

层状横波光学声子的非简谐性对 高温超导电性的影响

汪 汉 廷 熊 诗 杰¹⁾

南京大学物理系, 南京, 210008

1991 年 4 月 3 日收到

本文采用二能级(TLS)模型,利用正则变换方法,研究氧化物超导体中层状横波光学声子的非简谐性对层间配对的影响.结果表明:只有在二能级差 ω 小于临界值 ω_c 时, T_c 才不为零; ω 越小, T_c 越大.这与实验中所显示的绝缘层离子的轴向运动的重要性是一致的.

PACC: 7420

一、引 言

自从发现高温超导体以来^[1],高温超导机制引起物理学界广泛的兴趣^[2]. Fermi 面的发现^[3],以及其它一些实验正逐步表明,高温超导电性中声子仍然有重要作用.高温超导体的特殊性质,如弱同位素效应^[4],不同于金属超导体的层状结构^[5],以及某些超导体中存在的轴向(垂直于层的方向)结构涨落^[6],显示了高温超导体中电声子互作用的特殊性.

声子非简谐性对超导的影响很早就受到重视^[7]. 高温超导发现后不久, Hardy 和 Flocker 就提出声子在双势阱中振动^[8], Plakida 等人也利用非简谐效应,通过增大耦合常数 λ 以解释高 T_c 的出现^[9]. Müller 最近也通过 $O^{(n)}$ 的非简谐性解释同位素效应^[10]. 最近的实验显示, YBCO 中绝缘层的轴向运动确实存在双势阱^[6]. 由于绝缘层处于两个导电层之中,其轴向运动对两个导电层中载流子的作用是反号的^[11]. 本文将在双能级模型下,引入反号相互作用(SOI),研究双势阱的能级差与转变温度 T_c 的关系,所得结果表明,非简谐声子的作用随双势阱能级差的减少而增大,这与实验中所显示的绝缘离子层的非简谐轴向运动的重要性是一致的.

二、模 型

考察 YBCO 系统的一个原胞的结构,可发现两个特殊的单元,如图 1(a)和(b)所示,它们都由两个导电层夹绝缘层组成.

实验表明^[6]: 图 1 中的绝缘平面存在两个平衡位置 A 和 B, 绝缘平面的振动势能可

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理分中心,北京,100080.

用双势阱表示。由于势垒的存在, 在多个势阱中可以有多个振动能级, 取每个势阱内最高的一个振动能级 E_a, E_b 组成双能级系统 (TLS)^[12]。在低激发情况下, 在双势阱中的振动可以简化成二能级系统 (TLS) 来处理。因此可以将某一绝缘层的轴向运动用双能级系统 (TLS) 哈密顿量来表示^[12],

$$H_{\text{TLS}} = \sum_i (-Q\sigma_i^z + W) - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij}\sigma_i^x\sigma_j^x, \quad (1)$$

其双能级为

$$E_a = W - Q, \quad E_b = W + Q, \quad (2)$$

其中 Q 表示双势阱能级差, W 表示零点能, 对应于双能级间的势垒。 i, j 为平面上原胞的指标, J_{ij} 表示由于直接或间接的原子运动的关联, 相邻原胞间 TLS 的交换相互作用。 $\sigma_i^z (a = x, y, z)$ 表示作用于双能级指标的泡利 (Pauli) 算符。由于势垒 W 很小, 在 (1) 式中忽略了原胞的双能级总占据数^[12]。

对 H_{TLS} 引入低激发近似^[13]:

$$S_i^z = S - a_i^+ a_i, \quad (3a)$$

$$S_i^- = (\sqrt{2S - a_i^+ a_i}) a_i, \quad (3b)$$

$$S_i^+ = a_i^+ (\sqrt{2S - a_i^+ a_i}), \quad (3c)$$

经过傅里叶 (Fourier) 变换,

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_k, \\ a_i^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_k^+, \quad (4)$$

l 为第 l 个元胞的位置, 得到

$$H_{\text{TLS}} \cong \sum_k \hbar\omega_k b_k^+ b_k, \quad (5)$$

其中

$$\hbar\omega_k = 2Q - \frac{1}{2} J(k), \quad (5a)$$

$$J(k) = \sum_a J_{i,i+a} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}. \quad (5b)$$

这正是 TLS 的元激发, $\hbar\omega_k$ 为元激发能谱。由于它对应的离子运动是轴向的, 而与该平面相邻的两个导电层亦处在轴向的上下位置上, 因此它与两个导电层中载流子的相互作用是反号的, 由此产生的有效相互作用, 将形成第二推迟配对^[14], 提供一种层间配对的超导机

