

# 非含 Cu 氧化物超导体的超导电性机制\*

余超凡<sup>1)</sup>

(南开大学物理系, 天津 300071)

陈斌

(南开数学研究所理论物理部, 天津 300071)

何国柱

(南开大学物理系, 天津 300071)

(1993年6月3日收到)

基于单占据  $a_{i\sigma}$  表象和电荷涨落机制, 应用简并微扰理论推导了非含 Cu 氧化物  $Ba_{1-x}K_xBiO_3$  的双带 Hubbard 模型有效哈密顿量。考虑到坐标空间两个相反自旋空穴的次近邻格位配对, 得到了格林函数运动方程和超导方程。合理解释了超交换作用和跳跃能对次近邻配对的作用, 并且超导窗是由于坐标空间 Cooper 配对的结果。

PACC: 7420

## 1 引言

含有 Cu 和 O 作为关键组分的高  $T_c$  氧化物超导体的电子配对机制问题已引起人们很大关注<sup>[1-4]</sup>。在这些系统中存在  $\sim 6eV$  同位库仑排斥, 并且处于金属-绝缘体相变的邻域。因此, Anderson 提议了一个强调库仑关联的机制<sup>[5]</sup>。但是, 与其它过渡金属氧化物一样, 高  $T_c$  超导体也存在电子-声子相互作用<sup>[6-9]</sup>。Alexandrov 等曾指出, 在窄带晶体中强电子-声子耦合作用引起双极化子, 它在一定条件下与超流荷电 Bose 系统等价<sup>[8,9]</sup>。由此, Kuramoto 等提出了电子配对机制是由于超交换作用和极化子效应合作的结果<sup>[10]</sup>。

针对上述问题, 本文基于单占据  $a_{i\sigma}$  表象和电荷涨落机制, 并考虑了坐标空间局域配对图象, 具体研究了超交换作用与跳跃能对近邻局域空穴配对的作用。以非含 Cu 超导体  $Ba_{1-x}K_xBiO_3$  作为讨论的对象。Bi 系氧化物是三维化合物,  $BaBiO_3$  为逆磁性。化合物  $Ba_{1-x}K_xBiO_3$  是一种低载流子数目的不良金属, 其 Fermi 能级态密度较低, 且理想配比母体化合物为半导体性。实验上显示出它对掺杂极为敏感,  $x < 0.25$  为半导体,  $x > 0.25$  成为超导体, 在  $x = 0.4$  有最高转变温度  $T_c = 30K$ <sup>[11,12]</sup>。

\* 国家自然科学基金资助的课题。

1) 现在通讯地址: 广东教育学院物理系, 广州 510303。

由于电荷涨落机制与空穴的局域性质相联系,因而可以采用双带模型处理此问题<sup>[13,14]</sup>,且结果亦表明是合理的。在本文中,将看到带掺杂载流子的超导体中,化学势仅依赖于O-空穴浓度 $\delta$ ,这自然引入对应 $T_c$ 值的 $\delta$ 上限值。基于单占据 $a_{i\sigma}$ 表象,从电荷涨落机制出发,应用简并微扰论方法导出双带模型有效哈密顿量,得出了 $a_{i\sigma}$ 表象的次近邻格位上O-空穴之间的超交换相互作用。应用这个有效哈密顿量推导了格林函数运动方程组,并求解超导方程而得到 $T_c-x$ 曲线。

## 2 单占据表象,模型哈密顿量及微扰论处理

对于P型非含Cu超导体 $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ ,超导载流子仅存在于 $BaO_3$ 的八面体上。掺杂前,其电子结构为 $Ba^{2+}O_3^{2-}$ ,其中 $Ba^{2+}$ 为满d壳,而 $O_3^{2-}$ 为满p壳,因而是绝缘体。掺杂后,Ba原子被K原子取代,因此一个附加空穴出现在O格位上,构成电流载流子。

取 $6s^2$ 和 $2p^6$ 作为能量的零点,混杂能级如图1所示。与此相应的哈密顿量可以写成为

$$H = \sum_{j'} \epsilon_o n_{j'} - \sum_j \epsilon_p n_j - t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + H.c.) + \sum_{j'} U_o n_{j'} n_{j'} + \sum_j U_p n_j n_j, \quad (1)$$

