

铜氧化物高温超导体的比热容*

李贞姬, 王 涛, 谭小丹

(南方医科大学生物医学工程学院, 广东 广州 510515)

摘 要: 基于 Nozieres-Schmitt-Rink 的强耦合超导理论和推广的 Luttinger 理论, 文中分别计算了低电子浓度和高电子浓度体系的电子比热容及线性比热系数, 描绘出线性比热系数随温度的变化曲线。电子线性比热系数的计算结果表明, 在 Nozieres-Schmitt-Rink 理论和推广的 Luttinger 理论框架下, 铜氧化物高温超导体中产生隙隙。

关键词: 铜氧化物高温超导体, 电子比热容, 线性比热系数, 隙隙

中图分类号: O511.2 文献标志码: A 文章编号: 0529-6579 (2012) 03-0007-06

The Electronic Specific Heat in High Temperature Cuprate Superconductors

LI Zhenji, WANG Tao, TAN Xiaodan

(School of Biomedical Engineering, Southern Medical University, Guangzhou 510515, China)

Abstract: Based on the Nozieres-Schmitt-Rink theory and expanded Luttinger theory, the electronic specific heat coefficient $\gamma(T)$ is evaluated and plotted individually. The results indicated that the pseudo-gap phenomena are realized in quasi-two dimensional high temperature cuprate superconductors in the Nozieres-Schmitt-Rink theory and expanded Luttinger theory.

Key words: high temperature cuprate superconductors; electronic specific heat; the specific heat coefficient; pseudo-gap

理解超导现象, 有两个著名的理论: Bardeen Cooper Schrieffer (BCS) 理论和玻色-爱因斯坦凝聚。BCS 理论是弱耦合超导理论, 在常规低温超导电性的描述中取得了巨大成功。由于 BCS 理论是一个集体协同的理论, 所以在临界温度点 T_c ($\ll \varepsilon_F$), 电子配对与进入超导态 (相位相干态) 几乎是同时发生的。玻色-爱因斯坦凝聚, 描述的是独立玻色子的凝聚。高温超导体的一个重要特征是: 在弱掺杂区域正常态温度 T^* 以下, 首先形成电子间的“预配对”并形成能隙, 然后在更低的温度 T_c 以下形成“预配对电子”的玻色-爱因斯坦凝聚, 即电子对的形成与超导凝聚是分两步在不同的温度上发生的, 这是与 BCS 理论完全不同的图像。

从 BCS 理论的“电子配对”到“配对电子”的玻色-爱因斯坦凝聚, 是一个随着电子之间吸引

力的增加而平稳变化的过程^[1]。由于隙隙的产生伴随着该过程, 所以过渡问题可以看作是隙隙问题。

1994 年 Loram 等^[2]关于电子比热容的实验, 给出了高温超导体在正常态已形成某种电子束缚态的间接证明。另外 1996 年 Loeser 等^[3]利用角分辨光电子发射谱 (ARPES) 在 Bi-2212 弱掺杂样品的正常态中, 直接观测到谱权重的转移, 这是在正常态中隙隙存在的直接证据。近年来又有一些研究人员在 Bi-2201, Bi-2223 和 La214, Y123 等材料中观测到谱权重的转移^[4-5], 观察到隙隙现象。

许多基于自洽的、t-矩阵近似的研究结果从理论上证明了高温超导体隙隙的存在, 但他们的研究把着重点放在单粒子谱权重的计算上^[6-7]。本文的主要目的是在高低不同的电子浓度区域, 采用不同

* 收稿日期: 2011-08-01

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (60771035); 广东省科技计划资助项目 (2011B050300011)

作者简介: 李贞姬 (1963 年生), 女, 理学博士, 副教授; 通讯作者: 谭小丹; E-mail: lee0720@fimmu.com

的理论计算电子比热容以及线性比热系数, 并从线性比热系数的变化趋势确定正常态隙的存在。

1 Nozieres-Schmitt-Rink 理论框架下的隙现象

在强耦合高温超导理论中, Nozieres-Schmitt-Rink (NSR) 理论具有重要的地位和影响^[8]。NSR 理论的基本出发点是临界温度取决于 Thouless 条件 (见 (16) 式), 而化学势 μ 用自洽法得到, 这是与传统的 BCS 理论的主要区别。本节在 NSR 理论的基础上, 研究了准二维系统中从电子预配对的形成到玻色-爱因斯坦凝聚的演变过程, 并在临界温度 T_C 以上的温度区域, 计算了电子熵和比热系数 $\gamma(T)$, 发现了 $\gamma(T)$ 的隙行为。