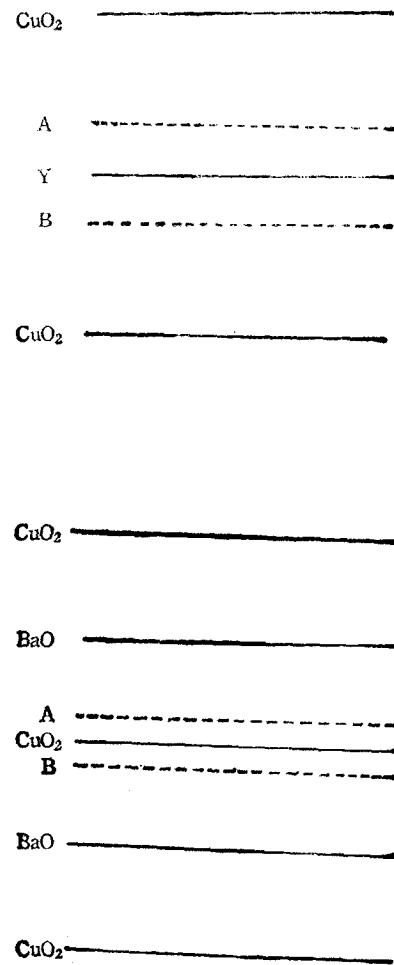


图1 YBCO 超导相一个原胞中的两个夹心单元 A 和 B 表示绝缘平面 (Y 平面或者 CuO 平面) 的两个平衡位置

制。

对于上下两个导电层, TLS 元激发与载流子的相互作用哈密顿量可表示为^[7,12]

$$H_{e-TLS} = \sum_{k, q, m} (V_{k, q, m} c_{k+q, m}^{\dagger} c_{k, m} b_q + \text{H.c.}). \quad (6)$$

H. c. 表示厄密 (Hermite) 共轭。下标 $m = 1, 2$ 为导电层的标号。相互作用常数为

$$V_{k, q, m} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l \langle \phi_{k+q, m}(\mathbf{r}) | \frac{\partial}{\partial z} u_l(\mathbf{r}, z) |_{z=z_0} | \phi_{k, m}(\mathbf{r}) \rangle \cdot 2z_{ii}, \quad (7)$$

其中 $z_{ii} = \langle \phi_i | z | \phi_i \rangle$ 为离子位移 z 在二能级系统的对称态 ϕ_s 与反对称态 ϕ_a 间的矩阵元, z 沿垂直于原 z 平面的方面。 $u_l(\mathbf{r}, z)$ 为绝缘平面上第 l 个原胞的离子在 \mathbf{r} 处产生的势能, z_0 为中点位置, $\phi_{k, m}(\mathbf{r})$ 为第 m 个导电层的载流子的波函数。很明显, 由于两个导电层相对于 z_0 上下对称排列, 因此 $V_{k, q, 1} = -V_{k, q, 2}$, 这与以前所提到的反号电声子相互作用^[15]很类似, 只不过在这里由于考虑到非简谐势的影响, 声子的作用由 TLS 的元激发所代替。

三、 T_c 计算与讨论

处理如下系统:

$$H = H_e + H_{TLS} + H_{e-TLS}, \quad (8)$$

其中, H_e 为两个导电层的载流子哈密顿量,

$$H_e = \sum_k \varepsilon_1(k) c_{k1}^{\dagger} c_{k1} + \sum_k \varepsilon_2(k) c_{k2}^{\dagger} c_{k2}. \quad (9)$$

由于两个导电层是完全对称的, 因此 $\varepsilon_1(k) = \varepsilon_2(k)$ 。 H_{TLS} 和 H_{e-TLS} 分别如(5)和(6)式所示。

采用正则变换方法^[16], 得到电子间的有效相互作用哈密顿量

$$H_{eff}^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{k, k', q} |V_q|^2 \left\{ \frac{2\hbar\omega_q}{[\varepsilon_i(k+q) - \varepsilon_i(k)]^2 - (\hbar\omega_q)^2} c_{k'i}^{\dagger} c_{k'+q,i} c_{k+q,i}^{\dagger} c_{ki} \right\}, \quad (10)$$

$$H_{eff}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{k, k', q} |V_q|^2 \left\{ \frac{2\hbar\omega_q}{[\varepsilon_i(k+q) - \varepsilon_i(k)]^2 - (\hbar\omega_q)^2} c_{k'+q,2}^{\dagger} c_{k'2} c_{k1}^{\dagger} c_{k+q,1} \right. \\ \left. + \frac{2\hbar\omega_q}{[\varepsilon_2(k') - \varepsilon_2(k'+q)]^2 - (\hbar\omega_q)^2} c_{k'+q,2}^{\dagger} c_{k'2} c_{k1}^{\dagger} c_{k+q,1} \right\}, \quad (11)$$