其中 $j$ 与 $j'$ 分别代表O格位和Bi格位, $c_{j\sigma}^\dagger$ 和 $c_{j\sigma}$ 分别代表空穴的产生和湮没算符。对于两个O-空穴之间的相互作用,仅次近邻O格位和Bi格位被涉及。对于这样的三格位近似情形,各种占据态如表1所示。它们相应的能级图如图2所示。

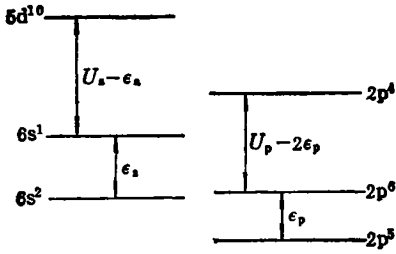


图1 Bi和O的混杂能级

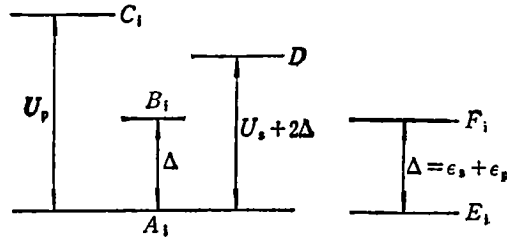


图2 三格位的各种占据态的相应能级

表1 三格位的各种占据态

$$\begin{aligned}
 |A_1\rangle &= \begin{pmatrix} \uparrow \\ \bullet \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \bullet \\ \downarrow \end{pmatrix} & |A_2\rangle &= \begin{pmatrix} \bullet \\ \downarrow \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \uparrow \\ \bullet \end{pmatrix} & |B_1\rangle &= \begin{pmatrix} \bullet \\ \times \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \bullet \\ \downarrow \end{pmatrix} & |B_2\rangle &= \begin{pmatrix} \uparrow \\ \times \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \bullet \\ \downarrow \end{pmatrix} \\
 |B_3\rangle &= \begin{pmatrix} \bullet \\ \times \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \uparrow \\ \bullet \end{pmatrix} & |B_4\rangle &= \begin{pmatrix} \bullet \\ \downarrow \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \uparrow \\ \bullet \end{pmatrix} & |C_1\rangle &= \begin{pmatrix} \bullet \\ \times \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \uparrow \\ \bullet \end{pmatrix} & |C_2\rangle &= \begin{pmatrix} \uparrow \\ \times \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \bullet \\ \downarrow \end{pmatrix} \\
 |D\rangle &= \begin{pmatrix} \bullet \\ \times \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \uparrow \\ \bullet \end{pmatrix} \\
 |E_1\rangle &= \begin{pmatrix} \uparrow \\ \bullet \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \bullet \\ \bullet \end{pmatrix} & |E_2\rangle &= \begin{pmatrix} \bullet \\ \downarrow \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \bullet \\ \bullet \end{pmatrix} & |F_1\rangle &= \begin{pmatrix} \uparrow \\ \times \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \bullet \\ \bullet \end{pmatrix} & |F_2\rangle &= \begin{pmatrix} \bullet \\ \times \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \bullet \\ \downarrow \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

将跳跃项视为微扰,按照简并微扰理论,  $E^{(1)} = 0, E^{(3)} = 0$ ,而非零微扰修正<sup>[4]</sup>

$$E^{(2)} = \sum_{\alpha} \frac{\langle \Phi_n | H' | \alpha \rangle \langle \alpha | H' | \Phi_m \rangle}{E_0^{(0)} - E_{\alpha}^{(0)}}, \quad (2)$$

$$E^{(4)} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \frac{\langle \Phi_n | H' | \alpha \rangle \langle \alpha | H' | \beta \rangle \langle \beta | H' | \gamma \rangle \langle \gamma | H' | \Phi_m \rangle}{(E_0^{(0)} - E_{\alpha}^{(0)})(E_0^{(0)} - E_{\beta}^{(0)})(E_0^{(0)} - E_{\gamma}^{(0)})} - \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{|\langle \Phi_n | H' | \alpha \rangle|^2 |\langle \Phi_m | H' | \beta \rangle|^2}{(E_0^{(0)} - E_{\alpha}^{(0)})^2 (E_0^{(0)} - E_{\beta}^{(0)})}, \quad (3)$$

