

用重整化群流方程方法求解 t-J 模型元激发能谱

汪 洪^{1)†} 娄 平¹⁾ 庄永河²⁾

¹⁾ 安徽大学物理系, 合肥 230039)

²⁾ 中国电子科技集团公司第 43 研究所, 合肥 230022)

(2003 年 3 月 7 日收到, 2003 年 4 月 29 日收到修改稿)

t-J 模型是研究电子强关联作用和高 T_c 超导理论的重要模型之一. 将重整化群方法应用于 t-J 模型, 得出相应的流方程, 再由流方程求解 t-J 模型的元激发能谱, 并利用函数的对称性, 解出 t-J 模型在零温条件下能谱的具体表达式, 最后与常规的格林函数方法所得的结果作了比较.

关键词: 重整化群, t-J 模型, 流方程

PACC: 6460A, 7400, 7420M

1. 引 言

t-J 模型是研究电子强关联作用和高 T_c 超导理论的重要模型之一. t-J 模型最初由 Anderson 用于研究铜氧化物超导体的 CuO_2 面的电子特性^[1], 随后一些研究者采用不同方法对 t-J 模型进行求解^[2-4], 其中主要有 Barentzen 和 Izyumov, 他们均采用格林函数方法对 t-J 模型进行求解. 近年来, 一些研究者开始探索用一种新方法即重整化群流方程方法求解系统能谱^[5,6]. 本文将重整化群方法应用于 t-J 模型, 得出相应的流方程, 再由流方程求解出在零温条件下 t-J 模型的相互作用系数、相互作用势和元激发能谱. 并在此基础上利用能谱表达式中被积函数的特性, 将积分分解成几项非奇异项, 逐一积分, 最后求解出 t-J 模型的元激发能谱具体的函数表达式. 然后将此结果与 Barentzen 和 Izyumov 用常规格林函数方法解出的 t-J 模型的能谱作了比较, 其结果基本一致. 用常规格林函数方法求解 t-J 模型的能谱时, 是先通过数值计算画出能谱曲线, 再拟合成函数式, 与其比较. 本文用重整化群流方程方法直接求解 t-J 模型能谱的函数式, 这一点较文献 [2,4] 的方法有了很大的进步. 重整化群流方程方法是一种较为精确的求解系统能谱的新方法.

2. 理论模型

t-J 模型的哈密顿量可表述为^[4]

$$H = -t \sum_{i,j,\sigma} (C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} + \text{c. c.}) + J \sum_{i,j} (S_i \cdot S_j - \frac{1}{4} n_i n_j), \quad (1)$$

其中 $C_{i\sigma}^+$ 和 $C_{i\sigma}$ 分别是约化的 Hilbert 空间中 σ 自旋电子的产生和湮没算符, $S_i^\mu = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} C_{i\alpha}^+ \sigma_{\alpha\beta}^\mu C_{i\beta}$ 是自旋算符, $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ 和 $n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma}$ 是粒子数算符.

当自旋 $S = 1/2$ 时, 引入辅助场, 即令 $C_{i\sigma}^+ = h_{i\sigma}^+ b_i$ 以及 $C_{i\sigma} = h_{i\sigma} b_i^+$ 且 $\sum_{\sigma} h_{i\sigma}^+ h_{i\sigma} + b_i^+ b_i = 1$ (这里 $h_{i\sigma}^+$ 和 $h_{i\sigma}$ 分别是二次量子化中费米子产生算符和湮没算符, b_i^+ 和 b_i 分别是二次量子化中玻色子产生算符和湮没算符), 在 k 空间进一步引入变换 $b_q = u_q \beta_q + v_q \beta_{-q}^+$, 其中 β_q^+ 和 β_q 分别为新的玻色子产生算符和湮没算符. 参考文献 [4] (1) 式可改写成

$$H = \sum_q \omega_q^0 \beta_q^+ \beta_q - \mu \sum_k h_k^+ h_k + \sum_{k,q} [M_{q,k} h_k^+ h_{k-q} \beta_q + \text{c. c.}], \quad (2)$$

