

大U Hubbard模型的中性费米液描述*

胡 连 吴深尚 华小明

(微电子学研究所) (物理学系) (激光与光谱学研究所)

摘 要

用Zou-Anderson的Spinor-holon有效哈密顿量讨论大U Hubbard模型的反铁磁相与超导相。RPA计算表明在费米液区($\delta t \gg J$),低温Néel温度随掺杂增大而降低。用Gor'kov方程,我们也求出了反铁磁相及超导相的能隙方程。

关键词 中性费米液, Néel温度, 反铁磁能隙方程, 超导能隙方程

近来有不少工作用二维Hubbard模型

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

分析高温超导现象^[1]。在 $U \gg t$ 时, Zou-Anderson导出以下有效哈密顿量^[2]:

$$H_{eff} = H_0 - J \sum_{\langle ij \rangle} \left(S_{i\uparrow}^+ S_{j\downarrow}^+ S_{j\downarrow} S_{i\uparrow} + S_{i\uparrow}^+ S_{j\uparrow} S_{j\downarrow}^+ S_{i\downarrow} \right) \quad (2)$$

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

其中 $J \equiv 4t^2/U$, e 、 d 为荷电相反的玻色场, S 为中性费米场。按文献[2], 在 $U \gg t$ 时取Holon场 $e_i \rightarrow \langle e_i \rangle = e, e^2 = \delta, \delta$ 为掺杂参数以及取 $d_i \rightarrow \langle d_i \rangle = 0$ 。在此近似下, 求得 H_{eff} 的动量表示形式:

$$H_{eff} = H_t + H_J \quad (3)$$

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

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

以上 $\epsilon_{\vec{k}, \sigma} = -Zt\delta r_{\vec{k}}$, μ 为spinor化学势, $r_{\vec{k}} = \frac{1}{Z} \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \delta}$, 此处 \sum_{δ} 表示对近邻格点

求和, Z 为近邻数, N 为二维平面XY上的格点总数。自旋关联作用 H_J 如图1所示。

其中图1b表示动量为 \vec{k} , \vec{k}' 的Spinor经相互作用 $J_{\vec{q}} \propto J r_{\vec{q}}$ 交换自旋的过程。以下分析

由(3)式表示的二维费米系在低温时可能存在的反铁磁相与超导相。

本文1988年10月25日收到

● 中山大学高等学术研究中心及广东省超导研究开发协调中心资助课题

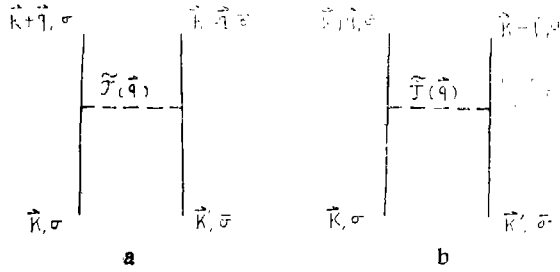


图 1

1 费米液区 ($\delta t \gg J$) 的顺磁相不稳定性估计

在 $\delta t \gg J$ 时, 我们用无规相近似(RPA)计算顺磁磁化率. 引入恒定外磁场

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

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

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

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

此处 g 为 Landé 因子, μ_B 为波尔磁子. 由 RPA 计算, 我们求得静态磁化率为

$$x(\vec{q}) = x_0(\vec{q}) / [1 + \tilde{J}(\vec{q}) x_0(\vec{q})] \tag{4}$$

上式中
$$x_0(\vec{q}) = (g^2 \mu_B^2 / 4N) \sum_{\vec{k}} [(f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}-\vec{q}}) / (\tilde{\epsilon}_{\vec{k}-\vec{q}} - \tilde{\epsilon}_{\vec{k}})] \tag{5}$$

$$f_{\vec{k}} = 1 / (e^{\beta(\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} - \mu)} + 1) \quad \tilde{\epsilon}_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} - \frac{ZJ}{N} \sum_{\vec{k}'} (\vec{k} - \vec{k}') f_{\vec{k}'}$$

