

高 T_c 超导体的反铁磁理论计算

杜 安 魏国柱 聂惠权

东北工学院物理系, 沈阳 110006

1991 年 10 月 18 日收到

考虑到高 T_c 超导材料层状结构特点, 从三维各向异性 Hubbard 模型出发, 在大 U 时导出了自旋波线性近似下的有效哈密顿量。利用格林函数运动方程技术, 计算了系统的子晶格磁化强度、内能、比热、平行磁化率和垂直磁化率等物理量。结果表明, 层间和层内反铁磁耦合强度之比 $\delta = J_{\perp}/J$ 对这些物理量有重要影响。在低温 $T \ll 2J(2 + \delta)/k_B$ 下, 确定了特征温度 $T_0 = 2J \sqrt{2\delta(2 + \delta)}/k_B$, 分别给出了 $T \gg T_0$ 和 $T \ll T_0$ 时, 这些物理量的渐近表达式。

PACC: 7530G; 7530D; 7420; 7510L

一、引 言

近年来新发现的高 T_c 超导体 $\text{La}_{2-x}(\text{Sr}, \text{Ba})_x\text{CuO}_{4-x}$ 和 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ 等在正常态时表现出的反铁磁性质, 成了人们研究其超导机制的出发点^[1]。很多理论都是基于在反铁磁背景下, 通过引入空穴来讨论其超导的可能性^[2,3], 但至今尚未给出满意的结果。因此讨论这些材料在正常态时的反铁磁性质, 仍是十分感兴趣的课题。

实验表明, 高 T_c 超导体都存在 CuO_2 平面, 平面内的反铁磁耦合强度大大高于平面间的反铁磁耦合强度。许多文献利用二维 Heisenberg 模型来讨论它们的磁学性质^[4-6], 然而对于纯二维的 Heisenberg 模型在 $T > 0$ 时不再有磁有序^[7], 这与高 T_c 超导体的实际性质并不相符。为了在有限温度下实现长程磁有序, 必须进一步考虑平面面间的反铁磁耦合强度^[8,9]。

本文旨在研究层间耦合强度对高 T_c 超导体在正常态时反铁磁性质的影响。首先从三维 Hubbard 模型出发, 在半满带和大 U 极限下利用 Rayleigh-Schrödinger 简并微扰理论导出有效哈密顿量, 然后用自旋波理论和格林函数运动方程技术, 计算出不同的层间耦合强度在不同温度下对子晶格磁化强度、磁振子比热及磁化率的影响, 进而与实验中的 Neel 温度相比较, 估算上述材料的层间耦合强度与层内耦合强度之比。

二、有效哈密顿量

考虑简单立方晶格的三维 Hubbard 模型

$$H = \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h. c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

其中 $c_{i\sigma}(c_{i\sigma}^\dagger)$ 是在格点 i 自旋为 σ 的电子湮没(产生)算符, $n_{i\sigma}$ 是相应的粒子数算符, t_{ij} 是跳跃积分, U 是在格点 i 两个相反自旋电子间的有效库仑排斥作用. $\langle i, j \rangle$ 代表一对最近邻格点. 考虑到高 T_c 超导体的各向异性, 取

$$t_{ij} = \begin{cases} t_{||} & \text{若 } \langle i, j \rangle \text{ 在 } x-y \text{ 平面内,} \\ t_{\perp} & \text{若 } \langle i, j \rangle \text{ 沿 } z \text{ 方向} \end{cases} \quad (2)$$

在大 U 极限下, 利用 Rayleigh-Schrödinger 简并微扰论, 对于半满带在二阶近似下可得^[8]

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3)$$

其中

$$J_{ij} = \frac{4t_{ij}t_{ji}}{U}. \quad (4)$$

推导(3)式对已略去与磁性质无关的项 $\frac{1}{4} n_i n_i$.

