

# 配对对称性与带间作用\*

曹天德<sup>1)</sup> 徐丽娜<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> (南京信息工程大学物理系, 南京 210044)

<sup>2)</sup> (复旦大学物理系, 上海 200433)

(2004 年 4 月 16 日收到, 2004 年 8 月 4 日收到修改稿)

研究 d-p 模型的超导性质, 可出现 d-p 配对占主导的情形. 配对对称性取决于 CuO<sub>2</sub> 面内空穴作用的各向异性, 可以是纯 d 波配对, 也可以是纯 s 波配对. CuO<sub>2</sub> 面内各向排斥作用不能导致空穴配对. 欠掺杂区域可以出现“预配对”. 当库珀对是局域的则不能根据配对函数求超导临界温度. 空穴的退局域以及配对参量对称性的演化也能得到理解.

关键词: d 波对称性, d-p 配对, 超导电性

PACC: 7420M

## 1. 引 言

许多实验显示高温超导体中的配对以 d 波对称性为主<sup>[1]</sup>, 这并未导致在高温超导微观机理认识上的统一. 首先提出 d 波对称性的是自旋涨落机理<sup>[2]</sup>, 其他一些机理也可导致 d 波配对, 如类似于 BCS 理论的各向异性和 Van Hove 奇异性<sup>[3]</sup>. 见诸报道的都是建立在所谓等效单带模型上的工作. 从微观模型上看, 能反应 CuO 面主要性质的是多带模型, 其中 d-p 模型最简单且有效, 但由于其复杂性和出于对强关联的思考, 人们讨论最多的模型是 t-j 模型和单带哈伯德模型. 对强关联系统, 由于其复杂性, 关注不同的物理过程就采用不同的模型和方法. 但首先要注意到单带模型不一定等效于 d-p 模型. 以 t-j 模型为例, 如果认为它与 d-p 模型等价, 则因从 d-p 模型约化到 t-j 模型时要产生一些高阶项, 已有工作表明常常被忽略的三位作用项对电子态和超导性质都有影响<sup>[4,5]</sup>, 因此忽略高阶项的 t-j 模型与 d-p 模型应该有不同的物理内涵. 还要意识到单带模型可能会掩盖超导起源, 因为从单带模型中难以直接看出导致配对的吸引力的原因, 对同样的结果有不同的解释. 例如目前的许多工作表明 t-j 模型有超导性<sup>[6]</sup>, 但在 t-j 模型中含有位间吸引项, 即

$$H' = -\frac{1}{4} \sum_{\langle i, i' \rangle} J n_i n_{i'} \quad (1)$$

以前的许多工作表明, 没有这项时配对关联函数就随晶体体积增大而趋于零. 近期的一些工作表明这项对超导有贡献, 但这项对超导的效应又有可能被三位作用项等高阶项抵消. 因此由 t-j 模型含有超导解而把超导归结为电子起源或磁性起源还为时过早. 对于采用没有这项的 t-j 模型而仅由配对函数断定有超导解的工作也值得商榷. 后面将对此讨论. 注意到 CuO<sub>2</sub> 面内结构和载流子分布的变化, 加之声子的贡献, 有理由假设在最佳掺杂区附近, Cu 位空穴和 O 位空穴的有效作用是吸引的. 这将导致以 d-p 配对为主的超导态. 文献[7]中引用 Bulut 和 Scalapino 的结果<sup>[8]</sup> 推测 d-p 配对将导致 d 波对称性为主. 本文则直接给出一种含 d 波对称性的超导解, 对预配对以及确定临界温度需注意的事项进行讨论, 也讨论空穴的退局域以及配对参量对称性的演化等.

## 2. 模型及其解

由于 CuO 面内结构和载流子分布的变化, 参数随载流子浓度而变的有效 d-p 模型更易于理解, 刚性模型并不符合实际. 在描述 CuO<sub>2</sub> 面内的性质时,

\* 江苏省教育厅自然科学基金(批准号 02KJD140005)资助的课题.