式中 ω_q^0 为玻色子间相互作用系数, h_k^+ 和 h_k 分别为 k 空间费米子产生算符和湮没算符, μ 为化学势, $M_{q,k}$ 为费米子和玻色子间相互作用系数, $M_{q,k}$ 和 ω_q^0

[†] Email: zyhwh@mail.hf.ah.cn

可分别表述为

$$M_{q,k} = zt(u_q \gamma_{k-q} + \nu_q \gamma_k), \quad (3a)$$

$$\omega_q^0 = \frac{1}{2} zJ \sqrt{1 - \gamma_q^2}. \quad (3b)$$

在(3a)(3b)式中

$$u_q = \left[\frac{(1 - \gamma_q^2)^{-1/2} + 1}{2} \right]^{1/2}, \quad (4a)$$

$$\nu_q = -\text{sign}(\gamma_q) \left[\frac{(1 - \gamma_q^2)^{-1/2} - 1}{2} \right]^{1/2}, \quad (4b)$$

$$\gamma_q = \frac{2}{z} \sum_{\alpha=1}^{z/2} \cos(q_\alpha), \quad (4c)$$

$$z = 4. \quad (4d)$$

3. 计算方法

重整化群的主要思想是用一系列微小的连续变换来替代对哈密顿量的单步变换, 以实现哈密顿量的对角化. 本文用 $\gamma(l)$ 表示重整化群方法中生成函数, l 表示无穷小变量. 则由文献[5]知生成函数 $\gamma(l)$ 无穷小变量 l 和哈密顿量 H 之间的关系可表述为

$$\frac{dH}{dl} = [\gamma(l), H(l)], \quad (5)$$

$$\gamma(l) = [H_0, H_l]. \quad (6)$$

H_0 和 H_l 将(2)式中哈密顿量 H 分为两部分, 其中 H_0 不含相互作用项, H_l 为相互作用项. 则有

$$H_0 = \sum_q \omega_q^0 \beta_q^+ \beta_q - \mu \sum_k h_k^+ h_k, \quad (7a)$$

$$H_l = \sum (M_{q,k} h_k^+ h_{k-q} \beta_q + \text{c.c.}). \quad (7b)$$

再将(7a)式和(7b)式代入(6)式, 并利用算符之间的对易关系, 可推导出生存函数 $\gamma(l)$ 的表达式为

$$\eta = - \sum_{k,q} \omega_q^0 M_{q,k} (\beta_q h_k^+ h_{k-q} - \beta_q^+ h_{k-q}^+ h_k). \quad (8)$$

在(8)式中参数 $M_{q,k}$ 和 ω_q^0 随 l 变化. 由(2)式(5)式(7a)式(7b)式和(8)式以及算符之间的对易关系经一系列的数学推导可得到一组流方程如下:

$$\frac{dM_{q,k}}{dl} = -M_{q,k} \omega_q^0, \quad (9)$$

$$\frac{d\omega_q^0}{dl} = 2 \sum_k M_{q,k}^2 \omega_q^0 (n_{k-q} - n_k), \quad (10)$$

$$\frac{d\epsilon_k}{dl} = 2 \sum_q [\hat{n}_q M_{q,k+q}^2 \omega_q^0 - (\hat{n}_q + 1) M_{q,k}^2 \omega_q^0], \quad (11)$$

$$\frac{dU_{q,k,k'}}{dl} = -2M_{q,k+q} M_{q,k'} \omega_q^0, \quad (12)$$

其中 \hat{n} 为玻色子分布函数, n 为费米子分布函数, ϵ_k 是能量, $U_{q,k,k'}$ 是由玻色子引起的费米子间相互作用势 (ϵ_k 和 $U_{q,k,k'}$ 分别为推导后的 $\frac{dH}{dl}$ 表达式中相应: $\beta_q^+ \beta_q :: h_k^+ h_k$ 和 $h_{k+q}^+ h_{k-q}^+ h_k h_k$ 前的系数).

