

Kondo 晶格中的超导理论

徐继海¹⁾

(中国科学院物理研究所)

苏肇冰

李铁城

(中国科学院理论物理研究所) (中国科学院物理研究所)

1986 年 7 月 2 日收到

提 要

为解释重费密子超导现象,本文在 Kondo 晶格中建立了 S 波和 P 波超导理论,并在推广的 Nambu 空间中对 f 电子和传导电子的杂化作用进行了自洽处理,计算了有关物理量. 理论证明: 如果认为 f 电子参与超导,对 S 波,所得到的超导转变温度与 Tachiki 等人的结果一致,但比热跃变与他们的不同,本文的结果更合理些;对 P 波,由 Kondo 晶格模型描述的重费密子超导系统等效于修正的局域的费密超流体. 此外,本文还研究了杂质散射对超导态的影响,并对各种不同的超导态分别得到了出现无能隙超导的条件.

一、引 言

自 1979 年 Steglich 等人^[1]发现 $CeCu_2Si_2$ 具有所谓“重费密子超导电性”(HFS)以来,人们又陆续发现 UBe_{13} ^[2] 和 UPt_3 ^[3] 等化合物也具有 HFS 性质. 由于 HFS 化合物表现出许多不同寻常的性质,引起了人们的极大兴趣. 这些性质包括: 具有较大的有效质量;许多物理量在 T_c 以下的低温行为与 BCS 理论有明显的偏离,等等.

为解释 HFS 现象,已有人提出了一些理论^[4-10]. 特别是 Tachiki 等人^[4],为解释具有 Kondo 反常的 HFS 化合物,提出了一个“Kondo 晶格中的 S 波超导理论”. 这一理论虽然能解释 HFS 的某些性质,但也存在与实验不符的地方. 例如,按照他们的理论, T_c 处的比热跃变与正常态比热之比与 BCS 理论完全相同^[4],这与 HFS 的实验相矛盾. 另外,某些物理量在 T_c 以下的低温行为也同 Tachiki 等人的理论不一致. 为得到更合理的结果,我们以对 f 电子和传导电子的杂化作用的自洽处理为基础,在 Nambu 空间^[11]推广了 Tachiki 等人的理论. 所得到的 T_c 与他们相同,但比热跃变与他们不一致,我们的结果与 HFS 的实验更符合些. 此外,我们还计算了其它物理量. 同时,我们对 P 波超导态的处理和有关物理量的计算以及杂质散射对超导态的影响则是新的尝试.

1) 现在山东大学物理系.

二、S 波超导理论

1. 模型

一般认为 CeCu_2Si_2 和 UBe_{13} 为 Kondo 晶格系统, f 电子形成 Kondo 晶格. 在这种系统中,不同格点上的 f 电子间的关联是很重要的. 这种关联可用标准的 Kondo 晶格模型进行计算^[22]. 为了方便,象 Yoshimori^[23] 和 Tachiki 等人所做的那样,我们用 f 带具有一小的修正的色散 ε_{fk} 来表示 f 电子间的这种关联. 注意到 HFS 现象起源于 f 电子的实验事实,可认为在 T_c 以下 f 电子凝聚为 Cooper 对. 这样,系统的哈密顿量可表示为

$$H = H_0 + H_1 + H_2, \quad (1)$$

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \left(\varepsilon_{fk} + E_f + \frac{U}{2} \right) f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} \\ + V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) - \frac{U}{4} N, \quad (2)$$

$$H_1 = U \sum_i \left(f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \left(f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \sum_{\sigma\sigma'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{-k\sigma'}^\dagger f_{k\sigma}^\dagger f_{k'\sigma'} f_{-k'\sigma'}, \quad (4)$$

其中 $c_{k\sigma}$, $f_{k\sigma}$ 分别为传导电子及 f 电子算符, ε_k 为传导电子的单电子能量, V 为传导电子与 f 电子间的杂化参数, U 为同一格点上 f 电子间的 Coulomb 能量, N 为系统的格点数. 在 Kondo 区,系统处于 Kondo 单态, f 电子能级位于费密能级上. 为了方便,采用对称 Anderson 模型,此时 $E_f = -U/2$.