† 通讯联系人, E-mail: tdciao@mail.nuist.edu.cn

一般地可取模型哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = \sum_i (\epsilon_d - \mu) d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + \sum_{\langle i,l \rangle > \sigma} (\epsilon_{pl} - \mu) p_{l\sigma}^+ p_{l\sigma} \\ + \sum_{\langle i,l \rangle > \sigma} t_{il} (d_{i\sigma}^+ p_{l\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{\langle i,l \rangle > \sigma} V_{il} n_{i\sigma} n_{l\sigma} \\ + U_d \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + U_p \sum_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow}, \quad (2)$$

其中  $n_{i\sigma}$  为 Cu 位自旋为  $\sigma$  的空穴数算符, 等号右端第三项为 d-p 相互作用. 由于晶格常数  $a$  和  $b$  随掺杂而变, 最高临界温度时多数超导体为  $b \rightarrow a$ , 由此可推测 d-p 相互作用参数  $V_{il}$  应该是各向异性的. 按文献 [9] 的截断格林函数方法, 引进函数

$$G_p(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \tau - \tau') = -\langle T_\tau p_{k\sigma}(\tau) p_{k'\sigma}^+(\tau') \rangle, \\ G_{\text{qp}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \tau - \tau') = -\langle T_\tau d_{k\sigma}(\tau) p_{k'\sigma}^+(\tau') \rangle, \\ G_{\text{dp}}^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \tau - \tau') = [G_{\text{qp}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \tau - \tau')]^+, \\ F_{\text{dp}}^+(\mathbf{k}, \sigma, \tau - \tau') = \langle T_\tau d_{k\sigma}^+(\tau) p_{k\sigma}^+(\tau') \rangle$$

等等, 它们可通过运动方程进行求解. 对于 d 空穴态与 p 空穴态有较强交迭的情形, 处于正常态时, 格林函数  $G_d$  的主要部分为

$$G_d(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \bar{\epsilon}_d - |t_{\mathbf{k}}|^2 (i\omega_n - \bar{\epsilon}_{p\mathbf{k}})},$$

格林函数  $G_p$  的形式与此类似. 于是 d 空穴的数量在波矢空间的分布由下式决定:

$$n_d(\mathbf{k}) = \frac{\epsilon_k^+ - \bar{\epsilon}_{p\mathbf{k}}}{\epsilon_k^+ - \bar{\epsilon}_k} n_f(\epsilon_k^+) + \frac{\bar{\epsilon}_k - \bar{\epsilon}_{p\mathbf{k}}}{\bar{\epsilon}_k - \epsilon_k^+} n_f(\bar{\epsilon}_k), \quad (3)$$

其中

$$\epsilon_k^\pm = \frac{1}{2} [\bar{\epsilon}_{p\mathbf{k}} + \bar{\epsilon}_d \pm \sqrt{(\bar{\epsilon}_{p\mathbf{k}} - \bar{\epsilon}_d)^2 + |t_{\mathbf{k}}|^2}].$$

不难看出  $\epsilon_k^+$  为宽带, 而  $\bar{\epsilon}_k$  为窄带. 其他量的说明见后. 这表示 Cu 位空穴由于与 O 位空穴交迭而重新分配到两种准粒子激发上. 更精细的计算表明, 在波矢空间的局部, 如  $\epsilon_k^+$  的底部准费米子概念失效<sup>[9]</sup>, 这会使欠掺杂时的 Cu 位空穴仍然保持局域化. 但随空穴浓度的进一步提高, 由于化学势的提高和  $\epsilon_k^+$  的降低, 更多的 Cu 位空穴将跃迁于能带  $\epsilon_k^+$  和  $\bar{\epsilon}_k$  之间, 这相当于电子术语的“上哈伯德带”变宽. (3) 式仍然预示了 Cu 位空穴中的一部分因为交迭而退局域. 顺便提到隙间态也影响空穴的退局域, 这种退局域成为 d-p 配对, 并形成超导的条件.

对于可能的超导态, 定义配对函数如

$$\Delta_{\text{dp}}^+(\bar{\mathbf{k}}, \bar{\sigma}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) F_{\text{dp}}^+(\mathbf{q}, \sigma, \delta\tau = 0). \quad (4)$$

我们取面内晶格常数  $a = b$ , 在临界温度附近, 可得

到以 d-p 配对为主的结果,

$$\Delta_{\text{dp}}^+(\mathbf{k}, \sigma) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \Delta_{\text{dp}}^+(\mathbf{q}, \sigma) \Gamma_{\mathbf{k}}, \quad (5)$$

$$\Gamma_{\mathbf{q}} = \frac{n_f(E_q^+) - n_f(E_q^-)}{E_q^+ - E_q^-} \\ - \frac{2\bar{\epsilon}_d}{E_q^+ - E_q^-} \frac{n_f(-\bar{\epsilon}_d) - n_f(E_q^+)}{-\bar{\epsilon}_d - E_q^+} \\ + \frac{2\bar{\epsilon}_d}{E_q^+ - E_q^-} \frac{n_f(-\bar{\epsilon}_d) - n_f(E_q^-)}{-\bar{\epsilon}_d - E_q^-}, \quad (6)$$

$$E_q^\pm = \frac{1}{2} [\bar{\epsilon}_{p\mathbf{q}} + \bar{\epsilon}_d \pm \sqrt{(\bar{\epsilon}_{p\mathbf{q}} - \bar{\epsilon}_d)^2 + 4|t_{\mathbf{q}}|^2}],$$

$$\bar{\epsilon}_d = \epsilon_d - \mu + n_p V(0) + U_d n_{d\sigma},$$

$$\bar{\epsilon}_{p\mathbf{q}} = \epsilon_{p\mathbf{q}} - \mu + n_d V(0) + U_p n_{p\sigma},$$

