

欠掺杂高温超导体中的涡旋电荷结构相变*

赵宏伟† 孟 豪 张凌峰 查国桥 周世平

(上海大学物理系, 上海 200444)

(2008 年 7 月 4 日收到, 2008 年 11 月 28 日收到修改稿)

利用平均场 $t-t'-U-V_c$ 模型, 通过自洽求解 Bogoliubov-de Gennes 方程, 研究了高温超导体中涡旋结构的相变. 发现增大原位排斥势 U , 自旋密度波、电荷密度波以及 d 波序参量由棋盘结构转变为条纹结构. 模型哈密顿量中引入合适强度的长程库仑势后, 欠掺杂高温超导体样品中也可以出现二维或者棋盘结构, 结果与文献报道的扫描隧道显微镜实验结果一致.

关键词: 高温超导, 涡旋结构, 长程库仑势

PACC: 7420M, 7460E

1. 引 言

近年来高温超导体涡旋结构及其相变引起了人们的广泛关注^[1-9]. $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (YBCO)^[1]核磁共振实验证明涡旋芯周围存在强的反铁磁(AF)有序涨落, 意味着在涡旋芯周围可能存在自旋密度波(SDW). Tranquada 等^[2]在掺杂度为 $x=0.125$ 的欠掺杂样品中观察到了条纹结构. Hoffman 等^[3]报道了在稍微过掺杂 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ (BSCCO)的样品涡旋芯区域观察到了四单元棋盘结构. 而十分有趣的是, 近期欠掺杂样品扫描隧道显微镜实验 (STM) 同样也观察到了棋盘相结构^[4,5]. 通常认为随着原位排斥势的增大, 涡旋结构会由二维结构转变为一维条纹结构^[6], 而欠掺杂样品中原位排斥势 U 比较大, 应该更有利于条纹相的存在. 于是需要提出一种新的物理机制来解释这种有趣的物理现象. Khomskii 和 Freimuth^[10]指出, 第二类超导体中超导凝聚伴随的粒子-空穴对称破缺引起涡旋芯周围正电荷积聚. 针对 YBCO 的分析指出^[11], 原位排斥势诱导的 AF 序则有利于电子型电荷积聚. 注意到高温超导体中 $k_F\xi$ 为一个小的值, 类似于中性超流体系, 传导电子之间的库仑排斥作用使涡旋格子本身聚积电荷, 该过程倾向于将电子排出涡旋芯, 减弱反铁磁有序, 从而可能调整涡旋结构. 基于这种考虑, 本文在哈密顿

量中引入了长程库仑势. 计算发现, 长程库仑势的引入减弱了原位排斥势的作用, 通过增强长程库仑势, 可以得到条纹结构到棋盘结构的转变, 预示着欠掺杂高温超导体样品中自旋密度波(SDW)、电荷密度波(CDW)以及 d 波序参量(DSC)有存在棋盘结构的可能. 这与文献^[4,5]的实验结果一致.

2. 模 型

有效平均场 $t-t'-U-V_c$ 模型哈密顿量为

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij,\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_{i,\sigma} [U n_{i\sigma} - \mu] c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{i,j} (\Delta_{ij} c_{i\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ + h.c.) + \sum_{i,\sigma} \frac{V_c}{2} \sum_{i \neq l} \frac{n_i - \bar{n}}{|r_i - r_l|} c_{i\sigma}^+ c_{l\sigma}, \quad (1)$$

其中 $c_{i\sigma}^+$ ($c_{i\sigma}$) 是 i 格点上的产生(湮灭)算符, μ 是化学势, 分析中通过调整 μ 可以控制平均电子密度 $\bar{n} = \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} / (N_x \times N_y)$ 与掺杂度相对应. 电子密度 $n_i = c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$. U 为原位排斥势, 它诱导自旋密度波序参量 $\Delta_i^{\text{SDW}} = U c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow}$. 式中对 i, j 的求和包括最近邻和次最近邻跃迁, 而配对吸引只对最近邻求和. 长程库仑势项中, 对每个 i 格点, 关于 l 的求和则涉及除 i 点以外的全部格点. $V_c = e^2 / (2\epsilon_0 a^2)$ 为长程库仑势

* 国家自然科学基金(批准号: 60671042)、上海市学科建设项目(批准号: S30105)和上海大学研究生创新基金(批准号: shucx080121)资助的课题.