为了讨论系统的反铁磁性质, 把原来的晶格分成 A, B 两套子晶格, 并假定子晶格 A 和 B 的自发磁化方向分别沿 $+z$ 和 $-z$ 方向, 在低自发情况下, 采用 Holstein-Primakoff 变换

$$\begin{aligned} S_i^+ &= \sqrt{2S} a_i, \quad S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \quad i \in A, \\ S_i^z &= S - a_i^\dagger a_i \\ S_j^+ &= \sqrt{2S} b_j^\dagger, \quad S_j^- = \sqrt{2S} b_j \quad j \in B, \\ S_j^z &= -S + b_j^\dagger b_j \end{aligned} \quad (5)$$

再引入自旋波算符

$$\begin{aligned} a_i &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k a_k e^{ik \cdot R_i}, \\ b_i &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k b_k e^{-ik \cdot R_i}, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 N 是格点总数, $R_i(R_j)$ 是子晶格的格矢量. 利用(5)和(6)式, 在线性近似下得到有效哈密顿量为

$$H = -\frac{1}{2} NAS + A \sum_k [a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k + \eta(k)(a_k b_k + a_k^\dagger b_k^\dagger)], \quad (7)$$

其中

$$A = 4J(2 + \delta)S, \quad (8)$$

$$\eta(k) = \frac{\cos k_x a + \cos k_y a + \delta \cos k_z c}{2 + \delta}, \quad (9)$$

$$\delta = J_{\perp}/J = \frac{t_{\perp}^2}{t_{||}^2}. \quad (10)$$

三、有关物理量的计算及讨论

为了讨论系统的反铁磁性质, 采用双时格林函数运动方程技术来计算有关物理量.

定义矩阵格林函数

$$G(k, \omega) = \begin{bmatrix} G_{11}(k, \omega) & G_{12}(k, \omega) \\ G_{21}(k, \omega) & G_{22}(k, \omega) \end{bmatrix}, \quad (11)$$

其中

$$\begin{aligned} G_{11}(k, \omega) &= \langle\langle a_k, a_k^\dagger \rangle\rangle_\omega, \\ G_{12}(k, \omega) &= \langle\langle a_k, b_k \rangle\rangle_\omega, \\ G_{21}(k, \omega) &= \langle\langle b_k^\dagger, a_k^\dagger \rangle\rangle_\omega, \\ G_{22}(k, \omega) &= \langle\langle b_k^\dagger, b_k \rangle\rangle_\omega. \end{aligned} \quad (12)$$

格林函数满足的运动方程为

$$\begin{pmatrix} \omega - A & -A\eta(k) \\ A\eta(k) & \omega + A \end{pmatrix} G(k, \omega) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

不难得到(13)式的解为

$$G(k, \omega) = \frac{1}{2\omega_k} \left(\frac{1}{\omega - \omega_k} - \frac{1}{\omega + \omega_k} \right) \begin{pmatrix} \omega + A & -A\eta(k) \\ -A\eta(k) & -\omega + A \end{pmatrix}, \quad (14)$$

其中 $\omega_k = A\sqrt{1 - \eta^2(k)}$ 是自旋波色散关系。

利用谱定理求得相关函数

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \langle b_k^\dagger b_k \rangle = \frac{1}{2} \left[\frac{A}{\omega_k} \coth \frac{\beta\omega_k}{2} - 1 \right], \quad (15a)$$

$$\langle a_k b_k \rangle = \langle a_k^\dagger b_k^\dagger \rangle = -\frac{A\eta(k)}{2\omega_k} \coth \frac{\beta\omega_k}{2}. \quad (15b)$$

下面利用(5),(6)和(15)式计算有关物理量。

1. 子晶格平均每个格点的磁化强度的计算

$$m = \frac{2}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle = S - \frac{2}{N} \sum_k \langle a_k^\dagger a_k \rangle = m_0 - \frac{2}{N} \sum_k \frac{n_k}{\sqrt{1 - \eta^2(k)}}, \quad (16)$$

其中 $n_k = \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1}$ 是玻色分布函数, m_0 是零度时的磁化强度, m 和 m_0 均以 $g\mu_B$ 为单位。

$$m_0 = S + \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\sqrt{1 - \eta^2(k)}} = S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} c_1. \quad (17)$$

