

氧化物高温超导体的双极化子 解释的可能性

丁 尚 武 侯 磊

(中国科学院武汉物理研究所)

1987 年 9 月 14 日收到

通过分析双极化子形成的条件, 指出文献 [1] 给出的三元金属氧化物高温超导体的双极化子解释是可疑的.

最近, 顾秉林等人^[1]提出, 三元金属氧化物高温超导体 $A-B-Cu-O$ (其中 $A = La, Y, Sc$; $B = Ba, Sr$ 等) 的超导机理可以用双极化子解释. 他们处理了由钙钛矿结构单元构成的简单立方格子, 在 Chakraverty, Alexandrov 等人^[2-4]计算的基础上, 给出了双极化子形成的条件, 并且给出了 $H-L$ 双极化子向 Anderson 双极化子转变的条件. 他们指出, $A-B-Cu-O$ 体系的超导电性可能来源于材料中 $H-L$ 双极化子的形成. 但是, 本文的分析表明, 他们给出的双极化子形成条件是不充分的, 并且指出他们对 $La-Sr-Cu-O$ 的 T_c 的估计也是失效的. 因此, 认为 $A-B-Cu-O$ 体系超导电性的基本原因是双极化子的结论值得怀疑.

为避免重复, 有关符号的意义及公式参阅文献 [1].

一般讨论双极化子问题时, 都用能级代替单极化子的能带, 这往往是很好的近似, 但情况并非总是如此. 文献 [1] 的缺陷正在于完全忽略了单极化子的能带宽度. 按照他们的说法, 只要 $\Delta > 0$ (Δ 是单极化子能量与双极化子能量差, 也就是双极化子的束缚能), 双极化子态的能量就比单极化子态能量低, 因而就可能形成双极化子. 但事实上, 如果将带宽考虑进来, 例如设单极化子带宽为 $W (\equiv zt)$, 那么可以很容易看出, 只有当 $\Delta > W$ 时, 双极化子态才是真正稳定的, 否则体系中电子仍将作单极化子能带传导. 因此, 双极化子形成的条件应该是

- (1) 当 $u_{eff} > v_{eff}$, $v_{eff} < 0$, 且 $\Delta > W$, 则基态为 $H-L$ 双极化子;
- (2) 当 $u_{eff} < v_{eff}$, $u_{eff} < 0$, 且 $\Delta > W$, 则基态为 Anderson 双极化子.

文献 [1] 中未考虑 $\Delta > W$ 这一条件, 也未证明 $A-B-Cu-O$ 中满足关系 $\Delta > W$. 仅凭 $u_{eff} > v_{eff}$ 这一点来说明 $A-B-Cu-O$ 中的基态是 $H-L$ 双极化子态, 理由是不充分的. 而且, 他们对 $La-Sr-Cu-O$ 的 T_c 估计中, 恰恰破坏了 $\Delta > W$ 这一条件 (见后文).

现在来分析考虑上述条件时, 双极化子体系若超导, 能达到的 T_c 有多高. 依平均场结果^[5]

$$T_c \approx 0.4 z t_{mm'} \left(\frac{n}{N} \right)^{2/3}. \quad (1)$$

可知,对给定材料 $t_{mm'}$ 的最大值给出 $T_c^{\max}$. 由文献[1]的(15),(17),(47),(49)式可得

$$t_{mm'} = \frac{4T_i}{\Delta} \exp \left[-\frac{2(1-\alpha)}{\alpha\omega_0} (|v_{\text{eff}}| + v) \right]. \quad (2)$$

双极化子材料中,一般都满足 $u_{\text{eff}} - v_{\text{eff}} \gg 4t$, 故近似有 $\Delta \doteq |v_{\text{eff}}|$, 因而

$$t_{mm'} = \frac{4T_i}{|v_{\text{eff}}|} \exp \left[-\frac{2(1-\alpha)}{\alpha\omega_0} (|v_{\text{eff}}| + v) \right]. \quad (3)$$

它是 $|v_{\text{eff}}|$ 的单调减函数. 在满足 $\Delta > W$ 这一条件时, $t_{mm'}$ 在 $|v_{\text{eff}}| = W$ 时达到最大,此时有

$$t = T \exp \left[-\frac{(1-\alpha)}{\alpha\omega_0} (zt + v) \right]. \quad (4)$$

只要知道了材料参数,从(4)式便可解出 t . 从而由

$$t_{mm'}^{\max} = \frac{4}{z} t, \quad (5)$$

便可从(1)式得到 $T_c^{\max}$

利用文献[1]提供的 La-Sr-Cu-O 的数据: $z = 4$, $T_i \approx 0.5\text{eV}$, $v \approx 0.423\text{eV}$, $\omega_0 \approx 0.08\text{eV}$, 并取 $\alpha = 1/2$, 则可得 $t_{mm'}^{\max} = 0.0022\text{eV}$, 取 $n/N = 0.1$ 时,求得 $T_c^{\max} = 8.8\text{K}$, 远远低于 La-Sr-Cu-O 的 T_c 实验值. 如果数据取得还保守些,则估计的 T_c 将更低. 而且有人指出^[3], 平均场结果 T_c 方程(1)对 T_c 的估计是偏高的, 考虑到量子涨落及热力学涨落后, T_c 值将比平均场结果小一倍左右(当 $n/N \ll 1$). 因此,上面对 T_c 的估计是偏高的. 从上述分析看来,用双极化子机制解释高 T_c 是困难的. 文献[1]对 T_c 估计时,取了 $\Delta = 0.0025\text{eV}$, 而 $t = 0.002\text{eV}$, 不满足双极化子形成条件 $\Delta > zt$, 故他们的估计是不正确的. 一般说来,即使存在双极化子超导材料,其 T_c 也是很低的. 因为从(5)式及(4)式可以看出 $T_c \propto t_{mm'}$ 受 $\Delta > W$ 的制约.

感谢中国科学技术大学物理系吴杭生教授和翁征宇博士的有益建议.

- [1] 顾秉林,王 强等,中国科学 A 辑,(7)(1987),693.
- [2] B. K. Chakraverty, M. J. Sienko, J. Bonnerot, *Phys. Rev.*, **B17**(1978), 3781.
- [3] A. S. Alexandrov, J. Ranniger, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 1796.
- [4] A. S. Alexandrov, J. Ranniger, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 1164.
- [5] A. S. Alexandrov, J. Ranniger S. Robaszkiewicz, *Phys. Rev.*, **B33**(1986), 4526.

POSSIBILITY OF BIPOLARONIC EXPLANATION FOR HIGH TEMPERATURE SUPERCONDUCTING TERNARY METAL OXIDE

DING SHANG-WU HOU LEI

(Wuhan Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

Through analysing the condition of the formation of bipolarons, we point out that the bipolaronic explanation for high temperature superconducting ternary metal oxide, given by Ref. [1] is doubtful.