

对角无序对三重态双极化子系统的 超导电性的影响

厉彦民

章立源

(中国科学院物理研究所)

(北京大学物理系)

1986年7月21日收到

提 要

本文在平均场近似的框架下,对于两 δ 函数无规分布讨论了对角无序对三重态双极化子系统的影响。得到无序对双极化子密度为半填充附近的影响较显著,超导转变温度严重降低;而当密度较小时,一般的无规能量并不能完全阻碍超导电性的发生,这是由双极化子的隧道运动所导致。因此可以期望在一些无序半导体中可以发现这种类型的超导体。

一、引 言

双极化子概念的提出最早是为了解释无序半导体的电磁、光学等物理特性^[1,2]。随着晶体生长技术的发展,越来越多的材料在实验上发现存在着这种局域配对双极化子^[3],其中一些具有超导电性。理论研究发现许多非寻常超导体,如 $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$, LiTi_2O_4 , 重费密子化合物等的反常特性至少可以用该模型得到定性解释^[4-6]。目前对双极化子超导电性的理论研究大都限于讨论单态的情形^[7-9]。然而,三重态双极化子可以象单态一样很自然地形成。如在原子的波函数是简并的或者是由原子集团组成的系统中, Hund 交换能量将有利于三重态双极化子产生。最近我们对有序的三重态双极化子系统的超导电性作了研究^[5],本文将进一步讨论无序对该系统的超导电性的影响。

我们知道,在库珀对是扩展的情况下,三重态配对对非磁性杂质非常敏感,顺磁杂质的散射将破坏超导配对。然而在局域配对的情况下,由于在超导之前“配对”就已存在,超导只是“对”凝聚的结果。因此可以期望结构无序将以和对 BCS 超导完全不同的方式产生影响。

结构无序的超导体通常称为超导玻璃。Kulik 和 Pedan^[10]已经提出具有一 U 中心的对角无序 Hubbard 模型作为超导玻璃模型。最近, Micnas 等人^[11]对单态双极化子系统,且双极化子密度为半填满的情况下,讨论了对角无序的影响。我们将对任意双极化子密度,讨论具有对角无序的三重态双极化子系统的性质。

二、理论形式

一般来说双极化子的形式是由于电声子相互作用。通过正则变换解除电声子之间的

耦合, 电子的运动可用通常的扩展 Hubbard 哈密顿量来描述. 三重态双极化子可以在一个原子位置或相邻的两原子位置上形成, 分别称为单位置和两中心双极化子. 在两中心双极化子的情况下, 一般形成配对的两原子靠得较近, 形成“配对”晶格. 应用惯常的表示法, 电子的有效哈密顿量可表示为

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1, \\ H_0 &= \sum_{m\sigma} E_m n_{m\sigma} + \sum_m \left[t_1 \sum_{\sigma} (c_{m1\sigma}^{\dagger} c_{m2\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_{\alpha} n_{m\alpha} n_{m\alpha} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\sigma\sigma'} (V_1 n_{m1\sigma} n_{m2\sigma'} + J_1 c_{m1\sigma}^{\dagger} c_{m2\sigma'}^{\dagger} c_{m1\sigma'} c_{m2\sigma}) \right], \\ H_1 &= \sum_{\langle mm' \rangle} \sum_{\alpha\alpha'} (t_{m\alpha m'\alpha'} c_{m\alpha\sigma}^{\dagger} c_{m'\alpha'\sigma} + \text{h.c.}) + \frac{1}{2} \sum_{\langle mm' \rangle} \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\sigma\sigma'} (V_{m\alpha m'\alpha'} n_{m\alpha\sigma} n_{m'\alpha'\sigma'} \\ &\quad + J_{m\alpha m'\alpha'} c_{m\alpha\sigma}^{\dagger} c_{m'\alpha'\sigma'}^{\dagger} c_{m\alpha\sigma'} c_{m'\alpha'\sigma}). \end{aligned} \quad (1)$$

这里 m 表示“原子配对”的位置, $\alpha = 1, 2$ 表示在配对中两电子所在位置, $\langle mm' \rangle$ 表示只对最近邻求和. H_0 描述电子在原子对内的运动, H_1 为原子对间的相互作用. E_m 为无规能量. 双极化子形成时应有 $V_1 < 0$.

