

应用 fermion-spin 理论研究掺杂的 反铁磁系统^{*}

徐 鑫 宋 筠

(北京师范大学物理系, 北京 100875)

冯世平

(北京师范大学物理系, 北京 100875; 中国科学院物理研究所国家超导实验室, 北京 100080)

(1995 年 5 月 12 日收到)

在平均场近似下, 探讨了 fermion-spin 理论中的投影算符对系统的物理性质的影响. 同时也应用 fermion-spin 理论研究了 t-J 模型的基态动能、相分离问题, 并与数值模拟和实验结果进行了比较.

PACC: 7145; 7510; 7420

氧化物超导材料是典型的强关联系统, 实验上已证明这类系统有很强的反铁磁关联, 并且是一种高度各向异性的材料, 支配其物理特性的是这些材料中的 CuO_2 平面和在该平面里的 Cu 离子磁矩之间的交换相互作用^[1]. 由于这些性质使得氧化物超导材料在低温下显示许多反常特性, 在半满或非常小的掺杂区域内, 系统是强反铁磁关联的 Mott 绝缘体, 随着掺杂系统进入超导状态, 当掺杂到最佳点时系统的超导临界温度最大, 而且超导电性也不十分依赖于超导材料中层间的三维耦合, 特别是在超导临界温度之上的正常态也不像普通金属那样而是显示许多反常特性(几乎所有的输运性质都反常)^[2]. 经过这些年来的研究, 人们似乎相信氧化物超导材料是一种非费密液体, 例如 Anderson^[3]认为它是 Luttinger 液体, 其主要特征是没有准粒子传播、带电自由度与自旋自由度分离、有费密面但系统的波函数重整化常数 $Z_k = 0$.

在实验上发现氧化物超导材料后不久, Anderson^[4]就提出描述这类系统的一个合适的模型是二维、单带、大 Coulomb 相互作用 U 的 Hubbard 模型. 在大 U 极限下, Hubbard 模型约化成没有电子双重占据的 t-J 模型. 没有电子双重占据实际上是一个很强的局域约束条件, 它将整个系统限制在 Hilbert 的子空间, 因而也是理论处理的难点之一. 过去处理这类系统的一个流行的办法是 slave-particle 技术^[5], 但后来发现这个理论框架在实际能够操作运算的情况下有许多缺陷^[6]. 最近提出的 fermion-spin 理论可以修正 slave-particle 理论的缺陷^[7]. 这个理论是建立在带电自由度与自旋自由度分离基础上的, 其最大特点是即使在平均场近似下, 电子的局域约束条件也自动满足, 应用这套理论已经可以定量或定性解释氧化物超导材料的一些物理特性^[7-9].

^{*} 国家自然科学基金及国家教育委员会《跨世纪优秀人材计划》基金资助的课题.

本文应用 fermion-spin 理论继续探讨氧化物材料的物理性质. 氧化物超导材料中的掺杂过程实际上是系统中动能与磁能的竞争过程, 我们发现 fermion-spin 平均场理论可以很好地描述这一物理过程. 我们理论计算得到的动能可以与数值结果相比拟. 在以前应用 fermion-spin 理论研究 t-J 模型中^[7,8], 该理论中投影算符的作用总是被忽略掉了. 本文根据其物理意义, 平均场处理这个投影算符, 并能够说明在我们感兴趣的掺杂范围内忽略投影算符对定性或定量的物理结果影响不大. 在平均场水平上, 我们通过加上次近邻的磁相互作用来模拟 t-J 模型的自旋涨落效应, 并对系统中可能存在的相分离问题进行了探讨, 结果说明自旋涨落可以使相分离的范围变小.