1.1 基本公式

强耦合意味着有效吸引作用大于费密能。NSR 把 Leggett 的理论推广到了有限温度情形^[8-9], 此时电子体系的哈密顿可写成如下形式:

$$H = H_0 + H' \quad (1)$$

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k - \mu) C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} \quad (2)$$

$$H' = \sum_{kk'q} V_{kk'} C_{k+q/2,\uparrow}^+ C_{-k+q/2,\downarrow}^+ C_{-k'+q/2,\downarrow} C_{k'+q/2,\uparrow} \quad (3)$$

其中, $C_{k\sigma}^+$ 和 $C_{k\sigma}$ 分别表示动量为 k 、自旋为 σ 的电子的产生和湮灭算符。本文采用科研上常采用的自然单位制, 即 $\hbar = k_B = m = 1$, 并取单位体积。 \hbar 、 k_B 和 m 分别表示普朗克常数、玻耳兹曼常数和电子质量。有效相互作用矩阵元取各向同性 s 型分波势

$$V_{kk'} = \frac{-V}{[(1 + k^2/k_0^2)(1 + k'^2/k_0^2)]^{1/2}} \quad (4)$$

$1/k_0$ 给出相互作用能量范围, 电子能量取自由电子模型 $\varepsilon_k = k^2/2m$ 。此时若把 (4) 式中的 V 看作是无量纲耦合常数, 则文中出现的所有物理量都变成无量纲的量。

电子对的涨落对热力学势 $\Omega(\mu, T)$ 的贡献可根据 NSR 理论计算^[8]。对于各向同性 s 型分波势, 热力学势直接由下式给出:

$$\Omega' = \Omega - \Omega_f = T \sum_{\nu_m, q} \log[1 - \chi(\mathbf{q}, \nu_m)] = -\frac{1}{\pi} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} d\nu g(\nu) \delta(\mathbf{q}, \nu) \quad (5)$$

其中

$$\chi(\mathbf{q}, \nu_m) = \sum_k V_{kk} \frac{1 - f(\varepsilon_{q/2+k} - \mu) - f(\varepsilon_{q/2-k} - \mu)}{\varepsilon_{q/2+k} + \varepsilon_{q/2-k} - 2\mu - i\nu_m} \quad (6)$$

$f(\varepsilon)$ 和 $g(\varepsilon)$ 分别表示费米分布函数和玻色分布函数, $\nu_m = 2m\pi T$ 。自由费米子体系的热力学势由下式给出:

$$\Omega_f(\mu, T) = -T \sum_{k\sigma} \log[1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}] \quad (7)$$

相移 $\delta(\mathbf{q}, \nu)$ 在数值计算中扮演重要角色, 定义为:

$$\delta(\mathbf{q}, \nu) = \tan^{-1} \frac{\text{Im}\chi(\mathbf{q}, \nu)}{1 - \text{Re}\chi(\mathbf{q}, \nu)} \quad (8)$$

其中 $\chi(\mathbf{q}, \nu)$ 是推迟函数 $\chi(\mathbf{q}, \nu + i\delta)$ 。电子体系的总粒子数密度应包括自由电子和配对电子两部分, 粒子数与热力学势之间的关系为

$$\frac{1}{2}(N - N_f) = -\frac{\partial}{\partial \mu}(\Omega - \Omega_f) \quad (9)$$

上式隐含着化学势 μ 。显然, 化学势与温度有很强的依赖关系, 给临界温度和各种热力学量带来重要的影响, 这是 NSR 理论与 BCS 理论的主要区别所在。

电子体系的熵表示为

$$S' = S - S_f = -\left(\frac{\partial \Omega'}{\partial T}\right)_{\mu, \text{vol}} \quad (10)$$

其中 N_f 和 S_f 分别表示自由电子的粒子数密度和熵, 即

$$N_f = \sum_{k\sigma} f(\varepsilon_k) \quad (11)$$

$$S_f = -k_B \sum_{k\sigma} \{ [1 - f(\varepsilon_k)] \log[1 - f(\varepsilon_k)] + f(\varepsilon_k) \log[f(\varepsilon_k)] \} \quad (12)$$

