

掺杂各向异性三角晶格系统的自旋动力学*

刘 斌¹⁾ 梁 颖¹⁾ 冯世平¹⁾²⁾

¹⁾ 北京师范大学物理系, 北京 100875)

²⁾ 中国科学院交叉学科理论研究中心, 北京 100080)

(2003 年 11 月 27 日收到, 2004 年 2 月 12 日收到修改稿)

在 t - J 模型和 fermion-spin 理论框架下, 研究了欠掺杂区各向异性三角晶格反铁磁体的自旋动力学. 与掺杂的四方晶格反铁磁体一样, 随着掺杂的增大出现了公度到非公度的转变, 而且散射峰的位置与各向异性度有关. 尽管非公度峰的位置不随能量变化, 但其权重随能量的增大而降低.

关键词: t - J 模型, fermion-spin 理论, 三角晶格

PACC: 7540G, 7540F, 7550G

自从实验上发现铜氧化物高温超导材料以来, 对其结构的研究已经取得了共识, 而且这些材料都具有的 CuO_2 平面决定了其基本的物理性质^[1,2]. CuO_2 平面里 Cu 离子形成二维正方晶格点阵, 在没有掺杂的半满情况下, 这些材料是 Mott 绝缘体. 由于这些特殊的性质, Anderson^[3] 认为其基态可能是共振价键自旋液体态, 而且这种自旋液体态是导致高温超导电性的重要原因之一. 共振价键自旋液体态是 Anderson^[4] 最早为解释二维三角晶格反铁磁系统的基态而提出的一种奇异自旋液体态. Anderson 认为由于三角晶格反铁磁系统自身所固有的自旋阻挫效应, 这种系统的基态很可能是没有反铁磁长程序的自旋液体态. 后来 Kalmeyer 和 Laughlin^[5] 发现三角晶格反铁磁系统中的共振价键自旋液体态是类似于玻色型的量子霍耳效应态, 并有可能导致一种新的超导体.

随着对铜氧化物超导材料和其他反铁磁材料的深入研究, 人们发现掺杂对反铁磁材料的磁学性质会产生很大的影响. 随着掺杂的增多, 反铁磁材料的反铁磁长程序会消失, 取而代之的是短程反铁磁关联. 一系列中子散射实验表明, 随着掺杂的增大, 公度的反铁磁长程序被抑制后将出现非公度的短程磁关联. 对于四方晶格材料, 这些非公度的散射峰出现在倒格子空间 $[(1 \pm \delta)\pi, \pi]$ 和 $[\pi, (1 \pm \delta)\pi]$ 位置^[6,7]. 同时, 与掺杂有关的不公度率和超导转变温度之间的关系也表明磁关联和超导电性之间有密切

关系^[8]. 最近, 从 t - J 模型出发, 在以电荷-自旋分离为基础的 fermion-spin 理论^[9] 框架下, 对四方晶格反铁磁材料的非公度反铁磁涨落性质进行了一系列研究^[10]. 研究表明, 只要电子的强关联效应得到恰当的处理, 就能够解释欠掺杂四方晶格反铁磁材料非公度磁涨落的主要性质. 最近有关材料 Cs_2CuCl_4 的中子散射实验^[11] 表明, 该材料具有各向异性三角晶格结构, 最近邻是反铁磁自旋耦合, 如图 1 所示. 磁交换能在 a 轴和 c 轴方向为 J_a , b 轴方向为 J_b . 在 $J_b = 0$ 时, 它为二维四方晶格结构; 在 $J_a = 0$ 时, 它为一系列的退耦自旋链; 在 $J_b = J_a$ 时, 它为

