

## 研究简报

# 由反铁磁态而引起的超导电性

冯 世 平

北京师范大学物理系  
1988 年 2 月 20 日收到

在空位浓度足够低时,文献[14]已经证明了这些空位在反铁磁态背景下服从 Bose 统计,而高温超导电性是由这些空位凝聚而致.在此基础上,我们计算了高温超导系统 Y-Ba-Cu-O 和 La-Sr-Cu-O 的一些物理量,结果与实验定性相符.

### 一、引 言

自从发现高转变温度超导体以来<sup>[1-3]</sup>,实验研究已有了许多进展<sup>[4-8]</sup>.但是大部分的实验结果显然是不能用建立在电-声子机制上的 BCS 理论解释的<sup>[9]</sup>,因而理论工作者已提出了许多新的理论框架<sup>[10-14]</sup>. 大部的理论都是建立在如下的实验事实上:没有掺杂的 LaCuO<sub>2</sub> 系统在适当的温度下是反铁磁系统<sup>[15]</sup>,当掺有适量的元素(如 Sr, Ba 等)而产生足够的空穴后才可能使系统由反铁磁态转变为超导态.这些理论所采用的模型基本上是 Hubbard 模型<sup>[10,13,14]</sup>,或扩展的 Hubbard 模型<sup>[11,12]</sup>.当掺杂浓度足够低时,Anderson 等人认为这时系统处于 RVB 状态<sup>[10]</sup>:这里存在三种元激发,不带电的自旋子及带有正电荷和负电荷的玻色子<sup>[16]</sup>,而超导电性是由于这些带电的玻色子的 Bose 凝聚而致.而另一些人则认为<sup>[14]</sup>:当空位浓度足够低时,这些空位在反铁磁背景下服从 Bose 统计,从而带电的玻色子,这些玻色子凝聚而引致超导电性.本文采用文献[14]的模型来解释高温超导体的一些实验结果.

### 二、理论方法

根据文献[14],采用如下形式的 Hubbard 模型哈密顿量:

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

这里  $c_{i\sigma}^{\dagger}$  是位置  $i$  处自旋为  $\sigma$  的电子产生算符,  $U$  是同一格点上的电子 Coulomb 作用能,  $\langle ij \rangle$  表示只对最近邻求和. 而 hopping 积分  $t_{ij}$  可表示成

$$t_{ij} = \begin{cases} t_1 & \text{如果 } \langle ij \rangle \text{ 在同一 Cu-O 平面内;} \\ t_3 & \text{如果 } \langle ij \rangle \text{ 在不同的 Cu-O 平面.} \end{cases} \quad (2)$$

在大  $U$  极限下,采用微扰理论<sup>[17]</sup>并且只保留到二级项,就可得到系统的有效哈密顿量<sup>[14]</sup>

$$H_{\text{eff}} = H_1 + H_2, \quad (3)$$

$$H_1 = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} [\xi_i c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \xi_j c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}], \quad (4)$$

$$H_2 = - \frac{4}{U} \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} b_{ij}^{\dagger} b_{ij} - \frac{2}{U} \sum_{\langle ijk \rangle} t_{ij} t_{jk} [\xi_k b_{ik}^{\dagger} b_{ji} + (i \leftrightarrow k)], \quad (5)$$

$$\text{式中} \quad b_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2}} [c_{ij}c_j - c_{ji}c_i], \quad (6)$$

$$\xi_i = \begin{cases} 1 & \text{如果位置 } i \text{ 是空的;} \\ 0 & \text{其它情况.} \end{cases} \quad (7)$$

在掺杂为零时,也即在半满时,哈密顿量  $H_{\text{eff}}$  正好就是描述反铁磁性的 Heisenberg 哈密顿量,这时系统处于反铁磁状态. 当掺杂浓度足够低时,文献[14]已经证明这些空位在反铁磁基态的背景上服从 Bose 统计,从而这些空位是带电的玻色子,他们已得到这些玻色子的有效哈密顿量,

$$H_{\text{eff}} = \sum_k E(k)h^+(k)h(k) + H'. \quad (8)$$

这里  $h^+(k)$  是空位的产生算符,而

$$E(k) = \hbar^2 \left[ \frac{k_x^2 + k_y^2}{2m^*} + \frac{k_z^2}{2m_3^*} \right], \quad (9)$$