其中 $i = 1, 2$, $H_{eff}^{(1)}$ 表示层内电子相互作用, 而 $H_{eff}^{(2)}$ 则表示层间电子相互作用。 $H_{eff}^{(1)}$ 与 $H_{eff}^{(2)}$ 符号相反, 这是由于 TLS 与两带的作用相反所致。

在带间配对情况下, 相互作用哈密顿量可近似表为

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{k, k', q} V_{kk'q} c_{k'+q,2}^{\dagger} c_{k'2} c_{k1}^{\dagger} c_{k+q,1}, \quad (12)$$

其中

$$V_{kk'q} = -V \begin{cases} \text{当 } \bar{W} > \varepsilon_1(k+q) > \omega_0, & -\bar{W} < \varepsilon_1(k) < -\omega_0 \\ \text{或 } \bar{W} > \varepsilon_1(k) > \omega_0, & -\bar{W} < \varepsilon_1(k+q) < -\omega_0 \\ \text{和 } \bar{W} > \varepsilon_2(k'+q) > \omega_0, & -\bar{W} < \varepsilon_2(k') < -\omega_0 \\ \text{或 } \bar{W} > \varepsilon_2(k') > \omega_0, & -\bar{W} < \varepsilon_2(k'+q) < -\omega_0 \end{cases}$$

= 0 其它.

这里, $\xi_{1(2)} = \varepsilon_{1(2)}(k) - \varepsilon_F$, ε_F 为费密 (Fermi) 能, \bar{W} 为载流子的能带半宽度, ω_0 为 TLS 的元激发谱, 由 (5a) 式, 在 TLS 交换相互作用很小的情况下, $\omega_0 \approx 2Q$.

经过与 BCS 同样的计算^[16,17], 得到计算 T_c 的方程为

$$\frac{1}{\rho V} = \int_{\omega_0/2k_B T_c}^{\bar{W}/2k_B T_c} \frac{dx}{x} \tanh x, \quad (13)$$

ρ 为载流子态密度. 在层间配对情况下, $V \approx \frac{\partial E}{\partial z} \cdot d$ ^[15], d 为势阱中两个势阱间的距离, 这使得电子与 TLS 的相互作用所产生的有效层间耦合比一般的电子相互作用产生的耦合大得多, 也比由 TLS 产生的层内配对耦合大得多.

数值计算的结果如图 2 所示. 对给定的 \bar{W} , Q 增大时 T_c 减小. 而且存在一个临界值 Q_c , 当 $Q \geq Q_c$ 时 T_c 降至零. 可见, 双能级系统的能级差 Q 较小时, 有利于配对的形成.

关于 TLS 元激发对层内电子的影响, 在文献[12]已研究. 从文献[12]得到的结果可以看到, 只有在能量差 Q 增大且超过某一临界值 Q_c 时, 层内配对才令出现, 而且随 Q 的增大 T_c 增高. 这与现在对层间配对的情况所得出的结论正好相反. 从实验测得的绝缘层非简谐振动的情况来看^[6], 两个势阱是对称的, 因此能级差 Q 极小或者趋于 0. 可以有理由认为, 如果离子的非简谐振动确实如同许多作者所认为的那样^[8-10], 对高温超导体的配对机制起重要作用, 那么它将主要影响层间的配对而非层内的配对.