其中  $H'$  为微扰作用,  $|\Phi_n\rangle$  和  $|\Phi_m\rangle$  为基态流形中的两个态。此处假定,对于一阶修正而言,能量简并态已消除。此时(3)式等号右端第二项是  $E^{(2)}$  的高阶项,它对于三格点模型近似的贡献可以忽略不计。对于表 1 的各种占据组态,方程(2)和(3)可以写成如下有效哈密顿量形式:

$$H^{(2)} = \sum_{E_i} \sum_{E'_i} \sum_{F_i} \frac{|E_i\rangle \langle E_i | H' | F_i \rangle \langle F_i | H' | E'_i \rangle \langle E'_i|}{(E_{E_i}^{(0)} - E_{F_i}^{(0)})}, \quad (4)$$

$$H^{(4)} = \sum_{A_i} \sum_{A'_i} \sum_{B_i} \sum_{B'_i} \sum_{C_i} \frac{|A_i\rangle \langle A_i | H' | B_i \rangle \langle B_i | H' | C_i \rangle \langle C_i | H' | B'_i \rangle \langle B'_i | H' | A'_i \rangle \langle A'_i|}{(E_{A_i}^{(0)} - E_{B_i}^{(0)})(E_{A_i}^{(0)} - E_{C_i}^{(0)})(E_{A_i}^{(0)} - E_{B'_i}^{(0)})} + \sum_{A_i} \sum_{A'_i} \sum_{B_i} \sum_{B'_i} \frac{|A_i\rangle \langle A_i | H' | B_i \rangle \langle B_i | H' | D \rangle \langle D | H' | B'_i \rangle \langle B'_i | H' | A'_i \rangle \langle A'_i|}{(E_{A_i}^{(0)} - E_{B_i}^{(0)})(E_{A_i}^{(0)} - E_D^{(0)})(E_{A_i}^{(0)} - E_{B'_i}^{(0)})}, \quad (5)$$

其中求和代表对一切可能的虚过程进行,并且还应考虑  $|A_1\rangle$  与  $|A_2\rangle$  的交换。

下面在单占据表象中推导上述有效哈密顿量的具体结果。为此引入  $a_{i\sigma}$  和  $b_{i\sigma}$  算符

$$c_{i\sigma} = a_{i\sigma} + b_{i\sigma}, \quad (6)$$

而

$$a_{i\sigma} = (1 - n_{i,-\sigma})c_{i\sigma}, \quad (7)$$

$$b_{i\sigma} = n_{i,-\sigma}c_{i\sigma}, \quad (7)'$$

$a_{i\sigma}^{\dagger}$  表示在格位  $i$  上产生一个自旋为  $\sigma$  的空穴单占据态,  $a_{i\sigma}$  表示在格位  $i$  上湮没一个自旋为  $\sigma$  的空穴单占据态(格位  $i$  上出现空态)。而  $b_{i\sigma}^{\dagger}$  表示湮没格位  $i$  上自旋为  $-\sigma$  的空穴单占据态,在格位  $i$  上产生双重占据态。 $b_{i\sigma}$  表示湮没格位  $i$  上的双重占据态,在格位  $i$  上产生自旋为  $-\sigma$  的空穴单占据态。采用算符  $a_{i\sigma}$  和  $b_{i\sigma}$  的好处是不用引入附加场进行公式化。并且若果小于半满情况,亦即激发能甚低于  $U$  时,仅需保留  $a_{i\sigma}$  算符。

对于  $a_{i\sigma}$  和  $b_{i\sigma}$  算符,它们分别满足如下非线性对易关系:

$$\{a_{i\sigma}, a_{j\sigma}^{\dagger}\} = \delta_{ij}(1 - n_{i,-\sigma}), \{a_{i\sigma}, a_{j,-\sigma}^{\dagger}\} = \delta_{ij}a_{i,-\sigma}^{\dagger}a_{i\sigma}, \quad (8)$$

$$\{b_{i\sigma}, b_{j\sigma}^{\dagger}\} = \delta_{ij}n_{i,-\sigma}, \{b_{i\sigma}, b_{j,-\sigma}^{\dagger}\} = -\delta_{ij}a_{i,-\sigma}^{\dagger}a_{i\sigma}, \quad (9)$$

$$\{a_{i\sigma}, b_{j,-\sigma}\} = \delta_{ij}c_{i\sigma}c_{i,-\sigma}, \quad (10)$$