由(17)式不难看出 c_1 是 δ 的单调减函数, Anderson^[10] 计算了在各向同性 ($\delta = 1$) 和纯二维 ($\delta = 0$) 情况下的 c_1 值分别是 1.156 和 1.393. 相应地 m_0 是 δ 的单调增函数^[11], 其数值计算结果如图 1 所示. (17)式等号右端第二项是 $T \neq 0$ 时由于自旋波的热激发对子晶格磁化强度的影响. 在低温 ($\theta = \frac{k_B T}{6J} \ll \frac{2 + \delta}{3}$) 时, 可用长波近似来计算这一项^[9], 作变量替换 $\phi_p = [(k_x a)^2 + (k_y a)^2]$ 和 $\phi_s = k_z c$, 完成对 ϕ_p 的积分后得

$$m = m_0 + \frac{3\theta}{2\pi^2} \int_0^\pi d\phi_s \ln \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{\sqrt{2\delta(2 + \delta)(1 - \cos \phi_s)}}{3\theta} \right] \right\}. \quad (18)$$

当 $\theta \gg \frac{1}{3} \sqrt{2\delta(2+\delta)}$ (对应 $\delta \rightarrow 0$, 准二维情况), 可得

$$m = m_0 - \frac{3\theta}{2\pi} \ln \frac{3\theta}{\sqrt{\delta(2+\delta)}}. \quad (19)$$

当 $\theta \ll \frac{1}{3} \sqrt{2\delta(2+\delta)}$ (对应 $\delta \rightarrow 1$, 准三维情况), 可得

$$m = m_0 - \frac{3}{4\sqrt{\delta(2+\delta)}} \theta^2. \quad (20)$$

由 (19) 和 (20) 式, 可以看到, 低温时磁化强度 m 在准二维情况表现出 $T \ln T$ 形式, 而在纯二维情况下, (19) 式等号右端第二项发散, 这表明在有限温度下, 反铁磁序不存在; 在准三维情况下磁化强度 m 表现出 T^2 的渐近形式. 这样在低温下, 随着 δ 值的增加, 系统的子晶格磁化强度随温度的变化由准二维形式向准三维形式过渡.

我们也用数值计算得到了在全温区磁化强度 m 在不同 δ 值时随温度变化的曲线, 如图 2 所示. 图 2 中 6 条曲线 A, B, C, D, E, F 分别对应 $\delta = 1, 0.5, 0.2, 0.05, 0.01$ 和 0.0005 . 曲线与温度轴的交点对应 Neel 温度. 图 3 给出 θ_N 随 δ 值的变化, 它表明 θ_N 也是 δ 值的单调增函数, 在 δ 值很小时, θ_N 随 δ 值增加得较快.

对于 $\text{La}_{2-x}(\text{Sr}, \text{Ba})_x\text{CuO}_{2+y}$ 和 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ 高 T_c 超导体, 实验测得正常态时 T_N

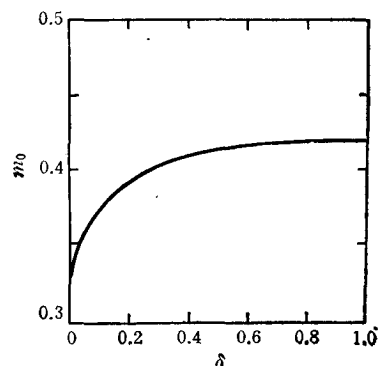


图 1 $T=0$ 时的 m_0 - δ 曲线

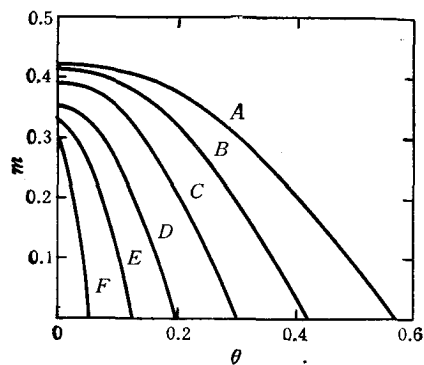


图 2 不同 δ 值下的磁化强度 m 随温度 θ 的变化曲线 A, B, C, D, E, F 分别对应 $\delta = 1, 0.5, 0.2, 0.05, 0.01$ 和 0.0005

