

# 二分量高温超导机理

曹天德<sup>1)</sup> 黄清龙<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> 西南师范大学物理系,重庆 400715)

<sup>2)</sup> 南昌航空工业学院测控系,南昌 330034)

(2001 年 7 月 9 日收到 2001 年 11 月 13 日收到修改稿)

用两种电子态,讨论了金属—绝缘相变、反铁磁性—金属相变,以及相分离、正常态—超导态相变、非费米液体行为、高  $T_c$  等

关键词:两种电子态,格林函数,玻色化,高温超导

PACC:7420,7100

## 1. 引 言

自从发现高温超导现象以来,在逐年提高  $T_c$  的同时,超导机理一直是人们研究的热点.已提出的强电声耦合、极化子、态密度的奇异性、层间耦合、反铁磁自旋配对、共振价键理论、Luttinger 液体等都能解释高超转变温度  $T_c$ ,但都因各种疑问而未被普遍接受,特别是电声机理是否适用于高温超导,仍是争论的热点<sup>[1,2]</sup>.

多带模型也备受关注.各种模型间的等价性,电子配对及其关联长度,非费米液体及其与空间维数的关系,磁性及其相变,大量的工作给人们提供了许多启发和经验.

就在发现高温超导现象不久,章立源等人<sup>[3]</sup>就提出了双子系统,并解释了超导体的一些性质,随后的有些实验<sup>[4]</sup>支持了这种观点,这种二分量机理在解释超导体正常态性质上很有效<sup>[5]</sup>.

超导体正常态性质与超导态的形成有密切关系.本文从 d-p 模型出发,首先用博戈留波夫变换消除混合项,形成对两种电子态的初步认识,结合对金属—绝缘相变、反铁磁性—金属相变,以及相分离、正常态—超导态相变、非费米液体行为、高  $T_c$  等一系列实验结果的定性解释,逐步丰富二分量超导机理的内容,显示 Cu-O 间的电子作用,亦即本文所说带间作用的重要性.

## 2. 两种电子态

许多实验证明了有两种电子态,即在正常态和

超导态中有较局域的电子和较扩展的电子,寿命不同,基于 d-p 模型在此先作出初步解释.

高温超导体有  $\text{CuO}_2$  平面,采用紧束缚模型,如果电子系统的哈密顿量在近邻近似下取 d-p 模型

$$H = H_0 + H_V, \quad (1)$$

这里

$$H_0 = \sum_{i\sigma} \epsilon_d d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + \sum_{l\sigma} \epsilon_p p_{l\sigma}^+ p_{l\sigma} + \sum_{i,l} V_{il} (d_{i\sigma}^+ p_{l\sigma} + p_{l\sigma}^+ d_{i\sigma}), \quad (2)$$

粒子-粒子作用项

$$H_V = U_d \sum_i n_{d,i\uparrow} n_{d,i\downarrow} + U_p \sum_l n_{p,l\uparrow} n_{p,l\downarrow} + U_{dp} \sum_{i,l} n_{d,i\sigma} n_{p,l\sigma'}. \quad (3)$$

略去了次近邻作用,取  $\epsilon_p > \epsilon_d, U_d > U_p$ ,对于电子型描述,  $U_d$  表示 O 位电子-电子作用,作为空穴描述,  $U_d$  表示 Cu 位空穴-空穴作用.

有许多工作讨论了此模型,这里换一种方式,为了讨论混合过程的效果,做点阵傅里叶变换,略去矢量记号,(2)式变为

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_d d_{k\sigma}^+ d_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \epsilon_p p_{k\sigma}^+ p_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} V_k (d_{k\sigma}^+ p_{k\sigma} + p_{k\sigma}^+ d_{k\sigma}), \quad (4)$$

这里混合矩阵元为

$$V_k = 2V [\cos(k_x a/2) + \cos(k_y b/2)]. \quad (5)$$

通过博戈留波夫变换

$$\begin{aligned} d_{k\sigma} &= A_k a_{k\sigma} + B_k b_{k\sigma}, \\ p_{k\sigma} &= B_k a_{k\sigma} - A_k b_{k\sigma}, \end{aligned} \quad (6)$$