其余对易关系为零。应用单占据表象(7)式,可以将有效哈密顿量约化成用  $a_{i\sigma}$  算符来表示。例如,考虑四阶过程  $|A_1\rangle \rightarrow |B_1\rangle \rightarrow |D\rangle \rightarrow |B_2\rangle \rightarrow |A_1\rangle$  的贡献应有

$$-\frac{t^4}{\Delta^2(U_+ + 2\Delta)} (1 - n_{i\uparrow})c_{i\uparrow}^{\dagger}(1 - n_{i\uparrow})c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{i\downarrow}(1 - n_{i\uparrow})c_{i\downarrow}(1 - n_{i\downarrow}) \\ \times [c_{i'\uparrow}(1 - n_{i'\uparrow})c_{i'\uparrow}n_{i'\downarrow}n_{i'\downarrow}c_{i'\downarrow}^{\dagger}(1 - n_{i'\downarrow})c_{i'\downarrow}^{\dagger}]$$

$$= -\frac{t^4}{\Delta^2(U_i + 2\Delta)} a_{ij}^\dagger a_{ij}^\dagger a_{ij} a_{ij} [a_{i'}^\dagger b_{i'}^\dagger b_{i'}^\dagger a_{i'}^\dagger]$$

$$= \frac{t^4}{\Delta^2(U_i + 2\Delta)} a_{ij}^\dagger a_{ij}^\dagger a_{ij} a_{ij},$$

其中已应用了关系式  $b_{i\sigma} b_{i-\sigma}^\dagger = -a_{i-\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ 。仿此，其它过程可作类似演算。考虑了(4)和(5)式中相应的所有可能虚过程求和后，最后将上述空穴型掺杂的双带 Hubbard 模型哈密顿量约化成如下的有效哈密顿量形式：

$$\tilde{H} = \tilde{z} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \text{H.c.}) - J \sum_{\langle ij \rangle \sigma} [a_{i\sigma}^\dagger a_{j,-\sigma}^\dagger a_{i,-\sigma} a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^\dagger a_{j,-\sigma}^\dagger a_{i,-\sigma} a_{j\sigma}]$$

$$- \mu \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}, \quad (11)$$

其中  $\Delta = \epsilon_s + \epsilon_p$ ，并且

$$J = t^4 \left( \frac{1}{\Delta^2 U_p} + \frac{2}{\Delta^2 (U_i + 2\Delta)} \right), \quad \tilde{z} = \frac{t^2}{\Delta} \delta. \quad (12)$$

这里动能项前面已引入了O格位被占据的概率因子。这是因为当O格位其中一个被占据而另外的格位空着时，这个O格位存在一个O-空穴占据概率。 $\delta$ 代表BiO<sub>2</sub>中的掺杂空穴浓度， $\mu$ 是化学势。显见，在本文的新处理中，双带 Hubbard 模型哈密顿量变换成  $a_{i\sigma}$  表象的单带有效哈密顿量。

### 3 格林函数方程, 超导方程和解

定义下列两个格林函数：

$$G_{ij}^\sigma(\tau) = -\langle T_\tau [a_{i\sigma}(\tau) a_{j\sigma}^\dagger(0)] \rangle, \quad (13)$$

$$F_{ij}^\sigma(\tau) = \langle T_\tau [a_{i,-\sigma}^\dagger(\tau) a_{j\sigma}^\dagger(0)] \rangle, \quad (14)$$