† E-mail: zhaohongwei@shu.edu.cn

强度 其中 ϵ_e 为有效介电常数. 磁场为 $\mathbf{h} = \nabla \times \mathbf{A}$ 时, 跳跃积分可表示为 $t_{ij} = \bar{t} \exp\left[i \frac{e}{\hbar c} \int_{r_j}^{r_i} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}\right]$. 假设 $(N_x \times N_y)a^2 = 48 \times 24a^2$ 为一个磁元胞的大小, 含两个磁通量子 $\Phi_0 = hc/2e$ 则磁场平均值为 $B \approx 24 \mathcal{K} (\gg H_{cl})$, 比超流引起的磁场大得多, 从而可以忽略屏蔽电流效应. 我们选择了朗道规范 $\mathbf{A} = (-By, Bx, 0)/2$, 其中 x, y 为位置矢量 \mathbf{r} 的 x, y 分量. 计算中我们采用了周期性边界条件^[12].

3. 模型对角化

由 Bogoliubov 变换

$$\begin{aligned} c_{i\sigma}^+ &= \sum_{\alpha} u_{i\sigma}^{\alpha*} \gamma_{\alpha}^+ - \sum_{\alpha} v_{i\sigma}^{\alpha} \gamma_{\alpha}^-, \\ c_{i\sigma} &= \sum_{\alpha} u_{i\sigma}^{\alpha} \gamma_{\alpha} + \sum_{\alpha} v_{i\sigma}^{\alpha*} \gamma_{\alpha}^-, \end{aligned} \quad (2)$$

可以得到 BdG 方程

$$\sum_j \begin{pmatrix} H_{ij,\sigma} & \Delta_{ij} \\ \Delta_{ij}^* & -H_{ij,\sigma}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{j,\sigma}^n \\ v_{j,\sigma}^n \end{pmatrix} = \epsilon_n \begin{pmatrix} u_{i,\sigma}^n \\ v_{i,\sigma}^n \end{pmatrix}, \quad (3)$$

其中 $H_{ij,\sigma} = -t_{ij} + \frac{V_c}{2} c_{i+\delta,\sigma}^+ c_{i,\sigma} + (U n_{i,\sigma} - \mu + \frac{V_c}{2} \sum_{l \neq i} (n_l - \bar{n}) \gamma_{l,i,l}) \delta_{ij}$, $\Delta_{ij} = \frac{V_d}{2} c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} - c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}$, 这里 $i + \delta$ 代表 i 格点的最近邻和次最近邻. V_d 描述了电子-电子间的耦合强度.

(3)式的时间反演对称性提示: 下述态是等价的 $(u_{i,\sigma}^n, v_{i,\sigma}^n, \epsilon_n) \leftrightarrow (-v_{i,\sigma}^{n*}, u_{i,\sigma}^{n*}, -\epsilon_n)$. 由此可引入 $2N_x N_y$ 维波矢 $u_i^n = (u_{i,\uparrow}^n, -v_{i,\uparrow}^{n*})$ 和 $v_i^n = (u_{i,\downarrow}^n, v_{i,\downarrow}^{n*})$, 并给出自洽条件

