

# 混合配对态波函数方程的解\*

周世平 徐克西 牛金海 瞿 海

(上海大学物理系, 上海 201800)

(1998 年 2 月 16 日收到; 1998 年 4 月 27 日收到修改稿)

从群论分析角度, 在  $C_{4v}$  点群中, 讨论了高温超导混合配对态对称性问题. 考虑了层间载流子库仑关联而引起的格子正交畸变, 克服了以往的混合配对态分析中双相变点的困难. 对  $s+id$  混合波 Ginzburg-Landau 方程的求解, 给出了波函数的特征; 而对外磁场下临界电流行为的分析, 进一步揭示了“本征钉扎”的物理实质; 从而对外场下高温超导体临界电流的反常行为及电阻-温度曲线展宽现象给出一种理解.

PACC: 7460E; 7460J; 7420

## 1 引 言

弄清高温超导配对态对称性问题, 对深刻认识高温超导电性有着积极的促进作用; 相应研究引起了凝聚态领域学者的关注. 从不同侧面的考虑, 人们提出了自己的观点. 如基于“层间耦合”与“电荷转移”模型的分析给出了各向异性、广义  $s$  波配对的结论<sup>[1,2]</sup>. 而基于自旋波动媒介, 反铁磁关联的分析原则上支持了  $d$  波对称性的提法<sup>[3]</sup>. 也有人建议用  $s-d$  混合配对态对称性来分析问题<sup>[4-6]</sup>. 尽管单一波配对观点分别得到一些实验结果的支持<sup>[7-10]</sup>, 我们认为, 从总体上并非局限于某些实验现象,  $s-d$  混合配对态对称性则更具竞争性. 如 Li 等<sup>[14]</sup>, 在单带 Hubbard 模型下, 分析了混合配对态的 NMR 行为; 得出总体上, 高温超导体中  $s-d$  混合配对态为基态较单分量  $d$  波态更有利的结论. 再如, 我们前一段的工作表明,  $s+id$  混合配对态的考虑可以对高温超导隧道行为及旋光特征有较好地理解<sup>[12]</sup>. 本文从群论分析角度, 进一步阐明混合态对称性的存在性; 并基于  $s-d$  混合波的考虑, 通过严格求解波函数方程给出其空间分布特征; 进而解释一些反常实验现象, 如外磁场下, 高温超导电阻-温度曲线展宽现象及临界电流  $j_c(T, H)$  的行为; 试图进一步明确相应“本征钉扎”的物理图像.

## 2 混合配对态

明确起见, 于此考虑的  $s$  波和  $d$  波分量分属四方点群  $C_{4v}$  的  $A_1$  类和  $B_1$  表象; 动量空间中, 相应的能隙函数分别为  $(\cos k_x a + \cos k_y a)$  和  $(\cos k_x a - \cos k_y a)$ <sup>[13]</sup>. 进一步讨论之前,

\* 国家自然科学基金(批准号: 69671013)和上海市教育委员会曙光计划基金资助的课题.

还需说明这种前提的可信度,即应明确  $s$ - $d$  波能共存吗,在四方晶格中展开序参量合适否.

首先,  $s$ - $d$  波态共存并不破坏原规范不变性. 因为:

**引理 1**  $C_{4v}$  点群中, 集合  $A_1$  ( $B_1$ ) 中的规范不变项, 在  $B_1$  ( $A_1$ ) 中亦是规范的.

**证:** 一维表象中, 任意配对态相应的自由能表示式应取类似表示. 记  $\psi_s \subset A_1$ ,  $\psi_d \subset B_1$ , 单一  $s/d$  波自由能密度为

$$f_i = \alpha_i(T - T_i) |\Psi_i|^2 + \beta_i |\Psi_i|^4 + k_i^{xy} (|\Pi_x \Psi_i|^2 + |\Pi_y \Psi_i|^2) + k_i^z (|\Pi_x \Psi_i|^2), \quad (1)$$

其中动量算符  $\Pi = j\hbar\nabla - 2e\mathbf{A}$ . 由集合  $A_1$  ( $B_1$ ) 的性质,  $C_{4v}$  中旋转操作对 (1) 式右端第一、二项是恒等变换. 第三项为波函数梯度模的平方项; 相对  $C_{4v}$  相空间中旋转  $\pi/2$  的映射, 它是不变的. 若存在  $s$ - $d$  波混合配对态, 总自由能密度应为<sup>[14]</sup>

$$f \equiv f_s + f_d + f_{sd} = f_s + f_d + \beta_{sd} (|\Psi_s|^2 |\Psi_d|^2) + \beta_p (\Psi_s^{*2} \Psi_d^2 + \Psi_d^{*2} \Psi_s^2) + k_{sd} (\Pi_x \Psi_s \Pi_x^* \Psi_d^* - \Pi_y \Psi_s \Pi_y^* \Psi_d^* + \text{c. c.}). \quad (2)$$

仿上, 不难证其中的混合项满足规范不变性.

