第 51 卷 第 10 期 2002 年 10 月
1000-3290/2002/51(10)/2355-07

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.51, No.10, October, 2002

高温超导混合配对态与磁通涡旋格子*

周世平 瞿 海 廖红印

(上海大学物理系,上海 201800)

(2001 年 9 月 14 日收到;2002 年 3 月 22 日收到修改稿)

建立在对基于 Gor'kov 方法而导出的微观 Ginzburg-Landau 方程的分析揭示了高温超导体 $YBa_2Cu_3O_7$ 配对态对称性和磁通涡旋格子结构.分析指出,存在一个格子转变温度 T^*,当温度高于 T^* 时,超导基态显示 $d_{x^2-y^2}$ 波对称性特征;低于该温度 s 波沟道幅值成为可观的量级,超导基态为混合 $s-d_{x^2-y^2}$ 态.对应单分量波函数磁通涡旋格子为三角的结构;而稳定的斜格子反映出混合波特征.s 与 d 沟道间耦合约束了磁场下 $d_{x^2-x^2}$ 波对称性自由度,而对高温超导反常输运行为如上临界磁场温度曲线上翘现象所负责.

关键词:高温超导,Ginzburg-Landau 理论,磁通涡旋

PACC:7460E,7420

1. 引 言

尽管目前尚缺乏一个完备的理论体系来描述高温超导电性;然而,学术界已形成一个共识:准二维分层结构层间耦合及强电子相斥过程导致高温超导材料的反常物理行为.相斥的电子作用倾向于增加体系自旋矩,因为该作用降低了自旋反向平行的两个电子占据同一轨道的概率,从而阻碍了两者自旋矩相互抵消过程.由于自旋呈反向平行时,一个电子可以跃迁到近邻位上而不违反 Pauli 不相容准则,相斥作用诱发的自旋矩间将发生反铁磁(AF)交换作用.从而可以预计磁长程有序和自旋单态配对 d 波态形成[1,2].最近,Zhang 提出建立在 $SO(5)$ 群之上的理论[3],演化出高温超导态 $d_{x^2-y^2}$ 配对对称性.利用 SQUID 和三晶结检测配对态对称性的实验[4,5]似乎支持 $d_{x^2-y^2}$ 波态的论点.然而,对此问题并未形成定论;仍有不同的观点.如 Anderson 与合作者指出层间配对隧道将增强电-声子作用,而诱发各向异性 s 波对称性[6].再如,Liechtenstein 等[7]的工作建议 AF 自旋涨落机制在引起 CuO_2 层内 d 波配对的同时,也可以诱发 2 维 s 波配对态对称性,前提是两层间存在足够强的 AF 关联.文献中也有不少实验支持高温超导配对态存在显著的 s 波分量的观点[8-10].

从众多模型(论点)中演化出基态,通常应有合适的等效 Hamilton(哈密顿)量.Anderson[11],Rice 和 Zhang[12]指出,建立氧化物强关联理论框架应从 Hubbard 模型,或半满填充 t-J 模型出发.遗憾的是对这些模型在 1 维情形的严格解并未给如何解决相应高维问题带来更多的启示.另一方面,即使是简化的 Hubbard 模型中,尚存在所谓两个能量标度问题[13].本文将利用紧束缚模型,单能带结构假设下,考虑高温超导体 CuO_2 面空穴(Cu d 态)-空穴(O p 态)最近邻配对作用和面间最近邻耦合,分析超导基态能隙函数对称性.其次,我们将采用有限温度下的 Green 函数方法推倒分层结构高温超导 Ginzgurg-Landau 模型方程;并给出相应磁通涡旋格子结构.分析结果显示,随能带空位填充度 ρ(或化学位 μ)和温度 T 变化,高温超导基态序参量 $\Delta(k)$ 对称性既可以呈中心对称,又可以关于 $k_x=\pm k_y$ 反称,还可以是两者的组合;分别对应 s 波,$d_{x^2-y^2}$ 波和混合 s-d 波.对应于单一波磁通涡旋格子为三角的结构;而稳定的斜格子反映出混合波特征.依据混合波配对态的分析能够对高温超导体反常输运行为,如上临界磁场温度曲线 $H_{C2}(T)$ 的上翘现象,外磁场下电阻-温度转变温区展宽等,提供一种诠释.

2. Ginzburg-Landau 方程

从对称性角度考虑,Volovik[14]指出 d 波超导体

* 国家教育部高校骨干教师基金资助的课题.

涡旋心应当含有与涡旋线最大对称群一致的所有可能的序参量.特别是,它应当包含具有反向环绕相位的常规 s 波配对态.Berlinsky 及合作者数值计算了 d 波涡旋结构区分出 d,混合 s-d 及 s 波分布区域[15].然而,该模型中诸多参量的温度函数关系并未明确;因而,涡旋格子及序参量温度关系未能进一步讨论.Heeb 等[16]考虑了四方与正交晶格点群对称性,细致分析了分层超导体单个涡旋结构.问题是现阶段对单个涡旋结构的实验观察尚难以实施,因此研究单个涡旋结构对涡旋格子排列的影响显得十分重要.本节讨论高温超导配对态对称性随温度变化关系,并给出相应磁通涡旋格子结构.以 Gor'kov 方程(9)为出发点[18],我们首先推导依赖于波矢 k 的序参量方程组,并由此演化出 G-L 方程,进而完成从微观角度将 G-L 自由能参量化以便于数值分析的展开.

$$\left\{\mathrm{i}\omega_n-\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\nabla+e\boldsymbol{A})^2+\mu\right\}G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\omega_n)+\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}''\nabla(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'')F^+(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}',\omega_n)=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),$$
$$\left\{-\mathrm{i}\omega_n-\frac{1}{2m}(\mathrm{i}\nabla+e\boldsymbol{A})^2+\mu\right\}F^+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\omega_n)+\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}''\nabla(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'')G^*(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}',\omega_n)=0. \tag{1}$$