在正常态,若对 H_1 引起的自能 $\tilde{\Sigma}(\omega_n)$ 作单格点近似,则有^[24]

$$\tilde{\Sigma}(\omega_n) \approx i\omega_n(1 - \tilde{\gamma}), \quad (5)$$

其中

$$\tilde{\gamma} = 1/4N_f(0)T_K. \quad (6)$$

这里 $\omega_n = 2\pi T \left(n + \frac{1}{2} \right)$, n 为整数, $N_f(0)$ 为 f 电子在费密面上的态密度, T_K 为 Kondo 温度. 按照 Tachiki 等人的做法^[4],略去重正化效应引起的能量漂移,可得到重正化后的 f 电子及传导电子的 Green 函数

$$G_{fk}(\omega_n) = [i\omega_n k_f - \varepsilon_{fk}]^{-1}, \quad (7)$$

$$G_{ck}(\omega_n) = [i\omega_n k_c - \varepsilon_k]^{-1}, \quad (8)$$

其中 k_f 和 k_c 分别为 f 电子和传导电子的重正化常数

$$k_f = \tilde{\gamma} + N_c(0)/N_f(0) \quad (9)$$

$$k_c = 1 + \tilde{\gamma}N_f(0)/N_c(0). \quad (10)$$

这里 $N_c(0)$ 为传导电子在费密面上的态密度, $\tilde{\gamma}$ 由 (6) 式给出. 由于 f 电子的色散 ε_{fk} 比传导电子的 ε_k 小得多,因此有 $N_f(0) \gg N_c(0)$. 利用 (7) 和 (8) 式,容易得到正常态的比热

$$c_n(T) = \frac{2\pi^2}{3} N_f(0) k_f T = \gamma T, \quad (11)$$

其中 k_f 由 (9) 式给出. 比热系数 $\gamma = \frac{2\pi^2}{3} N_f(0) k_f$, 由于 k_f 为 1 的量级, 而 $N_f(0) \gg N_c(0)$, 所以 γ 比普通金属大得多, 从而解释了重费密子的形成.

2. 超导态的自洽方程

与 Tachiki 等人的做法不同^[4], 这里我们将在推广的 Nambu 空间^[11] 讨论 S 波超导. 在弱耦合情况下, S 波超导哈密顿量 H (见 (1) 式) 可表示为

$$H_{\text{eff}} = H_0 + H_1 - \sum_k (\Delta f_{-k\downarrow}^\dagger f_{k\uparrow}^\dagger + \text{h.c.}), \quad (12)$$

其中已定义 S 波的超导序参量为

$$\Delta = -g \sum_k \langle f_{-k\downarrow} f_{k\uparrow} \rangle, \quad (13)$$

其中 g 为耦合常数. 定义算符

$$F_k = \begin{pmatrix} f_{k\uparrow} \\ f_{k\downarrow} \\ f_{-k\uparrow}^\dagger \\ f_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}; \quad C_k = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{k\downarrow} \\ c_{-k\uparrow}^\dagger \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (14)$$

现在就可推广的 Nambu 空间定义 f 电子及传导电子的 Green 函数

$$\mathcal{G}_k^f(\omega_n) = \langle\langle F_k; F_k^\dagger \rangle\rangle_{i\omega_n}, \quad (15a)$$

$$\mathcal{G}_k^c(\omega_n) = \langle\langle C_k; C_k^\dagger \rangle\rangle_{i\omega_n}. \quad (15b)$$

这里 $\langle\langle \dots; \dots \rangle\rangle_{i\omega_n}$ 类似于 Zubarev 的推迟 Green 函数的 Fourier 变换^[12], 差别只是用 $i\omega_n$ 代替了普通频率 ω .

在推广的 Nambu 空间, 传导电子及 f 电子的单电子自能 $\Sigma_c(\omega_n)$, $\Sigma_f(\omega_n)$ 可用图 1 表示.

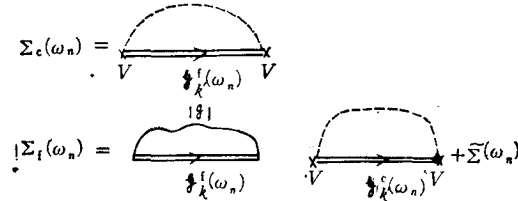


图 1 在推广的 Nambu 空间, 传导电子及 f 电子的单粒子自能示意图 $\mathcal{G}_k^f(\omega_n)$ 和 $\mathcal{G}_k^c(\omega_n)$ 分别表示 f 电子及传导电子的总 Green 函数; g 为 f 电子的 BCS 超导耦合常数; $\tilde{\Sigma}(\omega_n)$ 为 H_1 产生的自能, 可由 (5) 式近似给出; \times 表示在同一格点上的散射, 其散射矩阵元为 V

