

CeCu₂Si₂ 的超导临界温度随压力变化的 理论解释

冯 世 平

(北京师范大学物理系)

1985 年 7 月 17 日收到

提 要

在 BCS 机制下,采用 Anderson 模型,在低压区域内,我们解释了 CeCu₂Si₂ 的超导临界温度随压力变化的实验结果.

一、引 言

最近,实验上已经发现了一些化合物材料具有许多低温反常性质: 它们的超导临界温度 T_c 很低,具有大的有效质量 m^* 和临界磁场 $H_c^{[1-4]}$. 因而称这类化合物为重费密子超导体. 对于重费密子超导体,现在并没有一个比较满意的理论解释. Anderson 等人认为重费密子超导体可能是类似于超流 ³He 的哪种 P-波型超导体,而不是 BCS 型的超导体^[5,6]. 而另外一些人则认为这类超导体的机制仍然是电声子机制^[7,8]. 但是,无论坚持那种观点的人,都认为重费密子超导体中的 f 电子对于超导及其它特性起了关键的作用. 正是 f 电子的局域性使得重费密子超导体有较大的有效质量等一系列低温反常性质. 第一个被发现的重费密子超导体是 CeCu₂Si₂^[1], 它是一个典型的混合价化合物,对于这类混合价化合物,实验上已发现当对样品加压后要发生所谓的 Collapse 效应^[9]. 特别有趣的是最近 Aliev 等人发现 CeCu₂Si₂ 样品的超导临界温度随外加压力的变化而变化^[10]. 我们认为: 由于 CeCu₂Si₂ 是混合价化合物,它在加压后可以发生显著的体积变化,因而电子-晶格相互作用将是非常重要的. 当系统被加压后,首先费密能级和 f 电子能级要发生相对移动,其次加压后增加了 f-s 轨道的杂化. 正是由于以上原因才使得 CeCu₂Si₂ 的超导临界温度 T_c 随压力而变化. 本文的目的就是在 BCS 机制下,考虑 f 电子的定域性以及以上所说的其他一些影响后来解释这个实验事实.

二、现论方法简述

我们已经知道 f 电子在重费密子超导体中起关键作用. 由于 f 电子的定域性很强,故可采用周期 Anderson 模型哈密顿量^[7]

$$H = H_0 + H_1. \quad (1)$$

这里

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{f\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + V \sum_{\mathbf{k}\sigma} (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}), \quad (2)$$

$$H_1 = \frac{U}{2} \sum_i f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} f_{i-\sigma}^\dagger f_{i-\sigma}, \quad (3)$$

$$\varepsilon_{f\mathbf{k}} = \alpha \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad \alpha \ll 1. \quad (4)$$

文献[7]中采用微扰近似,求得导带电子和 f 电子的 Green 函数分别为

$$G_{c\mathbf{k}}(\omega_n) = \frac{1}{2\tilde{\gamma}V} \left[\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - (u - v)}{i\omega_n - (u - v)} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - (u + v)}{i\omega_n - (u + v)} \right], \quad (5)$$

$$G_{f\mathbf{k}}(\omega_n) = \frac{1}{2V} \left[\frac{\tilde{\alpha}\varepsilon_{\mathbf{k}} - (u - v)}{i\omega_n - (u - v)} - \frac{\tilde{\alpha}\varepsilon_{\mathbf{k}} - (u + v)}{i\omega_n - (u + v)} \right]. \quad (6)$$

这里

$$\tilde{\gamma} = 1 - \left. \frac{\partial \tilde{\Sigma}(\omega_n)}{\partial (i\omega_n)} \right|_{i\omega_n=0}, \quad (7)$$

$$\tilde{\alpha} = \alpha/\tilde{\gamma}, \quad (8)$$

$$u = \frac{1}{2} (1 + \tilde{\alpha}) \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad (9)$$

$$v = \frac{1}{2} [(1 - \tilde{\alpha})^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + 4\tilde{\nu}^2]^{\frac{1}{2}}, \quad (10)$$

$$\tilde{\nu}^2 = V^2/\tilde{\gamma}, \quad (11)$$

$\tilde{\Sigma}(\omega_n)$ 为自能. 可见能量的色散关系有两支. 将 $u + v$ 和 $u - v$ 沿着费密能级展开, 可得

$$u \pm v = h(\varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \varepsilon_0), \quad (12)$$

$$h = 2\tilde{\alpha}/(1 + \tilde{\alpha}), \quad \varepsilon_0 = |\tilde{\nu}|/(\tilde{\alpha})^{\frac{1}{2}}. \quad (13)$$