其中 G 和 F^+ 分别表示单粒子和配对子传播算符,$\omega_n=(2n+1)\pi T$.定义实空间中序参量 $\Delta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$的自洽方程为

$$\Delta^*(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')T\sum_{\omega_n}F^+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\omega_n), \tag{2}$$

其中 $-V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$为两颗载流子之间的有效配对作用势.利用方程组(1)求形式解,代入(2)式迭代至 F^+ 的三阶及 G 的二阶得到

$$\Delta^*(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})T\sum_{\omega_n}\Big\{\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}'\mathrm{d}\boldsymbol{x}''G_0(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},-\omega_n)\Delta^*(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}'')\Big[G_0(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{y},\omega_n)-\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}_1\mathrm{d}\boldsymbol{x}_2G_0(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}_1,\omega_n)\Delta(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)\times\int\mathrm{d}\boldsymbol{x}_3\mathrm{d}\boldsymbol{x}_4G_0(\boldsymbol{x}_3,\boldsymbol{x}_2,-\omega_n)\times\Delta^*(\boldsymbol{x}_3,\boldsymbol{x}_4)[G_0(\boldsymbol{x}_4,\boldsymbol{y},\omega_n)]\Big]\Big\}, \tag{3}$$

其中 G_0 表示在磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 中自由电子 Green 函数.考虑到我们所关心的区域上费米波长远小于伦敦穿透深度,矢势 A 可以认为是缓变的,而 G_0 可以用零场下的格林函数 $\tilde{G}_0$ 表示如下[17]:

$$G_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\omega_n)\approx\tilde{G}_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\omega_n)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}, \tag{4}$$

其中

$$\tilde{G}_0(\boldsymbol{x},\omega_n)=\frac{1}{(2\pi)^2}\int\mathrm{d}\boldsymbol{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\frac{1}{\mathrm{i}\omega_n-\varepsilon_k},$$
$$\varepsilon_k=(k^2/2m)-\mu$$

为载流子动能项(相对于化学位 μ).引入质心坐标 $\boldsymbol{R}=(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})/2$,$R'=(\boldsymbol{x}'+\boldsymbol{x}'')/2$,相对坐标系 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$,$\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}''$.注意到在相干长度 ξ 的尺度上矢势 A 是缓变的,我们假设 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{y})=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$近似成立并且磁场仅作用于配对载流子质心坐标上.则完成(1)式,关于相对坐标的 Fourier 变换,得

$$\Delta^*(\boldsymbol{R},\boldsymbol{k})\equiv\Delta_1^*(\boldsymbol{R},\boldsymbol{k})+\Delta_2^*(\boldsymbol{R},\boldsymbol{k}), \tag{5a}$$

$$\Delta_1^*(\boldsymbol{R},\boldsymbol{k})=\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^2}V(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\Big\{T\sum_{\omega_n}\frac{1}{\omega_n^2+\varepsilon_{k'}^2}+\frac{T}{2}\sum_{\omega_n}\Big[\frac{1}{(2m)^2}\frac{2\varepsilon_{k'}^2-6\omega_n^2}{(\omega_n^2+\varepsilon_{k'}^2)^3}\times(k_x'^2\Pi_x^2+k_y'^2\Pi_y^2)-\frac{1}{2m}\frac{\varepsilon_{k'}}{(\omega_n^2+\varepsilon_{k'}^2)^2}\Pi^2\Big]\Big\}\Delta^*(\boldsymbol{R},\boldsymbol{k}), \tag{5b}$$

$$\Delta_2^*(\boldsymbol{R},\boldsymbol{k})=-\int\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^2}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')T\times\sum_{\omega_n}\frac{1}{(\omega_n^2+\varepsilon_{k'}^2)^2}|\Delta^*(\boldsymbol{R},\boldsymbol{k}')^2|\times\Delta^*(\boldsymbol{R},\boldsymbol{k}). \tag{5c}$$

可见 $\Delta^*(R,k)$既包含依赖于 k 的分量又与其无关的部分,将它们记为 $\Delta_{\mathrm{d}}^*(R,k)$和 $\Delta_{\mathrm{s}}^*(R)$.进一步区分两者起见,我们采用下述约定:

$$V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')=V_{\mathrm{d}}(\hat{k}_x^2-\hat{k}_y^2)(\hat{k}_x'^2-\hat{k}_y'^2)+V_{\mathrm{s}}, \tag{6}$$

$$\Delta^*(\boldsymbol{R},\boldsymbol{k})\equiv\Delta_{\mathrm{d}}^*(\boldsymbol{R})(\hat{k}_x^2-\hat{k}_y^2)+\Delta_{\mathrm{s}}^*(\boldsymbol{R}), \tag{7}$$

其中 $\hat{k}$ 为沿 $\boldsymbol{k}$ 方向单位矢.于是,$\Delta_{\mathrm{s}}^*(\boldsymbol{R})$和 $\Delta_{\mathrm{d}}^*(\boldsymbol{R})$可写为

$$\Delta_{\mathrm{s}}^*(\boldsymbol{R})=N(0)V_{\mathrm{s}}\Delta_{\mathrm{s}}^*\ln\frac{2e^{\gamma}\omega_{\mathrm{D}}}{\pi T}-\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T)^2}N(0)V_{\mathrm{s}}\Big\{\frac{1}{4}v_{\mathrm{F}}^2\Pi^2\Delta_{\mathrm{s}}^*+\frac{1}{8}v_{\mathrm{F}}^2(\Pi_x^2-\Pi_y^2)\Delta_{\mathrm{d}}^*+\Delta_{\mathrm{s}}\Delta_{\mathrm{s}}^{*2}+\frac{1}{2}\Delta_{\mathrm{s}}\Delta_{\mathrm{d}}^{*2}+|\Delta_{\mathrm{d}}|^2\Delta_{\mathrm{s}}^*\Big\}, \tag{8}$$