我们可设 $\mathcal{G}_k^c(\omega_n)$, $\mathcal{G}_k^f(\omega_n)$ 具有如下形式:

$$[\mathcal{G}_k^c(\omega_n)]^{-1} = i\omega_n z_c(\omega_n) \tau_0 - \varepsilon_k \tau_3 - \phi_c(\omega_n) \sigma_2 \tau_2 = i\omega_n \tau_0 - \varepsilon_k \tau_3 - \Sigma_c(\omega_n), \quad (16a)$$

$$[\mathcal{G}_k^f(\omega_n)]^{-1} = i\omega_n z_f(\omega_n) \tau_0 - \varepsilon_{f,k} \tau_3 - \phi_f(\omega_n) \sigma_2 \tau_2 = i\omega_n \tau_0 - \varepsilon_{f,k} \tau_3 - \Sigma_f(\omega_n), \quad (16b)$$

其中 σ_i , τ_i 分别为自旋空间和粒子-空穴空间的 Pauli 矩阵, $z_c(\omega_n)$, $z_f(\omega_n)$ 分别为传导电子和 f 电子 Green 函数的重正化系数, $\phi_c(\omega_n)$, $\phi_f(\omega_n)$ 分别为传导电子和 f 电子

的重正化序参量。定义两个新函数 $u_c(\omega_n)$ 和 $u_f(\omega_n)$

$$u_c(\omega_n) = \omega_n z_c(\omega_n) / \phi_c(\omega_n), \quad (17a)$$

$$u_f(\omega_n) = \omega_n z_f(\omega_n) / \phi_f(\omega_n). \quad (17b)$$

利用图 1 给出的自能和 (17) 式, 结合 (16) 式和 (5) 式, 可得到关于 $u_c(\omega_n)$, $u_f(\omega_n)$ 的自治方程

$$u_c(\omega_n) = u_f(\omega_n) + \omega_n \sqrt{1 + u_f^2(\omega_n)} / \pi N_f(0) V^2, \quad (18a)$$

$$u_f(\omega_n) = \frac{\tilde{\gamma} \omega_n + \pi N_c(0) V^2 u_c(\omega_n) / \sqrt{1 + u_c^2(\omega_n)}}{\Delta + \pi N_c(0) V^2 / \sqrt{1 + u_c^2(\omega_n)}}. \quad (18b)$$

(18) 式即为我们将要用到的基本方程。

3. 超导转变温度 T_c

由 (13) 式可得到序参量 Δ 所满足的方程

$$\Delta = g N_f(0) \pi T \sum_n \frac{1}{\sqrt{1 + u_f^2(\omega_n)}}. \quad (19)$$

当 $T \rightarrow T_c$ 时, 可设 $u_f(\omega_n)$ 具有级数形式的解

$$u_f(\omega_n) = \frac{a_{-1}}{\Delta} + a_1 \Delta + \dots, \quad (20)$$

将 (20) 式代入 (18) 式中, 注意到 $\pi N_f(0) V^2 \gg |\omega_n|$, $N_f(0) \gg N_c(0)$, 则可自治地定出系数 a_{-1} , a_1, \dots 来,

$$a_{-1} = \omega_n [\tilde{\gamma} + N_c(0) / N_f(0)] = k_f \omega_n, \quad (21)$$

$$a_1 = N_c(0) / 2 \tilde{\gamma} N_f(0) a_{-1}. \quad (22)$$

代入能隙方程 (19), 可得到决定 T_c 的方程

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = \pi T_c \sum_n \left(\frac{1}{a_{-1}} - \frac{1}{\omega_n} \right), \quad (23)$$

其中 T_{c0} 为 BCS 超导转变温度。利用 (21) 式, 则可明显地得出 T_c 的表达式

$$T_c = 1.14 T_K \cdot \exp \left[-\frac{1}{N_f(0) g} \right]. \quad (24)$$

上面已将截止能量取为 Kondo 温度 T_K 。这一结果与 Tachiki 等人的一致^[4]。

4. 有关热力学量的计算

1) $T = 0$ 处的能隙函数及序参量 一般而言, 能隙函数 Δ_g 并不等于序参量 Δ , 能隙函数定义为

$$\Delta_g = \phi_f(\omega_n) / z_f(\omega_n) = \omega_n / u_f(\omega_n). \quad (25)$$

在 $T = 0$ 时, 由 (20) 和 (21) 式及 (19) 式, 得

$$\Delta(0) = 2 T_K k_f \cdot \exp \left[-\frac{k_f}{N_f(0) g} \right], \quad (26)$$

$$\Delta_g(0) = 2 T_K \cdot \exp \left[-\frac{k_f}{N_f(0) g} \right]. \quad (27)$$

由此可以看出 Kondo 晶格中的超导与普通金属 BCS 超导的差别, 这里能隙函数不再等于序参量了.