现在大部分人相信氧化物材料的基本物理性质已包含在 t-J 模型中

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1a)$$

$$\sum_{\sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma} \leq 1, \quad (1b)$$

式中 $C_{i\sigma}$ 是电子算符, $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ 是自旋算符, $\langle ij \rangle$ 表示最近邻求和. 这个模型描述了系统中动能与磁能的竞争, 动能 t 将有利于电子的自由运动, 而磁能 J 则限制电子的自由运动并使其局域化. 在没有掺杂的半满情况下, t-J 模型约化成反铁磁的 Heisenberg 模型. 局域约束条件(1b)式将整个系统限制在子 Hilbert 空间并由此带来了解析处理中的许多困难. 最近提出的 fermion-spin 变换^[7].

$$C_{i\uparrow} = h_i^\dagger S_i^-, \quad C_{i\downarrow} = h_i^\dagger S_i^+, \quad (2)$$

似乎对于处理局域约束条件很有效. 式中 h_i 是费密算符, 描述系统的带电自由度(holon), $S_i^\pm$ 是自旋算符, 描述系统的自旋自由度(spinon). 而自旋算符 $S_i^\pm$ 可以通过二维 Jordan-Wigner 变换 $S_i^+ = f_i^+ e^{i\theta_i}$, $S_i^- = f_i e^{-i\theta_i}$ 映射到费密表象, 这里 f_i 是费密子, $\theta_i = \sum_{l \neq i} f_l^+ f_l B_{il}$, $B_{il} = \text{Im} \ln(Z_l - Z_i)$ 和 $Z_l = X_l + iY_l$ 是复空间的格点坐标. 但是这个变换的表示空间与物理的约束电子的子 Hilbert 空间并不完全一致, 文献[7]中已证明物理的约束电子算符可以被精确地表示成为

$$\tilde{C}_{i\uparrow} = P_i h_i^\dagger S_i^- P_i^+, \quad \tilde{C}_{i\downarrow} = P_i h_i^\dagger S_i^+ P_i^+,$$

式中 P_i 是投影算符, 它的作用是将 fermion-spin 变换(2)式中多余的非物理自旋态排除. 在以前的处理中^[7,8]略去了投影算符 P_i , 并认为由此造成的误差是掺杂 δ 的量级, 当 δ 很小时, 这种误差是完全可以忽略的. 本文将在平均场近似下说明这一情况. 利用(3)式, t-J 模型可以写成

$$H = H_t + H_J, \quad (4a)$$

$$H_t = -t \sum_{\langle ij \rangle} P_i [S_i^+ h_i P_i^+ P_j h_j^+ S_j^- + S_i^- h_i P_i^+ P_j h_j^+ S_j^+] P_j^+, \quad (4b)$$

$$H_J = J \sum_{\langle ij \rangle} (h_i h_i^\dagger) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j (h_j h_j^\dagger). \quad (4c)$$

根据投影算符 P_i 的物理意义, 在平均场近似下我们可近似地将 H_t 写成

$$\begin{aligned} H_t \approx & -t \sum_{\langle ij \rangle} h_i h_j^\dagger [\langle S_i^+ S_j^- \rangle + \langle S_i^- S_j^+ \rangle] - t \sum_{\langle ij \rangle} \langle h_i h_j^\dagger \rangle (1 - \delta) \\ & \times [S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+] + t \sum_{\langle ij \rangle} \langle h_i h_j^\dagger \rangle (1 - \delta) [\langle S_i^+ S_j^- \rangle + \langle S_i^- S_j^+ \rangle]. \end{aligned} \quad (5)$$

类似于以前的处理^[7-9], 我们定义 holon 的粒子-空穴序参数 $\phi = \langle h_i^+ h_{i+\eta} \rangle$ 和 spinon 的最近邻键的序参数 $\chi = \langle S_i^+ S_{i+\eta}^- \rangle = \langle S_i^- S_{i+\eta}^+ \rangle$, 这里 $\eta = \pm \hat{x}, \pm \hat{y}$. 由于系统处于反铁磁状态, 我们划分系统成为 A, B 子晶格系统, 并且定义系统的 Néel 序参数 $\langle S_i^z \rangle = (-1)^i M$. 在这种情况下, 类似于文献[7]平均场处理 Jordan-Wigner 相因子作为 π -通量, 我们可以获得平均场近似下的 t-J 哈密顿量

$$H = \sum_{k(\text{Red})} (\epsilon_k^+ \alpha_{k\uparrow}^\dagger \alpha_{k\uparrow} + \epsilon_k^- \alpha_{k\downarrow}^\dagger \alpha_{k\downarrow}) + \sum_{k(\text{Red})} E_k (\beta_{k\uparrow}^\dagger \beta_{k\uparrow} - \beta_{k\downarrow}^\dagger \beta_{k\downarrow}) + 4NJ_{\text{eff}} \chi^2 + 4NJ_{\text{eff}} M^2 - 8Nt\chi\phi(1-\delta), \quad (6)$$