$$\Delta_{\mathrm{d}}^*(\boldsymbol{R})=\frac{1}{2}N(0)V_{\mathrm{d}}\Delta_{\mathrm{d}}^*\ln\frac{2e^{\gamma}\omega_{\mathrm{D}}}{\pi T}$$

$$-\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T)^2}N(0)V_{\mathrm{d}}\Big\{\frac{1}{8}v_{\mathrm{F}}^2\Pi^2\Delta_{\mathrm{d}}^*$$
$$+\frac{1}{8}v_{\mathrm{F}}^2(\Pi_x^2-\Pi_y^2)\Delta_{\mathrm{s}}^*$$
$$+\frac{3}{8}\Delta_{\mathrm{d}}\Delta_{\mathrm{d}}^{*2}+\frac{1}{2}\Delta_{\mathrm{d}}\Delta_{\mathrm{s}}^{*2}+|\Delta_{\mathrm{s}}|^2\Delta_{\mathrm{d}}^*\Big\}. \tag{9}$$

其中 $N(0)$表示费米面上态密度,γ 为 Euler 常数,v_{F} 是费米速度,ω_{D} 为平均 Debye 频率或称为互作用截止频率.(注记:Ting 及合作者曾报道 d 波超导体的 G-L 模型[19].在他们的推导中,通过假设正的相斥作用而认定 s 波沟道为非配对的.问题是其中关于 Δ_{s} 的方程将诱导出非物理的解;因此须人为地认定 Δ_{s} 为相对小量,用 Pade 近似处理方程奇异性.我们认为,如果高温超导配对态确实是纯 d 波,建立在 Gor'-kov 模型下,并考虑到材料的准二维特征(柱费米面)的推导应能给出纯 d 波的结论.)定义 T_{s} 和 T_{d} 分别对应 s 和 d 沟道转变温度,

$$N(0)V_{\mathrm{s}}\ln\frac{2e^{\gamma}\omega_{\mathrm{D}}}{\pi T_{\mathrm{s}}}=1,$$

和

$$N(0)V_{\mathrm{d}}\ln\frac{2e^{\gamma}\omega_{\mathrm{D}}}{\pi T_{\mathrm{d}}}=\frac{1}{2}. \tag{10}$$

依(8)和(9)式给出波函数 Ginzburg-Landau 方程组:

$$-\Delta_{\mathrm{s}}^*\ln\frac{T_{\mathrm{s}}}{T}+\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T)^2}\Big\{\frac{1}{4}v_{\mathrm{F}}^2\Pi^2\Delta_{\mathrm{s}}^*$$
$$+\frac{1}{8}v_{\mathrm{F}}^2(\Pi_x^2-\Pi_y^2)\Delta_{\mathrm{d}}^*+\Delta_{\mathrm{s}}\Delta_{\mathrm{s}}^{*2}$$
$$+\frac{1}{2}\Delta_{\mathrm{s}}\Delta_{\mathrm{d}}^{*2}+|\Delta_{\mathrm{d}}|^2\Delta_{\mathrm{s}}^*\Big\}=0, \tag{11}$$

$$-\frac{1}{2}\Delta_{\mathrm{d}}^*\ln\frac{T_{\mathrm{d}}}{T}+\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T)^2}\Big\{\frac{1}{8}v_{\mathrm{F}}^2\Pi^2\Delta_{\mathrm{d}}^*$$
$$+\frac{1}{8}v_{\mathrm{F}}^2(\Pi_x^2-\Pi_y^2)\Delta_{\mathrm{s}}^*+\frac{3}{8}\Delta_{\mathrm{d}}\Delta_{\mathrm{d}}^{*2}$$
$$+\frac{1}{2}\Delta_{\mathrm{d}}\Delta_{\mathrm{s}}^{*2}+|\Delta_{\mathrm{s}}|^2\Delta_{\mathrm{d}}^*\Big\}=0. \tag{12}$$

记 $\alpha=7\zeta(3)/8(\pi T)^2$,$\Delta_0=\sqrt{4/3\alpha}$,零温度下相干长度 $\xi_0=v_{\mathrm{F}}\sqrt{\alpha}/2$,$A_0=\Phi_0/2\pi\xi_0$.利用变量替换 $\boldsymbol{r}/\xi_0\to\boldsymbol{r}$,$\Delta/\Delta_0\to\psi$,$A/A_0\to A$ 化上述 Ginzburg-Landau 方程为无量纲形式:

$$-\psi_{\mathrm{s}}^*\ln\frac{T_{\mathrm{s}}}{T}+\Big[\Pi^2\psi_{\mathrm{s}}^*+\frac{1}{2}(\Pi_x^2-\Pi_y^2)\psi_{\mathrm{d}}^*$$
$$+\frac{4}{3}\psi_{\mathrm{s}}\psi_{\mathrm{s}}^{*2}+\frac{2}{3}\psi_{\mathrm{s}}\psi_{\mathrm{d}}^{*2}+\frac{4}{3}|\psi_{\mathrm{d}}|^2\psi_{\mathrm{s}}^*\Big\}=0, \tag{13}$$

$$-\psi_{\mathrm{d}}^*\ln\frac{T_{\mathrm{d}}}{T}+\Big[\Pi^2\psi_{\mathrm{d}}^*+(\Pi_x^2-\Pi_y^2)\psi_{\mathrm{s}}^*$$
$$+\psi_{\mathrm{d}}\psi_{\mathrm{d}}^{*2}+\frac{4}{3}\psi_{\mathrm{d}}\psi_{\mathrm{s}}^{*2}+\frac{8}{3}|\psi_{\mathrm{s}}|^2\psi_{\mathrm{d}}^*\Big\}=0. \tag{14}$$