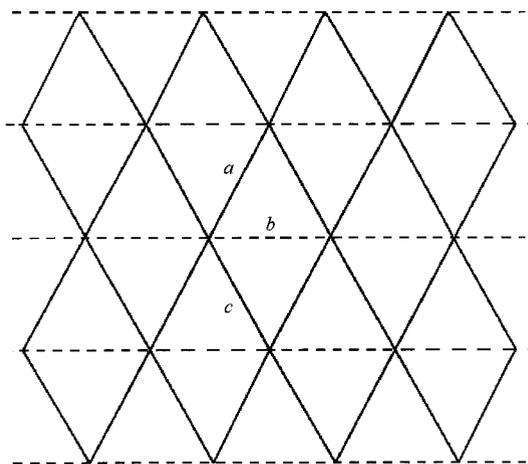


图 1 各向异性三角晶格. 跃迁能和磁交换能在 a 轴和 c 轴方向为 t_a 和 J_a , b 轴方向为 t_b 和 J_b

* 国家自然科学基金(批准号: 10125415, 90103024, 和 10347102)资助的课题.

各向同性三角晶格结构.半满时,该模型是解释有机超导体 κ -(BEDT-TTF)₂X 中许多非传统属性的一个有效模型^[12],而且实验上估计其各向异性度 $J_b/J_a = 0.3-1$ ^[13].对于掺杂的各向异性三角晶格的各种物理性质现在尚不清楚,但是可以肯定的是各向异性和阻挫的共同效应对这类系统物理性质有很大的影响.虽然三角晶格与四方晶格在结构上存在差异,但它们最本质的强关联属性还是相同的.那么,掺杂三角晶格反铁磁体中是否同样存在非公度反铁磁涨落这一特殊性质呢?本文将从 t - J 模型出发,探讨各向异性三角晶格的自旋动力学.

描述各向异性三角晶格反铁磁系统的 t - J 模型可表述为

$$\begin{aligned}
 H = & -t_a \sum_{i\eta} c_{i\sigma}^+ c_{i+\eta\sigma} - t_b \sum_{i\tau} c_{i\sigma}^+ c_{i+\tau\sigma} \\
 & + \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + J_a \sum_{i\eta} s_i \cdot s_{i+\eta} \\
 & + J_b \sum_{i\tau} s_i \cdot s_{i+\tau}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

其中 $\eta = \pm a, \pm c, \tau = \pm b$ 表示最近邻六个格点位置, $c_{i\sigma}^+$ ($c_{i\sigma}$) 是电子上升(下降)算符, $s_i = c_{i\sigma}^+ \sigma c_{i\sigma} / 2$ 是自旋算符,而 $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 是泡利矩阵, μ 为化学势. t - J 模型描述的是没有电子双重占据的情况,即 $\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} \leq 1$.在解析计算中能够满足这一电子单

占据约束条件的理论框架是 fermion-spin 理论^[9],

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

这里无自旋的费密子算符 h_i 描述电子的电荷自由度,而自旋算符 S_i 描述电子的自旋自由度,然后没有电子双重占据的局域约束条件 $\sum_{\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} = 1 - h_i^+ h_i \leq 1$ 自动满足.在这个 fermion-spin 表象下, t - J 模型(1)可以表述成为

$$\begin{aligned}
 H = & t_a \sum_{i\eta} h_{i+\eta}^+ h_i (s_i^+ s_{i+\eta}^- + s_i^- s_{i+\eta}^+) \\
 & + t_b \sum_{i\tau} h_{i+\tau}^+ h_i (s_i^+ s_{i+\tau}^- + s_i^- s_{i+\tau}^+) \\
 & - \mu \sum_i h_i^+ h_i + J_{\text{eff}}^a \sum_{i\eta} s_i \cdot s_{i+\eta} \\
 & + J_{\text{eff}}^b \sum_{i\tau} s_i \cdot s_{i+\tau}, \quad (3)
 \end{aligned}$$

这里 $J_{\text{eff}}^a = J_a[(1-x)^2 - \phi_a^2]$, $J_{\text{eff}}^b = J_b[(1-x)^2 - \phi_b^2]$, x 是掺杂浓度, $\phi_a = h_i^+ h_{i+\eta}$, $\phi_b = h_i^+ h_{i+\tau}$ 是 holon 序参数.