$\tilde{J}(\vec{q}) = 4ZJ r_{\vec{q}} / g^2 \mu_B^2$, $\tilde{\epsilon}_{\vec{k}}$ 中的第二项来自 H_J 中图 1 b 的贡献. 以下用 (4) 式的分母 $1 + \tilde{J}(\vec{q}) x_0(\vec{q}) = 0$ 估计顺磁相不稳定的转变温度. 取 $t = 0.5 \text{ eV}, U = 5 \text{ eV}$, 注 1) 的结果表明, 当 $\delta \leq 0.05$ 时, Spinor 的化学势几乎为零. 所以下面估计反铁磁相变温度 T_N 时, 我们近似取 $\mu = 0$. 注意 La_2CuO_4 超导材料的反铁磁相均发生在 $\delta \leq 0.03$ 的区域. 在近半满填充时, Spinor 的带宽很窄, 其裸带宽为 $2W = 8\delta t$, 用 RPA 计算, H_J 的作用只是将 Spinor 的有效带宽增加^{1), 2)}: $2W \rightarrow 2\tilde{W}$, \tilde{W} 为 Spinor 有效带宽. 用以下修正后的态密度

$$\rho(\tilde{\epsilon}) = \frac{2}{\pi^2 \tilde{W}} \ln \left| \frac{4\tilde{W}}{\tilde{\epsilon}} \right| \tag{6}$$

估计 Néel 温度, 可得 $x_0(\vec{Q})|_{T \rightarrow 0} \sim \ln^2 \frac{T}{\tilde{W}}$, 这里 $\vec{Q} = \frac{\pi}{a}(\hat{x}, \hat{y})$ 为反铁磁层矢量 (nesting vector of AFM). 由此可得低温下 Néel 温度 T_N ²⁾

1) Hu L et al., Chemical Potential and Self-energy Correction of Spinors in Large-U Hubbard Model, Submitted to Phys. Rev. B
 2) Hu L et al., Antiferromagnetic Phase Transition in High Tc Superconductors, Preprint

$$2k_B T_N \approx \bar{W} e^{-\pi \sqrt{\bar{W}/4J}} \quad (7)$$

我们看到在 $\delta t \gg J$ 区, Néel 温度随掺杂 δ 增大而下降。用这里的 RPA 计算 La_2CuO_4 高温超导材料的反铁磁相变温度 T_N 是不合适的, 最多只能是一个估计。因为对 La_2CuO_4 材料, 反铁磁相均出现在 $\delta \leq 0.03$ 的区域, 除非 La_2CuO_4 材料的 $U \gg t$ 使得 RPA 的条件 $\delta \geq t/U$ 成立, 这时才能用 RPA 计算 T_N 。(7) 式定性的与过去已有的结论^[3]一致。

2 反铁磁相与超导相能隙

在 $\delta t \leq J$ 区, 前面 RPA 计算磁化率的方法不适用, 由解反铁磁相的 Gor'kov 方程可以求出反铁磁相 spinor 传播子为:

$$G_{\vec{k}, \vec{k}'}(i\omega') = \frac{-i\omega'_n - \tilde{\epsilon}_{\vec{k}}}{\omega_n'^2 + \epsilon^2(\vec{k})} \delta_{\vec{k}-\vec{k}'} + \frac{A_{SDW}(\vec{k})}{\omega_n'^2 + \epsilon^2(\vec{k})} \delta_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{c}} \quad (8)$$

$$\text{此处} \quad i\omega'_n = i\omega_n + \frac{ZJ}{N} r(0) \sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) \quad \omega_n = (2n+1)\pi/\beta$$

$$\epsilon(\vec{k}) = \sqrt{(\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} - \mu)^2 + A_{SDW}^2(\vec{k})} \quad (9)$$

$A_{SDW}(\vec{k})$ 为反铁磁自旋密度波能隙, 求出以下的能隙方程

$$A_{SDW}(\vec{p}) = \frac{JZ}{N} \sum_{\vec{p}'} (1 - r(\vec{p} - \vec{p}')) A_{SDW}(\vec{p}') (\text{th} \frac{1}{2} \beta \epsilon_{\vec{p}'} / \epsilon_{\vec{p}'}) \quad (10)$$

(8) 式在形式上与最近 X. G. Wen 和 A. Zee^[4] 基于 Berry 相因子讨论所得的反铁磁相的自由传播子一致, 但 (8) 式还包含 Spinor 的自能修正。由于 (10) 式隐含 Spinor 化学势 μ , 而 μ 依赖于掺杂 δ , 所以积分方程 (10) 必须同 Spinor 化学势 μ 的方程联立求解, 详细的数值分析我们将另文发表。

下面讨论 Spinor 超流相, 引入 Matsubara 格林函数

$$G(\vec{p}, \tau - \tau') = -\langle T_{\tau} S_{\vec{p}, \rho}^+(\tau) S_{\vec{p}, \rho}^+(\tau') \rangle$$

$$F_{\downarrow \uparrow}^+(-\vec{p}, \tau - \tau') = \langle T_{\tau} S_{-\vec{p}, \downarrow}^+(\tau) S_{\vec{p}, \uparrow}^+(\tau') \rangle$$