我们近似地将这两支能谱看作是自由粒子能谱, 则可求得基态能量为

$$E_g = \frac{12}{5} \cdot \frac{\tilde{\alpha}}{(1 + \tilde{\alpha})} E_F. \quad (14)$$

这里 E_F 为系统的费密能量. 当我们对于样品施加压力后, 我们需要考虑 f 电子能级和费密能级的相对移动和 f-s 电子杂化的增加而引起的效应. 这两个效应可通过如下方式引入:

$$\alpha = \alpha_0 - \beta\bar{V}, \quad (15)$$

$$E_f = E_0 - \chi\bar{V}, \quad (16)$$

$$\bar{V} = V - V_0. \quad (17)$$

这里 V 是样品上的压力为 P 时的比容, 而 V_0 是零压力时的比容. 那么在压力为 P 时, 系统的基态能量为

$$E_g = \frac{12}{5} \cdot \frac{(\tilde{\alpha}_0 - \tilde{\beta}\bar{V})}{(1 + \tilde{\alpha}_0 - \tilde{\beta}\bar{V})} (E_0 - \chi\bar{V}), \quad (18)$$

式中 $\tilde{\beta} = \beta/\tilde{\gamma}$. 定义系统的焓为

$$\Omega = E_g + p\bar{V}. \quad (19)$$

由平衡条件

$$\frac{\delta Q}{\delta \bar{V}} = 0, \quad (20)$$

我们可定出 $\bar{V}$ 与 p 的关系. 由于(15)–(17)式的线性关系只对于 $\bar{V}$ 小时成立, 也就是说只对于低压区成立. 因此, 我们只讨论低压区情况, 在略去 $\bar{V}$ 的高阶项后, 可得

$$\bar{V} = \frac{5(1 + \tilde{\alpha}_0)^2 p}{12(2\tilde{\beta}^2 E_0 - 2\tilde{\beta}\chi(1 + \tilde{\alpha}_0))} - \frac{\tilde{\beta}E_0(1 + \tilde{\alpha}_0) + \tilde{\alpha}_0(1 + \tilde{\alpha}_0)^2 \chi}{(2\tilde{\beta}^2 E_0 - 2\tilde{\beta}\chi(1 + \tilde{\alpha}_0))}. \quad (21)$$

文献[7]中已经证明导带电子不直接参与超导, 而直接参与超导过程的是经过 f-s 杂化后的 f 电子. 他们在 Anderson 模型哈密顿量的基础上, 考虑 Cooper 对的影响, 求得系统的超导临界温度为

$$T_c = 1.13 T^* \exp - \frac{1}{\lambda_f \rho} \alpha(\tilde{\gamma} + \alpha). \quad (22)$$

在讨论超导情况时, 由于对样品加压后晶格要发生变化, 因此我们认为电-声子耦合常数 λ_f 也要发生变化, 可认为

$$\lambda_f = \lambda_f^0 - \kappa \bar{V}, \quad \kappa \geq \beta. \quad (23)$$

这样, 在我们讨论 T_c 随压力的变化情况时, 自然是以 $\alpha_0 - \beta \bar{V}$ 和 $\lambda_f^0 - \kappa \bar{V}$ 代替(22)式的 α 和 λ_f 而得

$$T_c = 1.13 T^* \cdot \exp \{ - [\alpha_0(\tilde{\gamma} + \alpha_0) - \beta(2\alpha_0 + \tilde{\gamma})\bar{V} + \beta^2 \bar{V}^2] / (\lambda_f^0 - \kappa \bar{V}) \rho \}. \quad (24)$$

以下我们就是利用(24)式和(21)式来解释 CeCu₂Si₂ 的超导临界温度随压力变化而变化的实验事实.

