

层间耦合与高温超导体角分辨光电子能谱和 Ba 位替代效应*

杨志红^{1,2)} 施大宁¹⁾ 罗达峰¹⁾

¹⁾ 南京航空航天大学理学院, 南京 210016)

²⁾ 南京邮电学院应用数理系, 南京 210003)

(2003 年 12 月 16 日收到, 2004 年 4 月 5 日收到修改稿)

根据高温超导体层状结构特点和层间耦合效应, 提出了一个唯象的 S-N 双层高温超导模型(S 表示超导层, N 表示非超导层), 并在 Nambu 空间求得高温超导态的格林函数, 得到了 S-N 模型下高温超导体临界温度 T_c 随 S, N 层间耦合强度增加而下降的结果. 在该模型的基础上讨论了 YBCO 材料中 Ba 位替代对 T_c 的抑制效应, 说明了高温超导体角分辨光电子能谱具有 hump/dip/peak 结构的特点, 所得结果与实验相一致.

关键词: 层间耦合效应, 替代效应, 势无序, 角分辨光电子能谱

PACC: 7410, 7450, 7460M, 7470J

1. 引言

高温超导体材料, 如 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (YBCO) 和 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (BSCCO) 材料的物性和超导机理, 是近 20 年来凝聚态理论和实验研究的热点. 大量的实验研究工作形成的共识是: 高温超导体具有层状结构特点, 除了具有 d 波配对对称性的二维 CuO_2 超导层之外, 超导体中还可能存在一层或多层非超导层, 例如 YBCO 材料中 CuO 层和 BSCCO 材料中 BiO 双层都是非超导层. 这些实验结果引起了理论工作者对非超导层的更多关注, 人们普遍相信, 除了用以提供 CuO_2 平面上载流子的蓄电库作用外, 非超导层与超导层之间的耦合作用还将对超导电性产生至关重要的影响^[1-7].

近年来, 许多实验研究发现, 用 Sr 原子^[8-10] 或用 Nd 原子^[11, 12] 替换 YBCO 材料中的 Ba 元素, 将对超导体的结构、电荷分布以及临界温度产生影响. 由于 Sr 原子 ($r_1 = 0.135\text{nm}$) 和 Nd 原子 ($r_1 = 0.0995\text{nm}$) 都比 Ba 原子 ($r_1 = 0.152\text{nm}$) 半径小, 而且 Ba 元素处在超导的 CuO_2 层和非超导的 CuO 层之间, 因此人们当初认为这种替代将在超导体中产生

晶格畸变而形成内部分子压力. 这样, 和外部机械压强对高温超导产生的效应相类似, 替代的效果(在替代浓度很小而不产生 CuO_2 层载流子浓度显著变化的情况下) 将使超导体临界温度提高. 然而, 事实比人们想像要复杂得多, 实验测得在 YBCO 超导体中, Sr 或 Nd 对 Ba 位替代引起的 T_c 变化, 显示了相反的结果^[13, 14], 表明在超导体中这种替代作用形成的分子压力效应与宏观的机械压强效应并不等效^[10, 13, 14]. 目前对这一问题尚无明确的理论解释.

另一方面, 角分辨光电子能谱 (angle-resolved photoemission spectroscopy, 简称 ARPES) 测量是揭示高温超导材料电子形态的重要手段, 实验结果日新月异. 该技术除成功检测到超导态能隙外, 另一个重要发现是超导态中谱权重的反常转移^[15]. 特别重要的是, 几乎所有的实验小组都报告了 ARPES 宽背景和在此背景下的 hump/dip/peak 结构, 并且这种结构与能隙函数的角关联特征相同^[16]. 有学者认为^[16] 宽背景来源于电子与表面的相互散射作用, 即来源于高温超导体电子结构的非本质要素, 但 hump/dip/peak 结构则来源于高温超导系统特有的物理结构和强关联特征^[16-18]. 然而, 大量的研究一直集中在探讨电子之间强关联作用对 ARPES 的贡献,

* 南京航空航天大学知识创新基金资助的课题.

