

一维电声系统中的自旋 – 电荷分离*

赵 晖¹ 宁文强¹ 吴长勤^{1 †} 林海青²

(1 复旦大学物理系 上海 200433)

(2 香港中文大学物理系 沙田 香港)

摘 要 文章作者结合团簇微扰理论和优化声子基近似的方法,通过单电子谱函数的计算,研究了一维关联系统中声子效应对自旋 – 电荷分离的影响,发现由于有限声子频率带来的推迟效应抑制自旋 – 电荷分离,使之在谱函数中不可见,同时还得到电子对和极化子劈裂的信息.

关键词 自旋 – 电荷分离,电声相互作用,单电子谱函数

Spin-charge separation in one-dimensional electron-phonon systems

ZHAO Hui¹ NING Wen-Qiang¹ WU Chang-Qin^{1 †} LIN Hai-Qing²

(1 Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China)

(2 Department of Physics and Institute of Theoretical Physics, The Chinese University of Hong Kong, Shatin, Hong Kong, China)

Abstract Phonon effects on spin – charge separation in one dimension are investigated through the calculation of one – electron spectral functions in terms of the recently developed cluster perturbation theory together with an optimized phonon approach. It is found that the retardation effect due to the finiteness of phonon frequency suppresses the spin – charge separation and eventually makes it invisible in the spectral function. Signatures of electron pairing and polaron splitting in the spectral function are also observed.

Keywords spin charge separation, electron-phonon interactions, spectral function

大多数的一维强关联电子系统不能用传统的费米液体理论来描述,而 Luttinger 液体理论则很好地描述了一维关联系统的特性^[1]. Luttinger 液体的一个重要特性就是自旋 – 电荷分离:低能的激发不再是同时带电荷 e 和自旋 $1/2$ 的准粒子,而是自旋激发和电荷激发相互独立分开,有着不同的速度,我们称之为“spinon”和“holon”.顺着早先的工作^[1],很多学者从理论和实验上研究了自旋 – 电荷分离.特别是通过谱函数的计算,可以发现自旋 – 电荷分离的存在,而谱函数直接对应于实验中的角分辨光电子谱.最近,在一维材料如 SrCuO_2 的角分辨光电子谱实验中也明确发现了“spinon”和“holon”的两支谱^[2].另外,在低维材料中普遍同时存在着很强的电子 – 电子相互作用和电子 – 声子相互作用,电子 – 电子之间的库仑排斥以及电子 – 声子之间的吸引将对自旋 – 电荷的分离产生至关重要的影响.同

时,这两种作用之间的相互影响也是当前强关联领域最为热门的主题之一.

一维的 Holstein-Hubbard 模型是既包含电子-电子相互作用,又包含电子 – 声子相互作用的最基本的一个模型,并被广泛地用来描述一些低维材料.一维 Holstein-Hubbard 模型 Hamiltonian 定义为:

$$H = -t \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - g \sum_i (b_i^\dagger + b_i) n_i + \omega_0 \sum_i b_i^\dagger b_i, \quad (1)$$

其中 $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) 在格点 i 上产生(湮灭)一个自旋为 σ 的电子; b_i^\dagger 和 b_i 是 Einstein 声子在格点 i 上的产生和湮灭算符; $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$, \hbar 是电

* 国家自然科学基金(批准号:90403110)、CUHK 基金(批准号:401504)资助项目

2006-06-12 收到

† 通讯联系人. Email: zqw@fudan.edu.cn

子在相邻格点之间的转移积分,这里作为能量单位; U 是同一格点上的库仑排斥; ω_0 是裸声子频率; g 是电声耦合常数,而与维数无关的电声作用常数定义为 $\lambda = 2g^2/\omega_0$.

单电子谱函数定义为:

$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\langle G | c_{k\sigma}^\dagger \frac{1}{\omega + i\eta + (H - E_0)} c_{k\sigma} | G \rangle + \langle G | c_{k\sigma} \frac{1}{\omega + i\eta - (H - E_0)} c_{k\sigma}^\dagger | G \rangle \right], \quad (2)$$

其中 $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) 产生(湮灭)一个自旋为 σ 、动量为 k 的电子; $|G\rangle$ 是系统的基态波函数; E_0 是系统基态能量; η 是一个小正数. 结合团簇微扰理论和优化声子基近似,我们可以计算一维 Holstein-Hubbard 在热力学极限下的谱函数^[3,4].