2) T_c 处的比热跃变 利用 $T \rightarrow T_c$ 处的序参量方程, 可求出 T_c 处的比热跃变 Δ_c (见附录)

$$\Delta_c = \frac{8\pi^2}{7\rho(3)} \tilde{\gamma} k_f^2 N_f(0) T_c, \quad (28)$$

其中 $\rho(3)$ 为 ρ 黎曼函数. 由于 $N_f(0) \gg N_c(0)$, Δ_c 就非常大, 与 HFS 的实验相符. 结合 (11) 及 (28) 式, 可得到 T_c 处的比热跃变与正常态比热之比为

$$\frac{\Delta_c}{c_n(T_c)} = \left(\frac{12}{7\rho(3)} \right) \tilde{\gamma} k_f = 1.426 \tilde{\gamma} k_f. \quad (29)$$

这一结果比 Tachiki 等人^[4]的结果更合理些, 因为他们得到的与 BCS 值 (1.426) 完全相同, 而实验表明 HFS 的这一比率与 BCS 值有差别, 例如 CeCu_2Si_2 和 UBe_{13} 的这个比率为 1.36, 在我们的理论中只要取 $k_f \tilde{\gamma} = 0.92$ 就能与实验相符了.

3) 热力学临界磁场 容易算出 $T=0$ 处的热力学临界磁场

$$\frac{H_c(0)}{H_{c0}(0)} = \frac{T_c}{T_{c0}} \sqrt{k_f}, \quad (30)$$

其中 $H_{c0}(0)$ 和 T_{c0} 分别为 BCS 理论的临界磁场和超导转变温度.

4) 超导元激发 只要求出 (18) 式, 超导态的准粒子元激发态密度就很容易求出. 实际上

$$N_s(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_k \text{Tr} \left[\frac{1 + \tau_3}{4} \mathcal{G}_k^f(\omega_n) \right]_{i\omega_n = \omega + i\delta}. \quad (31)$$

经过简单计算, 可以得到

$$N_s(\omega) = N_f(0) \text{Im} \frac{u_f(\omega)}{\sqrt{1 - u_f^2(\omega)}} \approx N_f(0) \text{Im} \frac{\omega}{\sqrt{\Delta^2/k_f^2 - \omega^2}}. \quad (32)$$

这与 BCS 理论在形式上完全相同, 只是能隙变为 $\Delta_g = \Delta/k_f$. 由此推知, 同这一理论算出的有关物理量的低温行为与 BCS 理论相一致, 这与 HFS 的实验相矛盾. 因此有必要考虑其它因素的影响.

5. 杂质散射的影响

在 HFS 化合物中, 杂质散射总是存在的, 尤其是自旋-轨道散射, 其强度比普通金属大得多, 因此有必要考虑杂质散射对超导态的影响. 首先在推广的 Nambu 空间引入杂质散射势 $U^{(im)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$:

$$U^{(im)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = u_1 \tau_3 + i u_{s0} (\hat{k} \times \hat{k}') \cdot \boldsymbol{\alpha}. \quad (33)$$

上式等式右端第一项为正常散射, 第二项为自旋-轨道散射. 其中 $\hat{k} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$, $\boldsymbol{\alpha}$ 为 Nambu 空间 f 电子的自旋算符, 其定义为

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{1 + \tau_3}{2} \boldsymbol{\sigma} + \frac{1 - \tau_3}{2} \sigma_2 \boldsymbol{\sigma} \sigma_2. \quad (34)$$

现在仍可认为 f 电子超导态的 Green 函数具有 (16) 式的形式, 只是需在 f 电子的自能上再加上杂质散射所引起的自能

$$\Sigma_f^{(im)}(\omega_n) = n_1 \sum_{k'} U^{(im)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \mathcal{G}_{k'}^f(\omega_n) U^{(im)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (35)$$

n_1 为杂质浓度。将上式代入 (16) 式, 经过计算可近似得到

$$\frac{k_f \omega}{\Delta} = u_f \left[1 - \zeta_{so} \frac{1}{\sqrt{1 - u_f^2(\omega)}} \right], \quad (36)$$

其中 $\zeta_{so} = 2/\tau_{so}\Delta$ (τ_{so} 为自旋-轨道散射寿命)。从上式可以看出: 正常散射在方程中不见了, 表明正常散射不影响超导态的性质, 这就是所谓的 Anderson 定理^[16], 也就是说, Anderson 定理在 Kondo 晶格中的 S 波超导态仍然成立。在 (36) 式中, 当 $\zeta_{so} \geq 1$ 时, 系统会出现无能隙超导, 这表明自旋-轨道散射会对 S 波超导态产生重要影响。

