U Hubbard模型的Spinor-holon描述^[8]是基于 CuO_2 平面的自旋关联很强,并将它看成是一个二维量子自旋系统——Spinor中性费米液体.我们研究了大U Hubbard模型的磁性^[9],所得的结果使我们确信Zou-Anderson的Spinor-holon有效哈密顿量是研究 HT_cSC 的一个有用的哈密顿量.

本文在我们前面工作的基础上^[10]从Spinor与声子相互作用的角度探讨有关 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 结构相变的原因,求出系统自由能,得到相变温度与掺杂的关系.

1. $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$ 结构相变机制

从Zou-Anderson^[8]的Spinor-holon有效哈密顿量出发,我们得到它的Bloch表象形式为

本文1989年6月27日收到

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

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

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

这里, $J = 4t^2/U$, $\epsilon_{\vec{k}, \sigma} = -Zt\delta\gamma_{\vec{k}}$, $\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{z}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{z}}$, Z 为近邻数, N 为 XY 平面的格点数

μ 为Spinor化学势, S 为中性费米场。

Spinor数在大 U 条件下近似满足如下关系

$$\sum_{i, \sigma} S_{i, \sigma}^+ S_{i, \sigma} \approx N(1 - \delta) \tag{2}$$

RPA计算结果表明(1)式中 H_J 项会使Spinor的有效能带加宽^[10]并且这种能带加宽效果在小掺杂 $\delta \sim 0$ (t/u)时不能忽略, 所以我们采用修正后的带宽 \tilde{D} 近似作Spinor的能带宽度。

为了解释 $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ 结构相变, 假设能带增宽的Spinor与声子之间存在耦合作用, Spinor—声子系统的哈密顿量为

$$H = H_{sp} + H_{ph} + H_{int} \tag{3}$$

$$H_{sp} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \left[\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} - \mu \right] S_{\vec{k}, \sigma}^+ S_{\vec{k}, \sigma}$$

$$H_{ph} = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}} \left(a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right)$$

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma} \Gamma_{\vec{q}} S_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma}^+ S_{\vec{k}, \sigma} \left(a_{\vec{q}}^+ + a_{-\vec{q}} \right)$$

其中, $\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} - (ZJ/N) \sum_{\vec{k}'} \gamma(\vec{k}-\vec{k}') f_{\vec{k}'}$, $f_{\vec{k}'} = [1 + \exp\beta(\epsilon_{\vec{k}'} - \mu)]^{-1}$

$\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}$ 为能带加宽后Spinor的裸能量, $a_{\vec{q}}^+$, $a_{\vec{q}}$ 是声子的产生与消灭算符, $\Gamma_{\vec{q}}$ 为Spinor与声子的耦合常数, $\omega_{\vec{q}}$ 为波矢为 \vec{q} 的声子频率。

根据 La_2CuO_4 的能带计算^[11]说明在 CuO_2 平面上准自由电子在 $[1, 1, 0]$ 方向上的费米面有很强的nesting (见图1), 从实际的晶格结构可知Ortho晶格相对Tetra晶格畸变很小, Ortho晶格基本上保持了 K_2N_1F 的结构以致可以将Ortho相看成准Tetra相, 因此相变过程中不大可能存在CDW^[12]。

因此假设在Spinor的费米面 $[1, 1, 0]$ 方向上 $\vec{k} = \frac{\pi}{2a}(1, 1, 0)$ 处强的nesting导致大的反铁磁涨落。这些

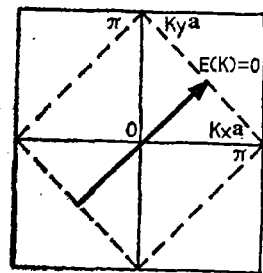


图1 掺杂为零的Spinor费米面 (箭头表示 nesting 波矢 \vec{Q})
Fig.1 The proposed pseudo Fermi surface in undoped $La_{2-x}CuO_4$ (the arrow indicates the nesting wave vector \vec{Q})

AFM自旋涨落使声子在 $[1,1,0]$ 方向上大小为 $|2K_F|$ 的波矢 Q 上软化, 这时有大数声子处于 Q 软模上, 故有

$$\langle a_Q^+ a_Q \rangle = M$$

这种凝聚应一种静态的周期晶格畸变。

用算符的平均值 $\langle a_Q^+ \rangle = \langle a_Q \rangle = \sqrt{M}$ 代替算符 a_Q^+, a_Q , 得到Peierls相变后系统的哈密顿量

$$\begin{aligned} H = 2M\hbar\omega_Q + \sum_{\vec{k}, \sigma} \left[(\tilde{\epsilon}_{\vec{k}+\vec{Q}/2} - \mu) S_{\vec{k}+\vec{Q}/2, \sigma}^+ S_{\vec{k}+\vec{Q}/2, \sigma} \right. \\ \left. + (\tilde{\epsilon}_{\vec{k}-\vec{Q}/2} - \mu) S_{\vec{k}-\vec{Q}/2, \sigma}^+ S_{\vec{k}-\vec{Q}/2, \sigma} \right. \\ \left. + \Delta_Q (S_{\vec{k}-\vec{Q}/2, \sigma}^+ S_{\vec{k}+\vec{Q}/2, \sigma} + S_{\vec{k}+\vec{Q}/2, \sigma}^+ S_{\vec{k}-\vec{Q}/2, \sigma}) \right] \end{aligned} \quad (4)$$