在 fermion-spin 理论中,自旋的涨落只能耦合到 spinon^[10].在没有长程序的自旋液体态情况下,一些理论工作者已讨论了掺杂的四方晶格反铁磁材料的自旋动力学^[10],根据他们的讨论^[10],我们得到无长程序掺杂各向异性三角晶格反铁磁系统的动力学自旋结构因子,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}(k, \omega) = & -\mathcal{I} [1 + n_{\text{B}}(\omega)] \text{Im} D(k, \omega) \\
 = & -\mathcal{I} [1 + n_{\text{B}}(\omega)] \times \frac{B_k^2 \text{Im} \sum_s^{(2)}(k, \omega)}{[\omega^2 - \omega_k^2 - B_k \text{Re} \sum_s^{(2)}(k, \omega)]^2 + [B_k \text{Im} \sum_s^{(2)}(k, \omega)]^2}, \quad (4)
 \end{aligned}$$

其中 $D^{-1}(k, \omega) = D^{(0)-1}(k, \omega) - \sum_s^{(2)}(k, \omega)$ 是 spinon 超出平均场的格林函数,而其在平均场的格林函数为 $D^{(0)-1}(k, \omega) = (\omega^2 - \omega_k^2) \mathcal{B}_k / \sum_s^{(2)}(k, \omega)$ 是 spinon 的二级自能,

$$\begin{aligned}
 \sum_s^{(2)}(k, \omega) = & \left(\frac{1}{N} \right)^2 \sum_{pp'} \zeta_{k, p, p'}^2 \frac{B_{k+p}}{2\omega_{k+p}} \\
 & \times \left(\frac{F_1(k, p, p')}{\omega + \xi_{p+p'} - \xi_{p'} - \omega_{k+p}} \right. \\
 & \left. - \frac{F_2(k, p, p')}{\omega + \xi_{k+p'} - \xi_{p'} + \omega_{k+p}} \right), \quad (5)
 \end{aligned}$$

这里

$$\zeta_{k, p, p'} = t_a Z_a (\gamma_{k+p+p'}^a + \gamma_{k-p}^a) + t_b Z_b (\gamma_{k+p+p'}^b +$$

$\gamma_{k-p}^b), \gamma_k^a = (1/Z_a) \sum_{\eta} e^{ik \cdot \eta}, \gamma_k^b = (1/Z_b) \sum_{\tau} e^{ik \cdot \tau}, Z_a = 4$ 和 $Z_b = 2$ 是最近邻格点数.并且

$$\begin{aligned}
 B_k = & \Delta_a [(2\epsilon_a X_a^z + X_a) \gamma_k^a - (\epsilon_a X_a + 2X_a^z)] \\
 & + \Delta_b [(2\epsilon_b X_b^z + X_b) \gamma_k^b - (\epsilon_b X_b + 2X_b^z)], \\
 \Delta_a = & 2Z_a J_{\text{eff}}^a, \Delta_b = 2Z^b J_{\text{eff}}^b, \epsilon_a = 1 + 2t_a \phi_a / J_{\text{eff}}^a, \epsilon_b = 1 + 2t_b \phi_b / J_{\text{eff}}^b, \text{而}
 \end{aligned}$$

$F_1(k, p, p') = n_{\text{F}}(\xi_{p+p'}) \mathbf{I} [1 - n_{\text{F}}(\xi_{p'})] + [1 + n_{\text{B}}(\omega_{k+p})] \mathbf{I} [n_{\text{F}}(\xi_{p'}) - n_{\text{F}}(\xi_{p+p'})];$
 $F_2(k, p, p') = n_{\text{F}}(\xi_{p+p'}) \mathbf{I} [1 - n_{\text{F}}(\xi_p)] - n_{\text{B}}(\omega_{k+p}) \mathbf{I} [n_{\text{F}}(\xi_{p'}) - n_{\text{F}}(\xi_{p+p'})].$
 $n_{\text{F}}(\xi_k)$ 和 $n_{\text{B}}(\omega_k)$ 分别是费米和玻色分布函数. holon 的平均场能谱为