本文研究的是方程组在温度趋于绝对零度条件下的解. 温度趋于绝对零度时方程(10)简化为 $\frac{d\omega_q^0}{dl} = 0$, 由此可得 ω_q^0 不随 l 变化. 然后代入方程(9)可解出费米子和玻色子相互作用系数

$$M_{q,k}(l) = M_{q,k}(0) e^{-\omega_q^0 l}. \quad (13)$$

将(13)式代入方程(12)可得相互作用势为

$$U_{q,k,k'} = -M_{q,q+k}(0) M_{q,k}(0) \gamma \omega_q^0. \quad (14)$$

再将(13)式代入方程(11)可得能谱

$$\begin{aligned} \epsilon_k(l) = & \epsilon_k(0) - \sum_q [M_{q,k+q}(0) \hat{n}_q \\ & - M_{q,k}(0) (\hat{n}_q + 1)] \\ & \times (e^{-2\omega_q^0 l} - 1) \gamma \omega_q^0, \end{aligned} \quad (15)$$

其中 $\epsilon_k(0) = -\mu$, 考虑到玻色子粒子数 $\hat{n} = \frac{1}{e^{-\frac{\mu - \epsilon}{kT}} - 1}$ 当温度趋于绝对零度时, 得出 t-J 模型元激发能谱的表达式为

$$\epsilon_k^R = -\mu - \sum_q M_{q,k}(0) \gamma / \omega_q^0. \quad (16)$$

4. 计算结果

将初始条件 $M_{q,k}(0)$ 和 ω_q^0 表达式代入(16)式, 可得

$$\begin{aligned} \epsilon_k^R = & -\mu - \sum_q [zt(u_q \gamma_{k-q} + \nu_q \gamma_k)]^2 \\ & / \frac{1}{2} zJ \sqrt{1 - \gamma_q^2}, \end{aligned} \quad (17a)$$

令 $q' = -q$ 代入(17a)式, 并利用余弦函数对称性, (17a)式可改写为

$$\begin{aligned} \epsilon_k^R = & -\mu - \sum_q [zt(u_q \gamma_{k+q} + \nu_q \gamma_k)]^2 \\ & / \frac{1}{2} zJ \sqrt{1 - \gamma_q^2}. \end{aligned} \quad (17b)$$

将(4a)(4b)(4c)和(4d)式代入(17a)和(17b)式, 并用积分代替求和, 可得能谱表达式为

$$\begin{aligned} \epsilon_k^R = & -\mu - c (I_1 \cos^2 k_x + 2I_2 \cos k_x \cos k_y \\ & + I_3 \cos^2 k_y + I_4 + 2I_5 \sin k_x \sin k_y), \end{aligned} \quad (18)$$

其中

$$c = \frac{zt^2}{J} \cdot \frac{1}{16\pi^2}, \quad (19)$$

$$I_1 = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq_x dq_y \frac{[(1 + \sqrt{1 - \gamma_q^2}) \cos 2q_x + (1 - \sqrt{1 - \gamma_q^2}) - 2\gamma_q \cos q_x]}{(1 - \gamma_q^2)}, \quad (20)$$

$$I_2 = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq_x dq_y \frac{[(1 + \sqrt{1 - \gamma_q^2}) \cos q_x \cos q_y + (1 - \sqrt{1 - \gamma_q^2}) - 2\gamma_q^2]}{(1 - \gamma_q^2)}, \quad (21)$$

$$I_3 = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq_x dq_y \frac{[(1 + \sqrt{1 - \gamma_q^2}) \cos 2q_y + (1 - \sqrt{1 - \gamma_q^2}) - 2\gamma_q \cos q_y]}{(1 - \gamma_q^2)}, \quad (22)$$

$$I_4 = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq_x dq_y \frac{(1 + \sqrt{1 - \gamma_q^2}) (\sin^2 q_x + \sin^2 q_y)}{(1 - \gamma_q^2)}, \quad (23)$$

$$I_5 = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq_x dq_y \frac{(1 + \sqrt{1 - \gamma_q^2}) \sin q_x \sin q_y}{(1 - \gamma_q^2)}. \quad (24)$$