此处局限于 $|\vec{k}| < |\vec{Q}/2|$, $\Delta_Q \equiv \sqrt{M/N}\Gamma_Q$ 为序参量。

对(4)式做正则变换得到新的哈密顿量

$$H = 2M\hbar\omega_Q + \sum_{\vec{k}, \sigma} \mathcal{E}(\vec{k}) d_{\vec{k}, \sigma}^+ d_{\vec{k}, \sigma} \quad (5)$$

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{1}{2} (\tilde{\epsilon}_{\vec{k}+\vec{Q}/2} + \tilde{\epsilon}_{\vec{k}-\vec{Q}/2} - \mu \pm \left[\frac{1}{4} (\tilde{\epsilon}_{\vec{k}+\vec{Q}/2} - \tilde{\epsilon}_{\vec{k}-\vec{Q}/2})^2 + \Delta_Q^2 \right]^{1/2})$$

在第一布里渊区, $Q = (\pi/a, \pi/a)$

$$\mathcal{E}(\vec{k}) = |\mu| \pm \left[\tilde{\epsilon}_{\vec{k}+\vec{Q}/2} + \Delta_Q^2 \right]^{1/2} \quad (6)$$

$\mathcal{E}(\vec{k})$ 为Peierls相变后Spinor的能谱, 它在未畸变的费米面打开一个能隙。

2 系统自由能的计算

采用对数态密度近似

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

这里 \tilde{D} 为加宽后的Spinor能带宽度。由简单计算得出系统的自由能为

$$\begin{aligned} F = \frac{2N\hbar\omega_Q}{\Gamma_Q^2} \Delta_Q^2 - \frac{2}{\beta} \int_{-\tilde{D}}^{-|\Delta_Q|} \frac{2}{\pi^2 \tilde{D}} \ln \left| \frac{4\tilde{D}}{\tilde{\epsilon}} \right| \\ \cdot \ln \left(1 + e^{-\beta \left[|\mu| - \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 + \Delta_Q^2} \right]} \right) d\tilde{\epsilon} \\ - \frac{2}{\beta} \int_{|\Delta_Q|}^{\tilde{D}} \frac{2}{\pi^2 \tilde{D}} \ln \left| \frac{4\tilde{D}}{\tilde{\epsilon}} \right| \ln \left(1 + e^{-\beta \left[|\mu| + \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 + \Delta_Q^2} \right]} \right) d\tilde{\epsilon} \end{aligned} \quad (8)$$

由 $\delta F / \delta |\Delta_Q| = 0$, 可以得到能隙方程

$$\frac{N\hbar\omega_Q}{\Gamma_Q^2} = \int_{|\Delta_Q|}^{\tilde{D}} \frac{1}{\pi^2 \tilde{D}} \ln \left| \frac{4\tilde{D}}{\tilde{\epsilon}} \right| \frac{\sinh \beta \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 + \Delta_Q^2}}{\cosh \beta \sqrt{\tilde{\epsilon}^2 + \Delta_Q^2} + \cos \beta |\mu|} \cdot \frac{d\tilde{\epsilon}}{\sqrt{\tilde{\epsilon}^2 + \Delta_Q^2}} \quad (9)$$

上式令 $|\Delta_0| \rightarrow 0$, 即可得 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 从 Tetra 相 \rightarrow Ortho 相的结构相变温度 $T_{T \rightarrow O}$ 所满足的式子

$$G(\delta) = \int_0^{\tilde{D}} \ln \left| \frac{4\tilde{D}}{\tilde{\epsilon}} \right| \frac{\sinh \beta \tilde{\epsilon}}{\cosh \beta \tilde{\epsilon} + \cosh \beta |\mu|} \cdot \frac{d\tilde{\epsilon}}{\tilde{\epsilon}} \quad (10)$$

上式 $G(\delta) \equiv N\hbar\omega_0\pi^2 \tilde{D}(\delta) / \Gamma_0^2$.