由此导出自由能表示式

$$f=-\frac{1}{2}N(0)[2\ln(T_{\mathrm{s}}/T)|\Delta_{\mathrm{s}}|^2V_{\mathrm{s}}$$
$$+\ln(T_{\mathrm{d}}/T)|\Delta_{\mathrm{d}}|^2V_{\mathrm{d}}]$$
$$+\frac{1}{2}N(0)\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T)^2}[V_{\mathrm{s}}|\Delta_{\mathrm{s}}|^4+\frac{3}{8}V_{\mathrm{d}}|\Delta_{\mathrm{d}}|^4$$
$$+\frac{1}{2}(V_{\mathrm{d}}+V_{\mathrm{s}})|\Delta_{\mathrm{s}}|^2|\Delta_{\mathrm{d}}|^2$$
$$+\frac{1}{2}(V_{\mathrm{s}}\Delta_{\mathrm{s}}^{*2}\Delta_{\mathrm{d}}^2+V_d\Delta_{\mathrm{s}}^2\Delta_{\mathrm{d}}^{*2})]$$
$$+\frac{1}{8}N(0)\frac{7\zeta(3)}{8(\pi T)^2}v_{\mathrm{F}}^2[2V_{\mathrm{s}}|\Pi\Delta_{\mathrm{s}}^*|^2$$
$$+V_{\mathrm{d}}|\Pi\Delta_{\mathrm{d}}^*|^2+(V_{\mathrm{s}}\Pi_x^*\Delta_{\mathrm{s}}\Pi_x\Delta_{\mathrm{d}}^*$$
$$-V_{\mathrm{s}}\Pi_y^*\Delta_{\mathrm{s}}\Pi_y\Delta_{\mathrm{d}}^*+V_{\mathrm{d}}\Pi_x^*\Delta_{\mathrm{d}}\Pi_x\Delta_{\mathrm{s}}^*$$
$$-V_{\mathrm{d}}\Pi_y^*\Delta_{\mathrm{d}}\Pi_y\Delta_{\mathrm{s}}^*)]+\frac{1}{2\mu_0}(\nabla\times\boldsymbol{A})^2. \tag{15}$$

类似地,以 ψ_{s} 和 ψ_{d} 表示的 Ginzburg-Landau 自由能为(其中 $f/(N(0)V_{\mathrm{d}}\Delta_0)\to f$)

$$f=\alpha_{\mathrm{s}}|\psi_{\mathrm{s}}|^2+\alpha_{\mathrm{d}}|\psi_{\mathrm{s}}|+\frac{4}{3}|\psi_{\mathrm{s}}|^4+\frac{1}{2}|\psi_{\mathrm{d}}|^4$$
$$+\frac{8}{3}|\psi_{\mathrm{s}}|^2|\psi_{\mathrm{d}}|^2+\frac{2}{3}(\psi_{\mathrm{s}}^{*2}\psi_{\mathrm{d}}^2+\psi_{\mathrm{d}}^{*2}\psi_{\mathrm{s}}^2)$$
$$+2|\Pi\psi_{\mathrm{s}}|^2+|\Pi\psi_{\mathrm{d}}|^2+\Pi_x^*\psi_{\mathrm{s}}\Pi_x\psi_{\mathrm{d}}^*$$
$$-\Pi_y^*\psi_{\mathrm{s}}\Pi_y\psi_{\mathrm{d}}^*+\Pi_x^*\psi_{\mathrm{d}}\Pi_x\psi_{\mathrm{s}}^*$$
$$-\Pi_y^*\psi_{\mathrm{d}}\Pi_y\psi_{\mathrm{s}}^*+\kappa^2(\nabla\times\boldsymbol{A})^2. \tag{16}$$

其中 $\alpha_c=-2\ln(T_{\mathrm{s}}/T)V_{\mathrm{s}}/V_{\mathrm{d}}$,$\alpha_{\mathrm{d}}=-\ln(T_{\mathrm{d}}/T)$.$\kappa$ 代表 G-L 参数.与唯象角度考虑而给出的表示式[20,21]比较,(16)式明确了诸多参量(关系),有益于开展数值求解而揭示相应实验现象的物理实质.必须指出,(10)式定义下使得我们的 G-L 模型将诱导出双相变温度的结论.考虑到目前尚未有令人信服的实验以证实双相变的发生,尽管一些比热实验曾观察到高达 15T 外磁场所引起的相变峰分离现象.该问题可通过考虑更接近实际情形,引入正交畸变来处理,细致的分析见文献[22].作为一个佐证,可参见文献[32,33]的实验结果.他们细致研究了 Bi-Sr-Cu-O 热输运行为,得出外磁场诱发另一序参量而形成无能节多分量态,降低初始的 $\mathrm{d}_{x^2-y^2}$ 态对称性的结论.明确起见,设 s 和 d 波沟道分属晶格四方点群 C_{4v} 的 A_1 和 B_1 表象.我们设 T_{d} 略高于 T_{s}.换言之,T_{d} 对应

零场临界温度 T_c,而把 T_s 理解为上临界场温度曲线 $H_{c2}(T)$ 外推至零所对应的温度.对文献[27]有关 $YBa_2Cu_3O_7$ 的实验数据最小二乘拟合给出 $T_s = 91.50 \pm 0.06K$ 和 $T_d = 92.50K$.

考虑无外场情形,意味着 G-L 方程中梯度项为零,方程解的特征.对混合 s-d 波,当温度 $T < T_d$ 且 $T < T_s$ 时,相应波函数解为 $|\Delta_d|^2 = (4/\alpha)\ln(T_d/T_s)$,$|\Delta_s|^2 = (1/\alpha)\ln(T_s^3/T_d^2 T)$.由此可见,仅当温度 $T < T^* \equiv T_s^3/T_d^2$ 时,$|\Delta_s|^2$ 将是非负的,对应 s 波沟道作用是吸引的.因此,可以预计在非常接近正常超导转变温度的温区上,$YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ 超导体将表现出纯 d 波超导体特征.相应涡旋格子,如果存在的话,将是三角的,相同 Abrikosov 理论所指出[23].在足够底的温度,一般而言 $T < T^*$,混合 s-d 波将取代纯 d 波.s 波与 d 波间的耦合将引出新的涡旋结构,如斜格子涡旋,如同对 $YBa_2Cu_3O_7$ 样品小角度中子散射实验所观察到的[24].