$$\begin{aligned} \xi_k &= 2t_a Z_a X_a \gamma_k^a + 2t_b Z_b X_b \gamma_k^b - \mu, \\ \omega_k^2 &= \Delta_a^2 (A_{11} (\gamma_k^a)^2 + A_{12} \gamma_k^a + A_{13}) \\ &\quad + \Delta_b^2 (A_{21} (\gamma_k^b)^2 + A_{22} \gamma_k^b + A_{23}) \\ &\quad + \Delta_1 \Delta_2 (A_{31} \gamma_k^a \gamma_k^b + A_{32} \gamma_k^b + A'_{32} \gamma_k^a + A_{33}) \end{aligned}$$

是 spinon 平均场能谱. 其中

$$\begin{aligned} A_{11} &= \alpha \epsilon_a (X_a / 2 + \epsilon_a X_a^z), \\ A_{12} &= \epsilon_a [\alpha \epsilon_a X_a (1 - Z_a) + \alpha (2X_a^z - \epsilon_a Z_a) \\ &\quad - (1 - \alpha) - 2\alpha Z_a (X_a^z + C_a^z)] / 2 Z_a, \\ A_{13} &= \alpha C_a^z + [(1 - \alpha)(1 + \epsilon_a^2) + 2\alpha (C_a Z_a \\ &\quad - 2X_a^z) \epsilon_a^2 - 2\alpha \epsilon_a X_a] / 4 Z_a, \\ A_{21} &= \alpha \epsilon_b (X_b / 2 + \epsilon_b X_b^z), \\ A_{22} &= \epsilon_b [\alpha \epsilon_b X_b (1 - Z_b) + \alpha (2X_b^z - \epsilon_b Z_b) \\ &\quad - (1 - \alpha) - 2\alpha Z_b (X_b^z + C_b^z)] / 2 Z_b, \\ A_{23} &= \alpha C_b^z + [(1 - \alpha)(1 + \epsilon_b^2) + 2\alpha (C_b Z_b \\ &\quad - 2X_b^z) \epsilon_b^2 - 2\alpha \epsilon_b X_b] / 4 Z_b, \\ A_{31} &= \alpha \epsilon_a \epsilon_b (X_a^z + X_b^z) + \alpha (\epsilon_b X_a + \epsilon_a X_b) / 2, \\ A_{32} &= -\alpha \epsilon_a (C_c + \epsilon_b X_a) - \alpha \epsilon_b (C_c + X_a^z), \\ A'_{32} &= -\alpha \epsilon_b (C_c + \epsilon_a X_b) - \alpha \epsilon_a (C_c + X_b^z), \\ A_{33} &= \alpha \epsilon_a \epsilon_b C_c + 2\alpha C_c^z, \end{aligned}$$

而自旋关联函数为

$$\begin{aligned} X_a &= S_i^+ S_{i+\eta}^-, \\ X_b &= S_i^+ S_{i+\tau}^-, \\ X_a^z &= S_i^z S_{i+\eta}^z, X_b^z = S_i^z S_{i+\tau}^z, \\ C_a &= (1/Z_a^2) \sum_{\eta\eta'} S_{i+\eta}^+ S_{i+\eta'}^-, \\ C_a^z &= (1/Z_a^2) \sum_{\eta\eta'} S_{i+\eta}^z S_{i+\eta'}^z, \\ C_b &= (1/Z_b^2) \sum_{\tau\tau'} S_{i+\tau}^+ S_{i+\tau'}^-, \\ C_b^z &= (1/Z_b^2) \sum_{\tau\tau'} S_{i+\tau}^z S_{i+\tau'}^z, \\ C_c &= (1/Z_a Z_b) \sum_{\eta\tau} S_{i+\eta}^+ S_{i+\tau}^-, \\ C_c^z &= (1/Z_a Z_b) \sum_{\eta\tau} S_{i+\eta}^z S_{i+\tau}^z. \end{aligned}$$

所有这些平均场序参数和化学势 μ 可通过自洽方程求解得到^[14].