在双极化子的耦合很强的情况下, 我们可以把 (1) 式的哈密顿量投影到三重态双极化子空间, 得到描述双极化子运动的有效哈密顿量. 假定无规单位置能量 E_m 远小于双极化子的结合能, 应用二级简并微扰理论可以导出双极化子的有效哈密顿量为^[5]

$$H = - \sum_m E_m \hat{n}_m - \sum_{\langle mm' \rangle} t (\hat{A}_m^{\dagger} \hat{A}_{m'} + \hat{B}_m^{\dagger} \hat{B}_{m'}) + \frac{1}{2} \sum_{\langle mm' \rangle} v \hat{n}_m \hat{n}_{m'}, \quad (2)$$

其中 $\hat{A}_m$, $\hat{B}_m$ 和 $\hat{n}_m$ 为双极化子算符

$$\hat{A}_m = a_{m1\uparrow} a_{m2\uparrow}, \quad \hat{B}_m = a_{m1\downarrow} a_{m2\downarrow}, \quad \hat{n}_m = \hat{A}_m^{\dagger} \hat{A}_m + \hat{B}_m^{\dagger} \hat{B}_m, \quad (3)$$

t 和 v 分别为双极化子在相邻配对位置的有效跳跃能量和库仑能量, 在文献 [5] 中已给出了具体的表达式. 为简单起见, 在 (2) 式中没有考虑自旋配对为 $\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow$ 的态, 这不会改变系统的特性.

要确定系统的性质必须首先知道无规能量的分布函数 $P\{E_m\}$. 相对于 $P\{E_m\}$, 任意热力学量 $\hat{\theta}$ 的平均值为

$$\theta = \langle \langle \hat{\theta} \{E_m\} \rangle_T \rangle_{\text{av}} \equiv \frac{1}{N} \int d^N E_m P\{E_m\} \langle \hat{\theta} \{E_m\} \rangle_T, \quad (4)$$

其中 $\langle \hat{\theta} \{E_m\} \rangle_T$ 为热平均, N 为配对位置总数. 本文中我们将仅考虑一种最简单的分布形式——两 δ 函数分布, 即

$$P\{E_m\} = \prod_m P\{E_m\} = \prod_m \frac{1}{2} [\delta(E_m - E_0) + \delta(E_m + E_0)]. \quad (5)$$

然而由这种分布函数, 我们可以得到系统的基本特性.

定义超导序参量

$$\alpha_m = \langle \langle \hat{A}_m \rangle_T \rangle_{\text{av}}, \quad \beta_m = \langle \langle \hat{B}_m \rangle_T \rangle_{\text{av}}. \quad (6)$$

在平均场近似的框架下, 应用类似于文献 [5] 的方法, 可以得到在均匀系统中每个配对位置的自由能为

$$F_s = (1 - n) \langle \xi_m \rangle_{\text{av}} + tz(|\alpha|^2 + |\beta|^2) - T \left\langle \ln \left[1 + 2e^{\xi_m/2T} \cdot \text{ch} \frac{R_m}{2T} \right] \right\rangle_{\text{av}}, \quad (7)$$

其中

$$\xi_m = E_m - \mu + vxm \equiv E_m - \bar{\mu}, \quad R_m = [\xi_m + 4(|\alpha|^2 + |\beta|^2)]^{1/2}. \quad (8)$$

在(7)式中已令玻耳兹曼常数 $k_B = 1$, 并去掉了一无关重要的常数项.

通过对(7)式的自由能变分和求导, 可以得到确定序参量和化学势的耦合方程. 由 $\delta F / \delta \alpha^* = 0$ 和 $-\frac{\partial(F - \mu n)}{\partial \mu} = n$, 可得

$$2n - 1 = \left\langle \frac{1}{1 + 2e^{\xi_m/2T} \cdot \text{ch} \frac{R_m}{2T}} - \frac{\xi_m}{R_m} \frac{e^{\xi_m/2T} \cdot 2\text{sh} R_m/2T}{1 + 2e^{\xi_m/2T} \cdot \text{ch} R_m/2T} \right\rangle_{\text{av}}, \quad (9a)$$

$$\alpha = \left\langle \frac{ix\alpha}{R_m} \cdot \frac{e^{\xi_m/2T} \cdot 2\text{sh} R_m/2T}{1 + 2e^{\xi_m/2T} \cdot \text{ch} R_m/2T} \right\rangle_{\text{av}}. \quad (9b)$$

同样由 $\delta F / \delta \beta^* = 0$ 可得类似于(9b)式的方程. 由于无极化, 所以应有 $\alpha = \beta$.

(7)–(9a), (9b) 式对任意无规能量分布 $P\{E_m\}$ 都是成立的. 在下节中 will 仅对(5)式给出的无规分布形式对系统进行讨论.