式 $J_{\text{eff}} = J[(1-\delta)^2 - \phi^2]$ 和求和 $\sum_{k(\text{Red})}$ 限制在约化的布里渊区. 带电自由度部分的准粒子能谱 $\epsilon_k^\pm$ 和准粒子算符 $\alpha_{k\sigma}$ 可表示成

$$\epsilon_k^\pm = \pm 2t\chi\gamma_k - \mu, \quad \gamma_k = 2(\cos k_x + \cos k_y), \quad (7a)$$

$$h_k^A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_{k\uparrow} + \alpha_{k\downarrow}), \quad h_k^B = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_{k\uparrow} - \alpha_{k\downarrow}), \quad (7b)$$

以及自旋自由度部分的准粒子能谱 E_k 和准粒子算符 $\beta_{k\sigma}$ 可表示成

$$E_k = \sqrt{4[J_{\text{eff}}(1-2\chi) + 2t\phi(1-\delta)]^2(\cos^2 k_x + \cos^2 k_y) + (8J_{\text{eff}}M)^2}, \quad (8a)$$

$$f_k^A = U_{k\uparrow} \beta_{k\downarrow} + U_{k\downarrow} \beta_{k\uparrow}, \quad f_k^B = \frac{\cos k_x - i \cos k_y}{\sqrt{\cos^2 k_x + \cos^2 k_y}} (U_{k\uparrow} \beta_{k\uparrow} + U_{k\downarrow} \beta_{k\downarrow}), \quad (8b)$$

$$U_{k\sigma}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \sigma \frac{8J_{\text{eff}}M}{E_k} \right]. \quad (8c)$$

决定序参数的自洽方程组可以由系统的自由能极小而获得, 以及我们得到的系统的基态能量可以表示成

$$E_g = E_{\text{动能}} + E_{\text{势能}}, \quad (9a)$$

$$E_{\text{动能}} = + 8Nt\chi\phi(1-\delta), \quad (9b)$$

$$E_{\text{势能}} = 4NJ_{\text{eff}}[\chi(1-\chi) - M^2]. \quad (9c)$$

我们已经完成了平均场的自洽计算, 结果见图 1 和图 2(实线). 与以前的结果^[7]相比较, 发现在平均场近似下, 忽略或考虑投影算符在我们感兴趣的掺杂范围内对定性和定量结果影响都不大. 也计算了系统的基态动能(见图 3(实线)), 并与 Dagotto 等^[10]数值模拟结果进行了比较, 发现在非常小的掺杂区域内($0 < \delta < 0.1$), 我们的平均场计算结果非常接近于数值模拟结果, 这也是为什么以前对于依赖掺杂的反铁磁长程序的研究^[7,8]非常成功的原因. 在最佳掺杂区域内($0.1 < \delta < 0.20$), 我们平均场计算的基态动能大致与数值模拟结果相符合. 在最佳掺杂区域内, 氧化物材料显示许多反常物理特性^[2], 人们似乎相信它是非费密液体并且 Anderson^[3]认为这些特性可以用带电自由度与自旋自由度分离来解释, 我们的结果支持这个观点. 在高掺杂区域($\delta > 0.20$), 我们的平均场结果与数值模拟结果偏离较大, 这是由于在高掺杂区域里, 氧化物材料是费密液体^[2], 这里并不发生带电自由度与自旋自由度分离, 那么我们建立在带电自由度与自旋自由度分离基础之上 fermion-spin 理论当然不能解释费密液体情况.

