国防科技大学学报
JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY
第15卷第1期　1993年3月　Vol. 15 No. 1

高温超导层状势研究*

陆彦文
（应用物理系）

摘　要　本文对文献[1]中提出的层状势作了较为深入的研究，作出了相互作用强度 U 与 ω 间关系的曲线，U 与电子密度 N_e^0 间关系的曲线和 U 与铜氧层数 l 间的关系曲线。进而对层状势的微观机制——Cu－O 层的有效哈密顿量进行了研究，得到了铜氧层的有效哈密顿量，讨论了空穴（附属费密子）凝聚成库柏对的条件。

关键词　超导体，层状势，铜氧层，有效哈密顿量，二级微扰

分类号　O511. 2

在文献[1]，虽已推导出含铜氧化物超导体载流子之间的相互作用势即层状势，但对势的物理性质未作深入的研究，尤其对势的微观机制基本上未作研究。本文将对层状势的物理性质和微观机制作较为深入的研究。

1　层状势的物理物质

按照文献[1]，层状势的傅里叶变换式 $V(q_p)$ 为：

$$V(q_p) = \frac{2\pi e^2}{q_p \in_{\text{eff}}} \tag{1}$$

式中 $\in_{\text{eff}}$ 为有效介电常数

$$\in_{\text{eff}} = \frac{\in (\omega^2 - \omega_+^2)(\omega^2 - \omega_-^2)}{(\omega^2 - \omega_{01}^2)(\omega^2 - \omega_{02}^2)} \tag{2}$$

而

$$\omega_\pm^2 = \frac{1}{2}\{(\omega_{01}^2 + \omega_{02}^2 + \Omega_1^2 + \Omega_2^2) \pm [(\omega_{01}^2 + \omega_{02}^2 + \Omega_1^2 + \Omega_2^2)^2 - 4(\Omega_1^2\omega_{02}^2 + \Omega_2^2\omega_{01}^2 + \omega_{01}^2\omega_{02}^2)]^{1/2}\} \tag{3}$$

$$C^2 = (\lambda_{1M} + \lambda_{2M})/M, \omega_{01}^2 = C^2 q_p^2$$

$$\omega_{02}^2 = \pi N_e^0 h^2 q_p^2/m, \Omega_1^2 = 2\pi N_i^0 z^2 e^2 l q_p/(M \in)$$

$$\Omega_2^2 = 2\pi N_e^2 e^2 q_p/m \in, \in = \sqrt{\in_p \in_z} \tag{4}$$

$V(q_p)$ 的方位平均为：

$$U(E,E') = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\theta V(q_p) \tag{5}$$

* 1992年2月6日收稿

将(1)、(2)、(3)和(4)代入(5)，在 $A^{[1]}$略小于且接近于$-2k_F$ 时，利用数值计算描出了 U（E，E'）相对于 $\omega=(E-E')/h$的曲线（图 1）。为了描出图 1，(5) 式中的各参数值分别取为：$\varepsilon=4.0$，$m=0.91\times10^{-21}g$，$N_e^0=2.0\times10^{+14}\mathrm{cm}^{-2}$，$N_i^0=7.0\times10^{-14}cm^{-2}$，$M=6.6\times10^{22}$g. 这些参数对应于 $La_{1.8}Sr_{0.2}CuO_4$[2,3]。

从图可知，U 有一狭窄的吸引区域：$-2(10^{-6}e^2/r_0h)<\omega<2(10^{-6}e^2/r_0h)$。在该区域内载流子间可形成库柏对。这与文献[1]中的近似表达式(46)和表达式(47)是吻合的。在这区域外，U 迅即变为排斥的，不能形成库柏对。

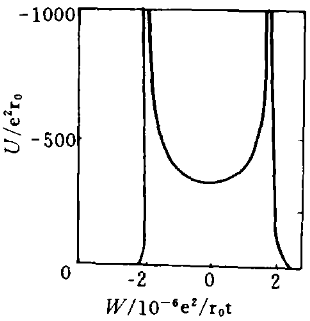

图 1 相互作用强度 U 与 $\omega=\frac{E-E'}{h}$间的关系

在图 2，描出了 $E'=E$ 时，相互作用强度 U 与电子密度 N_e^0 间的关系。在描出这条曲线时，除 N_e^0 外，其它参数是固定不变的。由图可见，互作用强度 U 随着电子密度 N_e^0 的增加将变得非常强。$A=-2k_F$ 时，U 成为发散。