$B_1$  和  $A_1$  表象可共存还得益于下述事实. 正交点群  $C_{2v}$  可由  $C_{4v}$  来生成: 只须剔除  $C_{4v}$  中绕  $c$  轴的  $90^\circ$  旋转和关于  $x = \pm y$  的反射映射. 而这些变换正是针对  $d_{x^2-y^2}$  波的非恒等变换的集合. 于是, 经  $C_{2v}$  的任意操作,  $C_{4v}$  中  $B_1$  表象之元  $d$  波态是守恒的; 意味着它变得如同  $A_1$  表象—— $s$  波标志性表象. 因此, 仅对称性意义而言,  $C_{4v}$  中的  $d_{x^2-y^2}$  波态可理解为正交晶格中的 (各向异性)  $s$  波态. 然而, 保对称性操作须不改变能隙中固有的波节分布结构; 兼顾波函数对称性及能隙色散关系的要求, 一种自然的推测是: 高温超导体中超导态  $s$ - $d$  波是共存的. 直观上, 混合态能隙函数可写为  $\Delta(\mathbf{k}, T) = \Delta_s(T) (\cos \mathbf{k}_x a + \cos \mathbf{k}_y a) f_s(\mathbf{k}_z) + \Delta_d(T) (\cos \mathbf{k}_x a - \cos \mathbf{k}_y a) f_d(\mathbf{k}_z)$ ; 考虑到  $U(1)$  之规范性, 可令  $f_s(\mathbf{k}_z)$  为实型函数. 而对零自旋单态  $f_s(\mathbf{k}_z)$  是  $\mathbf{k}_z$  的偶函数, 不妨取作常量. 为使  $\forall \mathbf{k}, \Delta(\mathbf{k})$  无节点,  $f_d(\mathbf{k}_z)$  须为虚量. 相应地, 称这样的混合态为  $s \pm i d$  波态.

诚然,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  ( $x < 0.15$ ) 超导体属正交钙矿结构, 沿  $a, b$  轴存在差异; 可是这种差异相对于波函数的相干长度则是甚微的, 即相应波函数本征态矢近乎是兼并的. 此情形, 将系统正常态对称群表述为四方的, 同时有正交的微扰似更合适. 事实上,  $\text{Cu}$  氧化物超导电性主要与几近四方的  $\text{CuO}_2$  行为相关也反映出四方相对称性是可取的. 考虑到高温超导电性并非仅呈现于正交格子中, 不失一般性, 在四方点群中讨论问题将更合适.

最后, 从 (4) 式不难得知, 它对应着两个显相变过程, 若  $T_s, T_d$  可分辨时. 然而, 尚未见有足够说服力的实验结果给以证实. 显然, 这是混合  $A_1$ - $B_1$  表象提法要明确的问题; 因为针对半满填充情形,  $s$  波与  $d$  波是非严格兼并的. 该问题可通过考虑格子的正交畸变来缓和. 鉴于  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  的准二维特性, 正交畸变较弱, 不妨视为对  $C_{4v}$  的微扰; 通过在  $C_{4v}$  自由能密度表达式 (4) 中引入小量等效场行为来表述:

$$f \equiv f_s + f_d + f_{sd} + \gamma (\Psi_s^* \Psi_d + \Psi_d^* \Psi_s). \quad (3)$$

这里  $\gamma(T) \geq 0$  是对晶格偏离四方格子的度量.  $f$  取极小的温度对应  $s$ - $d$  混合态的临界温

度  $T_c$ . 具体而言, 该混合态  $T_c$  可得如下: 对角化(5)式的二次幂项:  $\alpha_s(T - T_s)|\Psi_s|^2 + \alpha_d(T - T_d)|\Psi_d|^2 + \gamma(\Psi_s^* \Psi_d + \Psi_d^* \Psi_s)$ , 并求其最小系数, 记为  $\alpha^\times(T)$ ; 则  $T_c = \{T | \alpha^\times(T) = 0\}$ .

应当指出, 对(4)式给出的  $f$ , 仅当  $T_d > T_s$  时, 二次项系数本征值为最低. 反映出, 随温度降低波函数对称性只能是  $d$  波态  $\rightarrow s \pm id$  态的转变; 如此, 可望降低系统自由能. 因为  $d_{x^2-y^2}$  能隙函数是有节的, 而后者 ( $s \pm id$ ) 是无节的. 相反地, 对  $s$  波态  $\rightarrow s \pm id$  态, 从能量角度则未必是有利的.

### 3 混合波 Ginzburg-Landau 方程及周期边界条件

#### 3.1 混合波波函数方程组

于上节, 我们从对称性的角度分析了  $d$  波态与  $s$  波态的相容性及高温超导体中混合  $s \pm id$  波态的可能性与合理性. 虽然我们可依据变分原理, 从混合波自由能表示式演化出唯象的 G-L 方程, 并进一步得到一些结论<sup>[12]</sup>; 欲细致深入研究波函数于空间随外磁场和温度的变化, 须将唯象的 G-L 方程参量化. 参见文献[15], 从 Gor'kov 方程出发, 利用算子算符进行迭代求解(迭代序参量  $\Delta$  至三阶), 并与唯象的 G-L 方程类比; 再用变量替换:  $r/\xi_0 \rightarrow r$ ,  $\psi/\psi_0 \rightarrow \psi$  及  $A/A_0 \rightarrow A$  ( $\xi_0 = \sqrt{\alpha v_F}/2$ ,  $\psi_0 = \sqrt{4/3} \alpha$ ,  $A_0 = \Phi_0/2\pi \xi_0$ ), 得无量纲的 G-L 方程<sup>1)</sup>,

$$[2\Pi^2 - 2\ln(T_s/T)]\psi_s + i(\Pi_y^2 - \Pi_x^2)\psi_d + \frac{3}{4}|\psi_s|^2\psi_s + \frac{8}{3}|\psi_d|^2\psi_s - \frac{2}{3}\psi_d^2\psi_s^* = 0,$$

$$[2\Pi^2 - \ln(T_d/T)]\psi_d + i(\Pi_y^2 - \Pi_x^2)\psi_s + \frac{1}{2}|\psi_d|^2\psi_d + \frac{8}{3}|\psi_s|^2\psi_d - \frac{2}{3}\psi_s^2\psi_d^* = 0.$$