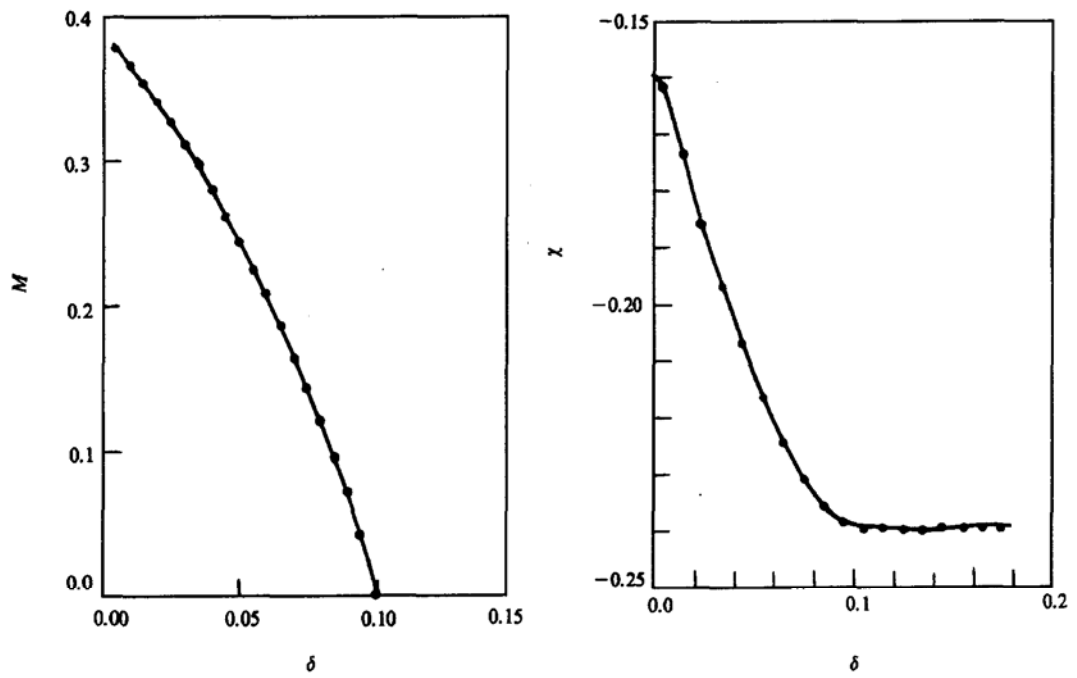
(a) 交错磁化强度 M 在 $t/J=5$ 时随掺杂 δ 的变化(b) 自旋最近邻键序参数 χ 在 $t/J=5$ 时随掺杂 δ 的变化

图 1 实线是考虑投影算符的结果;圆点是没有考虑投影算符的结果

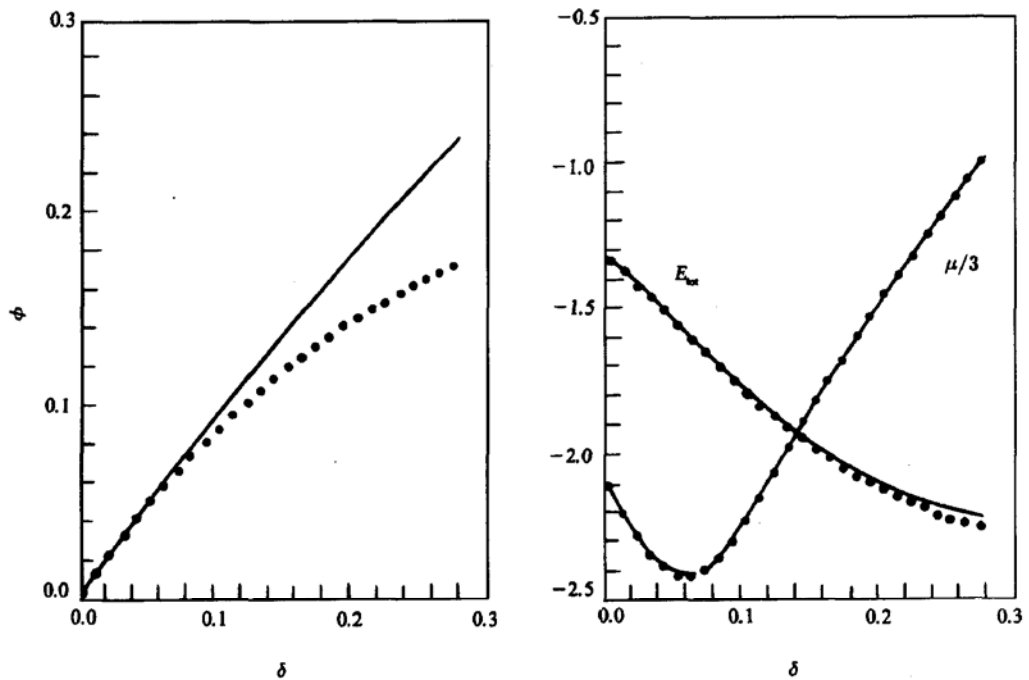
(a) Holon 的粒子-空穴序参数 ϕ 在 $t/J=5$ 时随掺杂 δ 的变化(b) 基态能量 E_{gs} 和化学势 μ 在 $t/J=5$ 时随掺杂 δ 的变化