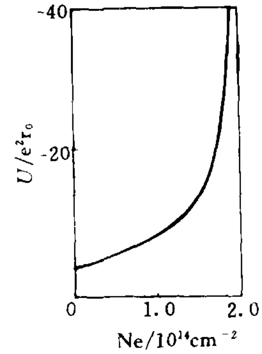

图 2 $E=E'$时 U 与电子密度 N_e^0 间的关系

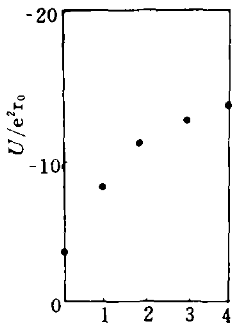

图 3 U 与铜氧层数 l 间的关系

图 3 描出了互作用强度 U 与原胞中 Cu—O 层数间的关系。图中除 l 外，其它参数是固定不变的。从图可见，U 随 l 的增加而增加。

2 层状势的微观机制——Cu—O 层的有效哈密顿量

现在研究 U 的微观机制——Cu—O 层的的有效哈密顿量。实验表明，几种典型的高温超导体，如 Y 系、Bi 系和 Ti 系都是空穴型导电。有些研究者指出。O 位置处的空穴可能是超导电性的起源[4]。图 4 画出了氧面的晶格结构。下面，就从关于空穴运动的 Hubbard 模型[5,6]出发，研究铜氧层中的有效相互作用势。Hubbard 哈密顿量为[7,8]：

$$H=-t\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\sigma}(C_{i\sigma}^{+}C_{j\sigma}+C_{j\sigma}^{+}C_{i\sigma})+U\sum_{i}n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \tag{6}$$

式中 (i, j) 是表示对最近邻和次近邻位置求和，t 表示氧位置上空穴间的交换积分，U 表示空穴间的库伦相互作用能。考虑到 $U\gg t$[9]，将哈密顿量 H 按$\frac{t}{U}$展成级数，只取到第

一级，对于自旋 $S=\frac{1}{2}$ 费密系统有：

$$H = -t\sum_{(i,j),\sigma}(C_{i\sigma}^+C_{j\sigma} + C_{j\sigma}^+C_{i\sigma}) + 2\tau \times \sum_{(i,j)}(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4}) \tag{7}$$

式中 $\tau=\frac{2t^2}{U}$。作变换：

$$S_i^+ = S_{i\uparrow}^+ S_{i\downarrow}, \qquad S_i^z = \frac{1}{2}(S_{i\uparrow}^+ S_{i\uparrow} - S_{i\downarrow}^+ S_{i\downarrow})$$

$$C_{i\uparrow} = S_{i\uparrow} e_i^+ \tag{8}$$

式中 $S_{i\sigma}$或 $S_{i\sigma}^+$ 是薛定谔玻色算符，e_i 或 e_i^+ 为附属费密算符[10]：

$$H = H_t + H_\tau \tag{9}$$

$$H_t = -\sum_{(i,j),\sigma} t_{ij}(e_i e_j^+ S_{i\sigma}^+ S_{j\sigma} + e_j e_i^+ S_{j\sigma}^+ S_{i\sigma}) \tag{10}$$

$$H_\tau = -\tau\sum_{(i,j),\sigma}[S_{i\sigma}^+ S_{j,-\sigma}^+ S_{j,-\sigma} S_{i\sigma} - S_{i\sigma}^+ S_{j,-\sigma} S_{j\sigma} S_{i,-\sigma}] \tag{11}$$

