

高温超导体混合态磁通涡旋结构*

瞿 海 周世平

(上海大学物理系, 上海 201800)

(1998 年 4 月 24 日收到)

利用紧束缚模型, 对 s - d 混合波的存在性作了讨论. 在 Ginzburg-Landau 理论框架下, 严格求解了高温超导体混合配对态磁通涡旋结构. 结果表明, 其磁通涡旋的分布与单个涡旋的结构密切相关. 在低温下, 由于序参量 s 波成分的存在及它与 d 波分量的耦合, 引起局域磁场和 d 波分量的各向异性, 使磁通涡旋呈斜格子分布, 而在温度近于转变温度时, 各向异性消失, 涡旋态转化为三角格子. 这与 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 样品的小角度中子散射实验的结果相符合.

PACC: 7460E; 7460J; 7420

1 引 言

弄清高温超导体配对态对称性问题对深刻理解高温超导电性有积极的促进作用. 近年来, 人们从不同的侧面提出自己的观点^[1-3]. 我们认为, 尽管单分量配对态提法在一定程度上得到一些实验结果的支持, 但从总体上并非局限于某些实验现象, s - d 波混合配对态对称性更具竞争性, 如 Li 等^[4]在单带 Hubbard 模型下, 分析了混合配对态的核磁共振行为, 得出总体上高温超导体中 s - d 波混合配对态为基态, 较单分量 d 波态更有利的结论; 再如, 文献[5]已表明, $s+id$ 波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的理解. 本文将运用紧束缚模型, 讨论 s - d 混合波的存在性, 并通过严格求解 Ginzburg-Landau(G-L)波函数方程, 给出高温超导体的磁通涡旋格子.

2 s - d 混合波的存在性

运用紧束缚模型, 考虑层内非滞后的最近邻配对相互作用, 研究高温超导体 s - d 波混合配对态的存在性问题.

首先给出有效哈密顿量为^[6]

$$H = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k \alpha_{k, \sigma}^+ \alpha_{k, \sigma} - \sum_{k, k'} V_{kk'} \alpha_{k, \sigma}^+ \alpha_{-k, \sigma}^+ \alpha_{-k', \sigma} \alpha_{k', \sigma} \quad (1)$$

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

其中 ϵ_k 为正常态电子的准粒子能量, $V_{kk'}$ 为配对相互作用势, $a_{k,\sigma}^+$, $a_{k,\sigma}$ 为波矢 k 、自旋 σ 的电子的产生和湮没算符. 依赖于 k 的能隙参数 Δ_k 的形式为

$$\Delta_k = \frac{1}{N} \sum_{k'} V_{kk'} F_{k'}, \quad F_k = \frac{\Delta_k}{2E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right), \quad (2)$$

其中 $E_k = (\epsilon_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}$, 为准粒子激发能, N 为晶格数, $\beta = 1/k_B T$. 吉布斯自由能的形式为^[7]

$$G(\Delta_k) = \frac{1}{N} \sum_k \left(\epsilon_k - E_k + 2\Delta_k F_k - \frac{2}{\beta} \ln(1 + e^{-\beta E_k}) \right) - \frac{1}{N^2} \sum_{kk'} V_{kk'} F_k F_{k'} \dots \quad (3)$$

现考虑层状四方堆积的紧束缚模型, 如图 1 所示. 图 1 中单位晶胞的尺寸由晶格常数 a_x , a_y 和 a_z 给出. 同时, 仅考虑层内最近邻相互作用, 作用量由对应 x , y 方向的 g_x 和 g_y 给定. t_1 , t_2 表示层内最近邻跃迁势 (x 和 y 方向), t_3 表示层内次近邻跃迁势, t_4 表示层间最近邻跃迁势. 对应这种模型, 其散射关系为^[8]