图 2 实线是考虑投影算符的结果;圆点是没有考虑投影算符的结果

现在回过头来讨论相分离问题. 实验上有一些证据表明 $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ 在掺杂 $0.01 < \delta < 0.06$ 区域内是不稳定的^[11]. Emery 等^[12]已证明 t-J 模型也存在相不稳定性问题. 相分离的特征是负的压缩系数(化学势的斜率). 在文献[7]中, 他们应用 fermion-spin 理论并在平均场框架下研究 t-J 模型说明相分离约发生在 $\delta < 0.08$ 区域内. 但是在平均场近似下, t-J 模型的量子涨落和自旋阻挠(frustration)是完全忽略了. 人们相信量子涨落和自旋阻挠效应将抑制相分离或使相分离范围更小. 在平均场近似下, 这些效应可以通过引入次近邻磁相互作用 J' 得到考虑, 在这种情况下, 须研究 t-J-J' 模型

$$H = t \sum_{i\eta} C_{i0}^\dagger C_{i+\eta} + J \sum_{i\eta} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\eta} + J' \sum_{i\tau} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\tau} - \mu \sum_{i0} C_{i0}^\dagger C_{i0}, \quad (10)$$

式中 $\tau = (\pm \hat{x} \pm \hat{y})$. 再引入次近邻自旋键序参数 $\lambda = \langle S_i^+ S_{i+\tau}^- \rangle = \langle S_i^- S_{i+\tau}^+ \rangle$ 和次近邻 holon 的粒子-空穴序参数 $\phi_1 = \langle h_i^+ h_{i+\tau} \rangle$, 与文献[8]相同平均场处理 Jordan-Wigner 相因子, 并与以上处理 t-J 模型(4)式类似, 可以得到对角化的 t-J-J' 哈密顿量以及决定序参数的自治方程组. 在合理的参数条件下($t/J = 5, J'/J = 0.05$), 已经完成了对于 t-J-J' 模型的化学势 μ 的平均场计算, 结果见图 4(实线), 与 t-J 模型的平均场结果(见图 4(虚线))相比较, 我们的结果表明在考虑了系统的量子涨落和自旋阻挠效应下, 相分离发生在掺杂 $\delta \leq 0.06$ 范围, 与实验结果^[11]非常符合. 我们的结果也说明了量子涨落和自旋阻挠效应确实能够抑制相分离, 并使其范围趋于更小, 从而使我们感兴趣的掺杂区域($0.06 \leq \delta \leq 0.20$)并不发生相分离.

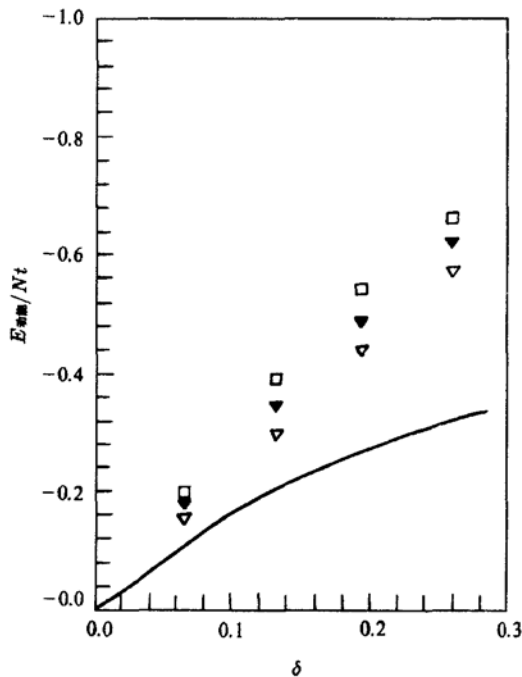


图3 基态动能在 $t/J = 5$ 时随掺杂 δ 的变化. 实线是现在的平均场结果; 方块、黑三角和白三角是数值模拟结果, 分别对应于 $t/J = 10, 2.5, 1$