高温超导材料中的非超导层对 ARPES 结构所产生的影响目前还鲜见报道。

本文在文献 [1—7] 的基础上,提出了一个简化的 S-N 模型:认为 YBCO 每个元胞有两个导电层,即超导层(S)和非超导层(N);S, N 层间存在单电子耦合,准粒子可以在层中自由传播,但 d 波对称性的载流子配对仅发生在超导层中。本文分别研究了非超导层对高温超导电性和 ARPES 的影响,对高温超导体 ARPES 的 hump/dip/peak 结构给出了一个简单、自然的物理解释,利用此模型,研究了 YBCO 超导体中 Ba 位替换对超导体临界温度产生的影响,成功地解释了一系列实验结果。

2. S-N 高温超导模型和 ARPES

以 YBCO 材料为例,其中每个元胞含有三个氧化铜层,其中双 CuO₂ 层面具有超导性,而 CuO 链层显示非超导性。在我们的 S-N 模型中,把双 CuO₂ 层看作一个 S 层,CuO 链层看作一个 N 层,并且在同一元胞内 S, N 层之间存在单粒子跃迁。为简化以下的计算,不考虑元胞之间的 S, N 层相互作用,因此 S, N 层之间的单粒子跃迁矩阵元可用常数 J 表示。同时,引进唯象参数 α 来描述同一元胞内双 CuO₂ 层之间的关联效应^[2-4]。基于以上考虑, S-N 模型下系统的哈密顿量表示为

$$H = H^0 + H^1 + H^{\text{BCS}}, \quad (1)$$

$$H^0 = \sum_{k\sigma} [\xi_S(k) \psi_{S\sigma}^+(k) \psi_{S\sigma}(k) + \xi_N(k) \psi_{N\sigma}^+(k) \psi_{N\sigma}(k)], \quad (1a)$$

$$H^1 = J \sum_{k\sigma} [\psi_{S\sigma}^+(k) \psi_{N\sigma}(k) + \text{H.c.}], \quad (1b)$$

$$H^{\text{BCS}} = \sum_k [\Delta(k) \psi_{S\uparrow}^+(k) \psi_{S\downarrow}^+(-k) + \text{H.c.}], \quad (1c)$$

其中 $\psi_{S\sigma}(k)$ 和 $\psi_{N\sigma}(k)$ 分别为 S, N 层中格矢为 k 、自旋为 σ 的场算符; $\xi_S(k)$ 和 $\xi_N(k)$ 为准粒子在 S, N 层的二维色散谱,且有 $\xi_S(k) = \epsilon_k$, $\xi_N(k) = \alpha\epsilon_k$, α 为引入的唯象参数,它的大小依赖于每个元胞中 CuO₂ 的层数、载流子浓度及受到的压力等。在

YBCO 和 BSCCO 超导体中,因超导层中分别包含两层和三层 CuO₂ 平面,为了表达它们之间的关联,取 $\alpha < 1$,以保证载流子在 S 层中有效质量比在 N 层中大。 $\Delta(k)$ 为 d 波序参量,即 $\Delta(k) = \Delta_0(k_x^2 - k_y^2)/2$, 满足能隙方程:

$$\Delta(k) = \sum_{k'} V(k, k') \psi_{S\uparrow}(k) \psi_{S\downarrow}(k'), \quad (2)$$

$V(k, k')$ 为费米面附近载流子之间的相互作用。

为了方便地讨论杂质替代效应,将哈密顿量(1)式推广到 Nambu 空间:

$$H_0 = \sum_k [\Psi_S^\dagger(k), \Psi_N^\dagger(k)] \times \begin{bmatrix} \alpha\epsilon_k\sigma_3 + \Delta(k)\sigma_1 & J\sigma_3 \\ J\sigma_3 & \epsilon_k\sigma_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_S(k) \\ \Psi_N(k) \end{bmatrix} \quad (3)$$

其中 $\Psi_S(k)$ 和 $\Psi_N(k)$ 分别为 Nambu 空间 S, N 层的场算符,定义为

$$\Psi_S(k) = \begin{bmatrix} \psi_{S\uparrow}(k) \\ \psi_{S\downarrow}^+(-k) \end{bmatrix}, \quad \Psi_N(k) = \begin{bmatrix} \psi_{N\uparrow}(k) \\ \psi_{N\downarrow}^+(-k) \end{bmatrix}. \quad (4)$$