$$\frac{\hbar^2}{m^*} = 4Ja^2 \left[ 1 + \frac{r}{2} \right], \quad (10)$$

$$\frac{\hbar^2}{m_3^*} = 4Ja_3^2 r \left[ 1 + \frac{r}{2} \right], \quad (11)$$

$$J = \frac{4t^2}{U}, \quad r = t_3/t, \quad (12)$$

式中  $a$  是 Cu-O 平面内的晶格常数  $a_3$  是垂直于 Cu-O 平面 Cu 层与 Cu 层之间的晶格常数. 而空位之间的相互作用  $H'$  可采用硬心球模型表示成<sup>[18]</sup>

$$H' = \frac{4\pi\hbar^2 d}{Nm^*a^2a_3} \sum_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} h_{k_1}^+ h_{k_2}^+ h_{k_2} h_{k_1}. \quad (13)$$

因为从文献[14]中已知,当两个空位在 Cu-O 平面内的最近邻位置时,其相互作用是  $J/2$ . 由此可定出(13)式中的硬心球半径  $d \approx 0.01a_3$ .

在浓度足够低时,相互作用  $H'$  可近似表示成<sup>[18]</sup>

$$H' = \frac{4\pi d \hbar^2 V}{m^*} \left( n' - \frac{1}{2} n_i \right), \quad (15)$$

式中  $V = Na^2a_3$ ,  $n = N/V$ ,  $n_i$  是凝聚的玻色子(空位)的浓度. 在这种情况下,相互作用几乎不影响系统的凝聚温度  $T_c$  (超导转变温度). 但是它将影响系统的其它物理量. 采用标准方法<sup>[18]</sup>,可求出系统的自由能和转变温度

$$F/V = - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{m^* m_3^* / \hbar^6} (k_B T)^{\frac{3}{2}} \sum_{l=1}^{\infty} l^{-\frac{3}{2}} e^{\beta l \mu} + \mu n + \frac{4\pi d \hbar^2}{m} n' \quad T > T_c, \quad (16)$$

$$F/V = - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{m^* m_3^* / \hbar^6} (k_B T)^{\frac{3}{2}} \sum_{l=1}^{\infty} e^{-\frac{3}{2} \beta l \mu} + \frac{4\pi d \hbar^2}{m^*} \left[ n^2 + \frac{1}{2} n_i - n \frac{T_c - T}{T_c} n_i \right] \quad T < T_c, \quad (17)$$

式中  $\mu$  是系统的化学势, 而转变温度  $T_c$  则为<sup>[14,18]</sup>

$$T_c = \frac{8\pi J}{\left[\xi\left(\frac{3}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}} r^{\frac{1}{2}} [1+r](a^2 a_3 n)^{\frac{1}{2}}. \quad (18)$$

这里  $\xi\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612\dots$ . 由 (16) 和 (17) 式也可求出在相变点的比热跃变及在  $T < T_c$

时的临界磁场为

$$\Delta c = \frac{4\pi d n^2 \hbar^2}{m^* T_c}, \quad (19)$$

$$H_c(T) = 4\pi n \left(\frac{d\hbar}{m^*}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{T_c - T}{T_c}. \quad (20)$$

为了使得  $T_c$  与实验符合较好, 我们发现在  $r, U$  取值合理后,  $r \approx 10^{-7} - 10^{-9}$ , 由此可见, 系统几乎是二维系统 ( $r = 0$  时为精确的二维系统), 文献中一般称这种系统为层状系统. 关于这种层状超导系统很早就有人研究过<sup>[19]</sup>. 为了写出这种系统的 Ginzburg-Landau 方程, 根据文献 [19], 定义层状系统的超导序参数为  $|\phi_n|^2 = a_3 n_z$ , 那么层状超导系统的自由能可写成<sup>[19]</sup>

$$F - F_N = a_3 \sum_z \int dx dy \left[ \alpha |\phi_n|^2 + \frac{\beta}{2} |\phi_n|^4 + \gamma \left( \left| \frac{\partial}{\partial x} \phi_n \right|^2 + \left| \frac{\partial}{\partial y} \phi_n \right|^2 \right) + l |\phi_n - \phi_{n+1}|^2 \right]. \quad (21)$$