$$n_{i\uparrow} = \sum_n |u_i^n|^2 f(\epsilon_n), \quad (4)$$

$$n_{i\downarrow} = \sum_n |v_i^n|^2 [1 - f(\epsilon_n)], \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{ij} &= \sum_n \left(\frac{V_d}{4} (u_i^n v_j^{n*} + v_i^{n*} u_j^n) \tanh\left(\frac{\beta \epsilon_n}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{V_c}{2} v_i^{n*} u_j^n [1 - f(\epsilon_n)] \right), \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $f(E) = 1/(e^{\beta E} + 1)$ 为费米-狄拉克分布函数. 格点 i 处的 DSC 序参量 $\Delta_i^D = (\Delta_{i+e_x, i}^D + \Delta_{i-e_x, i}^D - \Delta_{i, i+e_y}^D - \Delta_{i, i-e_y}^D)/4$ 其中 $\Delta_{ij}^D = \Delta_{ij} \exp\left[i \frac{\pi}{\Phi_0} \int_{r_i}^{(r_i+r_j)/2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}\right]$, $\mathbf{e}_{x,y}$ 表示沿 (x, y) 方向的单位矢量.

计算中选取晶格常数 a 为长度单位, 最近邻跳跃积分参数 \bar{t} 为能量单位. 对于 $U/V_d \gg 1$ 或 $U/V_d \ll 1$ 的极限情况, 系统是反铁磁态或者纯 d 波超导态. 但是当 U/V_d 取中间值时, 反铁磁态和 d 波超导态共存, 所以令 $V_d = 1$, U/V_d 取值范围是 2.2—2.5. 次最近邻积分单位 $t' = -0.2$, 平均电子密度 $\bar{n} = 0.875$, 对应参杂度 $x = 0.125$, V_c 的取值范围是 0—0.35 对应静态介电常数为 $\epsilon_e \rightarrow \infty$ 到 $\epsilon_e \rightarrow 0$ 的掺杂铜氧化物超导体样品^[13].

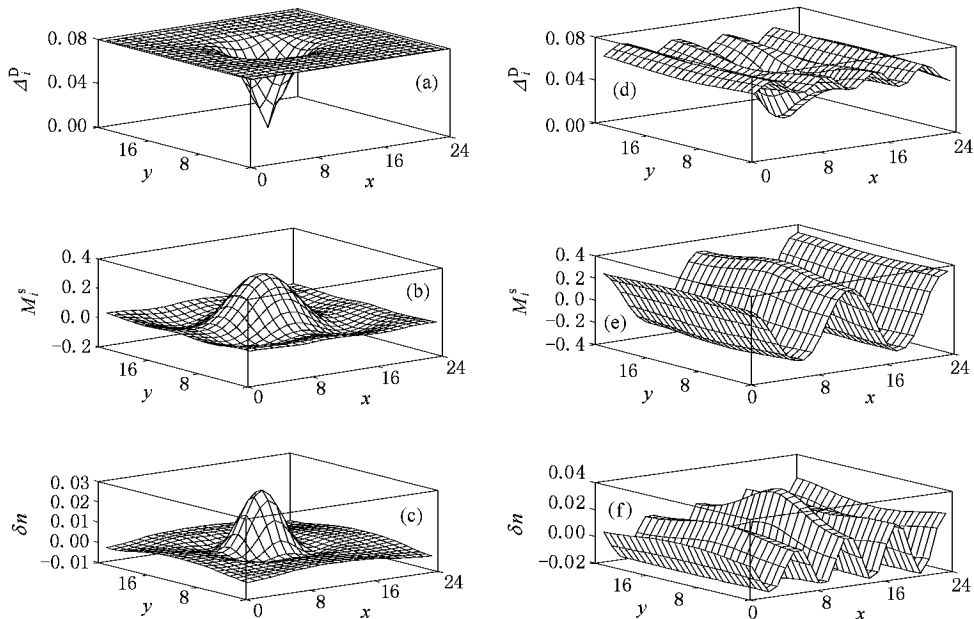


图 1 DSC 序参量 Δ_i^D (a)(d)、交错磁场 M_i^S (b)(e) 和电荷相对密度 $\delta n = \sum_{\sigma} n_{i\sigma} - \bar{n}$ (c)(f) 在 24×24 格子里的空间分布. 左列和右列分别对应 $U = 2.3$ 和 $U = 2.4$. 电子密度平均值 $\bar{n} = 0.875$