(G-L I)

$$- [2\psi_s^* \Pi_x \psi_s + \psi_d^* \Pi_x \psi_d - i(\psi_s^* \Pi_x \psi_d + \psi_d^* \Pi_x \psi_s) + \text{c. c.}] + 2k^2[\nabla \times \mathbf{B}]_x = 0,$$

$$- [2\psi_s^* \Pi_y \psi_s + \psi_d^* \Pi_y \psi_d + i(\psi_s^* \Pi_y \psi_d + \psi_d^* \Pi_y \psi_s) + \text{c. c.}] + 2k^2[\nabla \times \mathbf{B}]_y = 0,$$

(G-L II)

其中

$$\alpha_s = -2\ln(T_s/T)\lambda_d, \quad \alpha_d = -\ln(T_d/T)\lambda_d,$$

$$\beta_1 = \alpha\lambda_d, \quad \beta_2 = \frac{3}{8}\alpha\lambda_d, \quad \beta_3 = 2\alpha\lambda_d, \quad \beta_4 = -\frac{1}{2}\alpha\lambda_d,$$

$$\gamma_s = \frac{1}{2}\alpha\lambda_d v_f^2, \quad \gamma_d = \frac{1}{4}\alpha\lambda_d v_f^2, \quad \gamma_v = i\frac{1}{4}\alpha\lambda_d v_f^2, \quad (4)$$

$$\alpha = [7\zeta(3)/8][1/(\pi T)^2], \quad \lambda_d = (1/2)N(0)V_d.$$

1) 推导中假定:  $V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = V_s + V_d(\mathbf{k}_x^2 - \mathbf{k}_y^2)(\mathbf{k}_x'^2 - \mathbf{k}_y'^2)$  及  $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{k}) = \psi_s(\mathbf{R}) + i\psi_d(\mathbf{R})(\mathbf{k}_x^2 - \mathbf{k}_y^2)$ ,  $s$  波沟道与  $d$  波沟道作用势皆为吸引势. 从而避免了 Yong Ren 等(见文献[16])在视  $s$  波沟道作用势为排斥势的前提下而引出的相应  $s$  波分量的 G-L 方程的解的物理意义欠明确的困难(他们人为地认定  $s$  波为小量, 而采用 Pade 近似来处理之).

$$N(0) V_s \ln \frac{2 e^{\gamma} \omega_D}{\pi T_s} = 1, \quad N(0) V_d \ln \frac{2 e^{\gamma} \omega_D}{\pi T_d} = \frac{1}{2}.$$

相应地,超流密度可写为

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_s &= \frac{1}{2 \mu_0} (\nabla \times \mathbf{B}) \\ &= [2 \psi_s^* \Pi \psi_s + \psi_d^* \Pi \psi_d - i(\psi_s^* \Pi_x \psi_d + \psi_d^* \Pi_x \psi_s) \mathbf{e}_x \\ &\quad + i(\psi_s^* \Pi_y \psi_d + \psi_d^* \Pi_y \psi_s) \mathbf{e}_y + \text{c. c.}]. \end{aligned} \quad (5)$$

由方程(G-L I, II)不难知,对应无外场情形,当  $T_d > T > T_s$  时,  $\psi_s = 0$ ,  $|\psi_d|^2 = 4/3 \alpha \ln(T_d/T)$ ;相应地,  $F_d = -2/3 \alpha \ln^2(T_d/T)$ .类似地,当  $T_s > T > T_d$  时,  $\psi_d = 0$ ,  $|\psi_s|^2 = 1/\alpha \ln(T_s/T)$ ;相应地,  $F_s = -1/\alpha \ln^2(T_s/T)$ .当温度  $T < \min(T_s, T_d)$  时,一般而言,  $s$  波与  $d$  波分量可望以  $s+d$ , 或  $s \pm id$  的形式在高温超导体中共存.但通过比较各自的自由能,我们发现  $s+d$  的形态是不稳定的.对  $s \pm id$  态,我们有

$$\begin{aligned} |\psi_d|^2 &= 4/\alpha \ln(T_d/T_s); \quad |\psi_s|^2 = 1/\alpha \ln(T_s^3/T_d^2 T); \\ F_{s \pm id} &= -1/\alpha [3 \ln^2(T_s/T) - 4 \ln(T_s/T) \ln(T_d/T) + 2 \ln^2(T_d/T)], \end{aligned} \quad (6)$$

由此,当且仅当  $T_d > T_s$ ,  $T < T^* \equiv T_s^3/T_d^2$  时,  $s \pm id$  波态较单分量态更稳定,因为它处于相对较低的能态.该结论与第二节的定性分析是一致的.图 1 给出建立在上述近似理论的相图.