3. 涡旋格子结构

我们限于讨论均匀外磁场中无孪晶 $YBa_2Cu_3O_7$ 超导体的输运问题,磁场垂直于 CuO_2 面.这是一个两维问题,序参量仅沿 CuO_2 面层有变化,矢势仅有两个非零分量且位于平行于 CuO_2 面层中.记两维欧氏坐标系 $\boldsymbol{R}^2$ 中矢势沿 x 和 y 方向的分量为 A_x 和 A_y.可以证明,该问题的稳定解将具有周期性.我们感兴趣的是 G-L 方程在 $\boldsymbol{R}^2$ 上的周期解.给出周期函数的定义:设任意给定的两个矢量 $\boldsymbol{t}_1$ 和 $\boldsymbol{t}_2 \in \boldsymbol{R}^2$,称函数 $f(x,y)$ 关于 $\boldsymbol{t}_1 \times \boldsymbol{t}_2$ 确定的元胞上是周期的,若对所有的 $\boldsymbol{x} = (x,y) \in \boldsymbol{R}^2$,$f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{t}_k) = f(\boldsymbol{x})$,其中 $k = 1,2$.于是,可观测量超导电子密度 $|\psi|^2$,磁场感应强度 $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$,及超流密度 $\nabla \times \nabla \times \boldsymbol{A}$ 是周期的,如果 ψ 和 $\boldsymbol{A}$ 满足

$$\psi_{s,d}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{t}_k) = \psi_{s,d}(\boldsymbol{x})\exp(\mathrm{i}g_k(\boldsymbol{x})) \qquad k = 1,2, \tag{17}$$

$$A(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{t}_k) = A(\boldsymbol{x}) + \nabla g_k(\boldsymbol{x}) \qquad k = 1,2, \tag{18}$$

对一切 $(x,y) \in \boldsymbol{R}^2$,其中

$$g_k(\boldsymbol{x}) = C_k - \frac{1}{2}\bar{B}[(1+\theta)t_{ky}x - (1-\theta)t_{kx}y] \qquad k = 1,2. \tag{19}$$

这里 θ,C_1,和 C_2 为任意常数[25].$\bar{B}$ 为单位'元胞'面积 $|\boldsymbol{t}_1 \times \boldsymbol{t}_2|$ 上平均磁场感应强度.磁通量子化要求 $\bar{B} = 2\pi m/|\boldsymbol{t}_1 \times \boldsymbol{t}_2|$.整数 m 表示单位'元胞'磁通涡旋数.取 $\theta = -1$,$C_1 = 0$,$C_2 = 0$ 以获得最简的周期条件表示式,并保证不同涡旋心处波函数相位一致性.不失一般性,取 $\boldsymbol{t}_1 = (aL, bL)^{\mathrm{T}}$ 指向 x-y 平面的右半边,即 $L > 0$,$a > 0$,b 为实数;而 $\boldsymbol{t}_2 = (0, L)^{\mathrm{T}}$ 沿 y 轴正方向.在 Abrikosov 理论[23]中 a 是指尺度因子(aspect ratio),b 表征涡旋晶格子角度的.原则上,a 和 b 应作为 G-L 模型中待定参量.一组合适的 (a,b) 值将使得 G-L 自由能取极小.如面内为六度旋转对称的涡旋格子,惟一可取的 (a,b) 是 $(\sqrt{3},1)$.然而,由于我们的模型沿 y 方向全周期性,可置 $b = 0$,认定由 $\boldsymbol{t}_1$ 和 $\boldsymbol{t}_2$ 生成的元胞域 $\Omega = [aL, 0] \times [0, L]^{\mathrm{T}}$ 为矩形,而仅保留 a 为待定参量.于是,周期性边界条件(17)—(19)式化为

$$\psi_{s,d}(x + aL, y) = \psi_{s,d}(x,y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}y\Phi/2},$$
$$\psi_{s,d}(x, y + L) = \psi_{s,d}(x,y), \tag{20}$$
$$A_x(x + aL, y) = A_x(x,y),$$
$$A_x(x, y + L) = A_x(x,y), \tag{21}$$
$$A_y(x + aL, y) = A_y(x,y) + \Phi/L,$$
$$A_y(x, y + L) = A_y(x,y). \tag{22}$$

这里 $\Phi = a\bar{B}L^2$ 代表单位元胞中磁通量.

我们利用松弛迭代法进行数值求解,以研究使得自由能取稳定极小并满足周期条件的波函数和矢势(磁通涡旋)分布特性.选 $\psi_s(\psi_s^*)$,$\psi_d(\psi_d^*)$,A_x 及 A_y 为独立变量.松弛迭代格式为

$$\psi_s^{(n+1)} = \psi_s^{(n)} - \varepsilon_1(\partial f/\partial\psi_s^*)|^{(n)},$$
$$\psi_d^{(n+1)} = \psi_d^{(n)} - \varepsilon_2(\partial f/\partial\psi_d^*)|^{(n)}, \tag{23}$$
$$A_x^{(n+1)} = A_x^{(n)} - \varepsilon_3(\partial f/\partial A_x)|^{(n)},$$
$$A_y^{(n+1)} = A_y^{(n)} - \varepsilon_4(\partial f/\partial A_y)|^{(n)}, \tag{24}$$

其中松弛因子 ε_i 为正数,合适的范围为(0,2),整数 n 表示迭代步数.能够证明始于一个合适的初态,随 n 增加,自由能将单调地收敛于其全局极小值[26].设单位元胞 $[aL, 0] \times [0, L]^{\mathrm{T}}$ 包含 2 个涡旋.在维持元胞面积恒定的前提下,相对于 a 求自由能泛函(24)式的极小,以显示稳定涡旋结构.计算时元胞细分为 64×64 网格.选 $T/T_d = 0.5$.最小自由能值出现在 $a_{opt} = 1.3955$ 处,相应地,微观磁场涡旋斜格子是稳定的,如图 1 所示.而当温度 T 靠近 T_d 时,自由能极小点将移至 $a_{opt} = 1.735$,此时三角涡旋格子是稳定的,示于图 2.