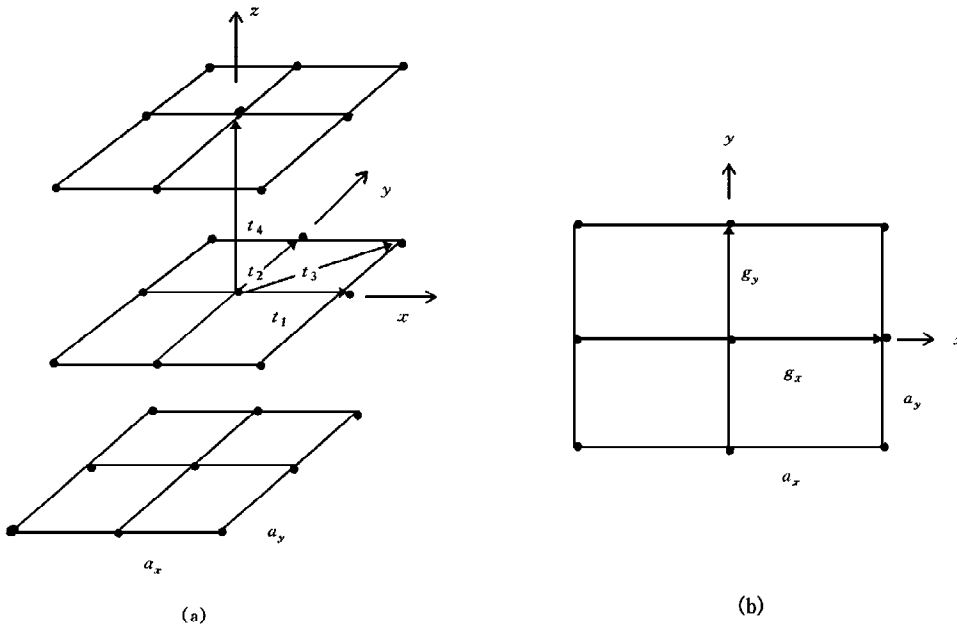


图 1 (a) 为层内最近邻、次近邻和层间最近邻跃迁概率的紧束缚模型图, (b) 为层内最近邻相互配对势

$$\epsilon_k = A \left[-2(\cos(k_x a_x) + A_y \cos(k_y a_y)) + 4B \cos(k_x a_x) \cos(k_y a_y) - 2C \cos(k_z a_z) - \mu \right], \quad (4)$$

其中 $A = -2t_1$, $A_y = -2t_2/A$, $B = -t_3/(2t_1)$, $C = t_4/(2t_1)$, μ 为化学势. 波矢为 $k = (n_x \pi / (N_x a_x), n_y \pi / (N_y a_y), n_z \pi / (N_z a_z))$, 其中 $-N_q < n_q \leq N_q$ ($q = x, y, z$), N_q 为 q 方向格点数.

假设电子间的配对相互作用只存在于 CuO 平面内的最近邻格点间, 则相互配对势可

选形式^[8]:

$$V_{kk'} = 2g_x \cos((k_x - k_x')a_x) + 2g_y \cos((k_y - k_y')a_y). \quad (5)$$

由(4)和(5)式的对称性,可以假设 Δ_k 的形式为

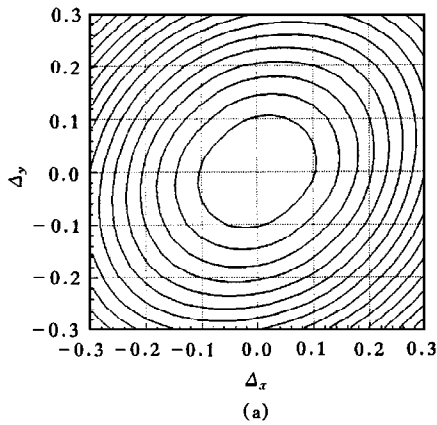
$$\Delta_k = 2\Delta_x \cos(k_x a_x) + 2\Delta_y \cos(k_y a_y), \quad (6)$$

则关于 Δ_k 的能隙方程转化为一个二维非线性方程组:

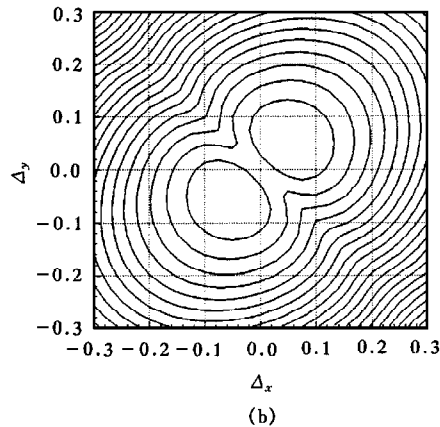
$$f_1(\Delta_x, \Delta_y) = \Delta_x - \frac{1}{N}g_x \sum_k \cos(k_x a_x) F_k = 0, \quad (7a)$$

$$f_2(\Delta_x, \Delta_y) = \Delta_y - \frac{1}{N}g_y \sum_k \cos(k_y a_y) F_k = 0. \quad (7b)$$