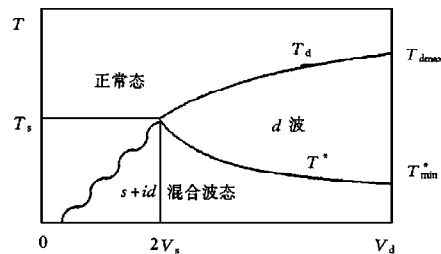


图 1  $s$ - $d$  混合波对称性下的相图

### 3.2 周期性边界条件及松弛迭代格式

我们限于讨论一均匀外磁场中超导薄膜的输运问题,磁场的方向垂直于膜面.这是一个两维问题,序参量及磁场只在薄膜平面内有变化.我们能够证明,该问题的稳定解将具有周期性.如下,我们感兴趣是(G-L I, II)在平面内的周期解.给出周期函数的定义:设任意给定的两个矢量  $\mathbf{t}_1$  和  $\mathbf{t}_2 \in \mathbf{R}^2$ , 称函数  $f(x, y)$  关于  $\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2$  确定的元胞上是周期的;若对所有的  $\mathbf{x} = (x, y) \in \mathbf{R}^2$ ,  $f(\mathbf{x} + \mathbf{t}_k) = f(\mathbf{x})$ , 其中  $k=1, 2$ . 于是有

**引理 2** 可观测量:超导电子密度  $\propto |\psi|^2$ , 磁感强度  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ , 以及超流密度  $\mathbf{j}_s = \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}$  是周期的,如果  $\psi$  和  $\mathbf{A}$  满足

$$\psi(\mathbf{x} + \mathbf{t}_k) = \psi(\mathbf{x}) \exp(i g_{k0}(\mathbf{x}))$$

和

$$\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{t}_k) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) + (\nabla g_{k0}(\mathbf{x})),$$

其中  $g_{k0}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}_k - 1/2 \langle \mathbf{B} \rangle [(1+\theta) \mathbf{t}_{ky} x - (1-\theta) \mathbf{t}_{kx} y]$ ,  $k=1, 2$ . 这里  $\theta$ ,  $\mathbf{C}_1$  和  $\mathbf{C}_2$  为任意常数.  $\langle \mathbf{B} \rangle$  为“元胞”  $\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2$  上的平均磁感强度.磁通量子化要求  $\langle \mathbf{B} \rangle = 2 n \pi / |\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2|$ , 其中整数  $n$  代表单位格胞上磁通涡旋数.

不失一般性,取  $\mathbf{t}_1 = (\alpha L, \beta L)^T$  指向  $x$ - $y$  平面的右半边,即  $L > 0$ ,  $\alpha > 0$ ,  $\beta$  为实数;而

$t_2 = (0, L)^T$  沿  $y$  轴的正方向; 选  $\theta = -1$ ,  $C_1 = 0$  和  $C_2 = 0^{1)}$  并进一步考虑四方元胞, 取  $\alpha = 1$ ,  $\beta = 0$  得到相应的周期边界条件

$$\begin{aligned} \psi_s(L_x, y) &= \psi_s(0, y) \exp(iy\Phi/L_y) & \psi_s(x, L_y) &= \psi_s(x, 0), \\ \psi_d(L_x, y) &= \psi_d(0, y) \exp(iy\Phi/L_y) & \psi_d(x, L_y) &= \psi_d(x, 0), \\ A_x(L_x, y) &= A_x(0, y) & A_x(x, L_y) &= A_x(x, 0), \\ A_y(L_x, y) &= A_y(0, y) + \Phi/L_y & A_y(x, L_y) &= A_y(x, 0). \end{aligned} \quad (7)$$

有必要指出, 在导出上述周期边界条件时, 并无需构造一特定的规范, 如令  $A_x$  与  $x$  无关<sup>[17]</sup>. 事实上, 容易知该约定只是一种特例; 不免有失一般性之嫌. 并且, 它还给算法的编程实现带来麻烦.

松弛迭代法可以看作是赛得尔迭代法的加速. 其基本思想是通过调整松弛因子使迭代矩阵谱半径值较小, 以加快收敛速度<sup>[18]</sup>. 针对本例, 取  $\Psi_s$ ,  $\Psi_s^*$ ,  $\Psi_d$ ,  $\Psi_d^*$ ,  $A_x$  和  $A_y$  为独立变量(下简称为  $x_k$ ,  $k=1, 2, 3, 4$ ), 迭代格式如下:

$$\begin{aligned} \psi_s^{(n+1)} &= \psi_s^{(n)} - \epsilon_1 \frac{\delta f}{\delta \psi_s^*} \Big|^{(n)}, \\ \psi_d^{(n+1)} &= \psi_d^{(n)} - \epsilon_2 \frac{\delta f}{\delta \psi_d^*} \Big|^{(n)}, \\ A_x^{(n+1)} &= A_x^{(n)} - \epsilon_3 \frac{\delta f}{\delta A_x} \Big|^{(n)}, \\ A_y^{(n+1)} &= A_y^{(n)} - \epsilon_4 \frac{\delta f}{\delta A_y} \Big|^{(n)}. \end{aligned} \quad (8)$$

这里松弛因子  $\epsilon_I$  为正数,  $n$  为迭代次数. 数值实验显示, 如果我们选择一个合适的初态, 迭代过程将一致地收敛于问题的真解. 迭代过程中, 我们用  $\sum_{k=1}^4 \sum_{i,j=1}^N \partial f / \partial x_k < \epsilon$  (通常取作  $10^{-4}$ ,  $N=80$ ) 作为迭代结束的判据, 以使数值解更接近真解. 这里对  $(i, j)$  的求和在整区域  $|t_1 \times t_2|$  网格点进行.