将 $Cu-O$ 层晶格分成两个子格：A 子格和 B 子格，位置在 $\boldsymbol{r}_i=(m+n,\ m-n)$ 的格点属 A 子格，相应的有关算符表为 $S_{i\sigma}=S_{i\sigma}^A$和 $e_i=a_i$. 位置在 $\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{Z}=(m+n+1,\ m-n)$ 的格点属 B 子格，相应的有关算符表为 $S_{i\sigma}=S_{i\sigma}^B$和 $e_{i+z}=b_i$. 这里的脚标 $i+\boldsymbol{Z}$ 表示位置 $\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{Z}_i$. 在 H_t 中，考虑到第三近邻格点位置：第一近邻时，$|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|=1$，$t_{ij}=t$；第二近邻时，$|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|=\sqrt{2}$，$t_{ij}=t'$；第三近邻时，$|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_j|=2$，$t_{ij}=t''$. 这里的晶胞常数取为 1.

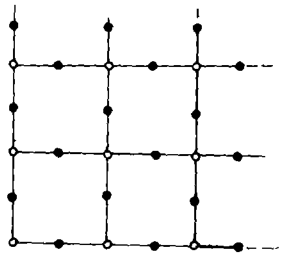

图 4 Cu—O 面的晶格结构

O —— Cu　　· —— O

首先考虑 H_τ. 在 H_τ 中，仅考虑到第一近邻既最近邻的情况[11]。定义序参量 Δ_z：

$$\Delta_z = \frac{1}{2}\langle S_{i\downarrow}S_{i+Z\uparrow} - S_{i\uparrow}S_{i+Z\uparrow}\rangle \tag{12}$$

式中符号 $\langle\cdots\cdots\rangle$ 意为取平均，$\boldsymbol{Z}$ 表示 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$，$i+z$ 表示在 z 方向与 $\boldsymbol{r}_i$ 位置最相邻的位置。对 $S_{i\sigma}^+$ 等算符做傅里叶变换：

$$S_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{ik\cdot r_i}S_{k\sigma} \tag{13}$$

式中 N 为晶格格点总数，$\boldsymbol{k}$ 为二维波矢。于是，在平均场近似下，在 $\boldsymbol{k}$ 空间 H_τ 可表示为：

$$(H_{\tau k})_{MF} = \sum_k[-4n_\uparrow \tau S_{k\uparrow}S_{k\uparrow} - 4n_\downarrow\tau \times S_{-k\downarrow}^+ S_{-k\downarrow} + \gamma_k S_{k\uparrow}^+ S_{-k\downarrow}^+ + \gamma_k^* S_{-k\downarrow}S_{k\uparrow}] + 4\tau N[|\Delta_x|^2 + |\Delta_y|^2 + n_\uparrow n_\downarrow] \tag{14}$$

式中 $n_\uparrow$ 为 $n_{i\uparrow}=S_{i\uparrow}^+S_{i\uparrow}$ 的傅里叶变换式

$$\gamma_k = 4i\tau(\Delta_x \sin k_x + \Delta_y \sin k_y) \tag{15}$$

定义 θ_k 和 λ：

$$\gamma_k = |\gamma_k| e^{i\theta_k} \tag{16}$$

$$\lambda = -2\tau(n_\uparrow + n_\downarrow) \tag{17}$$

作玻戈留波夫变换：

$$S_{k\uparrow} = u_k\alpha_k - v_k\beta_k^+ \tag{18}$$

$$S_{-k\downarrow} = -v_k\alpha_k^+ + u_k\beta_k \tag{19}$$

式中

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\lambda}{E_k} + 1\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{2}\theta_k} \tag{20}$$

$$v_k = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\lambda}{E_k} - 1\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{2}\theta_k} \tag{21}$$

于是$(H_\sigma)_{MF}$化成：

$$(H_\sigma)_{MF} = \sum_k [E_\alpha(\boldsymbol{k})\alpha_k^+\alpha_k + E_\beta(k)\beta_k^+\beta_k + E_k - \lambda] + 4\tau N[|\Delta_x|^2 + |\Delta_y|^2 + n_\uparrow n_\downarrow] \tag{22}$$