三、P 波超导理论

1. P 波超导的描述

上节已经证明, Kondo 晶格系统可用重正化的 Green 函数来描述, 下面就用重正化后的 Green 函数讨论 P 波超导问题。

在 P 波状态, (1) 式的哈密顿量可写成

$$H_{\text{eff}} = H_0 + H_1 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma\sigma'} [\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) f_{\mathbf{k}\sigma'}^+ f_{\mathbf{k}\sigma}^+ + \text{h.c.}], \quad (37)$$

其中 P 波超导序参量定义为 $\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) = - \sum_{k'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle f_{\mathbf{k}'\sigma'} f_{-\mathbf{k}'\sigma'} \rangle$ 。 (38)

在自旋空间, 其为 2×2 矩阵, 可形式地记为^[17]

$$\Delta(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \Delta_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) & \Delta_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (39)$$

若认为 $\Delta(\mathbf{k})$ 只依赖于 \mathbf{k} 的方向, 则还可写成 $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta \cdot f(\hat{k})$ 。 (40)

这里 Δ 为一实数, 称为平均序参量, $f(\hat{k})$ 为只依赖于 \mathbf{k} 的方向的 2×2 矩阵, 且满足归

一化条件 $\int \frac{d\Omega}{4\pi} \text{Tr} |f(\hat{k})|^2 = 1$ 。 (41)

若用重正化后的 Green 函数, 在 Nambu 空间只须研究 f 电子的 Green 函数。注意到 P 波序参量与 S 波的差别, f 电子的 Green 函数可表示为

$$[\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^f(\omega)]^{-1} = ik_f \omega_n \tau_0 - \varepsilon_{fk} \tau_3 - \Delta [f(\hat{k}) \tau_+ + f(\hat{k})^+ \tau_-], \quad (42)$$

其中 τ_i 为 Pauli 矩阵, 特别地

$$\tau_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (43)$$

由 (38) 式可得到序参量方程

$$\Delta = \pi N_f(0) g T \sum_n \int \frac{d\Omega}{4\pi} \Delta \text{Tr} |f(\hat{k})|^2 [\Delta^2 \text{Tr} |f(\hat{k})|^2 + k_f^2 \omega_n^2]^{-1/2}, \quad (44)$$

其中 g 为 P 波超导耦合常数, 由下式定义:

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -3g \hat{k} \cdot \hat{k}'. \quad (45)$$

由 (7) 式可以看出, Kondo 晶格中的 f 电子变成了重正化的、有效质量较大仍很局

域的费密子. 按照 Valls 等人^[8]的讨论, 对这样的费密子系统可得到一个 P 波吸引, S 波排斥的有效耦合常数. 对 P 波, 这个有效耦合常数 $\lambda = N_f(0)g = 1/3$. 因此, 在 Kondo 晶格中研究超导问题, P 波比 S 波可能更合理些.

2. 有关物理量的计算

1) 超导转变温度 在 (43) 式中, 令 $\Delta = 0$, 可得出

$$T_c = 1.14 T_K \cdot \exp(-k_f/\lambda), \quad (46)$$

与 S 波的 T_c 公式相同. 利用 Valls 的结果^[8]: $\lambda = 1/3$, 具有 Kondo 反常的 CeCu_2Si_2 和 UBe_{13} , 实验测得 $T_K \sim 10\text{K}$, $k_f \sim 1$, 就可得出 $T_c \sim 0.5\text{K}$, 与实验相符.

2) $T = 0$ 处的能隙函数及序参量 仿照与 S 波类似的讨论, 容易得出能隙函数 Δ_g 和平均序参量 Δ

$$\Delta_g(0) = 2T_K \Gamma \cdot \exp(-k_f/\lambda), \quad (47)$$

$$\Delta(0) = 2T_K k_f \cdot \Gamma \cdot \exp(-k_f/\lambda), \quad (48)$$

其中 Γ 由下式定义:
$$\ln \Gamma = - \int \frac{dQ}{4\pi} \text{Tr} |f(\hat{k})|^2 \cdot \ln [\text{Tr} |f(\hat{k})|^2]^{1/2}. \quad (49)$$

与 S 波相比, 这里多了一个因能隙的各向异性引起的附加因子 Γ .