由此可确定电子体系的比热容

$$C' = C - C_f = T \left(\frac{\partial S'}{\partial T} \right) = -T \left(\frac{\partial^2 \Omega'}{\partial T^2} \right) \quad (13)$$

这里, 热力学量亦通过化学势 $\mu(T)$ 与温度发生关系。

1.2 电子比热容

这一节我们将对上述热力学量进行定量计算, 这些热力学量是关于耦合强度 V 和电子浓度 N 的函数。

在电子浓度较低的系统中电子对的形成可用所谓的 t -矩阵近似描述。 t 为强耦合散射振幅, 可表示为无穷递减等比级数的和^[10], 即

$$t(\mathbf{q}, \nu) = -\frac{V}{1 - \chi(\mathbf{q}, \nu)} \quad (14)$$

当上式分母为零时, 可得到 Thouless 条件, 即

$$1 - \text{Re}\chi(\mathbf{q}, \nu) = 0 \quad (15)$$

因二维系统单位面积上的状态密度为 $m/2\pi$, 所以 (15) 式的求和式可在 $\mathbf{q} = \nu = 0$ 附近展开成如下的积分形式:

$$1 - \frac{mV}{4\pi} \int_0^{\varepsilon_0} \frac{\tanh[(\varepsilon - \mu)/2T]}{(1 + \varepsilon/\varepsilon_0)(\varepsilon - \mu)} d\varepsilon = 0, (\mathbf{q} = 0, \nu = 0) \quad (16)$$

其中 ε_0 是截止能量, $mV/4\pi$ 是无量纲耦合常数。

对于准二维系统的高温超导体而言, 在 ε_0 一定时, 针对不同的耦合常数可绘出 Thouless 条件 (16) 式所满足的曲线, 如图 1 所示。

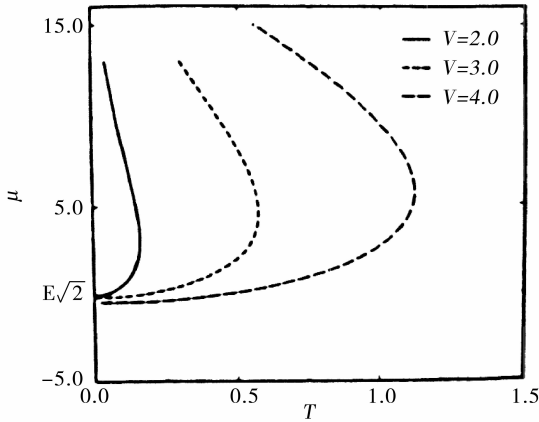


图 1 由 (16) 式绘出的 $\mu(T)$ 曲线. $\varepsilon_0 = 18$, 耦合强度 $V = 2, 3, 4$. E_0 是电子对的结合能

Fig. 1 Temperature dependence of the chemical potential $\mu(T)$ given by the Thouless condition (16) for $\varepsilon_0 = 18$ and for Various coupling strengths $V = 2, 3, 4$. E_0 is the binding energy of the pair of electron

满足 Thouless 条件 (16) 的曲线 (简称 Thouless 曲线, 如图 1 所示) 所包围的区域是平均场近似中超导态区域。从图 1 可以看出, 无论是强耦合还是弱耦合 Thouless 曲线的变化趋势是一致的, 提高耦合强度的唯一效果就是使超导临界温度得以提高。

为了更彻底地弄清问题的本质, 下面将通过计算动量积分 (而不是解近似方程) 来研究费米子体系。这里我们将考虑有限温度情形。

在 Thouless 条件的高温一侧, (9) 式仍然成立, 利用 (8) 式, 可得出相移 $\delta(\mathbf{q}, \nu)$ 对化学势 μ 的微分, 表示为如下形式:

$$\frac{\partial \delta(\mathbf{q}, \nu)}{\partial \mu} =$$

$$\frac{[1 - \text{Re} \chi(\mathbf{q}, \nu)] (\partial/\partial \mu) [\text{Im} \chi(\mathbf{q}, \nu)] + [\text{Im} \chi(\mathbf{q}, \nu)] (\partial/\partial \mu) [\text{Re} \chi(\mathbf{q}, \nu)]}{[1 - \text{Re} \chi(\mathbf{q}, \nu)]^2 + [\text{Im} \chi(\mathbf{q}, \nu)]^2}$$

$$(17)$$

严格地说, 超导转变不能发生在纯二维系统 (或说 $T_c = 0$)。Tokumitsu Miyake Yamada (TMY)^[11] 和 Li^[12] 等人指出, 在低温极限化学势