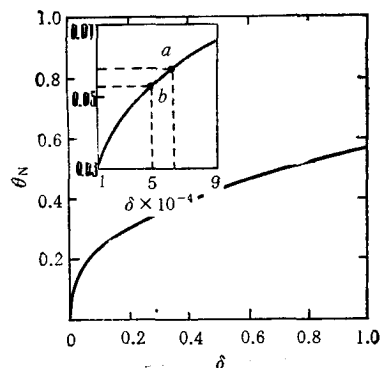


图 3 Neel 温度 θ_N 随 δ 值的变化曲线
左上角 a, b 两点的意义见正文中说明

分别是 300K 和 450K, ^[12,13] 层内耦合强度约是 900K 和 1300K, 由图 3 可估算出跳跃积分的比值 $v_{\perp}/v_{\parallel} = \sqrt{\delta}$ 约分别是 0.0214 和 0.0245 (参见图 3 中左上角的 b, a 两点). 我们得到的这个值比文献 [9] 估算的值要大一些, 与文献 [14] 估算的值相接近. 相比之下, Huang^[8] 从 Bose-Einstein 凝聚理论出发, 用实验得到的超导转变温度 T_c 估算出的值显得太小了.

2. 平均每格点内能和比热的计算

$$\text{内能 } U = \frac{1}{N} \langle H \rangle = U_0 + \frac{2}{N} \sum_k \omega_k n_k, \quad (21)$$

其中 U_0 是系统的基态能量

$$\begin{aligned} U_0 &= -\frac{1}{2} A(S+1) + \frac{A}{N} \sum_k \sqrt{1 - \eta^2(k)} \\ &= -\frac{1}{2} A(S+1) + \frac{A}{2} c_2, \end{aligned} \quad (22)$$

其中等号右端第二项是零点能, Anderson^[10] 也计算了在各向同性 ($\delta = 1$) 和纯二维 ($\delta = 0$) 时的 c_2 值分别是 0.903 和 0.842, 基态能量 U_0 也是 δ 的增函数. 与讨论磁化强度的低温行为的方法一样, 在两个不同低温区内能的渐近表达式分别是

$$U = \begin{cases} U_0 - \frac{6JS\delta}{\pi} \theta + \frac{108JS\xi(3)}{\pi(2+\delta)} \theta^3 & \text{对于 } \theta \gg \frac{1}{3} \sqrt{2\delta(2+\delta)}, \\ U_0 + \frac{54\pi^2 J^2 S}{5\sqrt{\delta(2+\delta)}(2+\delta)} \theta^4 & \text{对于 } \theta \ll \frac{1}{3} \sqrt{2\delta(2+\delta)}, \end{cases} \quad (23)$$

其中 $\xi(3) = 1.202$ 是 Riemann 函数.

相应地磁振子在两个低温区的比热 $c_m = \partial U / \partial T$ 的表达式分别是

$$c_m = \begin{cases} -\frac{\delta}{2\pi} k_B + \frac{27\xi(3)k_B}{\pi(2+\delta)} \theta^2 & \text{对于 } \theta \gg \frac{1}{3} \sqrt{2\delta(2+\delta)}, \\ \frac{18\pi^2 k_B}{5\sqrt{\delta(2+\delta)}(2+\delta)} \theta^3 & \text{对于 } \theta \ll \frac{1}{3} \sqrt{2\delta(2+\delta)}. \end{cases} \quad (24)$$

我们看到, 在低温时比热随 δ 值的增加由准二维的 $c_m - T^2$ 形式过渡到准三维的 $c_m - T^3$ 形

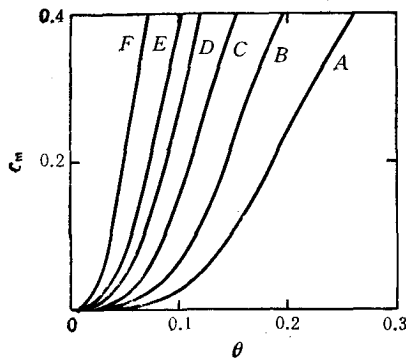


图 4 不同 δ 值下的磁振子比热 c_m 随温度 θ 的变化曲线 符号说明同图 2

式, 由 (24) 式第一式可得在纯二维情况下

$$c_m = \frac{27\xi(3)}{2\pi} k_B \theta^2. \quad (25)$$

在整个温区, 磁振子比热在不同 δ 值下随温度变化的数值计算结果如图 4 所示. 从图 4 中可以看到对应同一温度, 比热随 δ 值减小而增加, 在低温时比热的准二维形式 $c_m - T^2$ 与高 T 超导材料的比热测量结果定性上相一致.

