

研究简报

一个可能的高 T_c 超导机制

冯 世 平

(北京师范大学物理系, 低能核物理研究所)

马 本 堃

(北京师范大学物理系)

1987 年 8 月 12 日收到

采用 Anderson 晶格哈密顿量, 讨论了高 T_c 超导体的超导机制. 结果表明: 由于高 T_c 超导体中窄能带中局域电子的强关联性质使得自由电子能带中的自由电子与窄能带中的局域电子形成杂化的 Cooper 对状态而导致超导电性.

一、引 言

自从实验上发现 La-Ba-Cu-O, Y-Ba-Cu-O 等系统是高 T_c 超导体以来^[1-3], 高 T_c 超导体的超导机制的理论解释就成为人们极感兴趣的问题. 在围绕着高 T_c 超导体的超导机制的争论中, Anderson 等人认为高 T_c 超导体的超导机制是非电-声子机制^[4-7], 而另一部分人则认为该机制仍然是电-声子机制^[8]. 到目前为止, 还没有一个能被人们普遍接受的理论. 根据对 Y-Ba-Cu-O 等系统的结构分析和能带计算^[7,9,10], 我们注意到这些高 T_c 超导体带结构的复杂性: 由铜的 $d_{x^2-y^2}$ 轨道和氧的 2p 轨道组成的能带基本上被认为是自由电子能带, 而由铜的 d_{z^2} 轨道和氧的 2p 轨道组成的能带是一个相当窄的能带, 在这个能带中的电子的局域性很强. 这个窄能带通常在系统的 Fermi 能级之下^[7]. 对于处理这种双能带系统, 大家公认比较好的模型是 Anderson 模型. 本文的目的就是在 Anderson 模型下, 考虑到窄能带电子的强关联性质而解释高 T_c 超导体的超导机制.

二、理论方法简述

我们已经知道对于处理上述双能带系统比较好的模型是 Anderson 模型, 因此我们采用如下形式的 Anderson 晶格哈密顿量:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \epsilon_{fk} f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} V (C_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \text{H.c.}) \\ + U \sum_i f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\downarrow} \quad (1)$$

式中 $c_{k\sigma}$ 是自由电子带的电子消灭算符; $f_{k\sigma}$ 是窄能带的电子消灭算符; ϵ_k , ϵ_{fk} 是对应的自由电子带和窄能带的能量; V 是杂化参数; U 是窄能带中同一位置上局域电子的 Coulomb 能量, 这一项表征了局域电子的关联特性, 一般估计 $U \approx 3-5\text{eV}$ ^[1]. 在这样强的

关联条件下, 我们遵从 Coleman^[11]: 引入 Slave-Boson 场 b_i 而推广上述 Anderson 晶格哈密顿量成为

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{fk} f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} V (C_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} b_i + \text{H.c.}) \quad (2)$$

$$b_i^\dagger b_i + \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = Q_i = 1. \quad (3)$$

或者写成

$$H_{\text{eff}} = H_0 + H_1 - \sum_i \lambda, \quad (4)$$

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \tilde{\varepsilon}_{fk} f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + \sum_k \lambda b_k^\dagger b_k, \quad (5)$$

$$H_1 = \sum_{k\sigma} V (C_{k-q\sigma}^\dagger f_{k\sigma} b_q^\dagger + f_{k+q\sigma}^\dagger C_{k\sigma} b_q), \quad (6)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{fk} = \varepsilon_{fk} + \lambda. \quad (7)$$

式中 λ 是 Lagrange 不定乘子. 为方便起见, 可认为 $\tilde{\varepsilon}_{fk} = \alpha \varepsilon_k$, $\alpha \ll 1$ ^[12].

按照通常的方法, 定义如下形式的变换^[13]:

$$H_T = e^{-iS} H_{\text{eff}} e^{iS}. \quad (8)$$

式中算符 S 满足: $i[H_0, S] = -H_1$. 这样在只保留到二级项时可得

$$H_T = H_0 + \frac{1}{2} i[H_1, S] - \sum_i \lambda \quad (9)$$

假设 $|k, n_q\rangle = |k\rangle|n_q\rangle$ 是 H_0 的本征态, 利用关系式

$$\langle n_q - 1 | b_q | n_q \rangle = n_q^{\frac{1}{2}}, \quad (10)$$

$$\langle n_q + 1 | b_q^\dagger | n_q \rangle = (n_q + 1)^{\frac{1}{2}}, \quad (11)$$

再利用算符 S 满足的条件: $i[H_0, S] = -H_1$, 有如下的关系式:

$$\langle n_q - 1 | S | n_q \rangle = i \sum_{k\sigma} V \cdot \frac{f_{k+q\sigma}^\dagger C_{k\sigma} n_q^{\frac{1}{2}}}{(1 + \alpha)[\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k] - \lambda}, \quad (12)$$

$$\langle n_q + 1 | S | n_q \rangle = i \sum_{k\sigma} V \cdot \frac{C_{k-q\sigma}^\dagger f_{k\sigma} (n_q + 1)^{\frac{1}{2}}}{(1 + \alpha)[\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k] + \lambda}. \quad (13)$$