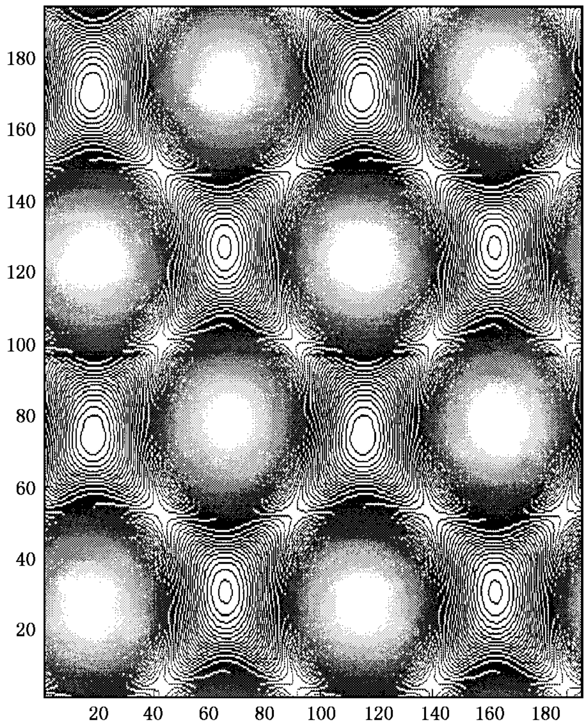

图 1　微观磁场等值线图,显示出稳定的斜格子涡旋结构(参数 $T/T_{\mathrm{d}}=0.5$, $\kappa=5$, $m=2$, $N_x=40$, $N_y=64$; $a=1.40$)

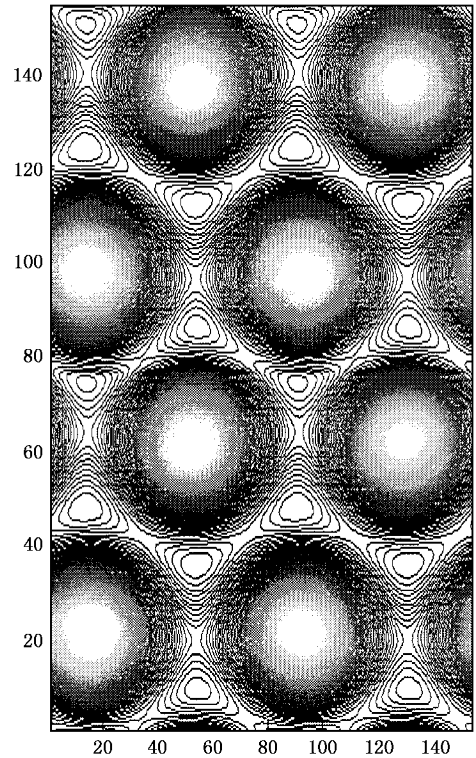

图 2　三角涡旋格子结构(参数同图 1,但 $T/T_{\mathrm{d}}=0.95$, $a=1.75$)

4. 上临界磁场温度曲线 $H_{\mathrm{c2}}(T)$

高温超导体涡旋动力学过程所表现的丰富的平衡态,如液相、玻璃相及 2 维超导体所具有的 K-T 相变等促成人们对高温超导电性的认识在不断更新和深入.如对 $YBa_2Cu_3O_7$ 单晶样品的上临界磁场温度曲线在临界温度附近所表现出的上翘现象[27],以往曾理解为维度重叠所至[28];细致的分析显示这种现象可作为高温超导反常配对对称性的一个佐证[20,29].我们将从 G-L 方程出发,展开数值计算上临界磁场温度曲线 $H_{\mathrm{c2}}(T)$以进一步支持该论点.

考虑外磁场中理想第二类超导体的行为.随磁场强度增高,波函数幅值将逐步降低;至下临界场 $H_{\mathrm{c1}}(T)$超导进入混合态,伴随磁通涡旋开始进入超导体.进一步增高磁场强度至上临界场 H_{c2}将发生混合态向正常态的相变,相应波函数最大幅值为 0,即 $\max\{|\psi(x,y)|:(x,y)\in\Omega\}=0$.该物理过程的数值模拟实现可在维持单个元胞中磁通涡旋量子数不变的前提下,而逐步减小元胞面积进行.由 Doria 等[30]定理

$$\kappa^2\bar{B}H=\frac{1}{2}(G_{\mathrm{kin}}+2G_{\mathrm{field}}), \qquad (25)$$

其中单个元胞中总自由能包含动能项 G_{kin} 和场能项 G_{field} $G_{\mathrm{kin}}+2G_{\mathrm{field}}=\int_{\Omega} f\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y$, f 由(16)式定义.实际操作中,我们缩短元胞线度 L,而保持涡旋量子数恒定,从而提高平均磁场感应强度 $\bar{B}$.类似于上节的做法,用松弛迭代求解 G-L 方程得解函数组(ψ_{s}, ψ_{d}, A_x, A_y),继而计算总自由能.由(25)式估算外加磁场 H 值.当 H 充分接近上临界磁场 H_{c2} 时,波函数幅值最大值应趋于 0 如 $\max_{\Omega}(|\psi_{\mathrm{d}}|^2, |\psi_{\mathrm{s}}|^2)\leqslant 10^{-6}$.计算所得上临界磁场温度曲线 $H_{\mathrm{c2}}(T)$如图 3 所示.计算时取 $T_{\mathrm{d}}=92.5\mathrm{K}$, $T_{\mathrm{s}}=91.8\mathrm{K}$, $\kappa=5$[1)], $b=1$, 涡旋数 $m=2$; a 随温度而变.其中插图给出正常-超导转变温区的 $H_{\mathrm{c2}}(T)$行为,清楚地显示出 $H_{\mathrm{c2}}(T)$曲率上翘特征.对此可理解为试样中共存的 s 波与 d

1) 改变 GL 参数 κ,涡旋格子分布特征定性上保持不变,但随 κ 增大,表征单个涡旋中 ψ_{d} 和 h 的各向异性等值线将远离涡旋心而去.