三、超 导 电 性

1. 基态 从现在起, 除特别声明外能量和温度都以 tz 为单位. 在(9a), (9b)式中令 $T \rightarrow 0$, 可以得到

$$1 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_+} + \frac{1}{R_-} \right), \quad (10a)$$

$$2n - 1 = -\frac{1}{2} \left(\frac{\xi_+}{R_+} + \frac{\xi_-}{R_-} \right), \quad (10b)$$

其中 $\xi_{\pm} = \pm E_0 - \bar{\mu}$, $R_{\pm} = \sqrt{\xi_{\pm} + 8|\alpha|^2}$. 解(10a), (10b) 式可得到基态的有效化学势 $\bar{\mu}$ 和序参量 $\alpha (= \beta)$. 当 $n = 1/2$ 时, 可以解析解出. 这时 $\bar{\mu} = 0$, 序参量 α 为

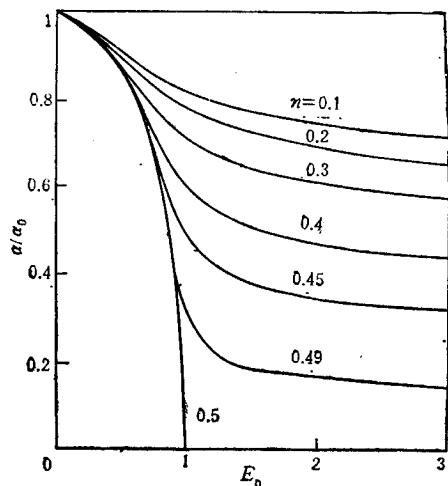


图 1 对于不同的双极化子密度 n , 序参量 α 随无规能量 E_0 的变化关系 α_0 为有序时的序参量^[1]

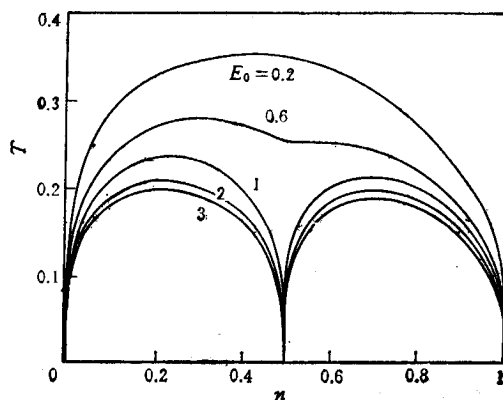


图 2

$$\alpha = \frac{1}{2\sqrt{2}} (1 - E_0^2)^{1/2} \quad \text{当 } n = \frac{1}{2} \text{ 时.} \quad (11)$$

这和单态双极化子的情况类似^[11]. 对于一般的双极化子密度, 只能数值求解.

图 1 示出序参量 α 随无规能量 E_0 的变化关系. 由于在基态电子和空穴是对称的, 图 1 中只给出了 n 从 0 到 0.5 的结果. 可以看出, 无序对半填满附近的情况影响最大. 当 $n = 1/2$ 时, $E_0 > 1$ 将完全抑制超导电性的发生. 当 n 很小时 (或 $1 - n \ll 1$ 时), 对角无序的影响较小, 对于一般的 E_0 , 仍然可以发生超导电性. 对应的物理意义是: 双极化子靠隧道运动产生超导电性, 当 n 较小时, 对角无序并不能完全阻碍该运动而抑制超导电性; 但当 n 在 $1/2$ 附近时, 由于泡利不相容原理的限制, 阻碍了双极化子的隧道运动, 从而使得无序对这种情况的影响非常显著.

2. 有限温度的情形 在 (9a), (9b) 式中令 α (和 β) $\rightarrow 0$, 可以得到超导转变温度 T_c . 图 2 示出对于不同的 E_0 , 转变温度 T_c 与双极化子密度 n 的关系. 随着 E_0 增大, $n = 1/2$ 附近的

转变温度显著降低. 当 $E > 1$ 时, $T_c \left(\frac{1}{2} \right) = 0$. 这和 (11) 式的结果相吻合.

当 $T < T_c$ 时, 解 (9a), (9b) 式的耦合方程可以得到序参量和化学势的温度关系, 代入 (7) 式中可以得到超导态的自由能. 根据一般的热力学关系, $H_c^2/8\pi = -(F_s - F_n)/V$ 即可得到热力学临界场 H_c . 图 3 示出双极化子的密度 n 为 0.2 时, 序参量和热力学临界场随温度的变化关系. 可以看出, 无序并没有改变系统的热力学特性, H_c 在低温下仍近似呈线性关系, 整个温度范围也和有序的情况类似^[12].