方程的解对应吉布斯自由能的稳定点,即最低点.同时注意到,若 (Δ_x, Δ_y) 为(7)式的解,则 $(-\Delta_x, -\Delta_y)$ 亦为其解.由(6)式的性质,我们可对解的形式作定性的分类:当 $\Delta_x = \Delta_y$ 时,对应各项同性 s 波;当 $\Delta_x = -\Delta_y$ 时,对应 d 波;当 $|\Delta_x| \neq |\Delta_y|$ 时,对应 $s-d$ 混合波.通过对吉布斯自由能(3)式的数值分析,可以得到以上方程解的信息.在分析中假定 A 和 k_B 为单位的量,即温度以 A/k_B , 能量以 A 为度量单位.取 $A = 0.05 \text{ eV}$; 温度 $A/k_B = 580 \text{ K}$, 配对相互作用势 $g_x = g_y = 0.06 \text{ eV}$, 即以 A 为单位, $g_x = g_y = 1.20$, (4)式中的系数 $B = 0.45$, $C = 0.1$ ^[8]. 分析结果表明,通过调节方程的参数,可获得不同解的形式.以化学势 μ 例(可以通过改变温度,掺杂等形式获得),随 μ 在一定范围内变化,得到对应的 s 波、 d 波和 $s-d$ 混合波(见图 2).



(a) $\mu = -2.5$



(b) $\mu = -2.3$

1) 由于晶格常数的非对称性(特征值如 $a_x = 0.382 \text{ nm}$, $a_y = 0.389 \text{ nm}$, $a_z = 1.168 \text{ nm}$, 对应 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ^[11] 的晶格结构), 导致格子间的相互作用及 a , b 轴跃迁概率不同.