根据格林函数的定义,在 Bloch 表象中,得到

$$G_0^{-1} = \begin{bmatrix} i\omega_n - \alpha\epsilon_k - \Delta(k) & -J & 0 \\ -\Delta^*(k) & i\omega_n + \alpha\epsilon_k & 0 \\ -J & 0 & i\omega_n - \epsilon_k & 0 \\ 0 & J & 0 & i\omega_n + \epsilon_k \end{bmatrix}, \quad (5)$$

其中 $\omega_n = 2\pi T(n + \frac{1}{2})$ 为 Matsubara 频率。根据(5)式,可以求出描述超导态的反常格林函数 $\psi_{S\uparrow}(k) | \psi_{S\downarrow}(-k)_{i\omega_n}$:

$$\psi_{S\uparrow}(k) | \psi_{S\downarrow}(-k)_{i\omega_n} = \frac{-\Delta(k) \chi (\omega_n^2 + \epsilon_k^2)}{B}, \quad (6)$$

其中

$$B = [(i\omega_n + \epsilon_k) \chi (i\omega_n + \alpha\epsilon_k) - J^2] \times [(i\omega_n - \epsilon_k) \chi (i\omega_n - \alpha\epsilon_k) - J^2] + \Delta^2(k) \chi (\omega_n^2 + \epsilon_k^2).$$

将反常格林函数(6)式代入能隙方程(2),注意到 $T = T_c$ 时 $\Delta = 0$,可求出 d 波配对的超导 T_c 方程为

$$1 = -V_2 T_c \sum_k \sum_{i\omega_n} \frac{(i\omega_n)^2 - \epsilon_k^2}{[(i\omega_n + \epsilon_k) \chi (i\omega_n + \alpha\epsilon_k) - J^2] [(i\omega_n - \epsilon_k) \chi (i\omega_n - \alpha\epsilon_k) - J^2]}, \quad (7)$$

V_2 为 d 分波有效势. 显然, 在 $\alpha \neq 1$ 时, 从方程(7)中很难解析地求出 T_c 表达式, 但在 S, N 层间耦合 $J=0$ 时, T_c 方程简化为

$$V_2 N_S(0) A(T_c) = 1, \quad (8)$$

其中 $A(T) = \ln(2\gamma\omega_c/\pi T)$, $\gamma = 1.78$, 这就是单层超导态 BCS 形式的 T_c 方程. 一般情况下, 可以通过数值计算从方程(7)中得到 T_c 与耦合强度 J 的关系. 计算中分别选取 $\alpha = 0.18, 0.20, 0.22$ 和 0.24 , 约化态密度 $N_S(0) = 1/2D$, 且 $N_S(0)/N_N(0) = 1/\alpha$, D 为非超导层能带半宽度, 可以作为下面数值计算的能量单位. 数值计算结果如图 1 所示. 从图 1 曲线中看出, 随耦合强度 J 的增强, T_c 将从 T_c 值开始逐渐降低, 说明超导层与非超导层间的相互作用具有拆对作用. 图 1 也表明唯象因子 α 对 T_c 也有影响, 如果分别选择 $J = 0.01$ 和 0.05 , 则同样的数值计算可得到临界温度 T_c 与 α 的关系, 如图 2 所示. 结果说明: α 稍微减小, T_c 迅速提高. 我们知道, 在外界的宏观机械压力下, 耦合强度 J 将呈增加趋势, 而 α

将呈减小趋势(双 CuO_2 层之间的关联效应加强). 因此, 考虑二者对 T_c 的共同效应, 在 S-N 模型下, 可以很自然地解释高温超导体转变温度随外界宏观压力变化所呈现的先上升后下降趋势. Lin 等人在文献 [19] 中详细分析了一系列实验结果表明这个高温超导体中普遍存在的实验现象.