其中对波矢  $\mathbf{k}$  或  $\mathbf{q}$  的求和仅限于第一布里渊区. 对 O 位空穴做次近邻近似, 则

$$\epsilon_{p\mathbf{q}} = \epsilon_p + 4t_{ll'} \cos(q_x a/2) \cos(q_y b/2) \\ + 2t_{ll''} [\cos(q_x a) + \cos(q_y b)]. \quad (7)$$

如果 d-p 作用取

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = 2V_1 \cos[(k_x - q_x) a/2] \\ + 2V_2 \cos[(k_y - q_y) a/2], \quad (8)$$

其中  $V_1$  和  $V_2$  为面内 Cu 位空穴和 O 位空穴间的近邻作用参数, 则可令配对函数

$$\Delta_{\text{dp}}^+(\mathbf{k}, \sigma) = \Delta_1 [\cos(k_x a/2) - \cos(k_y a/2)] \\ + \Delta_2 [\cos(k_x a/2) + \cos(k_y a/2)], \quad (9)$$

其中  $\Delta_1$  和  $\Delta_2$  分别为 d 波配对参量和 s 波配对参量. 把 (8) 和 (9) 式代入 (5) 式, 并引进 (10) 和 (11) 式,

$$A = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos^2(q_x a/2) \Gamma_{\mathbf{q}}, \quad (10)$$

$$B = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos(q_x a/2) \cos(q_y a/2) \Gamma_{\mathbf{q}}, \quad (11)$$

则因为对波矢的求和限于第一布里渊区, 可以发现, 在临界温度及其附近, 有

$$1 - 2V_1 A - 2V_2 B = 0, \quad (12)$$

而且 d 波参量与 s 波参量有关, 即

$$\frac{\Delta_1}{\Delta_2} = \frac{V_2 - V_1}{V_2 + V_1}. \quad (13)$$

以上结果忽略了 d-d 配对和 p-p 配对, 这在 Cu 位间或 O 位间的在位作用和近邻作用都是排斥力时可以接受, 而且在求解过程中也可以看出.

### 3. 结果与讨论

在实际参数范围内, 由于在最佳掺杂附近, Cu

位空穴和 O 位空穴已经退局域, Cu 位作用参数  $U_d$  不会比 O 位作用参数  $U_p$  大很多, 于是由(6)和(10)(11)式得  $A < 0$ , 且  $B < 0$ . 这样一来, 如果  $V_1 > 0$ ,  $V_2 > 0$ , 此时(12)式无解, 这说明如果 d-p 作用为排斥力, 则不存在 d-p 配对及其引起的超导. 当  $V_1 < 0$ ,  $V_2 > 0$ , 则存在  $\Delta_1 > \Delta_2$  的解, 此时 d 波配对序占优势. 特别地, 当  $V_1 + V_2 = 0$ , 存在  $\Delta_1 \neq 0$  而  $\Delta_2 = 0$  的解, 此时只有 d 波超导序而无 s 波超导序. 另外, 当  $V_1 = V_2 < 0$ , 由(13)式得  $\Delta_1 = 0$ , 此时无 d 波配对, 只可能有 s 波配对. 可见, 面内 d 空穴与 p 空穴作用的各向异性直接影响到配对序参量的对称性, 实验上发现的 s 波分量随掺杂而变化<sup>[10]</sup>或许可以由此得到解释. 有效引力是空穴配对的条件.