4. 结 果

首先,我们讨论原位排斥势 U 的作用,从计算结果看出,当 U 由小变大时,SDW 和 CDW 由棋盘相变为条纹相.如图 1 所示,左边一列为 $U = 2.3$ 时的涡旋结构,而右边一列为 $U = 2.4$ 时的涡旋结构. SDW 的交错磁场定义为 $M_i^s = (-1)^i \Delta_i^{\text{SDW}} / U$.可以很清楚地看到,当 $U = 2.3$ 时,DSC,SDW 和 CDW 的二维调制都具有四重对称性.在涡旋芯(12,12)处,DSC 序参量消失而 AF 序参量最强.离开涡旋芯,DSC 序参量被调制,这与反铁磁有序有非常密切的关系. U 变大到 $U = 2.4$ 时,图 1 右边的一列显示了沿 y 方向的条纹结构,DSC 和 CDW 具有周期 $6a$,而 SDW 周期为 $12a$,与实验^[14]和理论^[15]相符.需要指出的是,最佳掺杂样品实验^[5,16]中得到 SDW 和 CDW 的周期分别为 $8a$ 和 $4a$,在我们的模型中,通过调整原位排斥势 U 或者化学势 μ 可以同样得到上述结果.为了更清楚地展示原位排斥势 U 变化引起的涡旋结构由棋盘相到条纹相的转变,本文给出了交错磁场最大值随 U 的变化图,如图 2 所示.从图中可以看出,存在一个临界值 $U_c \approx 2.31$,当 $U < U_c$ 时棋盘结构存在,而 $U > U_c$ 时棋盘相转变为条纹相.

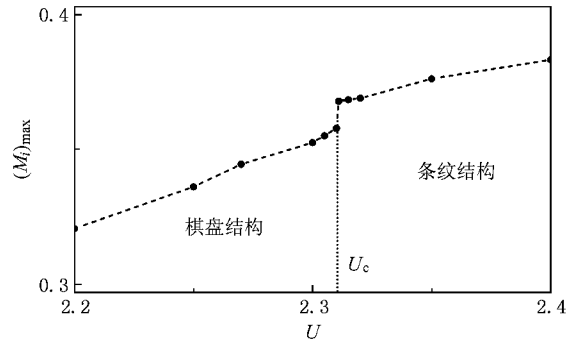


图 2 交错磁场最大值 $(M_i)_{\max}$ 随原位排斥势 U 的变化图. 棋盘结构和条纹结构分别代表自旋密度波的棋盘结构调制和条纹结构调制,电子密度平均值 $\bar{n} = 0.875$

然后,考虑长程库仑势对涡旋结构的影响.取 $U = 2.4$,上面的结果表明,不考虑 V_c 时,涡旋结构应为条纹相.引入 V_c 后减弱了 U ,因为有效哈密顿量中长程库仑势项和原位排斥势项存在竞争关系,所以 V_c 的引入可以改变涡旋结构.图 3 左列显示 V_c 比较小 ($V_c = 0.05$) 时,DSC,SDW 和 CDW 仍然保持一维结构,SDW 和 CDW 的条纹调制周期分别还是 $12a$ 和 $6a$.仔细观察发现,DSC,SDW 和 CDW 的空间分布相对于图 1 中右列变得尖锐.长程库仑势的强度足够大时,例如, $V_c = 0.15$ 时,所得的结果与