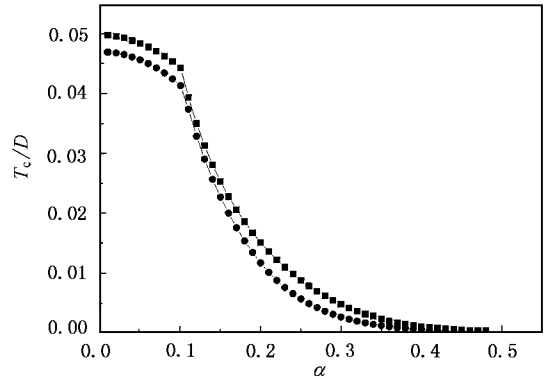


图 2 超导体临界温度 T_c 与唯象参数 α 的关系 $J/D = 0.01$ (■) 0.05 (●). 计算参量同图 1

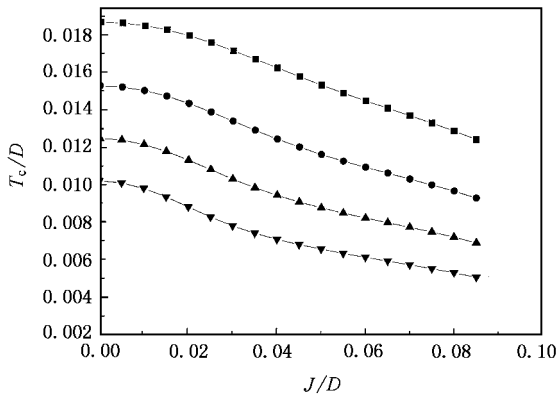


图 1 超导体临界温度 T_c 与层间耦合强度 J 的关系 $\alpha = 0.18$ (■) 0.2 (●) 0.22 (▲) 0.24 (▼). 计算参量选取 $V_2/D = 0.2$, $\omega_D/D = 0.1$

对于层状结构的高温超导体 ARPES 实验, 其光电流强度可以表达为^[20]

$$\Pi(k, \omega) = f(\omega) A(k, \omega), \quad (9)$$

其中 $A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \psi_S(k) | \psi_S^+(-k) |_{i\omega_n}$ 为超导态的谱函数. 根据格林函数(5)式, 经过计算可以求得

$$A(k, \omega) = \frac{u_1^2 \delta}{(\omega - E_1)^2 + \delta^2} + \frac{v_1^2 \delta}{(\omega + E_1)^2 + \delta^2} + \frac{u_2^2 \delta}{(\omega - E_2)^2 + \delta^2} + \frac{v_2^2 \delta}{(\omega + E_2)^2 + \delta^2}, \quad (10)$$

其中

$$E_1 = \left[\frac{\epsilon_k^2 + \alpha^2 \epsilon_k^2 + \Delta^2(k) + 2J^2}{2} - \frac{\sqrt{(\epsilon_k^2 - \alpha^2 \epsilon_k^2 - \Delta^2(k))^2 + 4J^2[(1 + \alpha)^2 \epsilon_k^2 + \Delta^2(k)]}}{2} \right]^{1/2}, \quad (10a)$$

$$E_2 = \left[\frac{\epsilon_k^2 + \alpha^2 \epsilon_k^2 + \Delta^2(k) + 2J^2}{2} + \frac{\sqrt{(\epsilon_k^2 - \alpha^2 \epsilon_k^2 - \Delta^2(k))^2 + 4J^2[(1 + \alpha)^2 \epsilon_k^2 + \Delta^2(k)]}}{2} \right]^{1/2}, \quad (10b)$$

$$u_1^2 = -\frac{1}{2} \frac{(1 - \epsilon_k/E_1) [(E_1 + \epsilon_k)(E_1 + \alpha \epsilon_k)] - J^2}{E_2^2 - E_1^2}, \quad (10c)$$

$$v_1^2 = -\frac{1}{2} \frac{(1 + \epsilon_k/E_1) [(E_1 - \epsilon_k)(E_1 - \alpha\epsilon_k) - J^2]}{E_2^2 - E_1^2}, \quad (10d)$$

$$u_2^2 = \frac{1}{2} \frac{(1 - \epsilon_k/E_2) [(E_2 + \epsilon_k)(E_2 + \alpha\epsilon_k) - J^2]}{E_2^2 - E_1^2}, \quad (10e)$$

$$v_2^2 = \frac{1}{2} \frac{(1 + \epsilon_k/E_2) [(E_2 - \epsilon_k)(E_2 - \alpha\epsilon_k) - J^2]}{E_2^2 - E_1^2}, \quad (10f)$$

E_1, E_2 为准粒子超导态能量. 对于二维系统并考虑次近邻作用, 则 $\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t_1 \cos k_x \cos k_y$. 在以下的数值计算中, 选取相关参数如下: $t = 0.125\text{eV}$, $t_1 = -0.5t$, $\delta = 0.03t$, $\Delta_0 = 0.2t$, $\alpha = 0.2$. 在 $J/D = 0.05$ 和 0.10 情形下, 对 Brillouin 区中沿 ΓY 方向 $(0, \pi)$ 点的 ARPES 数值计算结果分别如图 3 和图 4 所示.