3) T_c 处的比热跃变

仿照与 S 波相平行的讨论, 容易得到 P 波状态的比热跃变

$$\Delta c = 8\pi^2 N_f(0) k_f^2 / 7\zeta(3) R, \quad (50)$$

其中
$$R = \int \frac{dQ}{4\pi} [\text{Tr} |f(\hat{k})|^2]^2. \quad (51)$$

而比热跃变与正常态的比热之比为
$$\frac{\Delta c}{c_n(T_c)} = 1.426 k_f^2 / R. \quad (52)$$

对任意给定的 P 波状态, 可通过 (51) 式计算出 R . 例如, BW 相, $R = 1$; ABM 相, $R = 6/5$; 由 (52) 式得
$$\left. \frac{\Delta c}{c_n(T_c)} \right|_{\text{ABM}} = \frac{5}{6} \left. \frac{\Delta c}{c_n(T_c)} \right|_{\text{BW}}. \quad (53)$$

这与液 ^3He 的 P 波超流理论相符^[8]. 对 UBe_{13} , 由于其比热在低温下呈现 $c_s \sim T^3$ 规律, Ott 等人^[7] 据此约为 UBe_{13} 可能处于 P 波的 ABM 相. 实验测得 UBe_{13} 的比热系数 $\gamma \sim 1.1 \text{J}/\text{K}^2 \cdot \text{mol}$, $T_K \sim 10\text{K}$, $\Delta c/c_n(T_c) \sim 1.36$. 根据现在的理论, 如果认为系统处于 ABM 相, $R = 5/6$, $k_f \approx \tilde{\gamma}$, 根据 (6) 和 (11) 式, 可得 $\tilde{\gamma} \approx \pi^2/6 T_K \gamma \approx 1.12$, 代入 (52) 式可得到这个比率为 1.37, 与实验非常接近, 据此更增强了 UBe_{13} 为 P 波超导的可能性.

4) 热力学临界磁场 $T = 0$ 处的热力学临界磁场很容易算出.

$$H_c(0) = [1.76 T_c (4\pi N_f(0))^{1/2}] \cdot \sqrt{k_f} \cdot R. \quad (54)$$

这与 S 波相差一个修正因子 R .

5) 超导元激发 超导元激发态密度 $N_s(\omega)$ 为

$$N_s(\omega) = N_f(0) \text{Im} \int \frac{dQ}{4\pi} \frac{\omega}{\sqrt{\Delta^2 \text{Tr} |f(\hat{k})|^2 / k_f - \omega^2}}. \quad (55)$$

我们看到, Kondo 晶格的作用只是使能隙变为 $\Delta_g = \Delta/k_f$, 并不改变超导态的基本性质.

3. 杂质散射的影响

当杂质散射势 (33) 式存在时, P 波状态下 f 电子的 Green 函数具有如下形式:

$$\begin{aligned} [\mathcal{G}_k^i(\omega_n)]^{-1} &= iz_f(\omega_n)\omega_n\tau_0 - \varepsilon_{fk}\tau_3 - \phi_f(\omega_n)[f(\hat{k})\tau_+ + f(\hat{k})^+\tau_-] \\ &= ik_f\omega_n\tau_0 - \varepsilon_{fk}\tau_3 - \Delta[f(\hat{k})\tau_+ + f(\hat{k})^+\tau_-] - \Sigma_f^{(im)}(\omega_n), \end{aligned} \quad (56)$$

其中 $\Sigma_f^{(im)}(\omega_n)$ 为杂质散射引起的自能. 引入

$$u_f(\omega_n) = \omega_n z_f(\omega_n) / \phi_f(\omega_n), \quad (57)$$

经过简单运算可得出自洽方程

$$u_f(\omega_n) = \frac{k_f\omega_n}{\Delta} + \zeta_1 \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{u_f(\omega_n)}{\sqrt{\text{Tr}|f(\hat{k})|^2 + u_f^2(\omega_n)}} + \zeta_{s0} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{\sin^2\theta u_f(\omega_n)}{\sqrt{\text{Tr}|f(\hat{k})|^2 + u_f^2(\omega_n)}}, \quad (58)$$

其中 ζ_1, ζ_{s0} 分别为正常散射和自旋-轨道散射系数. 变换到普通频率空间, 上式变为

$$\frac{k_f\omega}{\Delta} = u_f \left[1 - \zeta_1 \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{\text{Tr}|f(\hat{k})|^2 - u_f^2}} - \zeta_{s0} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{\sin^2\theta}{\sqrt{\text{Tr}|f(\hat{k})|^2 - u_f^2}} \right]. \quad (59)$$

对各种不同的超导相, 由于 $f(\hat{k})$ 的不同, 所以杂质散射对不同超导相的影响亦不同, 其结果列入表 1 中.