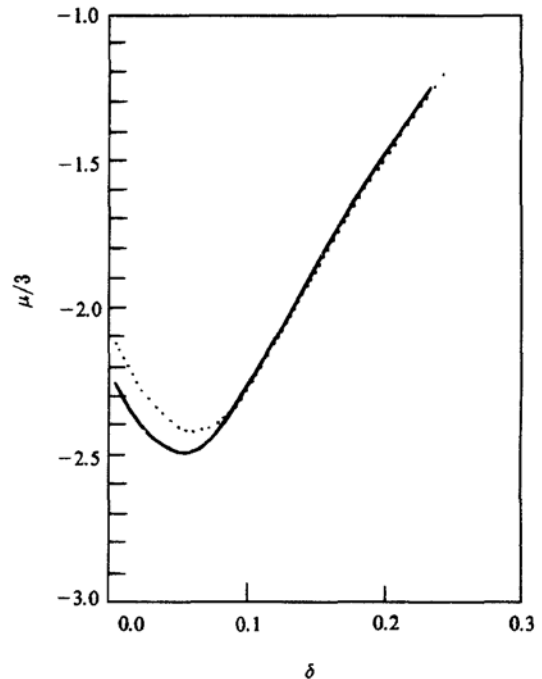


图4 化学势随掺杂的变化. 实线对应于 $t/J = 5, J'/J = 0.05$; 虚线对应于 $t/J = 5, J'/J = 0$

总结起来,在平均场近似下,我们已经探讨了 fermion-spin 理论中投影算符的问题,并能够说明在我们感兴趣的掺杂范围内忽略投影算符对定性或定量的物理结果影响不大.在 fermion-spin 理论框架下,我们研究了 t-J 模型的基态动能,结果说明我们的平均场基态动能在非常小的掺杂区域内($0 < \delta \leq 0.1$)与数值模拟结果符合很好,在最佳掺杂区域内($0.1 < \delta < 0.2$)与数值模拟结果基本符合.也讨论了 t-J 模型的相分离问题,能够说明考虑了量子涨落和自旋阻挠效应后确实能够抑制相分离并使其范围趋于更小.

- [1] A. P. Kampt, *Phys. Reports*, **249**(1994), 219.
- [2] B. Batlogg *et al.*, *Physica*, **C235-240**(1995), 130.
- [3] P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.*, **64**(1990), 1839, *ibid.*, **67**(1991), 2092; 3844.
- [4] P. W. Anderson, *Science*, **235**(1987), 1196; F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 3759.
- [5] See, e. g., the Review, L. Yu, in "Recent Progress in Many-body Theories", Vol. 3, eds. by T. L. Ainsworth, C. F. Campbell, B. E. Clenceats and E. Krotscheck (Plenum, 1992), p. 157.
- [6] Shiping Feng, J. B. Wu, Z. B. Su and L. Yu, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 15192.
- [7] Shiping Feng, Z. B. Su and L. Yu, *Phys. Rev.*, **B49** (1994), 2368; *Mod. Phys. Lett.*, **B7**(1993), 1013.
- [8] Shiping Feng, *Physica*, **C232** (1994), 119.
- [9] Xin Xu, Yun Song and Shiping Feng, *Mod. Phys. Lett.*, **D9**(1995), 1623.
- [10] E. Dagotto *et al.*, *Phys. Rev.*, **B45**(1972), 10741.
- [11] J. D. Jorgensen *et al.*, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 11337; D. R. Harshman *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **63**(1989), 1187.
- [12] V. J. Emery *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **64**(1990), 475.

FERMION-SPIN APPROACH TO STUDY A DOPED ANTIFERROMAGNET

XU XIN SONG YUN

(Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875)

FENG SHI-PING

(Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875;
National Laboratory of Superconductivity, Academia Sinica, Beijing 100080)

(Received 3 May 1995)

ABSTRACT

Within the mean-field approximation, we discuss effects of the projection operator in the fermion-spin theory. The ground-state kinetic energy of the t-J model is studied, and the results show that the mean-field ground-state kinetic energy is consistent with the numerical results. The possible phase separation is also discussed.

PACC: 7145; 7510; 7420