总是趋近于一对粒子的束缚态结合能。但是如果考虑弱三维情形, 即在二维的基础上, 考虑高温超导体层与层之间的弱相互作用, 则原来二维情形下的奇点产生偏移, 临界温度也因此得以提高 ($T_c > 0$)。图 2 所示的是弱三维情形下化学势 μ 随温度 T 、电子浓度 N 的变化曲线。

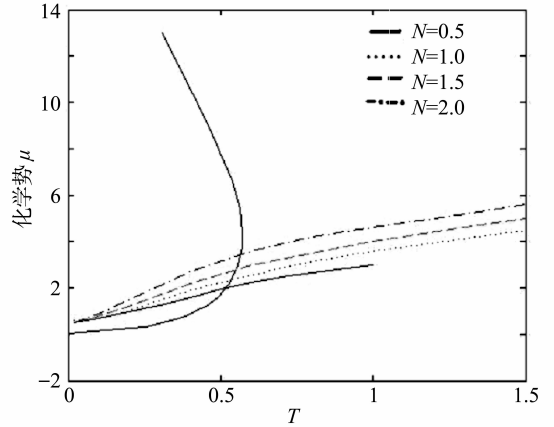


图 2 化学势随温度的变化关系。相互作用势能 $v = 4.0$, $\varepsilon_0 = 18$. 纵向实线满足 Thouless 条件 (16)
Fig. 2 Temperature dependence of the chemical potential $\mu(T)$ for coupling strengths $v = 4.0$. The solid line satisfy the Thouless condition (16)

我们可以看到, 化学势随温度的降低而减小, 在某一有限的温度与 Thouless 曲线相交, 从而达到玻色凝聚点。

必须强调的一点是, NSR 理论的特点在于电子对 (玻色子) 的形成使得遵循费米分布的电子浓度减小, 进而引起化学势的变化。以这种方法得到的临界温度比用 BCS 平均场近似法得到的临界温度要低。当温度升高时, 化学势趋于恒定值。

一旦化学势 $\mu(T)$ 确定下来, 则可由 (10) 和 (13) 式计算出电子系统的熵 $S(\mu, T)$ 和比热容 $C(\mu, T)$ 。在图 3 中, 我们描绘出熵、比热容和线性比热系数随温度的变化曲线。

图 3 中, 截止波数取 $k_0 = 6.0$, 抛物线型实线对应 Thouless 条件 (16), 即超导态和非超导态的分界线。电子熵 $S(\mu, T)$ 是温度 T 的单调函数, 当温度从高温区开始向低温区移动时, 电子熵逐渐变小, 接近超导转变温度 T_c 时减小得稍快。

电子比热容系数 $\gamma(T)$ 呈现峰状结构, 它随温度的下降而变大, 大约在以平均场近似法得到的超导转变温度 T_{MF} 附近达到最大值, 之后迅速下降。

现在让我们来讨论一下从电子线性比热系数

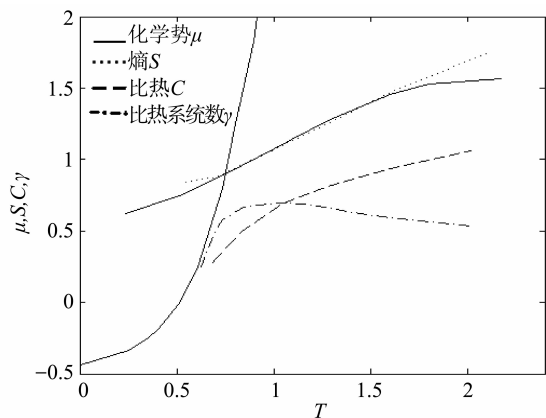


图 3 熵、比热容和线性比热系数随温度的变化曲线。

截止波数取 $k_0 = 6.0$, 各种参数的取值为:

$$V = 4.0, N = 0.1.$$

Fig. 3 The specific heat c and the specific heat coefficient γ as a function of T for fixed $k_0 = 6.0$ and for the parameters:

(a) $V = 4.0, N = 0.3$. (b) $V = 4.0, N = 0.1$.