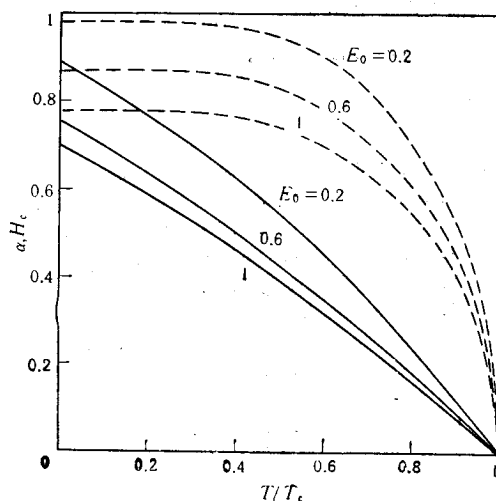


图 3 序参量 α (虚线) 和热力学临界场 H_c (实线) 与温度 T/T_c 的关系 α 和 H_c 分别以有序时绝对零度的序参量 α_0 和 H_{c0} 为单位

四、讨论和结论

本文在平均场近似下对于两 δ 函数无规分布, 讨论了对角无序对三重态双极化子系统的影响. 得到无序对半填充的情形影响显著; 但当双极化子的密度较小时, 一般的无规能量并不能完全抑制超导电性的产生. 这是因为双极化子的隧道运动并不能被对角无序完全阻止, 从而在低温下可以产生超电流. 但双极化子密度在 $1/2$ 附近时, 泡利不相容原理对系统的作用增强. 当 E_0 较大时, 无序和泡利原理的共同作用使得超导的转变温度显著降低. 当 n 较大时, 由于系统可用空穴来描述, 所以无序的影响和 n 较小的情况类似. 因此在双极化子密度 (或空穴密度) 比较低的无序材料中, 可望有超导电性发生.

对于具有无序场的自旋系统的研究发现^[13],在三维系统中,临界特性与平均场的结果偏离较大. 平均场近似对于本文讨论的系统的适用性还有待于研究. 显然,应用更精确的方法,如重整化群等对该系统作进一步的讨论是必要的. 然而可以预料本文的一般结论定性上应该是合理的. 另外,本文仅对一种无序分布做了探讨,对其他分布形式的讨论是直接可进行的,但预期只会改变具体细节,不会影响主要结论.

本文作者之一(厉彦民)非常感谢导师李荫远研究员的指导与鼓励,以及瑞典 Linköping 大学赵光安教授的帮助与有益讨论.

参 考 文 献

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.*, **34**(1975), 953.
- [2] R. A. Street and N. F. Mott, *Phys. Rev. Lett.*, **35**(1975), 1293.
- [3] B. K. Chakraverty and J. Ranninger, *Phil. Mag. B*, **52**(1985), 669; 和其中的参考文献.
- [4] T. M. Rice and L. Sneddon, *Phys. Rev. Lett.*, **47**(1981), 689.
- [5] Y. M. Li (厉彦民), L. Y. Zhang (章立源), *Solid State Commun.*, **57**(1986), 553; and to be published.
- [6] A. Alexandrov, J. Ranninger and S. Robaszkiewicz, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 949.
- [7] S. Robaszkiewicz, R. Micnas and K. A. Chao, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 1447; *ibid.*, **B24**(1981), 1579.
- [8] I. O. Kulik and A. G. Pedan, *Sov. Phys. JETP*, **52**(1980), 742.
- [9] A. Alexandrov and J. Ranninger, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 1796; *ibid.*, **B24**(1981), 1164.
- [10] I. O. Kulik and A. G. Pedan, *Sov. J. Low Temp. Phys.*, **8**(1982), 118.
- [11] R. Micnas, S. Robaszkiewicz and K. A. Chao, Preprint.
- [12] 厉彦民、章立源, 物理学报, 待发表.
- [13] A. Aharony, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 3318; *ibid.*, **B18**(1978), 3328.

EFFECT OF DIAGONAL DISORDER ON SUPERCONDUCTIVITY IN THE TRIPLET BIPOLARONIC SYSTEM

LI YAN-MIN

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ZHANG LI-YUAN

(Department of Physics, Peking University)

ABSTRACT

The effect of diagonal disorder on superconductivity of the triplet bipolaronic system with a two-delta random site energy distribution is analysed in the framework of the mean-field approximation. It is found that this kind of disorder strongly affects superconductivity of the system. When the triplet bipolaron concentration is near 1/2, the transition temperature decreased seriously; while when the concentration is small, the normal random site energy can not impede the occurrence of superconductivity completely. This results from the tunneling motion of triplet bipolarons. It is therefore expected that superconductivity may appear in some amorphous semiconductors with low bipolaron concentration.