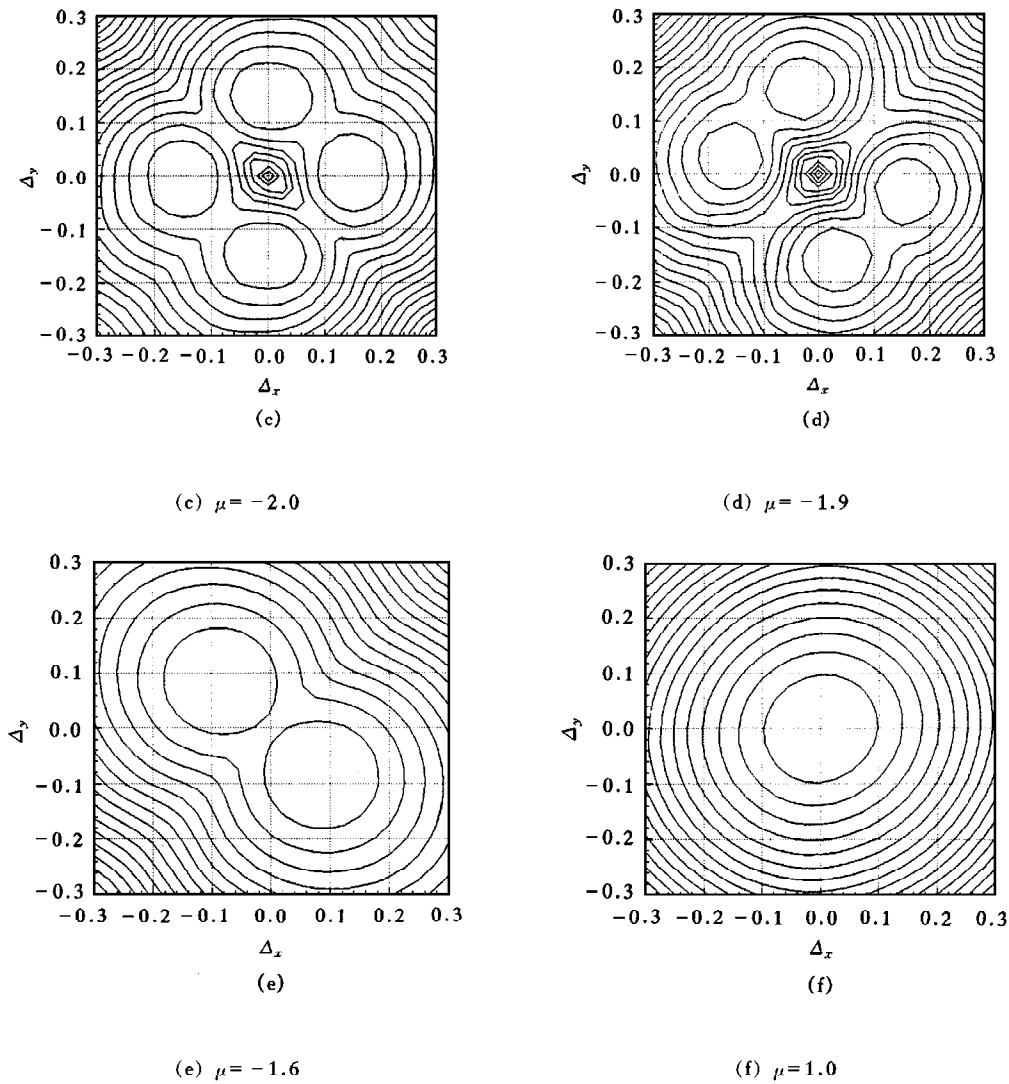


图2 随 μ 变化, s 波、 d 波和 s - d 混合波等值图 $T=0\text{K}$; $g_x = g_y = 1.20$; $A_y = 1.0$; (a), (f) 对应正常态 ($\Delta_x = \Delta_y = 0$); (b) 对应 s 波态 ($\Delta_x = \Delta_y$); (c), (d) 对应 s - d 混合波态 ($|\Delta_x| \neq |\Delta_y|$); (e) 对应 d 波态 ($\Delta_x = -\Delta_y$)

进一步的讨论发现,若考虑格子相互作用的非对称性,或是由于 CuO 平面内 a , b 轴跃迁概率的非对称性¹⁾,将使纯 s 波、 d 波不再存在,取而代之以 s - d 波混合配对态的形式.

3 混合态数学模型

以上讨论明确了 s - d 波存在的必然性,但对这种混合配对态下磁通格子分布的分析,

则需依赖更精确的模型. 可以依据变分原理, 从混合波自由能表示式演化出唯象的 G-L 波函数方程, 并进一步得到一些结论^[5]. 同时, 欲细致深入研究波函数随外磁场和温度的变化, 须将唯象的 G-L 波函数方程参量化(参见文献[9]). 从 Gor'kov 方程出发, 利用算子算符进行迭代求解(迭代序参量 Δ 至三阶), 并与唯象的 G-L 波函数方程类比, 再用变量替换, 得到无量纲下的 G-L 波函数方程^[10]为

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

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

(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)

这里我们限于讨论一均匀外磁场中超导薄膜的输运问题, 磁场垂直于膜层. 这是一个二维问题, 序参量和微观感应场只在薄膜平面内有变化. 为描述磁场中的超导体, 我们在单个元胞中给定磁通量 $\Phi = \langle B \rangle L_x L_y$, 其中 L_x, L_y 为 x, y 方向的晶格长度, 并由此给出周期性的边界条件. 若选取 A_x 与 x 无关的特殊规范^[12], 则得到简单的边界条件: $A_x(0) = A_x(L_y)$ 和 $A_y(L_x, y) - A_y(0, y) = \Phi/L_y$, 其余边界条件可通过规范不变性得到^[13]: $A_y(x, L_y) = A_y(x, 0)$, $\Psi_s(x, L_y) = \Psi_s(x, 0)\exp(i\Phi/2)$, $\Psi_s(L_x, y) = \Psi_s(0, y)\exp(iy\Phi/L_y)$, $\Psi_d(x, L_y) = \Psi_d(x, 0)\exp(i\Phi/2)$ 和 $\Psi_d(L_x, y) = \Psi_d(0, y)\exp(iy\Phi/L_y)$. 通过以上的边界条件和 G-L 波函数方程, 选取 $\Psi_s, \Psi_s^*, \Psi_d, \Psi_d^*, A_x$ 和 A_y 作为独立变量, 给出松弛迭代格式:

$$\psi_s^{(n+1)} = \psi_s^{(n)} - \epsilon_1 \frac{\delta f}{\delta \psi_s^*} \Big|^{(n)},$$

$$\psi_d^{(n+1)} = \psi_d^{(n)} - \epsilon_2 \frac{\delta f}{\delta \psi_d^*} \Big|^{(n)},$$

$$A_x^{(n+1)} = A_x^{(n)} - \epsilon_3 \frac{\delta f}{\delta A_x} \Big|^{(n)},$$

$$A_y^{(n+1)} = A_y^{(n)} - \epsilon_4 \frac{\delta f}{\delta A_y} \Big|^{(n)},$$

其中 ϵ_i 为松弛因子, n 为迭代次数. 数值计算表明, 选取了合适的初态, 随 n 的增加, f 将单调地趋于其最小值.