3. 磁化率的计算

由 Kubo 的线性响应理论, 系统的平行磁化率和垂直磁化率可分别表成

$$\chi_{\parallel} = (g\mu_B)^2 N^2 \int_0^{\beta} \langle T S_{\tau}^z S_{(0)}^z \rangle d\tau, \quad (26a)$$

$$\chi_{\perp} = (g\mu_B)^2 N^2 \int_0^{\beta} \langle T S_{\tau}^x S_{(0)}^x \rangle d\tau, \quad (26b)$$

其中

$$\begin{aligned} S^x &= N^{-1} \left[\sum_{i \in A} S_i^x + \sum_{i \in B} S_i^x \right], \\ S^z &= N^{-1} \left[\sum_{i \in A} S_i^z + \sum_{i \in B} S_i^z \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

利用 (5) 和 (6) 式容易证明 S^x 和 S^z 都与有效哈密顿量 (7) 式相对易. 再利用 (15) 式, 得

$$\begin{aligned} \chi_{\parallel} &= 2(g\mu_B)^2 \beta \sum_k \langle (b_k^\dagger b_k - a_k^\dagger a_k)(b_k^\dagger b_k - a_k^\dagger a_k) \rangle \\ &= 2(g\mu_B)^2 \beta \sum_k \frac{e^{\beta\omega_k}}{(e^{\beta\omega_k} - 1)^2}, \end{aligned} \quad (28a)$$

$$\chi_{\perp} = \frac{(g\mu_B)^2}{4} \beta N (2\langle a_0^\dagger a_0 \rangle + 2\langle b_0^\dagger a_0^\dagger \rangle + 1) = \frac{(g\mu_B)^2 N}{16JS(2 + \delta)}. \quad (28b)$$

在推导 (28a) 式最后一步用到了 Wick 定理和玻色对易关系, 推导 (28b) 式最后一步用到了极限

$$\lim_{k \rightarrow 0} \left[\frac{A(1 - \eta(k))}{\omega_k} \coth \frac{\beta\omega_k}{2} \right] = \frac{1}{\beta A}$$

低温时, 平行磁化率在两个不同温区的渐近表达式分别是

$$\frac{\chi_{\parallel}}{(g\mu_B)^2 N} = \begin{cases} \frac{3\theta}{8\pi SJ(2 + \delta)} \ln \frac{3e\theta}{\sqrt{\delta(2 + \delta)}} & \text{对于 } \theta \gg \frac{1}{3} \sqrt{2\delta(2 + \delta)}, \\ \frac{3}{8JS\delta^{\frac{1}{2}}(2 + \delta)^{3/2}} \theta^2 & \text{对于 } \theta \ll \frac{1}{3} \sqrt{2\delta(2 + \delta)}. \end{cases} \quad (29a)$$

$$\quad (29b)$$

由 (29a) 和 (29b) 式, 可以看到低温时平行磁化率在准二维时表现出 $T \ln T$ 形式, 在准三维时表现出 T^2 的规律. 在纯二维情况下, 由 (29a) 式看到平行磁化率变成无限大, 这再次表明当 $T \approx 0$ 时, 不存在磁有序.

图 5 给出在不同 δ 值下平行磁化率随温度变化的数值计算结果. 从图 5 中可以看出, 对给定的温度, 平行磁化率随 δ 值减小而增加; δ 值越小, 平行磁化率随温度变化的曲线变得越陡.

对于垂直磁化率, 从 (28b) 式看到它与温度无关, 这是由于在我们的计算中只取到自旋波的线性近似, 当进一步考虑到自旋波间的相互作用时, 计算表明垂直磁化率随温度增加而变小. 关于这方面的工作, 准备另文讨论.

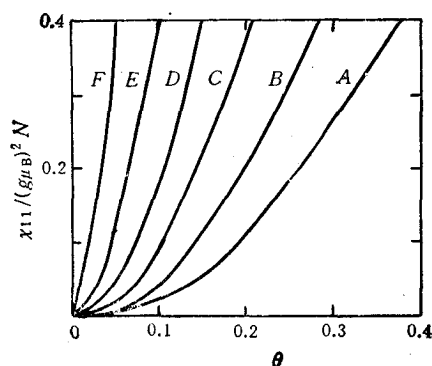


图 5 不同 δ 值下的平行磁化率 $\chi_{\parallel}$ 随温度 θ 的变化曲线 符号说明同图 2

四、结 论

本文考虑到高 T_c 超导体具有层状结构的特点, 从三维各向异性 Hubbard 模型出

发,首先应用 Rayleigh-Schrödinger 简并微扰论和 Holstein-Primakoff 变换,在线性近似下导出了半满带大 U 极限时有效哈密顿量,然后采用矩阵格林函数运动方程技术,得到了自旋波的色散关系,计算了系统的子晶格磁化强度、内能、比热、平行磁化率和垂直磁化率等重要物理量。