波间的耦合所引起.

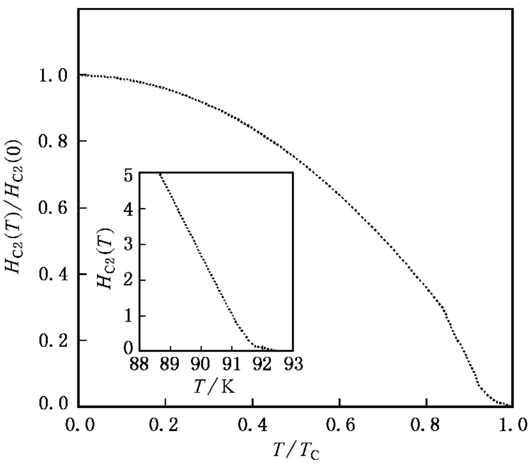

图 3 上临界磁场温度曲线 $H_{c2}(T)$(其中插图给出正常-超导转变温区的 $H_{c2}(T)$)

定义粒子数产生和湮没算符 $p_+=\sqrt{(\hbar c/2eH)/2}\times(\pi_x+i\pi_y)$和 $p_-=\sqrt{(\hbar c/2eH)/2}(\pi_x-i\pi_y)$. G-L 方程(19),(20)可写为(略去高阶小量)

$$\begin{aligned}&\alpha'_s l^2(T-T_s)\psi_s^*+\gamma_s(2p_+p_-+1)\psi_s^*\\&+\gamma_v(p_+^2+p_-^2)\psi_d^*=0,\\&\alpha'_d l^2(T-T_d)\psi_d^*+\gamma_d(2p_+p_-+1)\psi_d^*\\&+\gamma_v(p_+^2+p_-^2)\psi_s^*=0.\end{aligned}\tag{26}$$

其中 $l^2=\hbar c/2eH$,$\alpha'_s=\lambda_s$,$\alpha'_d=\lambda_d$,$\gamma_s=\alpha(T_c)\lambda_s v_F^2/4$,$\gamma_d=\alpha(T_c)\lambda_d v_F^2/4$,$\gamma_v=\alpha(T_c)\lambda_{ds}v_F^2/4$,$\lambda_s=(1/2)\times N(0)V_s$,$\lambda_d=(1/2)N(0)V_d$,$\lambda_{ds}=(1/2)N(0)\times\sqrt{V_dV_s}$. 推导中利用了对易关系 $[p_+,p_-]=1$. 显见,方程(26)左边作用于态函数(ψ_s,ψ_d)上算符是厄米的(Hermitian),其本征值是 H 和 T 的函数. 沿相界线 $H_{c2}(T)$最低本征值为 0. 我们采用微扰方法求问题的本征值. 计及 γ_v 的第零阶($\gamma_v\to0$),ψ_s 和 ψ_d 应满足无耦合的简谐振子方程组. 占据数表象中,相应基态$|0\rangle_s$ 和$|0\rangle_d$ 满足 $p_-|0\rangle_s=0$ 和 $p_-|0\rangle_d=0$. 对一般情形,$|m\rangle_s$ 与 $|n\rangle_d$ 间都将存在耦合. 然而,若限于至 γ_v 的一阶效应,则仅存在$|0\rangle_s$ 耦合至$|2\rangle_d$ 和$|\rangle_d$ 耦合至$|2\rangle_s$. 记$(|0\rangle_s|2\rangle_s)^T$ 和$(|0\rangle_d|2\rangle_d)^T$ 分别表示 s 波和 d 波态. 由方程(26),完成于 2 维子空间中的对角化,可演化出最低本征值(对应$|0\rangle_d$ 的)

$$\frac{1}{2}[\alpha'_d l^2(T-T_d)+\gamma_d+\alpha'_s l^2(T-T_s)+5\gamma_s]-\frac{1}{2}\{[\alpha'_d l^2(T-T_d)+\gamma_d-\alpha'_s l^2(T-T_s)-5\gamma_s]^2+4\gamma_v^2\}^{1/2},$$

上式 s$\longleftrightarrow$d 对换可写出对应$|0\rangle_s$ 的本征值. 于是,令上述本征值为 0 给出上临界场 $H_{c2}(T)$表示式

$$[\alpha'_d l^2(T-T_d)+\gamma_d][\alpha'_s l^2(T-T_s)+5\gamma_s]|_{H=H_{c2}}=\gamma_v^2,\tag{27}$$

当磁场强度较低时,(27)式左边第一个括号决定了 $H_{c2}(T)$:$H_{c2}=(\alpha'_d\hbar c/2e\gamma_d)(T_d-T)$;从而 $-(\mathrm{d}H_{c2}/\mathrm{d}T)|_{T_c}=\alpha'_d\hbar c/2e\gamma_d$. 它反映出一个事实,磁场沿 $H_{c2}(T)$曲线趋于零时,s 沟道与 d 沟道间无耦合. 另一方面,对较高磁场,$H_{c2}(T)$近似为线形的;它对温度变化率由(27)式第二个括号给出 $-(\mathrm{d}H_{c2}/\mathrm{d}T)|_{T_c}=(\alpha'_s\hbar c/10e\gamma_s)$. 比较两个斜率,不难得出临界温度附近上临界磁场温度曲线 $H_{c2}(T)$的上翘结论. 而共存的 s 波与 d 波的耦合作用至少在某种程度上应对该现象负责.