4 数值实验结果

在温度较低时, 单根涡旋的显著特征为 s 波成分的四叶各向异性(见图 3), 并由此引

发 d 波分量和磁场分量在远离涡旋芯处的四方各向异性(见图 4 和图 5), 而这将对磁通格子分布有显著影响.

图 6(a)和(b)为 d 波、 s 波序参量的相位图. 从图 6 可以清晰地看出, 在涡旋芯处, s 波与 d 波相位相差 $\pi/2$, 这与我们以前的 $s+id$ 波的提法相符^[5]. 计算同时表明, 当温度趋近转变温度时, s 波的成分将明显下降, 涡旋结构将趋于各向同性, 类似寻常 s 波超导体.

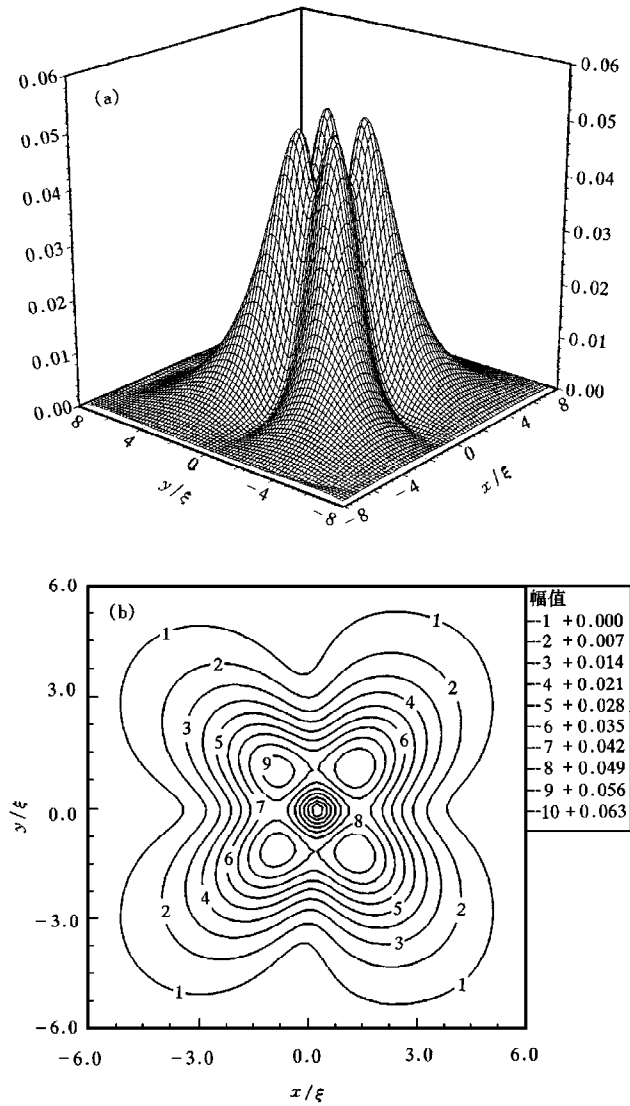


图 3 $T/T_d=0.5$, $\kappa=2.0$ 时单根涡旋对应 $|\psi_s|$; 三维图(a)和等值图(b)

单根涡旋结构从四方各向异性转变为各向同性将明显地影响磁通格子的结构. 我们在长方格子中对两个涡旋的分布进行数值求解. 这里运用同样的边界条件. 尺度因子 (aspect ratio) $R = L_y/L_x$ 决定了格子的形状^[13], 例如 $R=1$ 对应四方格子; $R=\sqrt{3}$ 对应三角格子. 物理上的稳定态一般对应自由能 F 的最小值. 为此, 我们在 $T/T_d=0.5$ 时研究了