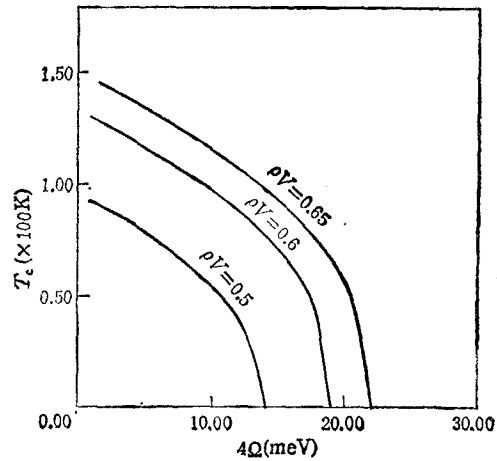


图 2 不同 ρV 值下, 转变温度 T_c 与双能级差 Q 的关系
 $\bar{W} = 50 \text{ meV}$

四、小 结

本文讨论了层状横波光学声子在高温超导电性中的作用, 计算了声子的非简谐性对层间配对的影响, 得到在 Q 较小时 T_c 较大, 在 $Q \approx Q_c$ 时 T_c 为零的结论, 这与实验中所显示的绝缘层的非简谐轴向运动的重要性是一致的.

本文在以前所提出的反号电声子相互作用机制^[11,14,15]中, 考虑了声子振动非简谐性的影响. 非简谐势一方面增大了电声子的耦合强度, 另一方面由于势垒的出现又部分抵消了其元激发的谱强度. 实验测得的层状横波光学声子模式的非简谐振动的势垒很低^[6], 而且表现出很强的电声子耦合效应^[18]. 这对本文的计算是有力的支持. 另一方面, 对高温超导体某些正常态性质的研究, 也反映出层状横波光学声子模式有着重要的影响^[19].

- [1] J. G. Bednorz, K. A. Muller, *Z. Phys.*, **B364** (1986), 189.
 [2] P. W. Anderson, *Science*, **235** (1987), 1196; F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev.*, **B37** (1988), 3759; V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 2794
 [3] R. S. List, A. J. Arko and R. J. Bartlett, *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990), 2308.
 [4] T. A. Falens *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **59** (1987), 915; K. J. Leary, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 1236.
 [5] Warren E. Pickett, *Rev. Mod. Phys.*, **61** (1989), 433.
 [6] J. M. de Leon, S. D. Conradson, I. Batistic and A. R. Bishop, *Phys. Rev. Lett.*, **65** (1990), 1675.
 [7] K. L. Ngai and T. L. Reinecke, *Phys. Rev.*, **B16** (1977), 1077; G. M. Vujicic, V. L. Aksenov *et al.*, *Phys. Lett.*, **73A** (1979), 439.
 [8] J. R. Hardy and J. W. Flocken, *Phys. Rev. Lett.*, **60** (1988), 2191.
 [9] N. M. Plakida, V. L. Aksenov *et al.*, *Europhys. Lett.*, **4**(1987), 1309.
 [10] K. Alex Muller, *Z. Phys.*, **B80** (1990), 193.
 [11] Shijie Xiong, *Phys. Lett.*, **A145** (1990), 461.
 [12] Shijie Xiong, *J. Phys. C*, **21** (1988), 2899.
 [13] T. Holstein and H. Primakoff, *Phys. Rev.*, **58** (1940), 1098.
 李正中, 固体理论, 高等教育出版社, 北京, (1985), 第三章.
 [14] Shijie Xiong, *Physica*, **C161** (1989), 105.
 [15] Shijie Xiong, *Z. Phys.*, **B74** (1989), 5.
 [16] H. Frohlich, *Pro. Roy. Soc. Lon.*, **A215** (1952), 291.
 [17] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Shrieffer, *Phys. Rev.*, **108** (1957), 1175.
 [18] J. L. Phillips, *Phys. Rev.*, **B39** (1989), 7356; A. Wittlin *et al.*, *Solid State Comm.*, **64** (1987), 477; R. Liu *et al.*, *Phys. Rev.*, **B37** (1988), 7971; S. L. Cooper *et al.*, *Phys. Rev* **B37** (1988), 5920.
 [19] Hanjing Wang, Wenzhen Wang and Shijie Xiong, *Mod. Phys. Lett.*, **B4** (1990), 949.

EFFECT OF ANHARMONICITY OF LAYERED TRANSVERSE- OPTICAL PHONONS ON HIGH- T_c SUPERCONDUCTIVITY

WANG HAN-TING XIONG SHI-JIE

Department of Physics, Nanjing University, Nanjing, 210008

(Received 3 April 1991)

ABSTRACT

The effect of anharmonicity of layered transverse-optical phonons on the interlayer pairing is investigated by a canonical transformation from a two-level-system model. The results show that the critical temperature T_c is zero only when the difference Ω of the two levels is smaller than a critical value Ω_c , and T_c increases with the decrease of Ω . It is consistent with the importance of the axial motion of the ions in the insulating sheets as has been revealed by the recent experiments.

PACC: 7420