The solid line satisfy the Thouless condition (16).

$\gamma(T)$ 观察到的的赭隙行为。对理解赭隙现象而言, $\gamma(T)$ 曲线的峰值十分重要, 它显示着相位的相干, 是形成玻色凝聚的临界点。由图 3 可知 $\gamma(T)$ 在大于 T_c 时已随温度的减小而减小, 这就意味着赭隙的出现。我们已证实在低电子密度系统中, $\gamma(T)$ 的峰值将随耦合强度的增加逐渐向高温区移动, 即强耦合系统的赭隙现象非常清晰。

2 Luttinger 的理论框架下的赭隙现象

一般地来说, 超导涨落较强时, 基于 NSR 理论的 t -矩阵近似亦适合于高电子浓度的系统。但严格地讲, 以化学势的转移来计算临界温度的方法, 仅在低浓度电子系统得以证明。

我们知道高 T_c 铜氧化物超导体属于高载流子浓度系统, 因为它的晶格处于半填充状态。

在高 T_c 铜氧化物超导体中所观察到的赭隙行为, 可以解释成准二维系统超导涨落引起的直接效应^[6-7]。通过他们的论文可以预测, 上述高温超导体的线性比热系数在高于临界温度 T_c 的赭隙区域会减小, 因此有必要用 NSR 理论以外的其它理论对高电子浓度系统进行数值计算和讨论。

2.1 基本公式

1960 年, Luttinger^[13-14] 根据朗道费米液体理论提出了热力学势的微观形式。Luttinger 的理论虽然在原理上并不新颖, 但可利用该理论推导并解释迄今仍未得以彻底解决的 Pseudo-gap 现象。

最初提出的 Luttinger 理论是非自恰的, 是针对

排斥势而言的, 本文对 Luttinger 理论进行推广, 用电子之间的吸引势取代粒子之间的排斥势, 着重讨论通过线性比热系数观察到的 Pseudo-gap 现象。这样哈密顿和仍然采用 (1) - (3) 式, 有效相互作用矩阵元仍取各向同性 s 型分波势 (4) 式。

按照 Luttinger 的理论, 热力学势 Ω 由下式表示:

$$\Omega = T \sum_{k, \omega_n} e^{i\omega_n 0^+} \log G(\mathbf{k}, \omega_n) \quad (18)$$

其中格林函数定义为

$$G(\mathbf{k}, \omega_n) = [\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega_n)]^{-1} \quad (19)$$

这里 $\omega_n = (2n+1)\pi T$, 而自能 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega_n)$ 起源于电子之间的引力势能。这样系统的电子比热容表示为

$$C = -T \frac{\partial^2 \Omega}{\partial T^2} = \frac{T\pi^2}{3} \sum_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{k}, \mu) \gamma_{\mathbf{k}}^* = \gamma T \quad (20)$$

$\gamma_{\mathbf{k}}^*$ 表示质量重整化因子, $\rho(\mathbf{k}, \mu)$ 表示谱权重函数, 分别为

$$\gamma_{\mathbf{k}}^* = 1 - \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \quad (21)$$

$$\rho(\mathbf{k}, \mu) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma^R(\mathbf{k}, 0)]^{-1} = \frac{-\text{Im} \Sigma^R(\mathbf{k}, 0) / \pi}{[\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \text{Re} \Sigma^R(\mathbf{k}, 0)]^2 + [\text{Im} \Sigma^R(\mathbf{k}, 0)]^2} \quad (22)$$

2.2 电子线性比热系数

为了得到以上的量, 首先计算自能部分:

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = T \sum_{q, i\nu_m} t(\mathbf{q}, i\nu_m) G(\mathbf{q} - \mathbf{k}, i\nu_m - i\omega_n) \quad (23)$$