#### 4 关于 $\rho(T; H)$ 展宽现象

早在 1987 年, Iye 等<sup>[19]</sup> 就观测到外磁场中,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  单晶的电阻转变温区展宽的现象. Tinkham<sup>[20]</sup> 把这一现象理解为磁通流的结果. 然而该问题并未得到最终解决; 直流磁化率测试表明这是个与热力学现象相关的, 单纯的磁通流模型则是无法满意的<sup>[21]</sup>. 这里我们尝试用混合波配对观点对该现象作解释.

我们从 G-L 自由能入手, 导出上临界场  $H_{c2}$  与相变温度的关系. 由于临界温度附近波函数幅度较小, 略去自由能中关于  $|\psi|^4$  等高次项,  $f$  可写作

$$f = \alpha_s |\psi_s|^2 + \alpha_d |\psi_d|^2 + \gamma_s |\Pi^* \psi_s|^2 + \gamma_d |\Pi^* \psi_d|^2$$

1)  $C_1, C_2$  取为零是为了保证对于所有的涡旋格心, 波函数  $\psi$  的相位一致.

$$+ \gamma_v (\Pi_x^* \psi_s \Pi_x \psi_d^* - \Pi_y \psi_s \Pi_y \psi_d^* + \text{c. c.}), \quad (9)$$

定义产生和消灭一个粒子数的算符,  $p_+ = -(l/\sqrt{2})(\Pi_x + i\Pi_y)$ ,  $p_- = -(l/\sqrt{2})(\Pi_x - i\Pi_y)$ , 这里  $l^2 = \hbar c/2eH$ . 进而令自由能  $\int d^3x f(\mathbf{H}, T)$  关于  $\Psi_s^*$ ,  $\Psi_d^*$  的一阶变分为零, 得

$$\begin{aligned} \alpha_s' l^2 (T - T_s) \psi_s + \gamma_s (2p_+ p_- + 1) \psi_s + \gamma_v (p_+^2 + p_-^2) \psi_d &= 0, \\ \alpha_d' l^2 (T - T_d) \psi_d + \gamma_d (2p_+ p_- + 1) \psi_d + \gamma_v (p_+^2 + p_-^2) \psi_s &= 0, \end{aligned} \quad (10)$$

其中  $\alpha_s' (T - T_s) \equiv \alpha_s$ ,  $\alpha_d' (T - T_d) \equiv \alpha_d$ . 从而知, 只要  $\gamma_v \neq 0$ ,  $d$  波态与  $s$  波态间将存在耦合. 计及  $\gamma_v$  的一阶效应, 即  $|0\rangle_s$  态仅跃迁至  $|2\rangle_d$  态, 同时  $|0\rangle_d \rightarrow |2\rangle_s$ . 占据表象中, 可方便地求得方程(12)的两个最低本征值; 令其为零得

$$[\alpha_d' l^2 (T - T_d) + \gamma_d][\alpha_s' l^2 (T - T_s) + 5\gamma_s] = \gamma_v^2. \quad (11)$$

由此, 当  $T \rightarrow T_c$ , 上临界场可写作

$$H_{c2} = \frac{\alpha_d' \hbar c}{2e\gamma_d} (T_d - T) = s(T_d - T), \quad (12a)$$

或

$$H_{c2} = \frac{\alpha_s' \hbar c}{10e\gamma_s} (T_s - T) = s_z(T_s - T). \quad (12b)$$

于是,  $H_{c2}(T)$  的特征主要取决于(14)式系数的大小.  $s_z$  和  $s$  可以从第三节中 Gor'kov 方程给出的系数来确定<sup>[26]</sup>,

$$s_z = \frac{\alpha_s' \hbar c}{10\gamma_s e} \cdot \frac{k_B^2}{\hbar^2 c}, \quad s = \frac{\alpha_d' \hbar c}{2\gamma_d e} \cdot \frac{k_B^2}{\hbar^2 c}. \quad (13)$$

考虑到  $T_d > T_s$ , 当  $H$  沿  $H_{c2}(T)$  趋于零时 ( $T_c$  附近), 混合波态特征主要反映了  $d$  波态的行为, 并不表现出  $s$  波分量的存在. 如果定义上临界场对应“零电阻起始点”下的场, 则依据(14)式和  $T^* \equiv T_s^3/T_d^2$ , 我们得到相转变温度与外磁场的关系:

$$\begin{aligned} T^*(H) &= \frac{T_s(H)^3}{T_d(H)^2} \\ &= \frac{(T_s(0) - H/s_z)^3}{(T_d(0) - H/s)^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