从图 3 和图 4 中看到 ARPES 存在两个峰, 这说明在高温超导体氧化物中因存在超导层与非超导层的层状结构特征, 它们之间的相互作用形成两类超导态准粒子, 能量对应着 E_1 和 E_2 . 如果考虑到电子在离开材料表面时与表面的散射效应, 则整个 ARPES 将加上一个共同的宽背景^[16], 但双峰结构特征不会改变. 实验上观察到的 hump/dip/peak 结构, 可能就是这种双峰结构, 并且它肯定与能隙函数在动量空间的对称性相同. 比较图 3 与图 4 我们注意到, 这种双峰结构的谱峰位置及权重与超导层及非超导层间耦合强度 J 相关. 因此, 在这个 S-N 模型中, 不需要其他物理假设, 就可以解释高温超导体 ARPES 的反常特点, 而且物理图像明确、简洁.

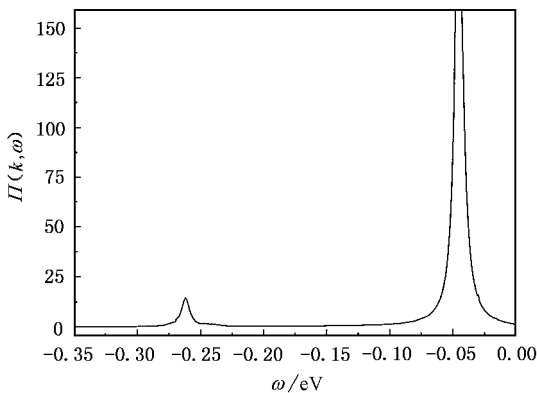


图 3 $J = 0.05$ 时 $(0, \pi)$ 点 ARPES 计算参量选取 $t = 0.125\text{eV}$, $t_1 = -0.5t$, $\delta = 0.03t$, $\Delta_0 = 0.2t$, $\alpha = 0.2$

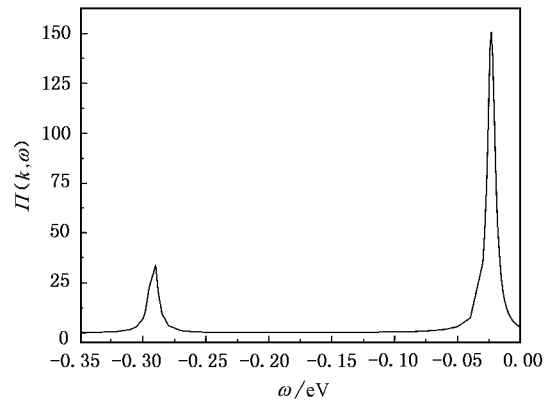


图 4 $J = 0.10$ 时 $(0, \pi)$ 点 ARPES 计算参量同图 3

3. Ba 位替代效应

为了研究高温超导体的微观机理, 人们利用各种实验手段分析超导材料中各组元的作用. 其中 Ba 位替代一直受到广泛关注^[8-14]. 当初人们考虑到 Ba 元素的位置处在 CuO_2 面和 CuO 面之间, 而不处在超导平面内, 所以普遍认为这种替代不会因杂质散射作用对库柏对产生拆对效应. 另一方面, 因替代元素(如 Sr 等)与 Ba 元素离子半径不同, 这将会在晶体中产生内压力, 对超导体转变温度的影响将和较小的宏观机械压强一样, 导致 T_c 增加. 但是, 实验情形恰恰相反, 文献 10 详细总结了 YBCO 材料中 Sr 替代 Ba 所导致的 T_c 下降的各种实验结果, 并指出目前对这一结果还缺乏系统的理论解释. 我们认为可能的解释是, 在替代元素的浓度较小时, 对 Ba 位的替代结果在晶格中产生了一种势无序效应. 由于 S, N 之间存在耦合作用, 这种无序效应将在超导层中产生间接的拆对效果, 从而导致 T_c 降低.