我们已经完成了对于动力学自旋结构因子 $\mathcal{S}(k, \omega)$ 的计算. 图 2 给出了在掺杂浓度 $x = 0.015$ (接近半满), 温度 $T = 0.15 J_b$, 能量 $\omega = 0.05 J_b$, $t_b / J_b = 2.5$ 图(a) $t_a / t_b = J_a / J_b = 0.6$ (b) $t_a / t_b = J_a / J_b = 1$ (c) $t_a / t_b = J_a / J_b = 1.6$ 时散射峰的位置(自此以后以 $[4\pi/3, 2\pi/\sqrt{3}]$ 为单位). 我们知道在各向同性情况下, 在半满或非常小的掺杂时, 散射峰出现在反

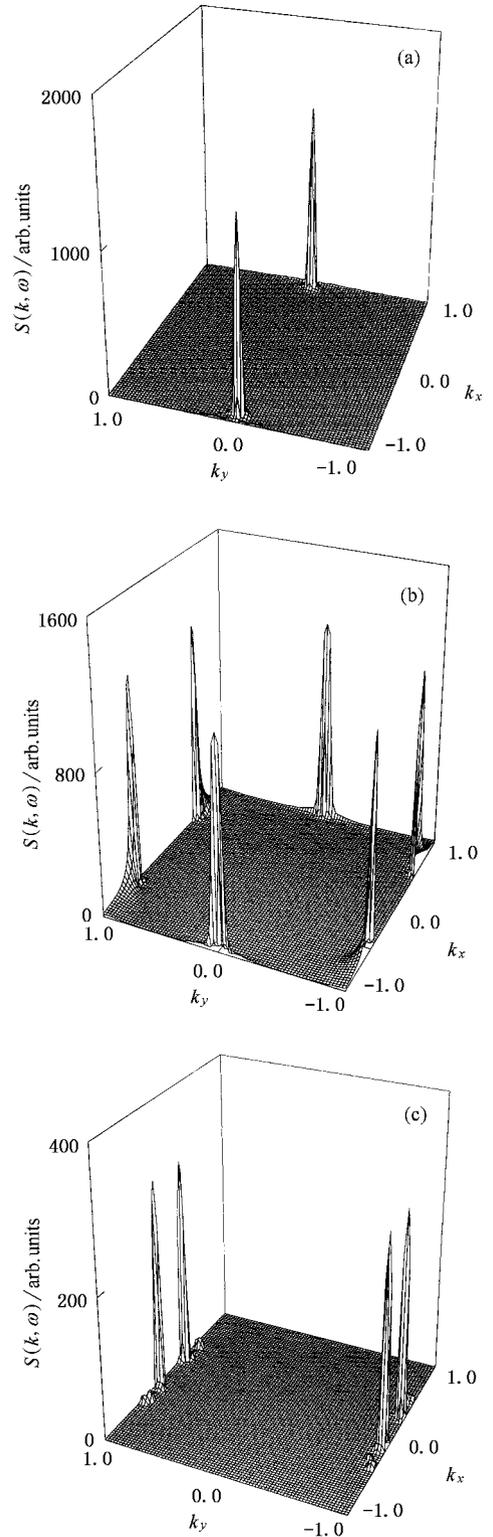


图 2 动力学自旋结构因子 $\mathcal{S}(k, \omega)$ 在 $x = 0.015$, $T = 0.15 J_b$, $\omega = 0.05 J_b$, $t_b / J_b = 2.5$ (a) $t_a / t_b = J_a / J_b = 0.6$, (b) $t_a / t_b = J_a / J_b = 1$ (c) $t_a / t_b = J_a / J_b = 1.6$ 时的情况