我们可以看出以上五项积分都是非奇异的, 根据二重积分的性质和三角函数的性质可知: $I_1 = I_3$, $I_5 = 0$, 然后再运用变步长 Simpson 二重积分法对 I_1 , I_2 和 I_4 逐一进行数值计算处理可得

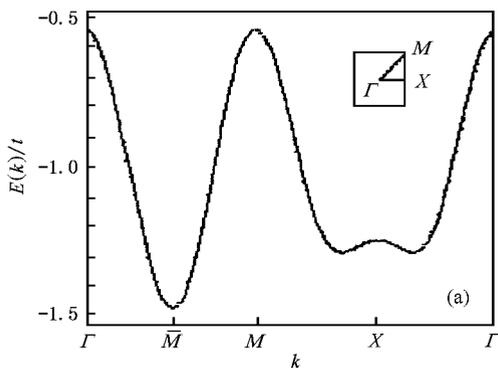
$$I_1 = -24.363, I_2 = -14.826, I_4 = 103.32.$$

然后将以上结果代入(18)式, 可以得出能谱的函数式

$$\varepsilon_k^R = -\mu + d [24.363 (\cos^2 k_x + \cos^2 k_y) + 29.653 \cos k_x \cos k_y - 103.32]. \quad (25)$$

5. 分析与比较

图 1(a) 为(25)式在指定自变量变化路径能谱的函数图, 图 1(b) 为 Barentzen 采用格林函数方法求解的 t-J 模型元激发能谱^[21].

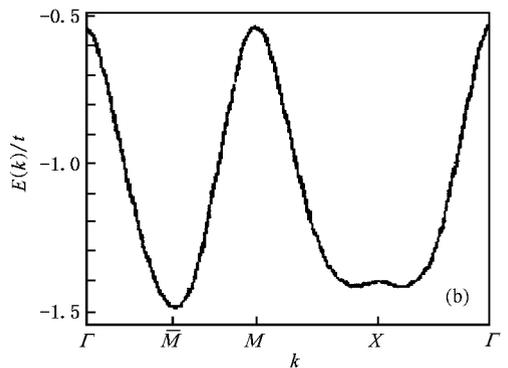


(a) 重整化群流方程方法解出的 t-J 模型能谱曲线

图 1(a) 的曲线 1 为(25)式在指定自变量变化路径能谱归一化曲线, 图 1(a) 的曲线 2 和图 1(b) 均为 Izyumov 采用格林函数方法求解的 t-J 模型元激发能谱在 J/t 取不同值时归一化曲线^[41].

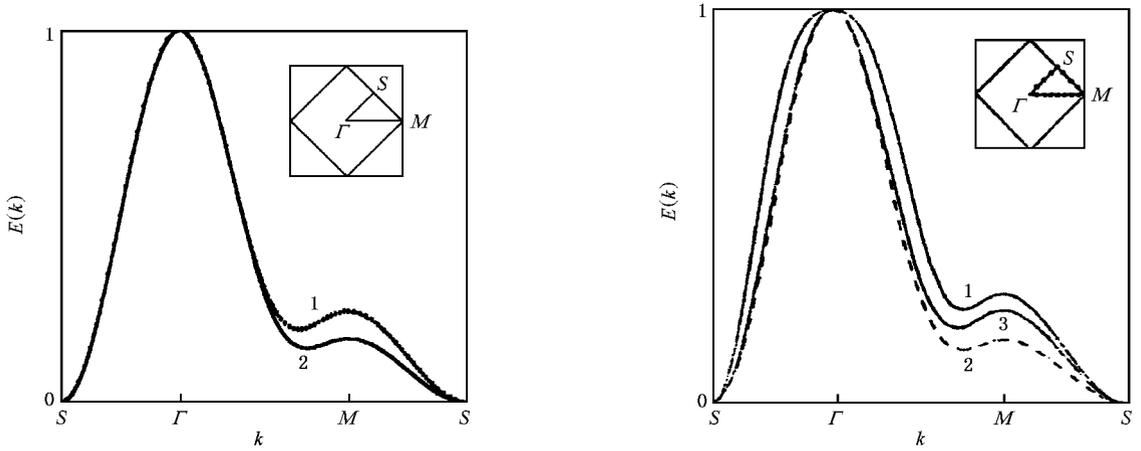
从图 1 和图 2 可以看出, 本文采用重整化群流方程方法, 在零温条件下求解的 t-J 模型元激发能谱的结果, 与最近两文献中采用常规格林函数方法求得的结果基本一致. 这说明重整化群流方程方法是一种较为精确的求解系统能谱的新方法.