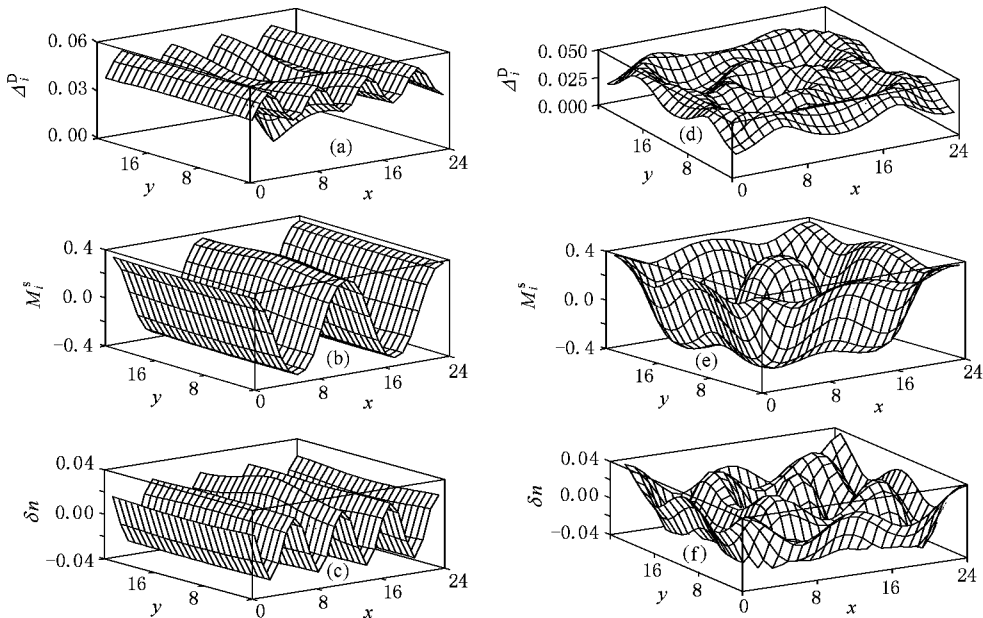


图 3 DSC 序参量 Δ_i^P (a)(d)、交错磁场 M_i^s (b)(e) 和电荷相对密度 $\delta n = \sum_{\sigma} n_{i\sigma} - \bar{n}$ (c)(f) 在 24×24 格子中的空间分布. 左列和右列分别对应 $V_c = 0.05$ 和 $V_c = 0.15$, 原位排斥势 $U = 2.4$, 电子密度平均值 $\bar{n} = 0.875$

$V_c = 0.05$ 时有显著区别,如图 3 右列所示,一维结构已经被二维或者棋盘结构取代.从图中可以看到,涡旋芯变小,预示着长程库仑势通过把电子排出反铁磁涡旋芯屏蔽了反铁磁序参量,从而使反铁磁序参量的涨落被局限在更靠近涡旋芯的范围内.引入长程库仑势后 DSC 参量被抑制,如图 3(d)所示,同时 CDW 的峰值变小,如图 3(f)所示.继续增大 V_c 的值,涡旋继续保持棋盘结构.上述结果说明,尽管原位排斥势比较强,欠掺杂样品中也可能存在棋盘相.这和通常认为的强的原位排斥势应该引起条纹状的反铁磁有序并不矛盾,因为长程库仑势的存在减弱了反铁磁有序的幅值.上述结果与欠掺杂样品 $\text{Na}_x\text{Ca}_{2-x}\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ ^[4] 和 BSCCO ^[5] 的 STM 实验结果一致.

5. 结 论

基于反铁磁序参量、 d 波超导序参量、长程库仑势共存的有效哈密顿模型,本文通过数值求解 BdG 方程详细研究了二维格子中原位排斥势 U 和长程库仑势 V_c 对高温超导体涡旋结构的影响.作者发现通过改变原位排斥势 U 和长程库仑势 V_c 的强度可以实现一维涡旋结构和二维涡旋结构之间的转变.强的原位排斥势更有利于一维的涡旋结构.通过分析长程库仑势对涡旋结构的作用发现,引入适当大小的长程库仑势后,对应大 U 前提下的一维条纹结构变成了二维棋盘结构,同时自旋密度波受到了抑制.进而可以很好地解释文献 [3—5] 中实验观察的结果.