与 (16) 和 (17) 式对比并经过简单讨论, 可得

$$\alpha = \alpha_0 (T - T_c), \quad \alpha_0 = \frac{4\pi d \hbar^2 n}{m^* T_c a_3}, \quad (22)$$

$$\beta = 4\pi \frac{d \hbar^2}{m^* a_3^2}, \quad \gamma = \frac{\hbar^2}{2m^* a_3}, \quad (23)$$

$$l = \frac{\hbar^2}{2m_3^* a_3^2}. \quad (24)$$

由此可求出系统的 Ginzburg-Landau 方程和有关的物理量. 这些有关的物理量是<sup>[19]</sup>

1) 相关长度  $\xi$ : 
$$\xi_l^2(T) = \gamma / |\alpha| = \frac{1}{8\pi d n} \left| \frac{T_c}{T - T_c} \right|, \quad (25)$$

$$\xi_{\perp}^2(T) = l a_3^2 / |\alpha| = \frac{m^*}{m_3^*} \xi_l^2(T); \quad (26)$$

2) 上临界场: 
$$H_{c,\parallel}(T) = \frac{4\pi n \hbar c}{e} \sqrt{\frac{m_3^*}{m^*}} \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|, \quad (27)$$

$$H_{c,\perp}(T) = \frac{4\pi n \hbar c}{e} \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|; \quad (28)$$

3) 下临界场: 
$$H_{c,\parallel}(T) = 4 \left[ \frac{\hbar^2 n \pi}{2m_3^* a_3^2} \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right| \right]^{\frac{1}{2}}; \quad (29)$$

$$4) \text{ 穿透深度: } \lambda_H^1(T) = \frac{m^* c^2}{4\pi e^2 n a_3} \left| \frac{T_c}{T - T_c} \right|, \quad (30)$$

$$\lambda_H^1(T) = \frac{m_3^*}{m^*} \lambda_H^1(T); \quad (31)$$

$$5) \text{ 电阻率: } \rho_H(T) = \frac{16 a_3 \hbar}{e^2 T_c} (T - T_c) \left[ 1 + \frac{m^* T_c}{2\pi n d a_3^2 m_3^* (T - T_c)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (32)$$

### 三、数值结果与讨论

对于 Y-Ba-Cu-O 高温超导系统, 取参数  $U = 2.5\text{eV}$ ,  $t = 0.6\text{eV}$ ,  $a^2 a_3 n = 0.1$ ,  $r = 10^{-7}$ , 晶格常数取实验测定值<sup>[28]</sup>. 计算结果与实验结果列在表 1 中. 对于 La-Sr-Cu-O 高温超导系统, 取参数  $U = 2.5\text{eV}$ ,  $t = 0.5\text{eV}$ ,  $a^2 a_3 n = 0.15$ ,  $r = 1.13 \times 10^{-8}$ , 晶格常数取实验测定值<sup>[29]</sup>. 计算结果与实验结果列在表 2 中. 由于这些高温超导系统的复杂性, 不同的实验小组采用不同的样品所得到的实验结果差别很大, 因此并不指望简单的理论计算可以解释实验结果. 但是从表 1 和表 2 中可以看出, 我们的理论结果至少与某些

表 1 Y-Ba-Cu-O

物 理 量	计 算 值	实 验 值
$T_c$	$\sim 89\text{K}$	$89-92\text{K}^{[4]}$
$\xi_H(0)$	$\sim 24\text{\AA}$	$23\text{\AA}^{[4]}$
$H_c(0)$	$\sim 2.6\text{T}$	$2.7\text{T}^{[20]}$
$H_{c2,1}(0)$	$\sim 57\text{T}$	$29-61\text{T}^{[20]}$
$\Delta c/T_c$	$\sim 35.3\text{mJ/mol} \cdot \text{K}^2$	$55\text{mJ/mol} \cdot \text{K}^{[27]}$
$\lambda_H(0)$	$\sim 360\text{\AA}$	$1200\text{\AA}^{[26]}$