从图 1(a) 图和(25)式还可看出, 本文采用重整化群流方程方法, 求解 t-J 模型在零温条件下能谱归一化曲线, 无论 J/t 为何值时归一化曲线均重合. 而图 1(b) 表明, Izyumov 采用格林函数方法求解的 t-J 模型元激发能谱归一化曲线, 当 J/t 取值不同时, 归一化曲线不重合, 这一点有待于更进一步的研究.



(b) 常规格林函数方法解出的 t-J 模型能谱曲线

图 1 $J/t = 0.4$ 时沿 $\Gamma M X \Gamma$ 路径能谱曲线



(a) 曲线 1 为由重整化群方法求解出的 t - J 模型能谱归一化曲线; 曲线 2 为格林函数方法求解的 t - J 模型能谱归一化曲线 ($J/t=0.4$)

(b) 常规格林函数方法求解的 t - J 模型能谱归一化曲线, 曲线 1 为 $J/t=0.01$, 曲线 2 为 $J/t=0.8$, 曲线 3 为 J 值较大

图 2 沿 $S\Gamma XS$ 路径 t - J 模型能谱归一化曲线

6. 结 论

本文采用重整化群流方程方法求解 t - J 模型元激发能谱时, 利用函数的对称性, 直接求解出 t - J 模型能谱的具体表达式, 然后再画出 t - J 模型的能谱曲

线, 而 Izyumov 采用格林函数方法求解 t - J 模型元激发能谱时, 先通过数值计算画出能谱曲线, 再拟合成方程. 就这一点而言, 本文采用重整化群流方程方法求解出的结果比格林函数方法求解出的结果更好. 从以上比较可以看出, 重整化群流方程方法是一种较好的精确求解系统能谱的方法.

[1] Anderson P W 1987 *Science* **235** 1196

[2] Barentzen H 1996 *Phys. Rev. B* **53** 5598

[3] Plakida N M and Oudovenko V S 1997 *Phys. Rev. B* **55** R11997

[4] Izyumov Y A 1997 *Physcis-Uspelki* **40** 453

[5] Ragwitz M and Wegner F 1999 *Eur. Phys. J. B* **8** 9

[6] Moca C P, Tifrea I and Crisan M 1998 *Journal of Superconductivity* **11** 723

Flow equations for solving elementary excitation energy spectrum of the t-J model

Wang Hong¹⁾ Lou Ping¹⁾ Zhuang Yong-He²⁾

¹⁾ (*Department of Physics , Anhui University , Hefei 230039 , China*)

²⁾ (*China Electronic Technology Corporation No. 43 Research Institute , Hefei 230022 , China*)

(Received 7 March 2003 ; revised manuscript received 29 April 2003)

Abstract

The t-J model is one of the most important models that is often used to study the theory of the effect of strong electron correlations and high- T_c superconductivity. In this article , the method of renormalization group is used to investigate the t-J model and the elementary excitation energy spectrum of the t-J model is obtained by using the flow equations . Using the symmetry of functions , we can solve the specific expression of the energy spectrum. The result is compared with the result of Green 's function method .

Keywords : renormalization group , t-J model , flow equations

PACC : 6460A , 7400 , 7420M