式中
$$E_\alpha(k) = E_k + 4m\tau \tag{23}$$

$$E_\beta(k) = E_k - 4m\tau \tag{24}$$

$$m = \frac{1}{2}(n_\uparrow - n_\downarrow) \tag{25}$$

得到了 H_σ 在 $\boldsymbol{k}$ 空间的对角化能谱。

下面研究 H_t。对 $S_{i\sigma}(S_{i\sigma})$和 $e_i^+(e_i)$作傅里叶变换后，在 $\boldsymbol{k}$ 空间，H_t 成为 H_{tk}：

$$H_{tk} = \frac{1}{N}\sum_{k_1,k_2}\sum_{q,\sigma}\{[t(k_1 - k_2)e^{i(k_{1x}-k_{2x})}b_{k1}^+a_{k_1+q} \times S_{k2+q\sigma}^+S_{k_2\sigma}^B + H\cdot C] + t'(k_1 - k_2)[a_{k_1}^+ \times a_{k_1+q}S_{k_2+q}^{A+}S_{k_2}^A + b_{k1}^+b_{k_1+q}S_{k_2+q}^{B+}S_{k_2}^B]\} \tag{26}$$

式中 $t(k) = 2t(\cos k_x + \cos k_y)$

$$t'(k) = 4t'\cos k_x\cos k_y + 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) \tag{27}$$

a_k 和 b_k 分别为 a_i 和 b_i 的傅里叶变换。对(26)式作一级微扰计算，即对 H_{tk}中 S^+S 取图 5 (a)所示的热平均后、得到附属费密算符的能谱：

$$\langle H_{tk}\rangle = \sum_k E_h(k)(a_k^+a_k + b_k^+b_k) \tag{28}$$

式中
$$E_h(k) = \frac{1}{N}\sum_{k_1,\sigma} t'(k - k_1)\langle S_{k_1\sigma}^{A+}S_{k_1\sigma}^A\rangle \tag{29}$$

应用(14)和(29)式，可得到哈密顿量 H 在 $\boldsymbol{k}$ 空间的一级微扰表示：

$$H_k = \sum_k [E_\alpha(k)\alpha_k^+\alpha_k + E_\beta(k)\beta_k^+\beta_k + E_k - \lambda + E_h(k)(a_k^+a_k + b_k^+b_k)] + 4\tau N\cdot[|\Delta_x|^2 + |\Delta_y|^2 + n_\uparrow n_\downarrow] \tag{30}$$

从(30)式所示的一级能谱中，看不出附属费密子间存在相互吸引作用。试对附属费密子作如图 5 (b) 所示的二阶微扰计算，可得到

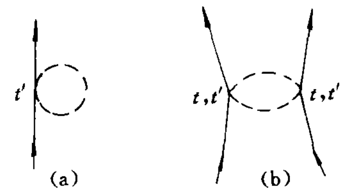

图 5

(a) 对附属费密子的第一级微扰；(b) 对附属费密子的第二级微扰

有效哈密顿量在 $\boldsymbol{k}$ 空间的表示：

$$H_{\mathrm{eff}} = \frac{1}{N}\sum_{k_1,k_2} V(k_1,k_2) a^{+}_{k_h+k_2} b^{+}_{k_h-k_2} b_{k_h-k_1} a_{k_h+k_1} \times e^{i(k_1-k_2)} \tag{31}$$

式中

$$\begin{aligned} V(k_1,k_2) = & -\frac{4(n_B-\frac{1}{2}\delta)}{[E_h(K_h-K_1)-E_h(K_h-K_2)]^2-E_s(K_s+K_1+K_2)^2} \\ & \times \{[8\tau\Delta + E_s(K_s+K_1+K_2)]t(K_h+K_s-K_1) \\ & \times t(K_h-K_s+K_2) + [8\tau\Delta - E_s(K_s+K_1+K_2)] \\ & \times t(K_h+K_s-K_1)t(K_h+K_s-K_2) + \sum_{i=1}^{2}\gamma K_s \\ & + K_1+K_2)t(K_h-K_s+K_i)t(K_h+K_s-K_i)\} \\ & + \frac{4(n_B-\frac{1}{2}\delta|\gamma(K_s+K_1+K_2)}{[E_h(K_h-K_1)-E_h(K_h-K_2)]^2-E_s(K_s+K_1-K_2)^2} \\ & \times \sum_{i=1}^{2} t'(K_h-K_s+K_i)t'(K_h+K_s-K_i) \end{aligned} \tag{32}$$