图 2 给出  $H_{c2}(T) - T^*$  曲线图, 同时给出了实测数据; 计算中取  $v_F = 0.53 \times 10^5$  m/s,  $T_d(0) = 92.5$ , 及  $T_s(0) = 91.57$ <sup>[22]</sup>, 相应地,  $s_z = 1.5432$  T/K,  $s = 7.7167$  T/K. 更明确起见, 记  $\Delta T_{\text{theory}}(H) = T_d(H) - T^*(H)$ , 这里  $T_d(H)$  为超导起始转变温度,  $T^*(H)$  为最高零电阻温度, 我们将  $\Delta T(H)$  值列于表 1; 同时给出 Doria 等的实验结

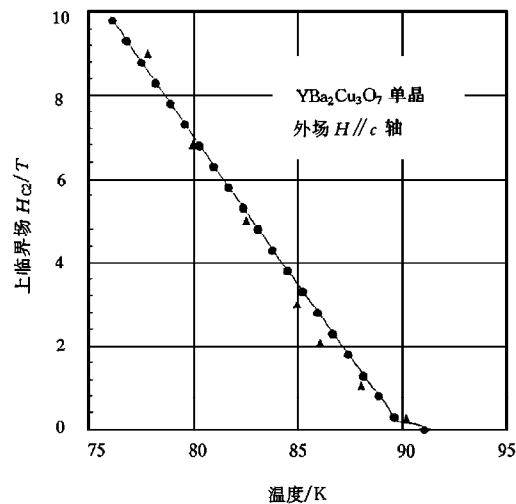


图 2  $s+id$  认可下,  $H_{c2}$  与温度的关系曲线.  $\Delta$  对应实验数据 (见 *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1991), 1160)

果.从中可以看出理论分析与实验结果呈良好的一致性.我们还考虑了外磁场平行与  $a$ - $b$  面的情形,相应计算结果同样对实验数据有很好地吻合;一定程度上反映出此的分析的可取性.

表 1 相转变温度与外磁场的关系;  $H$  沿薄膜  $c$  轴方向

$H(k \frac{1000}{4\pi} A/m)$	0.0	3.0	10.0	20.0	40.0	60.0	90.0
$T^*(H)(K)$	89.7380	89.2427	88.0931	86.4655	83.2623	80.1279	75.5557
$T_d(H)(K)$	92.5000	92.4611	92.3704	92.2408	91.9816	91.7225	91.3336
$\Delta T_{\text{theory}}(H)(K)$	2.7621	3.2184	4.2773	5.7752	8.7193	11.5944	15.7784
$\Delta T_{\text{exp}}(H)(K)^*$	2.5	3.6	5.0	6.5	8.0	11.0	14.0

## 5 高温超导体临界电流与混合配对态

于本节我们将依据 2.3 小节导出的模型着重讨论外磁场下高温超导体中临界电流的特征.首先分析  $d$  波态域(即选温度  $T \in (T_s, T_d)$ , 参见图 1)超导体波函数的空间分布特征,并通过与单纯  $d$  波态模型下的结果<sup>[23]</sup>相比较,以从一个侧面检验本文算法的收敛性及可行性.便于比较,取  $T_s = 94$  K,  $T_d = 95$  K,  $\kappa = \lambda/\xi = 5$ , 小磁场条件( $H = 0.5$  T, 相应地,  $L_x = L_y = 40$ ), 经求解方程(9)和(10)所得  $d$  和  $s$  分量波函数的空间分布示于图 3 和

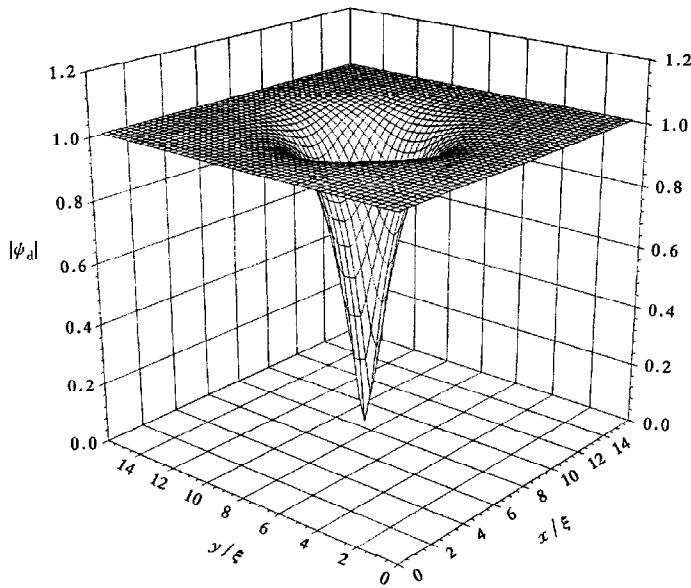


图 3  $d$  波分量波函数幅值空间分布

图 4.与纯  $d$  波态的分析完全一致;从而明确了所建立的算法的可行性.有趣的是,计算结果显示  $d$  波态波函数幅度远远大于  $s$  波态的,与人们倾向接受的及我们以往的分析所指

出的  $d$  波占优提法相吻合。

让我们来讨论混合波前提下, 超导波函数, 临界电流密度随温度及磁场的变化<sup>1)</sup>. 图 5 所示的结果显示, 在较低磁场下,  $d$  波与  $s$  波分量波函数幅值随磁场增加而迅速下降(进