数值计算结果表明,层间和层内反铁磁耦合强度之比 $\delta = J_{\perp}/J$ 对这些物理量有着重要影响。对给定的温度,子晶格磁化强度随 δ 增加而增加,比热和平行磁化率随 δ 值增加而减小;系统的 Neel 温度随 δ 值增加而增加。利用高 T_c 超导体 $\text{La}_{2-x}(\text{Sr}, \text{Ba})_x\text{CuO}_{4-x}$ 和 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ 正常态时的实验值 T_N 和 J , 估算出这两种材料层间和层内跳跃积分之比 $\sqrt{\delta} = t_{\perp}/t_{\parallel}$ 分别是 0.0214 和 0.0245。

在低温 $T \ll 2J(2 + \delta)/k_B$, 我们确定了一个特征温度 $T_0 = 2J\sqrt{2\delta(2 + \delta)}/k_B$, 分别给出了在两个低温区 $T \gg T_0$ 和 $T \ll T_0$ 子晶格磁化强度、内能、比热和平行磁化率的渐近表达式。对于准三维系统,这些物理量的低温行为与纯三维情况相一致;对于准二维系统,子晶格磁化强度和平行磁化率具有 $T \ln T$ 渐近行为,比热具有 T^2 渐近行为,这与高 T_c 超导材料的实验结果定性上一致;在纯二维情况下,有限温度时不存在反铁磁序。

北京大学物理系尹道乐教授对本工作给予了支持并审阅了论文初稿,谨此致谢。

- [1] P. W. Anderson, *Science*, **235**(1987), 1196.
- [2] B. I. Shraiman and E. D. Siggia, *Phys. Rev. Lett.*, **61**(1988), 467.
- [3] N. Bulut, D. Hone, D. J. Scalapino and E. Y. Loh, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 2192.
- [4] S. Chakraborty, B. I. Halperin and D. R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988), 1057.
- [5] D. P. Arovas and A. Auerbach, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 316.
- [6] R. P. Singh, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 9760.
- [7] P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.*, **158**(1967), 383.
- [8] K. Huang and E. Manousakis, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 8302.
- [9] A. Singh, Z. Tešanovic, H. Tang *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **64**(1990), 2571.
- [10] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **86**(1952), 694.
- [11] A. Singh and Z. Tešanovic, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 11457.
- [12] T. Freltoft, G. Shirane, S. Mitsuda *et al.*, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 137.
- [13] J. M. Tranquada, A. H. Moudden, A. I. Goldman *et al.*, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 2477.
- [14] S. H. Liu, *J. Magn. Magn. Mat.*, **82**(1989), 294.

ANTIFERROMAGNETIC THEORETICAL CALCULATION FOR HIGH- T_c SUPERCONDUCTORS

DU AN WEI GUO-ZHU NIE HUI-QUAN

Department of Physics, Northeast University of Technology, Shenyang 110006

(Received 18 October 1991)

ABSTRACT

Considering layer-structural characteristics of high- T_c superconductors, the effective Hamiltonian is derived within linear spin wave approximation for anisotropic three-dimensional Hubbard model in the large U limit. The sublattice magnetization, internal energy, specific heat, parallel and perpendicular susceptibilities of the system are calculated by using the equation of motion for matrix Green's function. It is shown that the ratio ($\delta = J_{\perp}/J$) of antiferromagnetic interplanar coupling to planar coupling has an important effect upon these quantities. In the low temperature regime $T \ll 2J(2 + \delta)/k_B$, a characteristic temperature

$$T_0 = 2J \sqrt{2\delta(2 + \delta)}/k_B$$

is given, the asymptotic expressions of these quantities are respectively obtained for $T \gg T_0$ and $T \ll T_0$.

PACC: 7530G; 7530D; 7420; 7510L