这里仍采用体现超导涨落的 t -矩阵近似:

$$t(\mathbf{q}, \nu) = -\frac{V}{1 - \chi(\mathbf{q}, \nu)} \quad (24)$$

$$\chi(\mathbf{q}, \nu_m) = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \frac{1 - f(\varepsilon_{\mathbf{q}/2+\mathbf{k}} - \mu) - f(\varepsilon_{\mathbf{q}/2-\mathbf{k}} - \mu)}{\varepsilon_{\mathbf{q}/2+\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{q}/2-\mathbf{k}} - 2\mu - i\nu_m} \quad (25)$$

经过解析计算可得到自能的实部和虚部, 它们分别是:

$$\text{Re} \Sigma^R(\mathbf{k}, \omega) =$$

$$\sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{\pi} [b(\nu) \text{Im} t(\mathbf{q}, \nu) G^A(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \nu - \omega) - f(\nu) t(\mathbf{q}, \nu + \omega) \text{Im} G^R(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \nu)] \quad (26)$$

$$\text{Im} \Sigma^R(\mathbf{k}, \omega) = -\sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\nu}{\pi} [b(\nu + \omega) + f(\nu)] \cdot \text{Im} t(\mathbf{q}, \nu + \omega) \text{Im} G^R(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \nu) \quad (27)$$

其中格林函数

$$G^R(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \nu) = [\nu - (\varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} - \mu) + i\delta]$$

在图4中我们描绘出自能函数的实部和虚部。

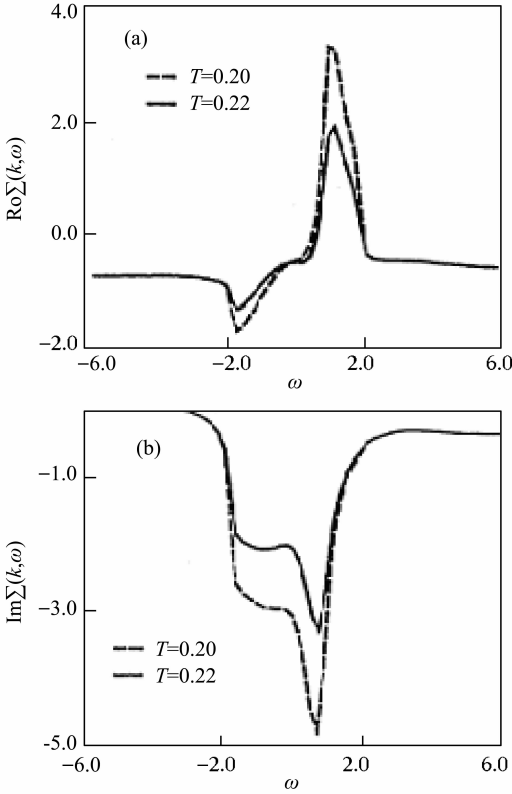


图4 (a) 自能函数的实部. (b) 自能函数的虚部. 耦合常数 $V = 2.1$, 电子浓度 $N = 0.5 (T_{MF} = 0.118)$. \mathbf{k} 点取费米面 \mathbf{k}_F 附近的值, 费米能的位置由 $\omega = 0$ 给定

Fig. 4 (a) The real part of the self-energy. (b) The imaginary part of the self-energy. Coupling constant $V = 2.1$, electron density $N = 0.5 (T_{MF} = 0.118)$. The \mathbf{k} -point is chosen on the Fermi surface near \mathbf{k}_F . The position of the Fermi energy is given by $\omega = 0$

我们同时描绘出电子线性比热系数, 如图5所示。

在图4和图5中, 费米能 $\varepsilon_F = \pi N$ 。现在我们来分析一下基于超导涨落的计算结果。在传统的费米液体理论里, $-\text{Im}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega) \propto \omega^2 + (\pi T)^2$, 即 $-\text{Im}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)$ 在 $\omega = 0$ 处有极小值。于此相对应, 在 $\omega = 0$ 处 $\text{Re}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)$ 的斜率为负值, 所以准粒子的质量重整化因子 $\gamma_k^* = 1 - \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} > 1$ 。但如果存在能隙, 则由于 t-矩阵对 \mathbf{q}, ν 两个变量有很强的依赖性, 所以自能函数呈现出违背传统的费米理论之势: 首先在 $\omega = 0$ 处 $-\text{Im}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)$ 的值较大, 这将减小费米面处的谱权重, 其次, 也是在 $\omega = 0$ 处, $\text{Re}\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)$ 斜率为正值, 这样一来重整化因子 $\gamma_k^* = 1 - \left. \frac{\partial \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} < 1$, 这一结果将直接