三、结果与讨论

因为(21)式可写成如下形式:

$$\bar{V} = Ap - B, \quad (21')$$

式中

$$A = \frac{5(1 + \tilde{\alpha}_0)^2}{12[2\tilde{\beta}^2 E_0 - 2\tilde{\beta}\chi(1 + \tilde{\alpha}_0)]}, \quad (25)$$

$$B = \frac{\tilde{\beta}E_0(1 + \tilde{\alpha}_0) + \tilde{\alpha}_0(1 + \tilde{\alpha}_0)^2 \chi}{[2\tilde{\beta}^2 E_0 - 2\tilde{\beta}\chi(1 + \tilde{\alpha}_0)]}. \quad (26)$$

将此两式代入(24)式可得

$$T_c^p = T_c^0 e^{ap - bp^2}. \quad (27)$$

这里

$$a = \frac{A}{\lambda_f^0 \rho} \left[\beta(2\alpha_0 + \tilde{\gamma}) - \frac{1}{\lambda_f^0} \kappa \alpha_0(\tilde{\gamma} + \alpha_0) + 2B \left(\beta^2 - \frac{(2\alpha_0 + \tilde{\gamma})\kappa\beta}{\lambda_f^0} \right) \right], \quad (28)$$

$$b = \frac{A^2}{\lambda_f^0 \rho} \left[\beta^2 - \frac{\kappa\beta(2\alpha_0 + \tilde{\gamma})}{\lambda_f^0} \right]. \quad (29)$$

根据以上分析, 我们对于低压时的实验结果采用数值模拟得到的 T_c 公式为

$$T_c = 0.014 \cdot \exp(2.32p - 0.37p^2). \quad (30)$$

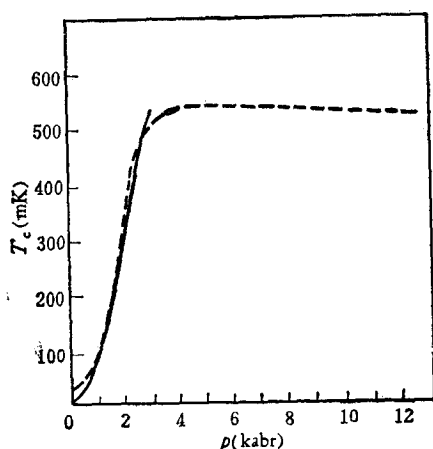


图1 实线代表理论结果;虚线代表实验结果

作者对李铁城先生的指导表示感谢。

这个公式与理论计算的公式(27)完全相同,而且由此可部分地定出(27)式中 a 和 b 中出现的参数,其余参数则需要做更详细的计算或由其它实验结果来定。这样,原则上我们已经定性或半定量地解释了 CeCu_2Si_2 的超导临界温度随压力变化在低压区域的实验结果(见图1)。

最后我们注意到的是重费密子超导电性的研究现在尚处在初始阶段,并没有一个被人们普遍接受的微观理论。因而从理论上研究重费密子超导体的机制和由此而解释一系列的实验结果将是非常重要的。

参 考 文 献

- [1] F. Steglich *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 1892.
- [2] H. R. Ott *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1595; *ibid*, **52**(1984), 1915.
- [3] G. R. Stewart *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 679.
- [4] L. E. DeLong *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983), 312.
- [5] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 1553.
- [6] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 4000.
- [7] M. Tachiki *et al.*, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 2497.
- [8] H. Razafimandimby *et al.*, *Z. Phys.*, **B54**(1984), 111.
- [9] J. M. Lawrence *et al.*, *Rep. Prog. Phys.*, **41**(1981), 1.
- [10] F. G. Aliev *et al.*, *Solid State Communications*, **45**(1983), 215.

THEORETICAL EXPLANATION OF SUPERCONDUCTIVE CRITICAL TEMPERATURE CHANGES OF CeCu_2Si_2 WITH PRESSURE

FENG SHI-PING

(Department of Physics, Beijing Normal University)

ABSTRACT

Under the BCS mechanism, we use Anderson model to explain CeCu_2Si_2 superconductive critical temperature change with pressure in low pressure range.