为了研究 Ba 位替代效应, 我们认为在替代发生时, S, N 层间存在势场的无序效应, 简称势无序. 这种无序高温超导体的哈密顿量在 Nambu 空间可以写成

$$H = H_0 + H_{\text{dis}}, \quad (11)$$

其中有序部分哈密顿量 H_0 已由方程 1 给出, 无序部分哈密顿量 H_{dis} 在 Nambu 空间可以表示为

$$H_{\text{dis}} = \sum_l [\Psi_S^\dagger(l), \Psi_N^\dagger(l)] \times \begin{bmatrix} 0 & W_l \sigma_3 \\ W_l \sigma_3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_S(l) \\ \Psi_N(l) \end{bmatrix}, \quad (12)$$

其中 $\Psi_S(l)$ 和 $\Psi_N(l)$ 为方程 (4) 中场算符在 Wannier 表象中的表示式, 而 W_l 为高斯分布型的无规变量, 满足

$$\overline{W^j} = \overline{W^{j'}} = 0, \quad (13)$$

$$\overline{W^j W^{j'}} = \overline{W^j W^j} = W^2 \delta_{jj'}, \quad (14)$$

(.....) 为对无规系综的平均. H_{dis} 可以用来描述各类不同的无序效应, 如晶格畸变和缺陷、杂质替代、压力效应等^[21, 22]. W^2 为系统的无序度, 正比于杂质浓度. 在自洽玻恩 (SCBA) 近似下, 由于势无序引起

的自能可表示为^[22]

$$\Sigma_W(\omega) = \sum_{ij} l |H_{\text{dis}}| i \alpha(i, j, \omega) \times j |H_{\text{dis}}| l' + l |H_{\text{dis}}| l', \quad (15)$$

$\alpha(i, j, \omega)$ 为无序系统的格林函数, 将方程 (12) 代入 (15) 式, 并对无规系综取平均, 同时考虑到方程 (13) 和 (14), 在 Bloch 表象中, 可得到无序系统自能的矩阵表示式

$$\Sigma(\omega) = W^2 \frac{1}{N} \sum_k \begin{pmatrix} \overline{G_{33}}(k, \omega) & -\overline{G_{34}}(k, \omega) & \overline{G_{31}}(k, \omega) & -\overline{G_{32}}(k, \omega) \\ -\overline{G_{43}}(k, \omega) & \overline{G_{44}}(k, \omega) & -\overline{G_{41}}(k, \omega) & \overline{G_{42}}(k, \omega) \\ \overline{G_{13}}(k, \omega) & -\overline{G_{14}}(k, \omega) & \overline{G_{11}}(k, \omega) & -\overline{G_{12}}(k, \omega) \\ -\overline{G_{23}}(k, \omega) & \overline{G_{24}}(k, \omega) & -\overline{G_{21}}(k, \omega) & \overline{G_{22}}(k, \omega) \end{pmatrix}. \quad (16)$$

根据 Dyson 方程, 无序系统的平均格林函数 $\overline{G}(k, \omega)$ 表示为

$$\overline{G}^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma(\omega), \quad (17)$$

其中 G_0 为有序超导体的格林函数, 由方程 (5) 决定. 考虑到序参量 $\Delta_0(k_x^2 - k_y^2)/2$ 有一个重要特性:

$\Delta(k)_{\text{FS}} = 0$, 可以很容易地证明自能矩阵 (16) 式中各元素满足以下重要对称关系:

$$\Sigma_{12} = \Sigma_{21} = \Sigma_{34} = \Sigma_{43} = 0, \quad (18a)$$

$$\Sigma_{14} = \Sigma_{23} = \Sigma_{32} = \Sigma_{41} = 0, \quad (18b)$$

$$\Sigma_{11} = \Sigma_{22}, \Sigma_{33} = \Sigma_{44}, \quad (18c)$$

$$\Sigma_{13} = \Sigma_{31} = \Sigma_{24} = \Sigma_{42}. \quad (18d)$$

根据上述关系, 可以求出无序系统高温超导体的格林函数, 并利用格林函数的谱定理在实轴上写出的无序高温超导系统 d 波 T_c 方程

$$1 = \frac{V_2}{\pi} \frac{1}{N} \sum_k \int d\omega f(\omega) \times \text{Im} \left\{ \frac{(\omega + \epsilon_k - \Sigma_{33}) (\omega - \epsilon_k - \Sigma_{33})}{CC'} \right\}, \quad (19)$$

其中 C 和 C' 分别为

$$C = (\omega + \epsilon_k - \Sigma_{33}) (\omega + \alpha\epsilon_k - \Sigma_{11}) - (J + \Sigma_{13})^2, \\ C' = (\omega - \epsilon_k - \Sigma_{33}) (\omega - \alpha\epsilon_k - \Sigma_{11}) - (J + \Sigma_{13})^2. \quad (20)$$

从 (16) 和 (17) 式可求得自能分量 Σ_{11} , Σ_{33} 和 Σ_{13} 的自

洽方程, 与 (19) 式联合作数值计算, 即可得到无序超导系统转变温度 T_c 与系统无序度的变化关系. 首先, 当 $J = 0$ 时, 可以证明 T_c 满足著名的 Abrikosov-Gorkov (AG) 方程 $\ln[T_c/T_{c0}] = \psi[1/2] - \psi[1/2 + W^2 N_S(0)/2T_c]$, $\psi(x)$ 为 digamma 函数. 其次, 当 $J \neq 0$ 时, 取 $D = 1, V_2/D = 0.2, \alpha = 0.2$, 通过数值计算, 得到 T_c 与重整化无序度 $\pi W^2 N_S(0)$ 的变化曲线, 如图 5 所示. $\pi W^2 N_S(0)$ 反映了掺杂浓度的大小, 图 5 中曲线 1, 2, 3, 4 分别代表 $J/D = 0.06, 0.04, 0.02$ 和 0.00 .

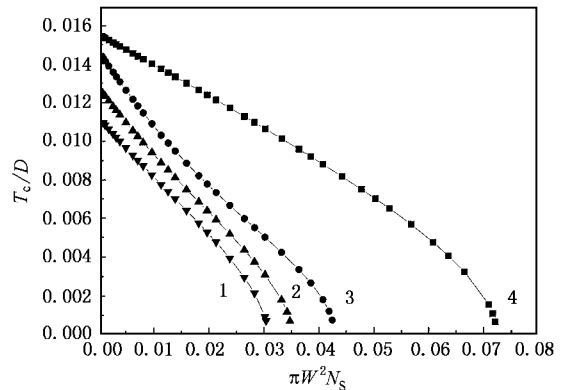


图 5 超导体临界温度 T_c 与重整化无序度 $\pi W^2 N_S(0)$ 的关系 $J/D = 0.00$ (■) 0.04 (●) 0.02 (▲) 0.06 (▼)

图 5 曲线 1 2 3 表明,随无序度增大,超导体转变温度 T_c 逐渐降低,而曲线 4 很清楚地显示了 AG 曲线行为.文献 [8—10] 中实验表明,在 YBCO 超导体中随 Sr 浓度增加, T_c 降低;同样用 Nd 代换 Ba, T_c 也随 Nd 浓度的增加而降低^[11,12].本文的理论模型为 Ba 位替代对超导体转变温度造成的影响提供了一个合理的解释,理论计算与实验结果定性相一致.另外必须指出,Ba 位的替代效应主要有两个方面影响,一是因为替代原子与被替代原子的大小不同而在超导体中产生无序效应,从而改变超导体的临界温度;二是由于替代原子与超导体中被替代原子的化合价不同,结果导致替换后每个元胞中载流子分布发生改变.对于后者,本文中并没有考虑,因为我们认为当杂质浓度很小时,少量的替代不足以引起元胞中载流子分布发生宏观上的改变.当替代元素浓度较大时,这个因素将起重要作用,这或许就是文献 [10] 中指出的,当 Sr 的浓度达到 30% 时,超导体转

变温度将从下降趋势转变成上升趋势的原因.