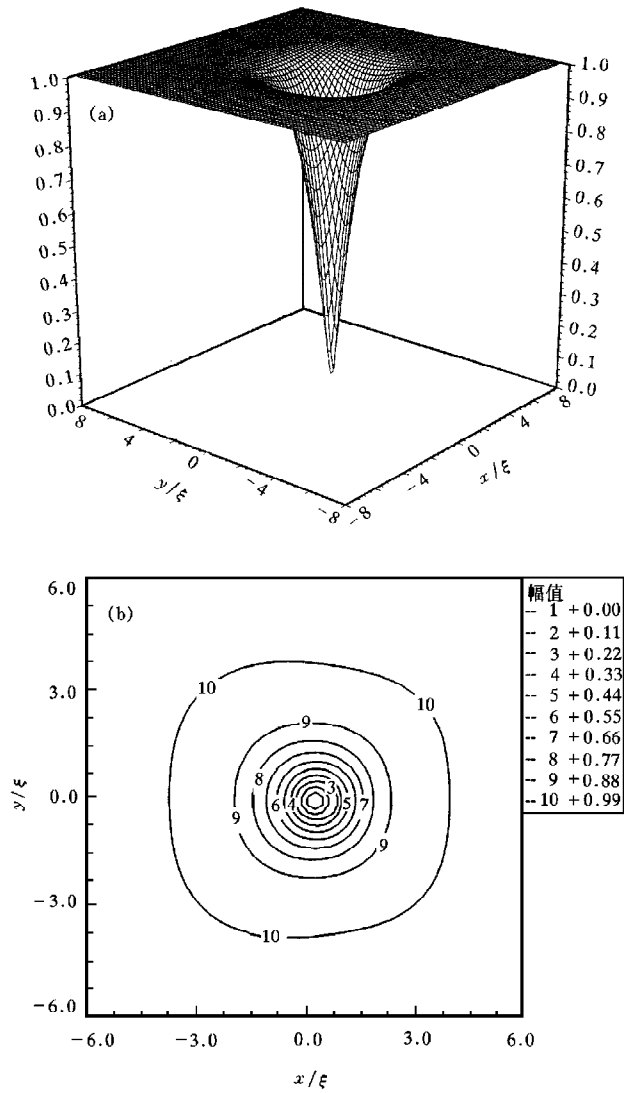


图 4 $|\Psi_d|$ 的三维图(a)和等值图(b) 条件同图 1

自由能 F 随 R 的变化, 得到在 $R=1.40$ 处达到最小值¹⁾(见图 7). 这表明此时斜格子是稳定的(图 8(a)示出斜格子的磁通涡旋 h 分布). 显然, 由于在低温下 s 波分量较高, 影响

1) 注意到物理解与计算时网格的划分有关, 但定性的结果一致.

了单根涡旋 d 波与 h 的结构,使 h 分布呈各向异性;而当温度趋于转变温度时, s 波成分将大为降低,其对单个涡旋的影响变得很小,使涡旋态恢复到类似寻常超导体^[14]的三角格子分布(见图 8(b)).