5. 结 论

建立在对基于 Gor'kov 方法而导出的微观 Ginzburg-Landau 方程的分析揭示了高温超导体 $YBa_2Cu_3O_7$ 混合 s-$d_{x^2-y^2}$ 配对态存在性和磁通涡旋格子结构. 分析指出,存在一个格子转变温度 T^*,当温度高于 T^* 时,超导基态显示 $d_{x^2-y^2}$ 波对称性特征;低于该温度时,s 波沟道幅值成为可观的量级;超导基态为混合 s-$d_{x^2-y^2}$ 态;相应地,三角的磁通涡旋格子(当 $T_d>T>T^*$ 时)转变为斜格子($T<T^*$ 时)是涡旋分布的最显著的特征.

我们发现高温超导体序参量内禀自由度沿 $H_{c2}(T)$曲线将发生变化. 表现为低场下的 $d_{x^2-y^2}$ 波占优态将转为高场下的 s 与 d 混合态,伴随有 $H_{c2}(T)$曲线斜率的显著变化,有必要指出,本文以 $YBa_2Cu_3O_7$ 材料为例诱导出 G-L 模型不难推广于分层准 2 维超导体;因此,我们可以预计上临界场温度曲线上翘行为是与高温超导涡旋动力学密切相关的一种普遍现象,还需要明确,建立在双分量纯 d 波态($d_{x^2-y^2}$-d_{xy})的分析[31]同样可给出 $H_{c2}(T)$反常上翘的结论,然而,对双分量 d 波情形仅当原本是简并的态分裂时(如,由晶格正交畸变引起)才会形成 $H_{c2}(T)$反常上翘. 于是,混合 d 波配对态对称性的前提下,四方相晶格的高 T_c 材料 $H_{c2}(T)$将不存在该反常现象,因此,四方相的 Bi-Sr-Ca-Cu-O $H_{c2}(T)$

的反常上翘实验现象[32]足以表明 s-d 配对态对称性 的存在.

---

[1] Monthoux P and Pines D 1994 *Phys. Rev.* B **49** 4261

[2] Monthonx P and Scalapino D J 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1874

[3] Zhang S C 1997 *Science* **275** 1089

[4] Wollman D A *et al* 1994 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2134

[5] Tsuei C C *et al* 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 593

[6] Chakravarty S, Sudbϕ A, Anderson P W and Strong S 1993 *Science* **261** 337

[7] Liechtenstein A I, Mazin I I and Andersen O K 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2303

[8] Millis A J 1994 *Phys. Rev.* B **49** 15408

[9] Kleiner R *et al* 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2161

[10] Kouzentsov K A *et al* 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3050

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

[12] Zhang F C and Rice T M 1988 *Phys. Rev.* B **37** 3759

[13] Lee P A and Read N 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2891

[14] Volovik G E 1993 *JETP Lett.* **58** 469

[15] Soininen P I, Kallin C and Berlinsky A J 1994 *Phys. Rev.* B **50** 13883

[16] Heeb R *et al* 1996 *Phys. Rev.* B **54** 9385

[17] Tinkham M 1964 *Group Theory and Quantum Mechanics* (New York: McGraw-Hill)

[18] Gor'kov L P 1960 *Sov. Phys. JETP* **9** 1364

[19] Ren Yong, Xu Ji-Hai and Ting C S 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3680

[20] Joynt R 1990 *Phys. Rev.* B **41** 4271

[21] Li Q P *et al* 1993 *Phys. Rev.* B **48** 437

[22] Zhou Shi-Ping 2000 *Physica* C **339** 258

[23] Abrikosov A and Eksp Zh 1957 *Teor. Fiz.* **32** 1442
Abrikosov A and Eksp Zh 1957 *Sov. Phys. JETP* **5** 1174

[24] Keimer B *et al* 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 6778

[25] Du Q, Gunzburger M D and Peterson J S 1993 *SIAMJ. Appl. Math.* **53** 689

[26] Zhou Shi-Ping 2001 *Chin. Phys.* **10** 541

[27] Welp U *et al* 1998 *Phys. Rev. Lett.* **62** 1908

[28] Ruggiero S, Barbie T and Beasley M 1982 *Phys. Rev.* B **26** 4897

[29] Zhou Shi-Ping *et al* 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 342 (in Chinese) [周世平等 1999 物理学报 **48** 342]

[30] Doria M M, Gubernatis J E and Rainer D 1989 *Phys. Rev.* B **39** 9573

[31] Laughlin R B 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 5188

[32] Aubin H *et al* 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 624

[33] Krishana K *et al* 1997 *Science* **277** 83

Pairing symmetry and vortex lattice of high temperature superconductors*

Zhou Shi-Ping Qu Hai Liao Hong-Yin

(*Department of Physics, Shanghai University, Shanghai* 201800, *China*)

(Received 14 September 2001; revised manuscript received 22 March 2002)

Abstract

We studied pairing symmetry of $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ high-temperature superconductor using a generic Ginzburg-Landau model. The phase transition between the mixed s-$d_{x^2-y^2}$ state and $d_{x^2-y^2}$ wave was shown. The vortex lattice of a $YBa_2Cu_3O_7$ superconductor is oblique at the temperature well below the transition temperature T_c, where the mixed s-$d_{x^2-y^2}$ state is expected to have the lowest energy. Whereas, very close to T_c, the $d_{x^2-y^2}$ wave is slightly lower in energy, and a triangular vortex lattice recovers. The coexistence and the coupling between the s-and d-waves would account for the unusual behaviours such as the upward curvature of the upper critical field curve $H_{c2}(T)$.

Keywords: hight T_c superconductivity, vortex structure, Ginzburg-Landau theory

PACC: 7460E, 7420

---

* Project supported by the Foundation for University Key Teachers by the Ministry of Education, China.