铁磁波矢处. 我们现在的结果显然说明在各向异性情况下, 散射峰随各向异性度 t_a / t_b 和 J_a / J_b 的变化而

变化.对于 $t_a/t_b = J_a/J_b < 1$ 时,系统的结构趋向于自旋链情况,这时散射峰是在两个反铁磁波矢点上.对于 $t_a/t_b = J_a/J_b = 1$ 时,系统是各向同性三角晶格反铁磁体,这时散射峰是在六个反铁磁波矢点上.而对于 $t_a/t_b = J_a/J_b > 1$ 时,系统的结构类似于四方晶格,这时散射峰是在四个反铁磁波矢点上.为了更好地理解在欠掺杂情况下这类系统的自旋动力学行为,在图 3 中给出了在 $x = 0.06$, $T = 0.15J_b$, $\omega = 0.05J_b$, $t_b/J_b = 2.5$ (a) $t_a/t_b = J_a/J_b = 0.6$ (b) $t_a/t_b = J_a/J_b = 1$, 和 (c) $t_a/t_b = J_a/J_b = 1.6$ 时散射峰的位置.与图 2 的一套参数相比,这里除了掺杂浓度由 $x = 0.015$ 变为 $x = 0.06$ 外,其余参数均未改变,现在的结果说明,随着掺杂浓度的增加,原来在半满时的每个散射峰立即分裂为两个散射峰^[15],这与各向同性的四方晶格系统类似^[6,7].而且我们也发现在低温情况下,虽然非公度散射峰的位置与能量无关,但是非公度散射峰的权重却随能量的增加而减小,这些结果也类似于四方晶格系统^[10].

掺杂和各向异性度(t_a/t_b 和 J_a/J_b)是造成系统的自旋动力学行为反常的根本原因,这一点可以从方程(4)中 spinon 的重整化能谱

$$E_k^2 = \omega_k^2 + B_k \text{Re} \sum_s^{(2)}(k, E_k)$$

的物理性质中得到证实.在计算中,我们发现在一些特定的波矢处当函数 $W(k, \omega) = \omega^2 - \omega_k^2 - B_k \text{Re} \sum_s^{(2)}(k, \omega) \approx 0$ 时,散射峰出现,然后散射峰的权重由自能的虚部所决定.掺杂以后,holon 和 spinons 自洽运动,而 holon 的运动扰乱了原来在半满时的反铁磁背景,从而导致出现了非公度的自旋关联,而这些非公度峰的数量则基本上由控制几何对称性的各向异性度来决定.

总结起来,在 t - J 模型和 fermion-spin 理论框架下,我们研究了掺杂各向异性三角晶格反铁磁系统的自旋动力学.在接近半满时,随着各向异性度 $t_a/t_b = J_a/J_b$ 的变化,散射峰在布里渊区内位置也发生了变化,并且随着掺杂的增大出现了公度到非公度的转变.尽管散射峰的位置不随能量变化,但其权重随能量的增大而降低.