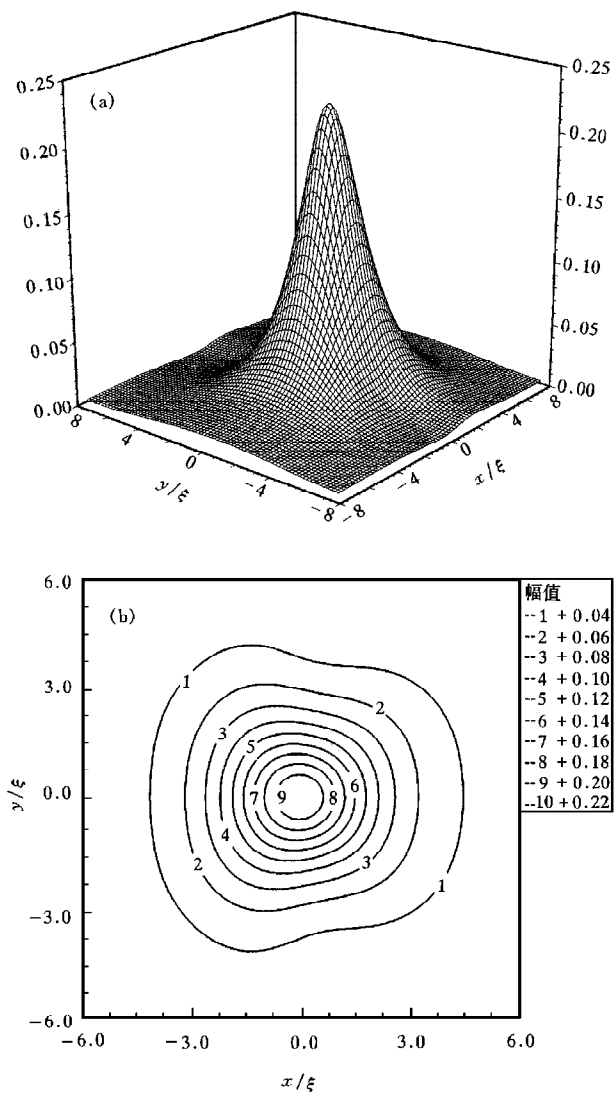


图 5 磁通涡旋 h 的三维图(a)和等值图(b) 条件同图 1

5 结束语

本文首先在紧束缚模型下对 s - d 混合波的存在性作了论证,在一定程度上确定了它的必然性;其次对混合波态下的 G-L 波函数方程进行了数值求解,获得了磁通格子分布

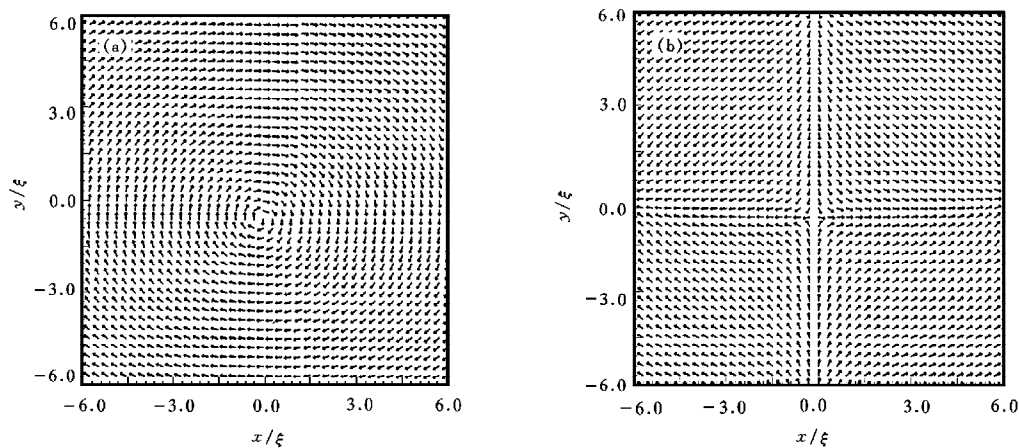


图 6 ψ_d 的相位图(a)和 ψ_s 的相位图(b)

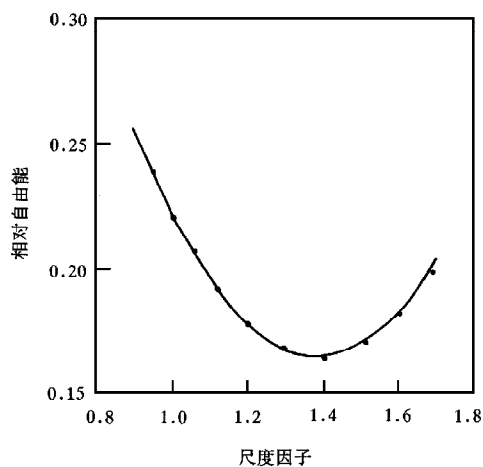
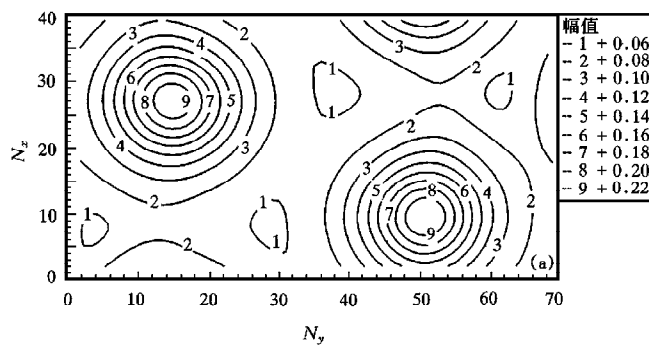
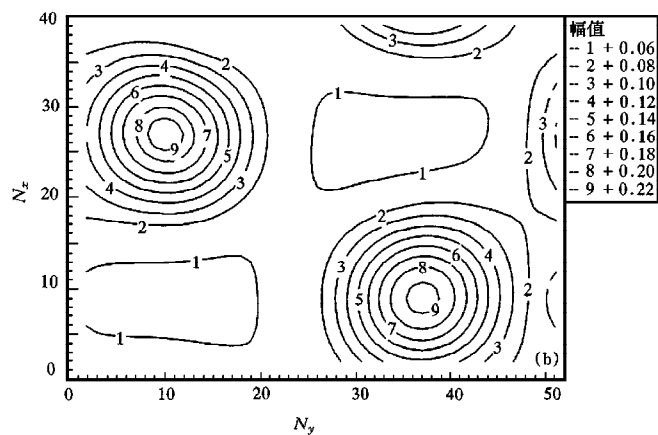