从而可以将 Slave-Boson 场积分掉后可得

$$H_T = H_0 + H_I - \sum_i \lambda, \quad (14)$$

$$H_I = \frac{1}{2} V' \sum_{\substack{k\sigma \\ k'\sigma'}} f_{k+q\sigma}^\dagger C_{k\sigma} C_{k'-q\sigma'}^\dagger f_{k'\sigma'} \left[\frac{1}{(1 + \alpha)[\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k] - \lambda} - \frac{1}{(1 + \alpha)[\varepsilon_{k'-q} - \varepsilon_{k'}] + \lambda} \right]. \quad (15)$$

从上式中我们发现当 $(1 + \alpha)|\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k| < \lambda$ 及 $(1 + \alpha)|\varepsilon_{k'-q} - \varepsilon_{k'}| < \lambda$ 时, 自由带的电子与局域带的电子之间的有效相互作用是吸引的. 这种相互吸引作用完全是由于窄能带中局域电子的强关联而引起的. 为简单起见, 在这个能量区域内, 我们的模型化有效相互

作用(15)式成为

$$H_I = -\gamma \sum_{\substack{k\sigma \\ k'\sigma'}} C_{k'-q\sigma'}^\dagger f_{k'\sigma'}^\dagger f_{k+q\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \quad \gamma > 0. \quad (16)$$

为了讨论系统的超导性质,在平均场近似下,可以将(16)式表述成类似的BCS形式——杂化对形式^[14]:

$$H_I = \sum_k \Delta_k (C_{k\uparrow}^\dagger f_{-k\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}) + \sum_k \Delta_k (f_{k\uparrow}^\dagger C_{-k\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}), \quad (17)$$

$$\Delta_k = -\gamma \sum_q J^+(k-q, \tau=0), \quad (18)$$

$$J^+(k, \tau) = \langle T_\tau C_{k\uparrow}^\dagger f_{-k\downarrow}^\dagger \rangle. \quad (19)$$

式中 $\langle \hat{B} \rangle$ 是对算符 $\hat{B}$ 的热力学平均。一个类似的BCS型的计算,我们可求出系统的超导临界温度是

$$T_c = 1.13 W_c e^{-\frac{1+\alpha-rN_F A}{rN_F}}, \quad (20)$$

式中 N_F 是Fermi面上的态密度, W_c 是计算 T_c 时的切断能量,而

$$A = \int_{\alpha W_c/T_c}^{W_c/T_c} \frac{dx}{x} \cdot \frac{1}{1+e^{-x}}. \quad (21)$$

三、结果与讨论

在(21)式中,从被积函数表达式的分析中我们发现积分值 A 很小,因而作为粗略计算时可令 $A=0$ 。这样 T_c 公式(20)可写成

$$T_c = 1.13 W_c e^{-(1+\alpha)/rN_F}. \quad (22)$$

由于 $W_c \approx 0.5 \text{ eV}^{[15,16]}$,因而 T_c 将是很高的,这与实验结果定性相符。

从第二节中的讨论可以看出:系统窄能带的电子的强关联性质使得导带电子与窄能带的电子杂化后形成杂化的Cooper对态,这样导致的超导电性是非电-声子机制,而完全是电子-电子机制。

感谢与黄祖洽教授的有益讨论。

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys., B*, **64**(1986), 189.
- [2] C. W. Chu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 405; M. K. Wu *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 908.
- [3] 赵忠贤等, *科学通报*, **32**(1987), 412.
- [4] P. W. Anderson, preprint.
- [5] A. E. Ruckenstein *et al.*, Preprint.
- [6] C. M. Varma, S. Schmitt-rink and E. Abrahams, *Solid State Comm.*, **62**(1987), 681.
- [7] D. M. Lee and J. Ihm, *Solid State Comm.*, **62**(1987), 811.
- [8] W. Weber, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1371.
- [9] L. F. Mattheis, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1028.
- [10] J. Yu, A. J. Freeman and J. H. Xu, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1035.
- [11] P. Coleman, in "Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations", edited by T. Kasuya and T. Saso.

- Springer-Verlag, New York, (1985).
- [12] M. Tachiki and S. Maekawa, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 2497.
- [13] J. Callaway, *Quantum Theory of Solid State*, Academic Press, Inc., (1976).
- [14] U. Gummich and B. Schuh, *Solid State Comm.*, **59**(1986), 385.
- [15] H. Fukuyama and K. Yosida, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **26**(1987), 160.

A POSSIBLE HIGH- T_c SUPERCONDUCTING MECHANISM

FENG SHI-PING

(Department of Physics, Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University)

MA BEN-KUN

(Department of Physics, Beijing Normal University)

ABSTRACT

Using the Anderson lattice Hamiltonian, we discussed the superconducting mechanism of high- T_c superconductors. The result show that the superconductivity may be induced by the hybrid Cooper pairs of electrons between the two bands of localized and delocalized states due to strong correlations of electrons in the band of localized states.