表 1 杂质散射对 P 波超导态的影响

	特 点	$\text{Tr} f(\hat{k}) ^2$	由 (59) 式决定的出现无能隙超导的条件	
			考虑到正常散射和自旋-轨道散射的共同影响	只考虑正常散射的影响
BW 相	能隙在费密面上各向同性	1	$\zeta_1 + \frac{2}{3}\zeta_{s0} > 1$	$\zeta_1 > 1$
ABM 相	能隙在费密面上有零点	$\frac{3}{2}\sin^2\theta$	$\sqrt{6} - i\zeta_{s0}\sqrt{\frac{2}{3}}u_f < \pi$ $\zeta_1 + \frac{1}{2}\zeta_{s0} + \frac{1}{3}\zeta_{s0}u_f^2$	$\zeta_1 > \sqrt{6}/\pi$
polar 相	能隙在费密面上有零线	$3\cos^2\theta$	$\zeta_1 \neq 0$ 或 $\zeta_{s0} \neq 0$	$\zeta_1 \neq 0$
各向异性 BCS 相	能隙在费密面上无零点无零线, 但各向异性	$\frac{1}{2}(1 + 3\cos^2\theta)$	—	$\zeta_1 > \sqrt{\frac{3}{2}} / \text{arcth}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$

由表 1 可看出, 与 S 波不同, 正常散射也会影响 P 波状态的性质. 也就是说 Anderson 定理^[6] 在 P 波态不再成立. 即便与 S 波非常类似的 BW 相, 也会受到正常散射的影响, $\Rightarrow \zeta_1 > 1$ 时, 还会出现无能隙超导. 在 ABM 相, 正常散射和自旋-轨道散射对超导态的影响是很不相同的; 特别是 polar 相, 只要存在一点杂质散射, polar 相就不稳定, 立即会变成无能隙超导态. 一般而言, 在 Kondo 晶格中杂质散射是不可避免的, 所以纯粹的 polar 相是不可能存在的, 这一结论有待实验的进一步证实.

这里只讨论了杂质散射存在时出现无能隙超导的条件. 杂质散射对超导态热力学量及有关物理量的低温行为的影响还有赖进一步工作.

四、讨 论

根据前几节的结果,我们可以得出如下结论:从理论上得到的一些物理量的临界值与 HFS 的实验基本相符, P 波态的有关物理量的临界值只是在 S 波的基础上增加一个由能隙的各向异性而引起的修正因子. 在 S 波超导态,单从比热来看,我们的结果比 Tachiki 等人所得到的结果^[4]更符合 HFS 的实验. 从耦合常数来看,由于 Valls 等人的工作^[8],在 Kondo 晶格中, P 波超导似乎比 S 波超导更合理些. 另外,我们发现杂质散射对 S 波和 P 波的影响是非常不同的,在 S 波,由于 Anderson 定理成立,正常散射不会影响超导态的性质,只须考虑自旋-轨道的影响;在 P 波,由于 Anderson 定理不再成立,正常散射和自旋-轨道散射都会影响超导态的性质,虽然影响的方式不同. 特别是我们发现,在实际的 Kondo 晶格系统中,由于总是存在杂质散射,纯粹的 polar 相是不存在的.

当然, HFS 化合物的低温行为是非常复杂的,很难用 S 波或 P 波来简单解释. 在讨论杂质散射时,我们只是给出了出现无能隙超导的条件,并未认真研究其对有关物理量的低温行为的影响,这些都有待进一步工作. 尽管如此,这里我们仍给出了 Kondo 晶格中 S 波和 P 波超导的基本特点,指出了杂质散射对各种不同的超导态所产生的重要而不同的影响.

附 录

此处将给出 (28) 式的推导. 为此,将 (20) 式代入 (19) 式中,得

$$\ln \frac{T_c}{T_c^0} = A(T) + \frac{1}{2} B(T) \Delta^2 + \dots, \quad (\text{A.1})$$

其中
$$A(T) = \pi T \sum_n \left(\frac{1}{\omega_n} - \frac{1}{a_{-1}} \right), \quad (\text{A.2})$$

$$B(T) = \pi T \sum_n \left(\frac{1}{a_{-1}^3} + \frac{2a_1}{a_{-1}^2} \right), \quad (\text{A.3})$$

其中 a_{-1} , a_1 分别由 (21) 和 (22) 式给出. 超导态与正常态的热力学势之差可表示为^[19]

$$\Omega_s - \Omega_n = \int_0^\Delta d\Delta' (\Delta')^2 \frac{d(1/g)}{d\Delta'}. \quad (\text{A.4})$$