如果取

$$A_k = -1/\sqrt{1+\gamma_k^2}, \quad B_k = \gamma_k/\sqrt{1+\gamma_k^2}, \quad (7)$$

$$\gamma_k = \left[ -(\epsilon_p - \epsilon_d) + \sqrt{(\epsilon_p - \epsilon_d)^2 + 4V_k^2} \right] / 2V_k, \quad (8)$$

可把(4)式对角化为

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_-(k) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} \epsilon_+(k) b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma}, \quad (9)$$

这里  $a_{k\sigma}, b_{k\sigma}$  为费米子湮没算符, 且

$$\epsilon_{\pm}(k) = \left[ (\epsilon_p + \epsilon_d) \pm \sqrt{(\epsilon_p - \epsilon_d)^2 + 4V_k^2} \right] / 2. \quad (10)$$

如果利用(6)式把相互作用项(3)式进行变换, 得到

$$\begin{aligned} H_V = & \sum_{k,k',q} U_a a_{k+q\uparrow}^+ a_{k\uparrow} a_{k'-q\downarrow}^+ a_{k'\downarrow} \\ & \times \sum_{k,k',q} U_b a_{k+q\uparrow}^+ a_{k\uparrow} b_{k'-q\downarrow}^+ b_{k'\downarrow} \\ & + \sum_{\substack{k,k',q \\ \sigma,\sigma'}} U_{ab}(q) a_{k+q\sigma}^+ a_{k\sigma} b_{k'-q\sigma'}^+ b_{k'\sigma'}. \quad (11) \end{aligned}$$

注意到  $A_k$  弱依赖于  $k$ , 其中  $U_a, U_b$  和  $U_{ab}$  可取为常数, 且  $U_a : U_b : U_{ab} = U_d : U_p : U_{pd}$ , 这里

$$U_{ab}(q) = 2U_{ab}[\cos(q_x a/2) + \cos(q_y b/2)],$$

因此(1)式可以写成

$$H = H_a + H_b + H_{ab}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} H_a = & \sum_{k,\sigma} \epsilon_-(k) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \\ & + U_a \sum_{k,k',q} a_{k+q\uparrow}^+ a_{k\uparrow} a_{k'-q\downarrow}^+ a_{k'\downarrow}, \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_b = & \sum_{k,\sigma} \epsilon_+(k) b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} \\ & + U_b \sum_{k,k',q} b_{k+q\uparrow}^+ b_{k\uparrow} b_{k'-q\downarrow}^+ b_{k'\downarrow}, \quad (14) \end{aligned}$$

$$H_{ab} = \sum_{\substack{k,k',q \\ \sigma,\sigma'}} U_{ab}(q) a_{k+q\sigma}^+ a_{k\sigma} b_{k'-q\sigma'}^+ b_{k'\sigma'}. \quad (15)$$

当单体作用  $V \ll \epsilon_p - \epsilon_d$  (13)和(14)式对应于二维大  $U$  的 Hubbard 模型, 描述强关联粒子系统.

但电子态的扩展程度不只与  $\epsilon(k)$  和  $U$  有关, 也与带内电子的分布有关. 在大  $U$  下, 无论是(13)式对应的下能带, 还是(14)式所述的上能带, 半填充时的电子系统都是局域的, 根据对 Hubbard 模型的研究已有这个经验. 当然, 由于  $U_b < U_a$ , 而且总有  $\epsilon_+ > \epsilon_-$ , 偏离半填充时, 上能带分布的粒子系统比起下能带的有较大的巡游性是可以理解的.

因此可以作出这样的推断:

对于电子型超导体, 未引进电子型载流子时, (13)式对应的下“能带”的填充是半满的, 尽管温度  $T > 0$ , 由于强关联, 超导体是绝缘体. 随着电子型载

流子的引进, 在中等载流子浓度区, 下“能带”的填充逐渐偏离半填充, 超导体出现金属性, 当带隙  $\sim k_B T$ , 上能带开始填充, 下能带未滿, 于是上能带存在较巡游的、下能带存在较局域的载流子, 带间作用会导致一系列奇异性.