$\boldsymbol{\delta}$ 为空穴浓度，$\boldsymbol{n_B}=0.3034$，$\boldsymbol{E_s(K)}=4\boldsymbol{J\Delta}\times\sqrt{1-(\sin\boldsymbol{K_x}+\sin\boldsymbol{K_y})^2/4}$是自旋系统的能谱，$\boldsymbol{\gamma}(\boldsymbol{k})=2\boldsymbol{iJ\Delta}\times(\sin\boldsymbol{K_x}+\sin\boldsymbol{K_y})$

$$K_h = \begin{cases} (\pi/2,-\pi/2), t' > \max(1.86t'',0) \text{ 时} \\ (\pi/2,\pi/2) \quad , t'' < \min(-1.86t'',0) \text{ 时} \\ (0,0),(\pi,0), \quad \text{其它} \end{cases} \tag{33}$$

$\boldsymbol{K_h}$ 围成附属费密子的一个小费密面，费密动量 $\boldsymbol{k_F}=\sqrt{2\pi\boldsymbol{\delta}}$. 对(32)式取角平均后，式中的 $\boldsymbol{E_s(Ks+K_1\pm K_2)}$成为 $\boldsymbol{E_s(K_s+K_F)}$，(32)式则成为：

$$\langle V\rangle = \frac{16J\Delta(n_B-\frac{1}{2}\delta)w}{[E_h(K_h-K_1)-E_h(K_h-K_2)]^2-E_s(K_s+K_F)^2} \tag{34}$$

式中

$$w=\begin{cases}4\pi^2\delta^2t^2+32(t'-t'')^2 & t'>\max(1.86t'',0)\\ -16\pi\delta t^2+32(t'+t'')^2 & t'<\min(-1.86t'',0)\\ -16\pi\delta t^2+16\pi^2\delta^2t'^2+32t'' & \text{其它}\end{cases}\qquad(35)$$

(34)式表明，当$|\boldsymbol{E}_h(\boldsymbol{K}_h-\boldsymbol{K}_1)-\boldsymbol{E}_h(\boldsymbol{K}_h-\boldsymbol{K}_2)|<\boldsymbol{E}(\boldsymbol{K}_s+\boldsymbol{K}_F)$时，在 $w>0$ 的情况下，相互作用是吸引性的由附属费密子对构成库的柏对凝聚形成。

参 考 文 献

1 陆彦文.国防科技大学学报，1992，14(3)

2 Finnemore D K ，shelton K N ，McCallum R W ，Ku H C，McCarley R E ，Chen C，Klavins P and Kogan v. Phys Rev B35，1987，(5319)

3 Ong N P，Wang Z Z，Clanhold J，Tarascon T M，Greene L H and McKinnon W R. Phys Rev B35，1987，(8807)

4 Emery V J. Phys Rev Lett. 1987，58(2794)

5 李正中.固体理论.高等教育出版社，1985

6 Anderson P W. Science，1987，235(1196)

7 Gros C，Joynt R and Rice T M . Phys Rev B36，1987，381

8 Yoshioka D. J Phys Soc Jpn 1990，59 (412)

9 Yoshioka D. J Phys Soc Jpn 1989，58 (1516)

10 Yoshioka D. J Phys Soc Jpn 1989，58 (32)

11 Yoshiokd D. J Phys Soc Jpn 1989，58 (3733)

Study of Layer Potential for High－Temperature Superconductor

Lu Yanwen

(Department of Applied Physics)

Abstract

This articl makes a deep study on layer potential developed in reference[1]. The curves that describe the relation between U and electron density N_e^0, and the relation between Cu－O plane number l and U , are traced. Furthermore, this article studies the micromechanism of layer potential －effective Hamiltonian for Cu－O layer. Effective Hamiltonian for Cu－O layer is obtained . The condition for holes (slave－fermions) to be condensed to Cooper pairs is dicussed.

Key Words\super conductor, layer potential, Cu－O layer, effective Hamiltonian, second－order perturbation