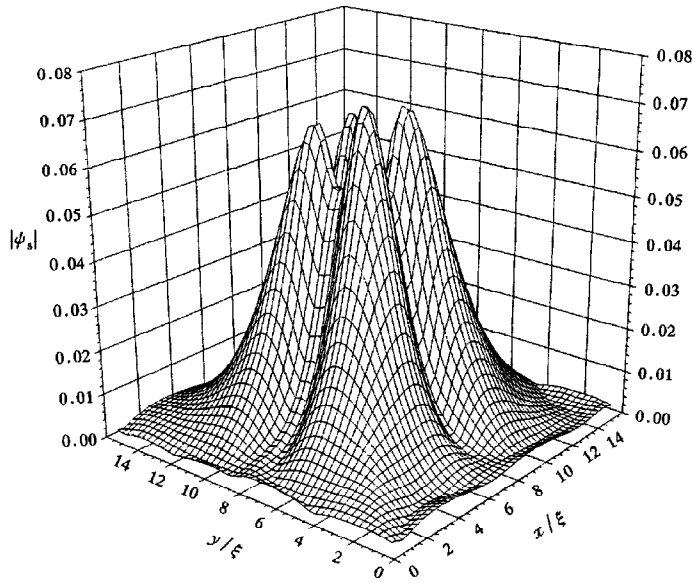


图 4  $s$  波分量波函数幅值空间分布

入混合态); 表明相应的下临界场  $H_{c1}$  值较小这一事实. 进一步提高磁场强度,  $s$  分量很快地降为一小量; 而  $d$  分量的减小却缓慢得多. 对此可结合图 3, 4 来理解. 由于两者不同的空间分布形态, 使得不同沟道的载流子受到磁场散射作用的程度有别; 相对而言,  $d$  波分量分布函数具较小的散射截面; 从而受磁场散射而下降的过程要缓慢些. 于是, 对磁场响应偏灵敏的  $s$  波分量的存在及通过它与  $d$  波分量的耦合过程, 则影响着混合配对态超导体的动力学行为; 尤其是一些反映反常现象的精细结构.

利用区域  $\Omega$  上已知的波函数及

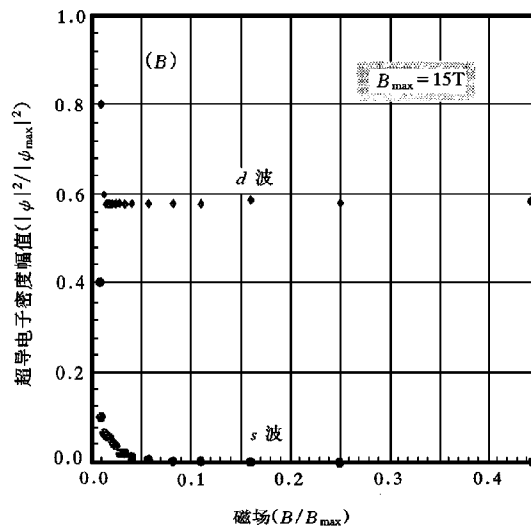


图 5 波函数幅值随磁场变化曲线

1) 操作中, 假定磁通涡旋元胞中操作中,  $\Omega = |\mathbf{L}_x \times \mathbf{L}_y|$  磁通量恒定, 通过调整  $\mathbf{L}_x \mathbf{L}_y$  达到变动外磁场的目的.



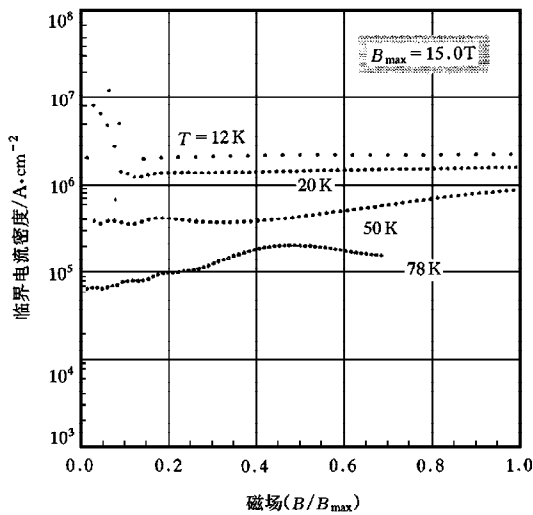


图 6 不同温度下高温超导体临界电流密度随外磁场变化曲线

起超导基态本征值的变化(见第四节的讨论),可望通过调节两者的分布形态,促成高场下这个体系依然能处于能量较低的基态和可观的超导载流子的存在.它们与磁场的交换作用而形成涡旋流,以屏蔽部分磁场;进而形成动态“钉扎中心”.事实上,参照 Doria 等<sup>[25]</sup>的做法,不难证明混合配对态前提下,相应波函数诱发的微观场随外磁场是非单调的;进而从本质上说明了  $J_c(\mathbf{H})$  的非单调性.我们注意到,不同温度下的  $J_c(\mathbf{H}; T)$  的精细结构尚存在一些差异;如较高温度 77 K 下,  $J_c(\mathbf{H}; T)$  非单调行为较为显现.这或许与磁通蠕动及超导涨落有关;一定程度反映着超导基态波函数的温度特征.