首先,在 $\omega_0 \rightarrow \infty$ 的反绝热极限下,自旋 1/2 的 Holstein 模型可以映射到一个有效的动态吸引为 $U_{\text{eff}}(\omega) = 2g^2\omega_0/(\omega_0^2 - \omega^2)$ 的 negative-U Hubbard 模型,这时可以明确得到“spinon”和“holon”的激发谱. 与通常的 Luttinger 液体不同的是,这时电荷的速度要小于自旋的速度. 而对于任何有限的 ω_0 ,我们必须考虑推迟效应的影响. 图 1 显示了由于有限声子频率带来的推迟效应对自旋-电荷分离的影响. 在 $\omega_0 = 4$ ($\lambda = 2$) 的反绝热区域,“spinon”和“holon”激发明显占据着主要的谱权重. 当声子的频率减小到 $\omega_0 = 1$,谱函数中属于声子激发的非相干部分谱权重将占据主导地位. 由于相干部分和非相干部分的激发强烈地混合在一起,我们很难明确分辨出“spinon”和“holon”激发. 在反绝热的弱耦合区域 ($\lambda = 0.5$),“spinon”和“holon”的速度差也相应减小. 相对于强耦合区域 ($\lambda = 2$),自旋电荷分离也几乎不可见. 另外,在绝热弱耦合区域(图 1 中 $\omega_0 = 1$, $\lambda = 0.5$)存在一个激发的劈裂,通过与无自旋的 Holstein 模型中相同参数下计算的谱函数相比较,我们发现这个劈裂来自于极化子间的相互作用. 同时,电子对的激发谱来自于存在一个电子配对的超导相^[5].

在图 2 中,我们在当前的电声耦合下加入电子间的库仑排斥相互作用,并讨论它对自旋电荷的影响. 首先,电子间的相互排斥抑制了电子对的产生,而在强电子关联系统中不能形成电子对. 从图 2 中我们可以发现,电子-电子相互作用和电子-声子相互作用对自旋-电荷分离有着相反的影响. 在确定的强电子-电子相互作用下(如 $U = 4.0$)增加

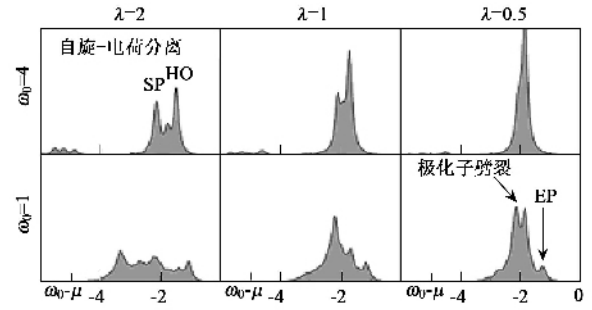


图 1 Holstein 模型的谱函数 $A(0, \omega)$. 图中 SP 和 HO 和分别指“spinon”激发和“holon”激发, EP 指电子对激发. 参数见图 1 中说明

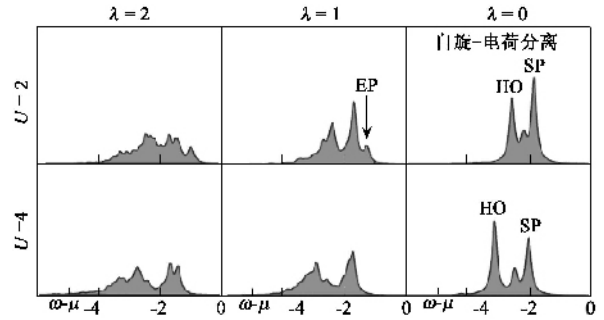


图 2 Holstein-Hubbard 模型的谱函数 $A(0, \omega)$.

电子-声子相互作用,使得激发谱展宽并导致自旋-电荷分离不可分辨. 相反地,当我们固定电声耦合强度,随着电子-电子相互作用的增强,自旋激发和电荷激发的分离也相应增加.

总之,有限声子频率带来的推迟效应抑制自旋-电荷分离,使之在谱函数中不可见. 另外,在强电子相互作用的系统中也需要考虑声子效应的影响.

参 考 文 献

- [1] Tomonaga S. Prog. Theor. Phys., 1950, 5: 544; Luttinger J M. J. Math. Phys., 1963, 4: 1154
- [2] Kim C, Matsuura A Y, Shen Z X et al. Phys. Rev. Lett., 1996, 77: 4054; Kim C, Shen Z X, Motoyama N et al. Phys. Rev. B, 1997, 56: 15589
- [3] Ning W Q, Zhao H, Wu C Q et al. Phys. Rev. Lett., 2006, 96: 156402
- [4] Zhao H, Wu C Q, Lin H Q. Phys. Rev. B, 2005, 71: 115201
- [5] Clay R T, Hardikar R P. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 096401