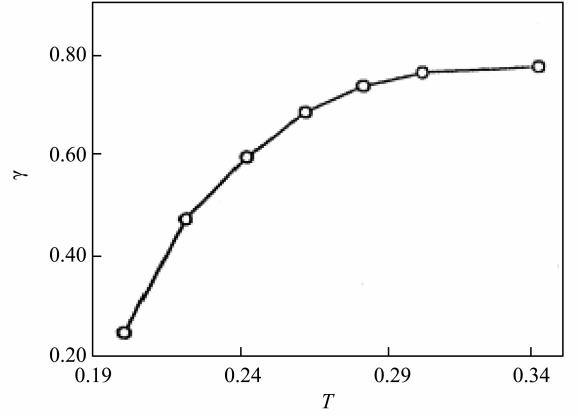


图5 低温 (但 $T < T_{MF}$) 电子比热容, $\mathbf{k} = \mathbf{k}_F$, 其他参量与图3相同。

Fig. 5 The specific heat coefficient at low-temperature above T_{MF} , $\mathbf{k} = \mathbf{k}_F$, The parameters are the same as in Fig. 3

导致线性比热系数的减小。Yanase^[15]等人也曾经指出这一点, 但他们并没有计算比热。

自能的反常行为起源于强相互作用吸引势, 就像费米液体状态来源于相互作用排斥势一样。如果是通常的三维情形, 相互作用吸引势会使费米液体状态不稳定, 立即变成超导态, 但在准二维情形, T_{MF} 温度以上存在隙隙区域。

态密度减小也好, 质量重整化因子变小也好, 都是线性比热系数减小的关键因素, 这是一个非常重要的结果。在1.2节, 我们直接从热力学势 Ω 出发计算了比热系数 γ , 这种计算与非自恰场的 t-矩阵近似相对应, 因此1.2节的结果与这一节的结果相符合, 虽然前者并不包含谱权重的转移成分。

3 讨论和总结

本文首先在 NSR 理论的基础上, 研究了准二维系统中从 BCS 态到玻色-爱因斯坦凝聚态的过渡问题。我们在电子浓度较低情况下, 在临界温度 T_c 以上的温度区域, 计算了电子熵和比热系数 $\gamma(T)$, 发现了 $\gamma(T)$ 的隙隙行为。在高 T_c 铜氧化物超导体中所观察到的隙隙行为, 可以解释成准二维系统超导涨落引起的直接效应^[6-7]。我们认为, NSR 理论是关于超导涨落的理论, 所以在强耦合系统中可看到隙隙现象。

NSR 理论中化学势的温度依赖性起本质的作用。电子浓度很低时, 配对电子数量的起伏, 强烈地改变了以费米分布状态存在的电子数量及其对应的化学势, 而化学势的降低, 将直接导致临界温度的减小。

然而, 实际拥有赝隙现象的高温超导体载流子浓度较高, 配对电子的相互作用吸引势引起的化学势的偏移不是特别明显。Yanase 等^[15]就强关联高电子浓度问题, 做了较为详细的讨论。准二维系统具有反常的超导涨落特性, 这种涨落是出现赝隙的根本原因, 这一特性与电子浓度的多少无关。我们看到, 图 3 和在推广的 Luttinger 理论框架下绘出的图 5 中的 $\gamma(T)$ 呈现相似的变化趋势, 即在临界温度 T_c 之上, 他们都随温度的减小而减小, 但是临界温度 T_c 的降低却来自不同的原因: 电子浓度较低时, T_c 的降低是化学势减小的结果, 电子浓度较高时, 费米面处电子的态密度的减小是导致 T_c 下降的主要原因。

我们用 NSR 理论和推广的 Luttinger 理论计算了比热系数, 并讨论了赝隙现象。因都采用体现超导涨落的 t-矩阵, 故用 Luttinger 方法得到的与超导涨落相关的比热必然在低电子浓度时与 NSR 理论相符合。采用 NSR 理论计算 $\gamma(T)$ 过程中, 超导涨落引起的质量重整化因子效应包含在里面, 但费米面处电子的态密度转移效应并没有包含在里面。采用 Luttinger 的理论计算 $\gamma(T)$ 过程中, 两者都包含在里面。在高低不同的电子浓度区域, 采用不同的理论计算电子比热容以及线性比热系数 $\gamma(T)$, 并从 $\gamma(T)$ 的变化趋势确定赝隙现象的出现是本文得到的重要结果, 迄今为止, 还没有人在这样广泛的范围内通过计算电子比热容量来揭示赝隙的存在。