## 6 结 论

本文的分析进一步明确了高温超导体混合配对态对称性的提法;并指出  $d$  波占优  $s + id$  波态的可取性.对  $s + id$  混合波 Ginzburg-Landau 方程的求解,给出了波函数的特征;而对外磁场下,高温超导体电阻-温度曲线的展宽及临界电流行为的分析,进一步揭示了“本征钉扎”的物理实质.

- [1] P. W. Anderson *et al.*, *Science*, **261**(1993), 337.
- [2] V. Z. Kresin and S. A. Wolf. *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 9012.
- [3] D. I. Khomskii *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **75**(1995), 1384.
- [4] M. Sigrist, T. M. Rice. *Phys. Rev. Lett.*, **63**(1989), 1727.
- [5] D. S. Rohksar, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993), 493.
- [6] R. P. Robertazzi *et al.*, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 8456.
- [7] P. Chaudhar and S. Y. Lin. *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 1084.

1) 利用计算而得微观场  $\mathbf{h}$ , 可估算磁化强度  $\mathbf{M} = \mathbf{H} - \mathbf{h}$ ; 进一步考虑  $\Delta \mathbf{M} = \mathbf{M}^+ - \mathbf{M}^-$  (其中  $\mathbf{M}^+$ ,  $\mathbf{M}^-$  分别表示外磁场从高于、低于某值时的磁化强度), 并参考 Kim-Anderson 模型来估算临界电流.

辅助矢位的分布函数, 参照(7)式, 可进一步讨论临界电流密度的行为<sup>1)</sup>. 如图 6, 给出不同温度下,  $J_c(\mathbf{H}; T)$  的曲线. 这组计算曲线与文献[24]的实测结果吻合得非常好; 特别地, 它反映出高温超导体临界电流随外磁场非单调特征及高场下仍维持较高值等实验现象. 对这些实验现象的解释, 一般认为是所谓“本征钉扎”引起的, 而高温超导体的层状结构和短  $G_L$  相干长度则有益于诱发钉扎中心. 于此, 我们可进一步明确, 这种“本征钉扎”是与超导基态序参量的特殊分布相关的. 多分量混合  $s \pm id$  配对态前提下,  $s$  波态与  $d$  波态间的耦合, 引

- [8] C. C. Tsuei *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **73**(1994), 593.
- [9] A. G. Sum *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 2267.
- [10] P. A. Rosenthal *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **63**(1993), 1984.
- [11] F. C. Zhang and T. M. Rice. *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 3759.
- [12] Zhou Shi-ping *et al.*, To appear in *Acta Physica Sinica*, the March and April issues, 1998, p. 807 (in Chinese).
- [13] M. Tinkham. *Group Theory and Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1964); J. P. Elliott and P. G. Gawber. *Symmetry in Physics* (Oxford University Press, New York, 1984), p. 43.
- [14] Q. P. Li *et al.*, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 437.
- [15] Cai Jian-hua *et al.*, *The Theory of Green's Functions in the Quantum Statistics* (The Science Press, Beijing, 1982), p. 336 (in Chinese).
- [16] Y. Ren, Ji-Hai Xu and C. S. Ting. *Phys. Rev. Lett.*, **74**(1995), 3680.
- [17] M. M. Doria, J. E. Gubernatic and D. Rainer. *Phys. Rev.*, **B41**(1991), 6335.
- [18] Guo Ben-Yu. *The difference algorithm for the partial differential equations* (The Science Press, Beijing, 1988), p. 43 (in Chinese).
- [19] Y. Iye *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **26**(1987), L1057.
- [20] M. Tinkham. *Phys. Rev. Lett.*, **61**(1988), 1658.
- [21] U. Welp *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 1908.
- [22] R. Joynt, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 4271.
- [23] J. H. Xu *et al.*, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 2991.
- [24] H. Kupfer *et al.*, *Cryogenics*, **28**(1990), 650.
- [25] M. M. Doria, J. E. Gubernatis and D. Rainer. *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 9537.
- [26] Niu Jin-Hai, M. S. Thesis. Shanghai University of Science and Technology, 1997 (in Chinese).

## SOLUTIONS FOR THE WAVE FUNCTIONS OF MIXED PAIRING SYMMETRY SUPERCONDUCTORS \*

ZHOU SHI-PING XU KE-XI NIU JIN-HAI QU HAI

(Physics Department, Shanghai University of Science and Technology Jiading, Shanghai 201800)

(Received 16 February 1998; revised manuscript received 27 April 1998)

### ABSTRACT

We study the pairing symmetry in high-temperature superconductors from the point of view of group theory analysis in the framework of Ginzburg-Landau model. By considering an orthorhombic distortion from  $C_{4v}$  point group because of the correlation of intralayers, the two apparent transitions needed in earlier work on mixed  $s$  and  $d$  state have been removed. The structure of a single vortex is presented by solving the Ginzburg-Landau wave function equations of the mixed  $s \pm i d_x^2 - y^2$  state. The analysis of the magnetic field dependence of the transport behaviors including the critical current and the  $R$ - $T$  curve expansion reveals the origin of the so-called "eigen-pinning effect" and offers a good interpretation of the experimental observations.

**PACC:** 7460E; 7460J; 7420

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 69671013).