图 7 自由能 F (相对值)随 R 的变化 $R_{opt}=1.40, N_x=N_y=40$



(a) $T/T_d=0.95, R=1.75$

(b) $T/T_d = 0.50$, $R = 1.40$ 图 8 磁通涡旋 h 分布等值图 ($L_x \times L_y = 64$)

的信息. 总而言之, 在温度较低时, 由于 s 波的各向异性特征, 使磁通涡旋呈稳定的斜格子分布, 而在温度较高时, 三角格子将变得稳定. 事实上, 这种趋势已有过对 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 样品的小角度中子散射实验的报道^[15]. 而混合态下这种涡旋格子行为是否与高温超导体临界磁场上翘行为、外磁场下的临界电流异常及二重色散现象有关, 将是需要进一步明确的问题.

感谢鲍家善教授和徐克西老师的关心及牛金海博士生的大力帮助.

- [1] P. W. Anderson *et al.*, *Science*, **261**(1993), 337.
- [2] V. Z. Kresin, S. A. Wolf, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 9012.
- [3] D. I. Khomskii *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **75**(1995), 1384.
- [4] F. C. Zhang, T. M. Rice, *Phys. Rev.*, **B37**(1980), 3795.
- [5] Zhou Shi-ping *et al.*, *Acta Physica Sinica*, **47**(1998), 807(in Chinese).
- [6] H. Schneider, M. P. Soerensen, *Z. Phys. B: Condensed Matter*, **81**(1990), 3.
- [7] A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.*, **47**(1975), 331.
- [8] H. Deraedt, T. Schneider, M. P. Soerensen, *Z. Phys. B.: Condens. Matter*, **79**(1990), 327.
- [9] Cai Jianhua *et al.*, *The Theory of Green's Functions in the Quantum Statistics*(Science press, Beijing, 1982)(in Chinese).
- [10] Niu Jin-hai, Ph. D. Thesis, Shanghai University, 1997(in Chinese)
- [11] R. Parkaluoto, K. Kask, *Phys. Scr.*, T **33**(1990), 227.
- [12] Z. D. Wang, C. R. Hu, *Rhys. Rev.*, **B44**(1991), 918.
- [13] M. M. Doria *et al.*, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 6335.
- [14] W. H. Kleiner, L. M. Roth, S. H. Autler, *Phys. Rev.*, **133**(1964), 1266.
- [15] B. Keimer *et al.*, *J Appl. Phys.*, **76**(1994), 6778.

VORTEX LATTICE IN A HIGH- T_c SUPERCONDUCTOR OF MIXED PAIRING SYMMETRY *

QU HAI ZHOU SHI-PING

(Department of Physics, Shanghai University, Shanghai 201800)

(Received 24 April 1998)

ABSTRACT

Starting from a tight binding description, the existence of mixed s - d wave pairing state is discussed. Then, within the framework of the phenomenological G-L theory, the structure of vortex lattice in a high- T_c superconductor is studied. It is shown that there is a strong correlation between the structure of a single vortex and the shape of the vortex lattice. At low temperatures, with the existence of s -wave component and its coupling to d -wave component, the d -wave order parameter and the local magnetic field show tetragonal anisotropy, and the structure of vortex lattice is oblique; however, when the temperature is close to T_c , it may become triangular.

PACC: 7460E; 7460J; 7420

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 69671013) and by the Dawn Programme of Education Commission of Shanghai, China.