对于空穴型超导体, 可作出类似的讨论.

### 3. 非费米液体行为、磁性

众所周知, 在许多情况下, d-p 模型可以变化成二维 Hubbard 模型, 而 Huscroft 已经得出<sup>[6]</sup>, 二维 Hubbard 模型在半满情况下, 有非费米液体行为. 那么, 如上所述, 有金属性的正常态, 对应于二维 Hubbard 模型的偏离半填充, 无论是空穴型还是电子型的高温超导体, 为什么有非费米液体特性? 这是因为带间作用加上不同电子态(较局域的和较扩展的)间的交叠. 文献[7]已经得出, 巡游性的电子系统受局域电子的作用(矩阵元取常数), 导致正常态有非费米液体行为. 最近, 我们研究非对角格林函数  $-T_\tau c_{k\sigma}(\tau) c_{k'\sigma}^+(\tau')$  表明带间作用也可导致非费米液体行为<sup>[8]</sup>. 这里的局域粒子分布(无论在 O 位还是 Cu 位)有周期性, 扩展态与局域态共存, 而且对两种态, 非费米液体行为互有有无.

关于高温超导体的磁性、磁相变和相分离也可作出说明.

无论是电子型的还是空穴型的超导体, 引进载流子前, 有一能带是半满的, 对应于二维 Hubbard 模型的半填充基态, 有反铁磁性<sup>[9]</sup>; 引进载流子后, 这里认为局域强关联电子系统有反铁磁性, 但有巡游性较好的电子, 无论是处于  $\text{CuO}_2$  的 O 位还是 Cu 位, 从物理图像上看, 由于其顺磁性, 都会破坏或抑制反铁磁序. 计入磁涨落, 类似地还可以解释相分离现象<sup>[10]</sup>. 相分离与两种粒子态的竞争有关, 因此在描述电子型超导体和空穴型超导体时, d-p 模型中各参数的取值应该有所不同, 这种不同是因为 Cu 和 O 的价态差别引起的, 这是空穴型超导体中难于见到相分离现象的可能原因.

### 4. 电子配对机理与高 $T_c$

许多实验现象表明, 高温超导与电子-电子作用密切相关. 用对角格林函数的运动方程方法可以证明, 带间作用(11)式可以导致电子配对, 而且所有的

电子参与配对,结合电子的巡游性,可以导致超导相.可能的运动图像是:格点基元的近局域电子背离正在经过的巡游电子,也即基元正电荷中心靠近巡游电子,与局域电荷密度涨落有联系,可以导致巡游电子间的吸引.因此,带间作用引起的有效吸引作用和带内电子-电子作用竞争的结果将有可能决定是否形成高  $T_c$ .

但格林函数的运动方程方法需慎重使用.对于这样的哈密顿量

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k - V \sum_{k,k'} c_{k'}^\dagger c_{-k'}^\dagger c_k c_{-k}, \quad (16)$$

采用格林函数的运动方程方法将得不出超导解,这并不意味着这种方法的不可行,而是因为(16)式定义于费米面附近,其态函数不是完备的.我们也发现,如果只计对角平均而忽视非对角平均,如  $\langle a_k a_{k'}^\dagger \rangle \neq \langle a_k a_k^\dagger \rangle + \delta_{k,k'}$ , 将常常得到费米液体解.例如,定义对角温度格林函数

$$G_a(k, \tau - \tau') = -T_c a_{k\sigma}(\tau) a_{k\sigma}^\dagger(\tau'), \quad (17)$$

利用(12)–(15)式,得出正常态的

$$G_a(k, i\omega_n) = 1/[i\omega_n - \epsilon_a - W_k^2(i\omega_n - \epsilon_b)], \quad (18)$$