在我们的情况下可化为
$$\Omega_s - \Omega_n = -\frac{1}{4} N_f(0) B(T_c) \Delta^4 \quad (\text{当 } T \rightarrow T_c \text{ 时}). \quad (\text{A.5})$$

由 (A.1) 式知,当 $T \rightarrow T_c$ 时, Δ^2 正比于 $(1 - T/T_c)$,

$$\Delta^2 = \frac{2}{B(T_c)} \left[1 - T_c \frac{\partial A(T)}{\partial T} \Big|_{T_c} \right] (1 - T/T_c). \quad (\text{A.6})$$

结合 (A.5) 和 (A.6) 式,就可求出 T_c 处的比热跃变

$$\Delta c = -T_c \frac{\partial^2 (\Omega_s - \Omega_n)}{\partial T^2} \Big|_{T=T_c} = \frac{2N_f(0)}{T_c B(T_c)} \left[1 - T_c \frac{\partial A(T)}{\partial T} \Big|_{T_c} \right]^2. \quad (\text{A.7})$$

利用 (21) 和 (22) 式,则发现 $A(T)$ 与 T 无关,而
$$B(T_c) = \frac{7\xi(3)}{7k_f^3 4\pi^2 T_c^2}. \quad (\text{A.8})$$

将上式代入 (A.7) 式,则可得到
$$\Delta c = \frac{8\pi^2 \tilde{\gamma} k_f^3 N_f(0) T_c}{7\xi(3)}. \quad (\text{A.9})$$

这正是(28)式.

参 考 文 献

- [1] F. Steglich *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 1892.
- [2] H. Ott, H. Rudiger, Z. Fisk and J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 1595.
- [3] G. R. Stewart, Z. Fisk, J. O. Wills and J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 679.
- [4] N. Tachiki and S. Mackawa, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 2497.
- [5] H. Razafimandimby, P. Fuld and J. Keller, *Z. Phys.*, **B54**(1984), 111.
- [6] N. Grewe, *Z. Phys.*, **B56**(1984), 111.
- [7] H. O. Ott, H. Rudigier, T. M. Rice, K. Ueda, Z. Fisk and J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 1915.
- [8] O. T. Valls and Z. Tesanovic, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1497.
- [9] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 1549.
- [10] C. K. Varma, *Bull. Am. Phys. Soc.*, **29**(1984), 404.
- [11] Y. Nambu, *Phys. Rev.*, **117**(1960), 648.
- [12] H. Jichu *et al.*, *Prog. Theor. Phys.*, **72**(1984), 366.
- [13] A. Yoshimori and H. Kasai, *J. Magn. Mat.*, **31—34** (1983), 475.
- [14] K. Yamada, *Prog. Theor. Phys.*, **53**(1975), 970; *ibid.*, **54**(1975), 316.
- [15] D. N. Zubarev, *Sov. Phys. Uspekki*, **3**(1960), 320
- [16] P. W. Anderson, *J. Phys. Chem. Solids*, **11**(1959), 26.
- [17] R. Balian and N. R. Werthamer, *Phys. Rev.*, **131**(1963), 1553.
- [18] P. W. Anderson and W. F. Brinkman, in *The Physics of Liquid and Solid Helium Pt II* ed. by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, John Wiley & Sons, New York, (1978).
- [19] A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, *Sov. Phys. JETP*, **12**(1961), 1243.

THE THEORY OF SUPERCONDUCTIVITY IN KONDO LATTICE

XU JI-HAI¹⁾

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

SU ZHAO-BING

(*Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica*)

LI TIE-CHENG

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

S-wave and *P*-wave superconductivity in Kondo lattice is theoretically studied in connection with heavy-fermion superconductivity (HFS). The hybridization between *f*-electron and conduction electron is investigated consistently and the corresponding quantities have been calculated in detail in the generalized Nambu formalism. It is shown that if one thinks *f*-electrons are responsible for superconductivity, for *S*-wave paired state, the superconducting transition temperature is in agreement with that of Tachiki *et al.*, but the specific heat jump is not, our result is more appropriate than theirs. For *P*-wave paired state, the HFSs described by a Kondo lattice model are essentially almost localized Fermi superfluids, with a small modification. The effects of impurities on *S*- and *P*-wave paired states have been studied in detail respectively, and the conditions of the appearance of gapless superconductivity have been obtained for each case.

1) Present address: Department of Physics, Shandong University.