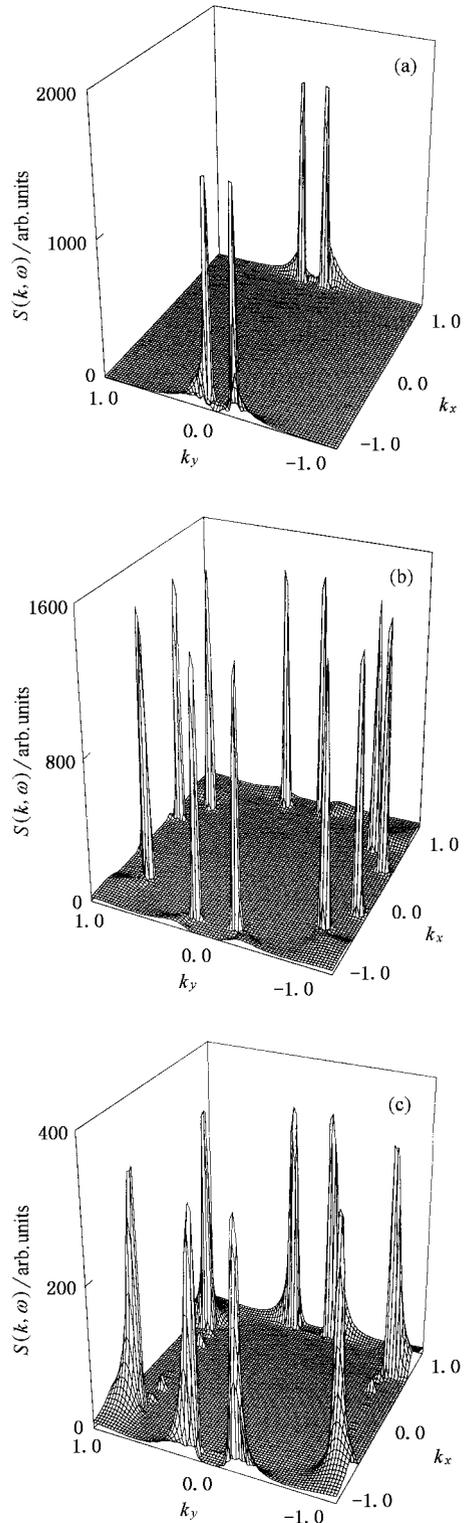


图 3 动力学自旋结构因子 $S(k, \omega)$ 在 $x = 0.06$, $T = 0.15J_b$, $\omega = 0.05J_b$, $t_b/J_b = 2.5$ (a) $t_a/t_b = J_a/J_b = 0.6$ (b) $t_a/t_b = J_a/J_b = 1$, 和 (c) $t_a/t_b = J_a/J_b = 1.6$ 时的情况

- [1] Kastner M A , Birgeneau R J , Shiran G and Endoh Y 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 897
- [2] Kampf A P 1994 *Phys. Rep.* **249** 219
- [3] Anderson P W 1987 *Frontiers and Borderlines in Many Particle Physics*, edited by R. A. Broglia and J. R. Schrieffer (North-Holland , Amsterdam 1987), p. 1
Anderson P W 1987 *Science* **235** 1196
- [4] Anderson P W 1973 *Mater. Res. Bull.* **8** 153
Fazekas P and Anderson P W 1974 *Philos. Mag.* **30** 423
- [5] Kalmeyer and Laughlin R B 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 2095
Laughlin R B 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 2677
Laughlin R B 1988 *Science* **242** 526
- [6] Yamada K *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **57** 6165
- [7] Dai P *et al* 2001 *Phys. Rev. B* **63** 54525
- [8] Balatsky A V and Bourges P 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 5337
- [9] Feng S P , Su Z B and Yu L 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2368
- [10] Feng S P *et al* 2002 *Phys. Rev. B* **66** 064503
Yuan F *et al* 2001 *Phys. Rev. B* **64** 224505
Feng S P *et al* 1998 *Phys. Rev. B* **57** 10328
- [11] Coldea R , Tennant D A , Tsvelik A M and Tylezynski Z 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 1335
- [12] McKenzie R H 1998 *Comments Condens. Matter Phys.* **18** 309
- [13] McKenzie R H *Cond-mat/9802198*
- [14] Feng S P and Song Y 1997 *Phys. Rev. B* **55** 642
- [15] Liang Y and Feng S P 2002 *Phys. Lett. A* **296** 301
Liang Y , Ma T X and Feng S P 2003 *Commun. Theor. Phys.* **39** 749

Spin dynamics in doped spatially anisotropic triangular antiferromagnets *

Liu Bin¹⁾ Liang Ying¹⁾ Feng Shi-Ping^{1,2)}

¹⁾*Department of Physics , Beijing Normal University , Beijing 100875 , China)*

²⁾*Interdisciplinary Center of Theoretical Studies , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100080 , China)*

(Received 27 November 2003 ; revised manuscript received 12 February 2004)

Abstract

Within the t - J model , the spin dynamics of the underdoped spatially anisotropic triangular antiferromagnets is studied based on the fermion-spin theory . It is shown that the pattern of the neutron scattering peaks depends on both anisotropic parameter and doping . Although the positions of the neutron scattering peaks are energy independent , the weight of these peaks decreases with increasing energy .

Keywords : t - J model , fermion-spin theory , triangular antiferromagnets

PACC : 7540G , 7540F , 7550G

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10125415 , 90103024 , and 10347102).