其中格林函数按热力学松原格林函数定义，其中 $\langle \dots \rangle$ 记作取热力学平均值。由于算符  $a_{i\sigma}$  满足非线性对易关系，因而使对易子  $[a_{i\sigma}, \tilde{H}]$  有实质性的非线性项修正，

$$[a_{i\sigma}, \tilde{H}] = -\mu a_{i\sigma} + \tilde{z} \sum_j [(1 - n_{i,-\sigma}) a_{j\sigma} + a_{i,-\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{j\sigma}]$$

$$+ J \sum_j (a_{i,-\sigma}^\dagger a_{j\sigma} a_{i,-\sigma} - a_{i,-\sigma}^\dagger a_{j,-\sigma} a_{i\sigma}), \quad (15)$$

$$[a_{i,-\sigma}^\dagger, \tilde{H}] = \mu a_{i,-\sigma}^\dagger - \tilde{z} \sum_j [(1 - n_{i\sigma}) a_{j,-\sigma}^\dagger + a_{i,-\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{j\sigma}^\dagger]$$

$$+ J \sum_j (a_{i,-\sigma}^\dagger a_{j\sigma} a_{i\sigma}^\dagger - a_{i,-\sigma}^\dagger a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}). \quad (16)$$

应用(15)和(16)式，求得格林函数  $G_{ij}^\sigma(\tau)$  与  $F_{ij}^\sigma(\tau)$  的运动方程组为

$$\left( \frac{\partial}{\partial \tau} - \mu' \right) G_{ij}^\sigma(\tau) = -\delta(\tau) (1 - \langle n_\sigma \rangle) \delta_{ij} - \tilde{z} (1 - \langle n_\sigma \rangle) \sum_l G_{il}^\sigma(\tau)$$

$$+ 2\tilde{z} \Delta_p F_{ij}^\sigma(\tau) + 4J \Delta_p \sum_l F_{il}^\sigma(\tau), \quad (17)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu'\right) F_{ij}^{\sigma}(\tau) = (1 - \langle n_{\sigma} \rangle) \tilde{\epsilon} \sum_i F_{ij}^{\sigma}(\tau) + 2\tilde{\epsilon} \Delta_p^{\dagger} G_{ij}^{\sigma}(\tau) + 4J\Delta_p^{\dagger} \sum_i G_{ij}^{\sigma}(\tau). \quad (18)$$

在此已考虑了非磁性态情形  $\langle n_{-\sigma} \rangle = \langle n_{\sigma} \rangle$ 。并且序参数  $\Delta_p$  考虑了坐标空间次近邻格位局域配对图象来定义

$$\Delta_p = \lim_{\substack{l \rightarrow i \pm 1 \\ \tau \rightarrow 0}} \langle a_{il}(\tau) a_{ii}(\tau) \rangle, \quad (19)$$

而

$$\mu' = \mu + 2J\langle n_{\sigma} \rangle. \quad (20)$$

将格林函数运动方程组(17)和(18)变换到  $(k, \omega)$  表象,得

$$(i\omega_n - \eta_k) G_{k\sigma}(i\omega_n) = (1 - \langle n_{\sigma} \rangle) - \Delta_k F_{k\sigma}(i\omega_n), \quad (21)$$

$$(i\omega_n + \eta_k) F_{k\sigma}(i\omega_n) = -\Delta_k^{\dagger} G_{k\sigma}(i\omega_n), \quad (22)$$

其中

$$\Delta_k = (4J\gamma_k + 2\tilde{\epsilon})\Delta_p, \quad (23)$$

$$\eta_k = (1 - \langle n_{\sigma} \rangle)\gamma_k \tilde{\epsilon} - \mu', \quad (24)$$

$$\gamma_k = \sum_{\delta_1} e^{ik \cdot \delta_1}, \quad (25)$$

$\delta_1$  代表最近邻格位求和。从方程(21)和(22)解得

$$G_{k\sigma}(i\omega_n) = -(1 - \langle n_{\sigma} \rangle) \frac{i\omega_n + \eta_k}{\omega_n^2 + E_k^2}, \quad (26)$$

$$F_{k\sigma}(i\omega_n) = (1 - \langle n_{\sigma} \rangle) \frac{\Delta_k^{\dagger}}{\omega_n^2 + E_k^2}, \quad (27)$$