由于考虑了自旋关联对 Spinor 能带加宽后正常相化学势 μ 及掺杂 δ 与温度 T 的关系¹⁾

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

联立 (10)、(11) 二式进行计算求出了结构相变温度与掺杂的关系。图 2 表示我们求出的结果与 La_2CuO_4 掺 Sr 实验数据比较。实验与理论结果定性符合: 存在高温区的 Tetra \rightarrow Ortho 相变, 相变温度随掺杂量增加而降低。同时也存在低温区的 Tetra \rightarrow Ortho 相变, 相变温度随掺杂增加而增加。

3 结论

从以上的推论及理论计算结果初步得出如下结论:

①由 Spinor 与声子的相互作用出发能为 La_2CuO_4 结构相变提供一个合理的解释; 在近半满填充时, 反铁磁自旋涨落在费米面的 $\vec{k} = \frac{\pi}{2a} (1.1.0)$ 上很大, Spinor 与声子耦合促使晶格集体振动的某一模式软化而在 \vec{k} 处打开一个能隙, 结果出现自旋 Peierls 相变而不是出现 CDW。

②掺杂在某种程度消除了费米面上的 nesting, 即掺杂使系统不再是完全半满填充。这时系统中 Spinor 的化学势随掺杂的增加而减少¹⁾, 同时 Spinor 态密度也随掺杂的增加相应降低。在常数态密度近似下, Peierls 相变温度的表式是 BCS 型

$$T_{T \rightarrow O} \propto \tilde{D} \exp[-1/\Gamma_0 N(E_F)]$$

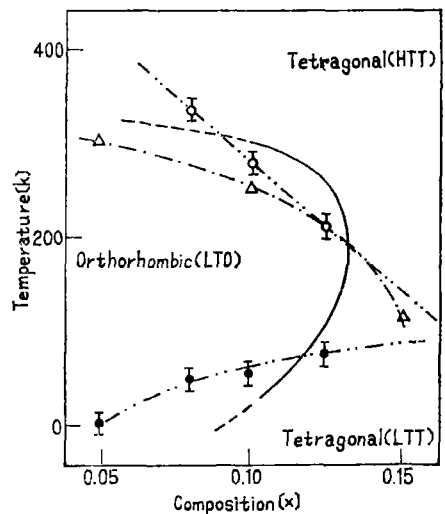


图 2 $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$ 的相图 (实线为理论曲线, Φ 为 $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ 的实验点, Δ 为 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ 的实验点)
Fig.2 The TO transition temperature $T_{T \rightarrow O}$ plotted against the doping fraction δ

1) L. Hu et al, Chemical Potential and Self-energy Correction of Spinor in the Large-U Hubbard Model, 待发表

用常数态密度估计, $N(E_F) = 1/2\bar{D}$ 。这样掺杂增加时, 能带 \bar{D} 增宽, 要引起相变温度随掺杂增加而降低。实际上我们采用对数态密度以及采用(2)式的约束条件, 结果不仅得到高温区有Tetra \rightarrow Othor相变, 还得出在低温区域有一个Tetra \rightarrow Othor相变, 这一结果与最近期的实验结果定性符合^[3]。因此, 我们不仅认为 Zou-Anderson 的 Spinor-holon有效哈密顿量是研究 $La_{2-x}M_xCuO_4$ 的一个有用的哈密顿量, 而且 Spinor态密度采用对数形式也可能是正确的。

参 考 文 献

- [1] Jorgenson J D et al., *Phys. Rev. Lett.*, 58(1987), 1024
- [2] Fleming R M et al., *Phys. Rev.*, B35(1987), 7191
- [3] Axe J D et al., *Phys. Rev. Lett.*, 62(1989), 2751
- [4] Birgeneau R J et al., *Phys. Rev. Lett.*, 59(1987), 1329
- [5] Hasegawa Y et al., *J. Appl. Phys.*, 26(1987), 1322
- [6] Zhou C et al., *Phys. Lett.*, A130(1988), 111
- [7] Kopaev Y et al., *Intern. J. of Mod. Phys.*, B1(1987)
- [8] Zou Z et al., *Phys. Rev.*, B37(1988), 627
- [9] Hu L et al., *Phys. Rev.*, B40(1989), 11036
- [10] Hu L et al., *Acta Sci. Nat. Uni. Sunyatseni*, 3(1989), 105
- [11] Yu J et al., *Phys. Rev. Lett.*, 58(1987), 1035
- [12] Kiyoyuki et al., *Solid State Phys. of JAN*, 22(1987), 761

Peierls Transition of the Two-Dimensional Doped Large-U Hubbard Model

Wu Shenshang* Hu Lian Ji Zherui K.W. Yu

Abstract

We propose a spinor-phonon Hamiltonian to account for the Peierls instability driven by large antiferromagnetic spin fluctuations in the copper oxide plane. Using the free energy of the spinor-phonon system, we establish a relation between the doping fraction and the transition temperature associated with the structural phase transition of the high-temperature superconducting material $La_{2-x}M_xCuO_4$. The results show that upon cooling the system changes from the high-temperature tetragonal phase to the orthorhombic phase and then to the tetragonal phase at an even lower temperature. The results give a possible explanation for the recent experiment of P.D. Axe et al.

Keywords spinor-phonon interactions, spin peierls instability

* Department of Physics