4. 结 论

本文考虑高温超导体层状结构特点,提出了一个唯象的 S-N 双层高温超导模型,首先研究了 S 和 N 层的耦合作用对高温超导体转变温度 T_c 的影响,并指出这种耦合作用对高温超导电性具有抑制效应.在此模型基础上,通过对高温超导体 ARPES 的计算,说明层状结构高温超导体 ARPES 具有 hump/dip/peak 结构特点.最后,将 YBCO 材料中 Ba 位替代效应理解为 S, N 层间的一种势无序作用,建立了描述无序情形下高温超导态的一个合理的自洽理论,很好地解释了由于 Ba 位替代而产生的无序效应对高温超导体转变温度的影响.

感谢与南京大学物理系吴小山教授的有益讨论.

- [1] Atkinson W A and Carbotte J P 1995 *Phys. Rev. B* **52** 10601
- [2] Klemm R A and Liu S H 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2343
- [3] Xiang T and Wheatley J M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 134
- [4] Shi D N and Li Z Z 1996 *Physica C* **270** 274
- [5] Donovan C O and Carbotte J P 1997 *Phys. Rev. B* **55** 1200
- [6] Zavidonov A Y and Brinkmann D 2000 *Phys. Rev. B* **61** 3282
- [7] Morr D K and Balatsky A V 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 247002
- [8] Licci F, Gauzzi A, Marezio M, Radaelli G P, Masini R and Chaillout-Bougerol C 1998 *Phys. Rev. B* **58** 15208
- [9] Marezio M, Licci F and Gauzzi A 2000 *Physica C* **337** 195
- [10] Karpinski J, Kazakov S M, Angst M, Mironov A, Mali M and Roos J 2001 *Phys. Rev. B* **64** 94508
- [11] Tang W H and Gao J 1998 *Physica C* **298** 66
- [12] Wu X S and Gao J 1999 *Physica C* **313** 79
- [13] Wada T, Adachi S, Mihara T and Inaba R 1987 *Japan. J. Appl. Phys.* **26** L706
- [14] Subramianm M A and Whangbo M H 1993 *J. Solid State Chem.* **109** 410
- [15] Dessau D S *et al* 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 2161
- [16] Shen Z X and Dessau D S 1995 *Phys. Rep.* **253** 1
- [17] Li J X, Mou C Y and Lee T K 2000 *Phys. Rev. B* **62** 640
- [18] Shi D N, Li J X and Wang Z D 2002 *Physica C* **371** 69
- [19] Chen X J, Lin H Q and Gong C D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 2180, and references therein
- [20] Shi D N, Xiao M W and Li Z Z 1998 *Phys. Rev. B* **58** 12478
- [21] Tesanovic Z 1986 *Phys. Rev. B* **34** 5112
- [22] Shi D N, W Xu and Li Z Z 1988 *Solid State Commun.* **68** 171

Effects of proximity coupling and substitutions for Ba-sites on the transition temperature and ARPES of high- T_c superconductors^{*}

Yang Zhi-Hong^{1,2)} Shi Da-Ning¹⁾ Luo Da-Feng¹⁾

¹⁾ College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

²⁾ Department of Mathematics and Physics, Nanjing University of Post and Telecommunications, Nanjing 210003, China)

(Received 16 December 2003; revised manuscript received 5 April 2004)

Abstract

Taking into account the proximity effects of the CuO chain on the high- T_c superconductivity, we introduce an S-N (superconducting-normal) model with d-wave Cooper pairing in the S layer. The hopping interaction between the S and N layers shows the suppression effect on the transition temperature T_c from the Green's function obtained in the Nambu space. Based on this model, we investigate the negative effects of the substitution for Ba-site on the transition temperature T_c in the Y-Ba-Cu-O system. Experimental observations are qualitatively consistent with our theoretical results. Finally, the hump/dip/peak structure in the line shapes of the angle-resolved photoemission of the high- T_c superconductors has also been discussed in the framework of the S-N model.

Keywords : proximity effects, substitution effects, potential disorder, ARPES

PACC : 7410, 7450, 7460M, 7470J

^{*} Project supported by the Foundation of Knowledge Innovation Program of Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, China.