这里

$$W_k = \sum_q U_{ab}(q) G_{ba}(k - q, \tau - \tau' = 0) \quad (19)$$

可自洽求出.这里也定义了

$$G_{ba}(k, \tau - \tau') = -T_c b_{k\sigma}(\tau) a_{k\sigma}^\dagger(\tau'). \quad (20)$$

由(13)式得到单粒子激发能

$$E^\pm(k) = [(\epsilon_p + \epsilon_d) \pm \sqrt{(\epsilon_p - \epsilon_d)^2 + 4W_k^2 + 4V_k^2}]/2. \quad (21)$$

这表明存在正常态能隙,且能隙是各向异性的.可见(18)式描写的是费米液体,但作为一般性的出发点,

应考虑多粒子态,应该计入非对角平均,我们最近这样考虑,得到了非费米行为的结果.已经得知,忽视非对角平均的结果表明,带内电子配对与带间跃迁、带间电子配对是联系在一起的.与半导体相似,带间跃迁主要发生在带底(顶)附近,因此只需计入带底(顶)附近的电子配对.在带底附近,有色散关系

$$\epsilon_+(k) \approx \epsilon(k_x^2 a^2 + k_y^2 b^2). \quad (22)$$

这个关系进一步提示,上能带粒子系统的动能色散关系是近标准的,可看成处于连续态.下能带粒子系统可看成处于较局域的态,我们曾把带间作用(15)式化成类似于电声作用的电子-玻色子作用项,进而可解释高  $T_c$ .

## 5. 结 论

现在,两种粒子态的概念比较明朗.可以借用能带来描述,上能带的粒子是较巡游的,下能带的粒子是较局域的,但在能带底(顶)附近准费米子概念失效,因此能带是不完全的.

对角格林函数方法显示,所有的粒子都参与配对.但看来可近似地认为,非费米液体现象、粒子配对都发生在能带底(顶)附近;两种状态的粒子间的作用导致非费米液体特性、高温超导、磁性相变等.

如果正常态的准粒子谱可以近似地用对角格林函数方法确定,可看出存在正常态能隙,且能隙是各向异性的.

本文是许多人的研究成果的进一步讨论,其后的研究表明,在位作用  $U_d$ 、带间作用  $U_{dp}$  对能带有重整化,但上述定性结果不变.

- [1] Tian M Q and Tao X M 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1193(in Chinese) 谭明秋、陶向明 2001 物理学报 **50** 1193
- [2] Yang H S *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1197(in Chinese) 杨宏顺等 2001 物理学报 **50** 1197
- [3] Zhang L Y 1987 *Sol. Stat. Commun.* **62** 491
- [4] Mihailovic D 1997 *Physica C* **282-287** 186
- [5] Zhang L Y and Feng X B 2000 *Sci. China A* **30** 1118(in Chinese) [章立源、冯小兵 2000 中国科学 A **30** 1118]

- [6] Huscroft C *et al* 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 139
- [7] Cao T D *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2261(in Chinese) 曹天德等 2000 物理学报 **49** 2261
- [8] Cao T D 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1118(in Chinese) [曹天德 2002 物理学报 **51** 1118]
- [9] Kuwabara T and Ogota M 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 4586
- [10] Zhao B R 1998 *Physics* **27** 204(in Chinese) 赵伯儒 1998 物理 **27** 204

# Mechanism of high $T_c$ superconductivity with two electron states

Cao Tian-De<sup>1)</sup> Huang Qing-Long<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>*Department of Physics , Southwest Normal University , Chongqing 400715 , China )*

<sup>2)</sup>*Department of Measuring and Control Engineering , Nanchang Institute of Aeronautical Technology , Nanchang 330034 , China )*

( Received 9 July 2001 ; revised manuscript received 13 November 2001 )

## Abstract

The metallic—insulating transition , antiferromagnetism—metallic transition , normal—superconductivity transition , non-Fermi liquid behaviour and high  $T_c$  are discussed with the existence of two electron states .

**Keywords :** two electron states , Green function , bosonization , high temperature superconductivity

**PACC :** 7420 , 7100