我们知道高温铜氧化物超导序参量是以 d 波为主, 但在空间不均匀处, 会出现局域的 d + S 混合波对称性形式, 而对于 YBCO 等存在正交畸变的高温铜氧化物超导体, 即使在空间均匀体系中也会产生 d + S 波形式的混合对称性。混合的 S 波成分虽然是少量, 但在比热等超导性质中却有重要作用。基于这样的思考, 本文采用了各向同性的 s-波模型。至今还没有人采用 d 波在任何理论框架下计算出比热, 所以无法进行比较。但是按照我们的处理方式, 可以推测若采用可分离的 d 波或 d + S 波模型, 亦可得出相同的结论, 只是能隙的结构为各向异性, 计算较为繁琐罢了。d 波或 d + S 波模型将在下一步的研究中继续讨论。

作为结论我们相信, 虽然我们的处理方式较为简单, 但基本可以勾勒出赝隙的物理图像, 而这些问题在纯粹的自洽场计算中并不十分清楚。我们的研究表明, 在这种不同寻常的中间温区, 赝隙的变化是连续的, 当然这个过程伴随着耦合强度和电子

浓度的变化。

参考文献:

- [1] ADHIKARI S K, LLANO M DE, SEVILLA F J, et al. The BCS-Bose crossover theory [J]. *Physica C*, 2006, 453:37 - 45.
- [2] LORAM J W, MIRZA K A, WADE J M, et al. The Electronic Specific Heat of Cuprate Superconductor [J]. *Physica C*, 1994, 235 - 240:134 - 137.
- [3] LOESER A G, SHEN Z X, DESSAU D S, et al. Excitation gap in the normal state of underdoped Bi2Sr2CaCu2O8 + delta [J]. *Science*, 1996, 273:325 - 329.
- [4] 刘国东. 高温超导体角分辨光电子能谱研究及新进展 [J]. *物理学进展*, 2004, 24(2):37 - 68.
- [5] 郑勇, 苏刚. 高温铜氧化物超导体能隙问题研究最新进展 [J]. *中国科学:G 辑*, 2009, 39(11):1553 - 1570.
- [6] YANASE Y. Theory of electric transport in the pseudogap state of High-Tc cuprates [J]. *J Phys Soc Jpn*, 2002, 71:278 - 292.
- [7] JUJO T. Effect of umklapp scattering on magnetic field penetration depth in High-Tc cuprates [J]. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2002, 71:888 - 904.
- [8] NOZIERES P, SCHMITT-RINK S. Bose condensation in an attractive fermion gas: From weak to strong coupling superconductivity [J] *J Low Temp Phys*, 1985, 59:195 - 211.
- [9] LEGGETT A J. *Modern trends in the theory of condensed matter* [M]. Berlin: Springer-Verlag, 1980:14.
- [10] ZIMAN J M. *Principles of the theory of solids* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1972:385.
- [11] TOKUMITU A, MIYAKE K, YAMADA K. Cooper-pair and Bose-Einstein condensations in two dimensions: A critical analysis based on the Nozières and Schmitt-Rink formalism [J]. *Phys Rev B*, 1993, 47:11988 - 12003.
- [12] LI Z J. Study of superconductivity based on the Nozieres-Schmitt-Rink formalism [M]. Doctor Thesis, Japan, 2001.
- [13] LUTTINGER J. M. Fermi surface and some simple equilibrium properties of a system of interacting fermions [J]. *Phys Rev*, 1960, 119(4):1153.
- [14] LUTTINGER J. M, Ward J. C. Ground-state energy and many-fermion system [J]. *Phys Rev*, 1960, 118:1417 - 1427.
- [15] YANASE Y, YAMADA K. Theory of pseudogap phenomena in High-Tc cuprates based on the strong coupling superconductivity [J] *J Phys Soc Jpn*, 1999, 68(9):2999 - 3015.