而

$$E_k = \sqrt{\eta_k^2 + \Delta_k^2}. \quad (28)$$

在现在的空穴载流子掺杂情况下,现在所得到的格林函数方程组与通常的作比较有实质性的修改。一方面由于算符  $a_{i\sigma}$  满足非线性对易关系使  $G$  的方程出现  $(1 - \langle n_{\sigma} \rangle)\delta_{ij}$  因子。还有重要的一面是,由于对易子  $[a_{i\sigma}, \tilde{H}]$  与  $[a_{i,-\sigma}^{\dagger}, \tilde{H}]$  出现一些非线性附加项,导致  $\tilde{\epsilon} \rightarrow (1 - \langle n_{\sigma} \rangle)\tilde{\epsilon}$ , 即对于  $a_{i\sigma}$  而言跳跃动能减少; 而  $\Delta_k = 4J\gamma_k \Delta_p \rightarrow (4J\gamma_k + 2\tilde{\epsilon})\Delta_p$ , 即最近邻  $O$  格位上两个自旋相反的  $a_{i\sigma}$  子的局域配对能隙  $\Delta_k$  增大。这两个因素都有利于坐标空间的配对态的形成和稳定。因此,本文从坐标空间两个自旋相反的  $a_{i\sigma}$  子最近邻局域配对图象考虑,比较合理解释强关联电子系统中超交换作用与跳跃能对最近邻局域配对的作用。并且在  $U \rightarrow \infty$  (即  $J \rightarrow 0$ ) 情况下上述配对机制都可以形成,似乎与电子-声子相互作用关系并不大。

下面再考虑化学势方程和能隙方程的结果。在空穴载流子情形,

$$\sum_{\sigma} \langle n_{i\sigma'} \rangle \approx 2\langle a_{i\sigma'}^{\dagger} a_{i\sigma'} \rangle = \delta. \quad (29)$$

从(26)和(27)式可以求得关于化学势和相变温度的方程组

$$1 - \frac{3}{2} \delta = \left(1 - \frac{1}{2} \delta\right) \frac{1}{N} \sum_k \tanh \frac{1}{2} \beta \eta_k, \quad (30)$$

$$1 = \left(1 - \frac{1}{2} \delta\right) \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{-ik \cdot \delta} (4J\gamma_k + 2\tilde{\epsilon})}{2E_k} \tanh \frac{1}{2} \beta E_k. \quad (31)$$

在  $T = T_c$  时,  $\Delta_p = 0$ , 可以引入无量纲能量变数和其它能量参数<sup>[13,14]</sup>

$$x = \frac{1}{3} \gamma_k \approx 1 - \frac{k^2 a^2}{3\pi^2}, \quad (32)$$

$$\beta' = 3 \left(1 - \frac{1}{2} \delta\right) \beta \tilde{\epsilon}, \quad (33)$$

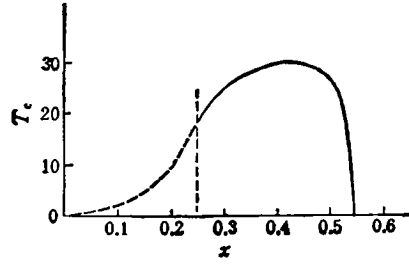
$$\tilde{\mu} = \mu' / 3 \left(1 - \frac{1}{2} \delta\right) \tilde{\epsilon}. \quad (34)$$

将(30)式的求和变成积分, 此时有正确的积分结果

$$\tilde{\mu} = \frac{1}{\beta'} \ln [e^{\frac{\beta'}{2} \tilde{\mu}} - 1]. \quad (35)$$

而(31)式可以近似积分得到

$$\frac{4}{3} \frac{1}{2 - \delta} = \left(\frac{2J}{3\tilde{\epsilon}} + \frac{1}{3} \tilde{\mu}\right) \cdot \left[\ln(1 - \tilde{\mu}) - \ln \tilde{\mu} \cdot \tanh \frac{1}{2} \beta' \tilde{\mu}\right]. \quad (36)$$



从方程组 (35) 和 (36) 通过自洽方法可以得到  $T_c$ - $x$  曲线. 参考数据<sup>[10,11]</sup>, 选取参数值  $U_s = 5\text{eV}$ ,  $U_p = 7.2\text{eV}$ ,  $\Delta = 2.2\text{eV}$ ,  $t = 0.5\text{eV}$ , 得到  $T_c$ - $x$  曲线如图 3 所示. 显然它正是我们所希望的结果.