表 2 La-Sr-Cu-O

物 理 量	计 算 值	实 验 值
$T_c$	$\sim 39\text{K}$	$39\text{K}^{[22]}$
$\xi_H(0)$	$\sim 24\text{\AA}$	$30\text{\AA}^{[23]}$
$H_c(0)$	$\sim 3\text{T}$	
$H_{c2,1}(0)$	$\sim 86\text{T}$	$58-140\text{T}^{[24]}$
$\Delta c/T_c$	$\sim 71.7\text{mJ/mol} \cdot \text{K}^2$	$33\text{mJ/mol} \cdot \text{K}^{[21]}$
$\lambda_H(0)$	$\sim 352\text{\AA}$	$2000\text{\AA}^{[25]}$

实验结果定性相符. 另外, 实验上也发现 La-Sr-Cu-O 和 Y-Ba-Cu-O 等高温超导系统在  $T_c$  以上时, 电阻率与温度成线性关系<sup>[30]</sup>. 这些结果也可以由(32)式得到定性解释: 因为  $m_3^*/m^* \approx 0$ , 因而(32)式可近似写成  $\rho_H(T) \approx A_0 + B_0 T$ .

作者感谢与 C. S. Ting 教授和 D. Y. Xing 教授的有益讨论.

- [ 1 ] J. G. Bednorz and K. A. Muller, *Z. Phys.*, **B64**(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 ] J. S. Moodera *et al.*, *Phys. Rev.*, **B** (to be published).  
 [ 5 ] T. S. Tsai *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1979.  
 [ 6 ] B. Batlogg *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 2333.  
 [ 7 ] D. Vaknin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 2802.  
 [ 8 ] P. L. Gammel *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 2592.  
 [ 9 ] T. M. Rice, *Z. Phys.*, **B67**(1987), 141.  
 [ 10 ] P. W. Anderson, *Science*, **235**(1987), 1196; G. Baskaran, Z. Zou and P. W. Anderson, *Solid State Commu.*, **63**(1987), 973; A. E. Ruckenstein, P. J. Hirschfeld and J. Appel, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 857; F. C. Zhang *et al.*, *Phys. Rev.*, **B** (to be published).  
 [ 11 ] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 2794.  
 [ 12 ] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 228.  
 [ 13 ] J. R. Schriffer *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988), 944.  
 [ 14 ] K. Huang *et al.*, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 8302.  
 [ 15 ] P. W. Anderson *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 2790.  
 [ 16 ] S. Kivelson *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 8302; S. Kivelson, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 7237.  
 [ 17 ] R. Gros *et al.*, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 381; J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 1317.  
 [ 18 ] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley, New York, (1987), sec 12.4, 13.8 and 19.2.  
 [ 19 ] N. Boecara *et al.*, *Phys. Lett.*, **49A**(1974), 165; W. Lawrence *et al.*, in *Proceedings of the Twelfth International Conference on Low Temperature Physics*, edited by E. Kanda, Academic Press of Japan, Kyoto, (1971), p. 361.  
 [ 20 ] Y. Iye *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **26**(1987), L1057.  
 [ 21 ] G. Nieva *et al.*, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 8780.  
 [ 22 ] C. Allgeier *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 8791.  
 [ 23 ] W. J. Kossler *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 7133.  
 [ 24 ] T. P. Orlando *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 5347.  
 [ 25 ] D. K. Finnemore *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 5319.  
 [ 26 ] M. Gurvitch *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 337.  
 [ 27 ] M. V. Nevitt *et al.*, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 2398.  
 [ 28 ] Q. W. Yan *et al.*, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 5599.  
 [ 29 ] U. Geiser *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 6721.  
 [ 30 ] W. K. Kwok *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 5343; J. E. Shirber *et al.*, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 8709.

## SUPERCONDUCTIVITY RESULTING FROM ANTIFERROMAGNETIC STATES

FENG SHI-PING

*Department of Physics, Beijing Normal University*

(Received 20 February 1988)

### ABSTRACT

When the doping is low enough, the holes obey Bose statistics<sup>[14]</sup>, Bose-Einstein condensation of these holes may lead to occurrence of superconductivity. In this framework, we have calculated some physical quantities, the results are in qualitative agreement with experiments.