由计算我们得到以下 Gor'kov 方程

$$-(\partial_{\tau} - \xi_{\vec{p}}) F_{\downarrow \uparrow}^+(-\vec{p}, \tau - \tau') + A_{s.c.}(\vec{p}) G(\vec{p}, \tau - \tau') = 0 \quad (11)$$

$$-(\partial_{\tau} + \xi_{\vec{p}}) G(\vec{p}, \tau - \tau') + A_{s.c.}(\vec{p}) F_{\downarrow \uparrow}^+(-\vec{p}, \tau - \tau') = \delta(\tau - \tau')$$

$$\text{其中} \quad \xi_{\vec{p}} = \tilde{\epsilon}_{\vec{p}} - \mu - \frac{ZJ}{N} r(0) \sum_{\vec{q}} f(\vec{q})$$

$$A_{s.c.}(\vec{p}) = \frac{ZJ}{N} \sum_{\vec{q}} r(\vec{q}) \langle S_{\vec{q}-\vec{p}, \uparrow} S_{\vec{p}-\vec{q}, \downarrow} - S_{\vec{q}-\vec{p}, \downarrow} S_{\vec{p}-\vec{q}, \uparrow} \rangle$$

$A_{s.c.}(\vec{p})$ 为 Spinor 超流相的自旋单态对激发的序参量。求得以下 Spinor 能隙方程:

$$A_{s.c.}(\vec{p}) = \frac{ZJ}{N} \sum_{\vec{q}} r(\vec{q}) A_{s.c.}(\vec{p} - \vec{q}) (\text{th} \frac{1}{2} \beta E_{\vec{p}-\vec{q}} / E_{\vec{p}-\vec{q}}) \quad (12)$$

$$E(\vec{p}) = \sqrt{\xi^2(\vec{p}) + A_{s.c.}^2(\vec{p})}$$

上式在形式上同其它RVB平均场所得结果相似,但我们的计算能更好的处理自旋涨落对Spinor化学势及Spinor自能的修正。计及这些修正,我们求解了超导相的S波能隙方程,在适当的参数(t, U)下求出文献[1]中G. Baskran 等所得的结果¹⁾。如同重费米子超导问题,能隙方程可按S波、d波分解求解。我们还将讨论能隙方程的求解及超导相的一些热力学性质,以及研究小掺杂情形下反铁磁相与超导相的竞争及其共存的可能性³⁾。

由于实验已证实当掺杂 δ 小时,La₂CuO₄ 超导材料在其铜-氧平面有强的自旋关联,显示出二维反铁磁量子自旋流体行为,其低温相为反铁磁相与超导相⁵⁾。从前面的讨论我们认为La₂CuO₄ 超导材料的低温相可近似用Zou-Anderson的Spinor-holon有效哈密顿量描述。对空穴场算子取平均后,Zou-Anderson有效哈密顿量描写一个中性费米液体系。当 $\delta = 0$ 时, $H_{eff} = -\frac{J}{4} \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - 1)$, 系统的低温相为反铁磁相。随着 δ 增大,反铁磁相将破坏, H_{eff} 的低温相将成为超流相,我们初步的数值计算支持这一物理图象³⁾。尽管Zou-Anderson有效哈密顿量忽略了电子在铜氧原子间的运动,但是我们认为对于研究自旋涨落是否为高温超导的主要机制这一问题,Zou-Anderson有效哈密顿量是合适的。我们将推广这里所用的方法论电子在铜氧原子间的游移。

参 考 文 献

- [1] Anderson P W, *Science* 235 (1987)1196; Baskran G et al., *Solid State Commun*, 63 (1987)973
 [2] Zou Z et al., *Phys. Rev.*, B37 (1988) 627
 [3] Nagaoka Y, *Phys. Rev.*, 147 (1966) 392
 [4] Wen X G et al., *Phys. Rev. Lett*, 61 (1988) 1025
 [5] Shirane G, *Spin Correlations in High T_c Superconductors*, BNL- 41441, 1988

Neutral Fermi Liquid Description of Large U Hubbard Model

Hu Lian* Wu Shengshang Hua Xiaoming

Abstract

The antiferromagnetic and superconducting phase of Large U Hubbard model has been discussed by using the Zou-Anderson spinor-holon effective Hamiltonian.

The RPA calculation shows that in Fermi liquid area ($\delta t \gg J$) and at low temperature the Néel temperature decreases as doping δ increases. The gap equations of antiferromagnetism and of superconductor are also given by solving the Gorkov equation.

Keywords neutral Fermi liquid, Néel temperature, gap equation of antiferromagnetic phase, gap equation of superconducting phase

3) Hu L et al., Researchs on Superconductivity and Magnetism for Hubbard Model, (unpublished)

* Research Institute of Microelectronics