## 4 结 论

本文基于  $a_{i\sigma}$  表象, 从电荷涨落机制出发, 采用简并微扰论推导了双带 Hubbard 模型的超交换相互作用. 由此得到的格林函数运动方程组与通常的比较有了实质性的修正. 并且采用了坐标空间两个自旋相反的  $a_{i\sigma}$  子最近邻局域配对的图象. 由于  $a_{i\sigma}$  满足非线性对易关系, 使  $[a_{i\sigma}, \tilde{H}]$  出现新的非线性附加项目, 导致  $a_{i\sigma}$  子的跳跃动能减少, 而  $a_{i\sigma}$  子的配对能隙增加. 这些因素有利于  $a_{i\sigma}$  子最近邻局域配对的形成和稳定. 因而较合理解释强关联系统中超交换作用与跳跃动能对近邻局域配对的作用. 还发现, 在掺杂载流子情形下, 化学势非零并依赖于掺杂浓度  $\delta$ , 因此超导窗能够得到合理解释.

如上所述, 超导性质仅依赖于 O 格位的掺杂, 它与整个非掺杂 O 格位的基质无关. 在这方面含 Cu 与非含 Cu 氧化物超导体是类似的, 虽然它们的维数不同, 它们都存在共同的超导机制, 即电荷涨落导致坐标空间局域配对. 由于磁性仅依赖于被掺杂金属格位的基质, 因此对于含 Cu 氧化物反铁磁性来源于 Cu 上的 d 空穴. 而对于 P 型非含 Cu 氧化物存在带有 p-空穴的 Bi 离子, 它形成自旋单态因而不具有磁性.

- [1] J.G. Bednorz and K.A. Muller, *Z. Phys.*, **B64**(1986), 189.
- [2] S. Uchida, H. Takagi, K. Kitahara and S. Tanaka, *J. Appl. Phys.*, **26**(1987), L1.
- [3] R.J. Cava, R.S. Van Dover, B. Batlogg and E.A. Rietman, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 488.
- [4] M.K. Wu, J.R. Ashburn, C.J. Torng, P.H. Hor, R.L. Meng, L. Gao, Z.J. Huang, Y.Q. Wang and C.W. Chu, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 908.
- [5] P.W. Anderson, *Science*, **235**(1987), 1196.
- [6] W. Weber, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1371.
- [7] H. Kamimura, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **26**(1987), L627.
- [8] A. Alexandrov and J. Ranninger, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 1796.
- [9] A. Alexandrov and J. Ranninger, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 1164.
- [10] Y. Kuramoto and T. Watanabe, *Solid State Commun.*, **63**(1987), 821.
- [11] R.J. Cava *et al.*, *Nature*, **332**(1988), 814.
- [12] J.O. Sofo, A.A. Aligia and M.D. Nunez Regueiro, *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 6955.
- [13] Zhen-qing Yang and Fan-mei Kong, *Phys. Lett.*, **A154** (1991), 305.
- [14] Yu Chao-fan, Yang Zhen-qing and He Guo-zhu, *Commun. Theor. Phys.*, to be published.

## SUPERCONDUCTIVITY MECHANISM OF NON-CUPRATE SUPERCONDUCTORS

YU CHAO-FAN CHEN BIN<sup>1)</sup> HE GUO-ZHU

(Department of Physics, Nankai University, Tianjin 300071)

<sup>1)</sup>(Theoretical Physics Division, Nankai Institute of Mathematics, Tianjin 300071)

(Received 3 June 1993)

### ABSTRACT

Based on the singly occupied  $\alpha$ -picture and the mechanism of charge fluctuation, the effective Hamiltonian of two-band Hubbard model is derived by using the degeneracy perturbation theory for the non-cuprate compound  $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ . By considering the next neighbour pairing of two opposite spin holes in coordinate space, the Green's function equation of motion and superconductivity equation are obtained. Furthermore, how the superexchange interaction and the hopping energy affect the next neighbour pairing has been explained reasonably, and the superconductivity window is due to the Cooper pairing in coordinate space.

PACC: 7420