有趣的是, 设 d-p 间的交迭积分  $t_{il} = 0$ , 则由于并未计入 Cu 位空穴间的交迭积分, 因此 Cu 位空穴应该是局域化的, 不可能与 O 位空穴配对形成超导, 但若假设  $V_1$  和  $V_2$  之一为负, 仍存在配对序, 这看上去是非物理的. 在这个问题上, 要注意两点. 其一, 交迭积分  $t_{il} = 0$  而  $V_1$  和  $V_2$  之一为负不符合最佳掺杂时的实际情况, 但它可以表示特定条件下的 O 位空穴围绕 Cu 位空穴旋转, 这类似于形成了“自旋单态”<sup>[11]</sup>, 形成局域化的空穴对, 此时 O 位空穴也有在位间跳跃的概率, 不能排除欠掺杂条件下会出现这样的“预配对”. 其二, 既然配对可以是局域化的, 让配对函数趋于零导出的温度就并不一定代表超导临界温度. 但如果模型参数是物理的, 得出的结

果也应该是物理的, 因此对退局域的空穴配对而言, 我们预期由配对函数可得出超导临界温度, 此时配对关联函数在临界温度以下也不为零. 应该说明的是, 这里所说的 d-p 配对, 不全同于 Zhang 和 Rice 的自旋单态. 局域化的 d-p 配对与自旋单态相似, 非局域化的 d-p 配对则直接成为超导态的库伯对. 由于 d 空穴不如 p 空穴自由, 因此有效配对尺寸受到限制. 另外, d-p 作用(8)式只是一种可能的形式, 具体形式与材料结构及载流子分布有关, 因而 d 波成分所占比例以至临界温度都是可变的.

## 4. 结 论

由于 d-p 模型能很好地反映 CuO 面内的能带结构, 因此用来描述层状氧化物的超导态易于显示其微观机理. 在最佳掺杂附近, 可以假设声子和面内电荷的分布等原因, 使面内空穴间的作用各向异性. 各向排斥不能引起配对. 空穴的退局域也可得到理解, 有效引力可以导致以 d-p 配对占主导作用的超导态, 可以是 d 波配对为主, 也可以是 s 波配对为主. 而且在 Cu 位空穴是局域化的情况下, 面内 d-p 间的有效引力作用可引起局域化的“预配对”, 这与 Zhang 和 Rice 提出的欠掺杂时的自旋单态不谋而合, 但本文提出的移动的 d-p 配对可直接作为超导态的库伯对. 在配对关联的条件下, 才能用配对函数确定超导临界温度.

- [ 1 ] Tsuei C C and Kirtley J R 2000 *Rev. Mod. Phys.* **72** 969  
 [ 2 ] Miyake K, Schmitt-Rink S and Varma C M 1986 *Phys. Rev. B* **34** 6554  
 [ 3 ] Sun J X *et al* 1997 *Chin. J. Low Temperature Phys.* **19** 166 (in Chinese) [ 孙久勋等 1997 低温物理学报 **19** 166 ]  
 [ 4 ] Eskes H, Oles A, Meinders M B and Stephan W 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17980  
 [ 5 ] Assaad F F, Imada M and Scalapino D 1997 *Phys. Rev. B* **56** 15001

- [ 6 ] Song B and Wang Y P 2003 *Chin. Phys. Lett.* **20** 287  
 [ 7 ] Cao T D, Guo S L, Li C Q and Cheng G S 2004 *Physica C* **402** 388  
 [ 8 ] Bulut N and Scalapino D J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 14971  
 [ 9 ] Cao T D 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1118 (in Chinese) [ 曹天德 2002 物理学报 **51** 1118 ]  
 [ 10 ] Kendziora C, Kelley R J and Onellion M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 727  
 [ 11 ] Zhang F C and Rice T M 1988 *Phys. Rev. B* **37** 3759

# Pairing symmetry with interband interaction<sup>\*</sup>

Cao Tian-De<sup>1)</sup> Xu Li-Na<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>( *Department of Physics , Nanjing University of Information Science and Technology , Nanjing 210044 , China* )

<sup>2)</sup>( *Department of Physics , Fudan University , Shanghai 200433 , China* )

( Received 16 April 2004 ; revised manuscript received 4 August 2004 )

## Abstract

We investigate the superconductivity of high- $T_c$  oxides with the d-p model. It is shown that the d-p pairing can dominate the superconductivity. The pairing symmetry depends on the anisotropic d-p interaction in  $\text{CuO}_2$  plane. The anisotropic d-p interaction can lead to d-wave or s-wave symmetry , but the repulsive interaction in the  $\text{CuO}_2$  plane cannot lead holes to being paired. The ' preliminary pairing ' may appear in a lightly doped regime. The critical temperature cannot be found for the pairing order parameter when the pairs are localized. The delocalization of holes and evolution of pairing symmetry with increasing doping are explained.

**Keywords** : d-wave symmetry , d-p pairing , superconductivity

**PACC** : 7420M

---

<sup>\*</sup> Project supported by the Natural Science Foundation from the Education Bureau of Jiangsu Province , China( Grant No. 02KJD140005 ).