- [1] Mitrovic V F, Sigmund E E, Eschrig M, Bachman H N, Halperin W P, Reyes A P, Kuhns P, Moulton W G 2002 *Nature* **413** 501
- [2] Tranquada J M, Sternlieb B J, Axe J D, Nakamura Y, Uchida S 1995 *Nature* **375** 561
- [3] Hoffman J E, Hudson E W, Lang K M, Madhavan V, Pan S H, Eisake H, Uchida S, Davis J C 2002 *Science* **295** 466
- [4] Hanaguri T, Lupien C, Kohsaka Y, Lee D H, Azuma M, Takano M, Takagi H, Davis J C 2004 *Nature* **430** 1001
- [5] McElroy K, Lee D H, Hoffman J E, Lang K M, Lee J, Hudson E W, Eisaki H, Uchida S, Davis J C 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 197005
- [6] Chen H Y, Ting C S 2005 *Phys. Rev. B* **71** 220510(R)
- [7] Chen Z P, Gong S C, Su Y L, Xue Y C, Zhang J C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5382 (in Chinese) [陈镇平、宫世成、苏玉玲、薛运才、张金仓 2005 物理学报 **54** 5382]
- [8] Chen W X, Yang P F 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6622(in Chinese) [陈文学、杨鹏飞 2006 物理学报 **55** 6622]
- [9] Liu M, Wu B G, You Y X, Zhao Z G 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1680 (in Chinese) [刘 楣、吴炳国、尤育新、赵志刚 2007 物理学报 **56** 1680]
- [10] Khomskii D I, Freimuth A 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1384
- [11] Chen Y, Wang Z D, Zhu J X, Ting C S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 217001
- [12] Zhou S P 2001 *Chin. Phys.* **10** 541
- [13] Kastner M A, Birgeneau R J, Shirane G, Endoh Y 1998 *Rev. Mod. Phys.* **70** 897
- [14] Lake B, Rønnow H M, Christensen N B, Aeppli G, Lefmann K, McMorro D F, Vorderwisch P, Smeibidl P, Mangkorntong N, Sasagawa T, Nohara M, Takagi H, Mason T E 2002 *Nature* **415** 299
- [15] Zha G Q, Zhao H W, Zhou S P 2007 *Phys. Rev. B* **76** 132503
- [16] Lake B, Aeppli G, Clausen K N, McMorro D F, Lefmann K, Hussey N E, Mangkorntong N, Nohara M, Takagi H, Mason T E, Schröder A 2001 *Science* **291** 1759

Transition of charged vortex structures in underdoped high-temperature superconductors^{*}

Zhao Hong-Wei[†] Meng Hao Zhang Ling-Feng Zha Guo-Qiao Zhou Shi-Ping

(Department of Physics , Shanghai University , Shanghai 200444 , China)

(Received 4 July 2008 ; revised manuscript received 28 November 2008)

Abstract

Vortex structures in high-temperature superconductors are studied by solving Bogoliubov-de Gennes equations based on a mean-field $t-t'-U-V-V_c$ model. The results show that transition from checkerboard pattern to stripe structure for spin density wave, charge density wave, and d -wave orderings may occur by enhancing the strength of the on-site repulsion U . When a reasonable long-range Coulomb interaction is introduced into the model Hamiltonian, two-dimensional modulations or the checkerboard patterns may appear for the underdoped samples, which is consistent with the scanning-tunneling-microscopy experiments.

Keywords : high-temperature superconductors, vortex structures, long-range Coulomb interaction

PACC : 7420M, 7460E

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60671042), Shanghai Leading Academic Discipline Project, China (Grant No. S30105), and the Innovation Funds for Graduates of Shanghai University, China (Grant No. shucx080121).

[†] E-mail : zhaohongwei@shu.edu.cn