

Hubbard-Hirsch 模型的超导性*

刘金明¹⁾ 宫 蒂²⁾ 匡志强¹⁾

(1)中山大学物理学系,广州 510275; 2)中山大学无线电电子学系)

摘 要 应用么正变换微扰论和平均场近似研究了二维 Hubbard-Hirsch 模型的超导性. 在大 U 和中等掺杂情况下,只要跳跃常数足够大,模型仍然具有超导性,此时交换作用积分使它的超导相区域比相应的 Hubbard 模型的区域小很多.

关键词 超导性,Hubbard-Hirsch 模型

分类号 O511.2, O481.3

Hubbard 为了说明过渡金属氧化物的绝缘—金属转变,于 60 年代初提出了一个基于狭带中电子的强关联作用的哈密顿量^[1],这就是著名的 Hubbard 模型.后来,此模型被广泛用于讨论金属磁性问题^[2].1986 年发现高 T_c 超导体之后,又被广泛应用于讨论高 T_c 氧化物超导体的性质^[3].固体中电子间的库仑相互作用在 Wannier 表象中,可以表示为单中心,双中心,三中心...等多中心积分项之和.Hubbard 模型只取单中心项,忽略了双中心及以上的多中心积分项.这虽然是很好的近似,但在许多情况下,还必须考虑被忽略的多中心积分项.例如,大 U 半满的 Hubbard 模型的基态是反铁磁性,但许多过渡金属氧化物却显出铁磁性,因此 Hubbard 模型不足以描述这类氧化物的性质.近来,Hirsch 指出^[4],双中心积分项中的交换作用项对于金属铁磁性具有重要作用,即使在平均场近似下,也可以得到自发磁化,从而出现铁磁性,加上交换作用项的 Hubbard 模型就叫做 Hubbard-Hirsch 模型.此模型能更好地描述较广泛的过渡金属氧化物的性质.本文研究了大 U 有掺杂情况下,二维 Hubbard-Hirsch 模型的超导性相变.研究表明,虽然双中心积分项中的交换相互作用是不利于超导相的形成,但只要跳跃项足够大,此模型仍然可以具有超导性,只是超导相的区域比 Hubbard 模型的区域小很多.

1 大 U 条件下的等效哈密顿量

Hubbard-Hirsch 模型的哈密顿量为

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (C_{i\sigma} + C_{j\sigma} + C_{j\sigma} + C_{i\sigma}) - \mu \sum_{i, \sigma} C_{i\sigma} + C_{i\sigma} + U \sum_i C_{i\alpha} + C_{i\alpha} C_{i\beta} + C_{i\beta} + J'' \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ \sigma, \rho}} C_{i\sigma} + C_{j\rho} + C_{i\rho} C_{j\sigma} \quad (1)$$

收稿日期: 1994-09-02

* 国家教委博士点专项科研基金资助项目

式中, i, j 代表格点位置, $\langle ij \rangle$ 代表最近邻的链, σ, ρ 代表电子的自旋, α 表示自旋向上, β 代表自旋向下, $C_{i\sigma}^+$ 是格点 i 上, 自旋为 σ 的电子产生算符, t 是跳跃强度, μ 是化学势, U 是单中心积分势, J'' 是双中心积分的交换作用矩阵元. 若忽略双中心积分项, 即令 $J''=0$, 便是 Hubbard 模型.

在大 U 条件下, 双占据态的几率很小, 我们可以应用么正变换微扰论, 将含有双占据态的过程都忽略掉^[5]. 为此, 作以下变换

$$\left. \begin{aligned} C_{i\sigma}^+ &= (1 - n_{i\bar{\sigma}}) C_{i\sigma}^+ + n_{i\bar{\sigma}} C_{i\sigma}^+ \equiv h_{i\sigma}^- + n_{i\bar{\sigma}} C_{i\sigma}^+ \\ C_{i\sigma} &= C_{i\sigma} (1 - n_{i\bar{\sigma}}) + C_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \equiv h_{i\sigma} + C_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

式中, $\bar{\sigma}$ 表示与自旋 σ 相反. 我们将 H 分成单占据态项 H_h , 双占据态项 H_d 和混合项 H_{mix} 之和:

$$\begin{aligned} H &= H_h + H_d + H_{mix} \\ H_h &= -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (h_{i\sigma}^+ h_{j\sigma} + h \cdot c) - \mu \sum_{i\sigma} h_{i\sigma}^+ h_{i\sigma} - J'' \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (h_{i\sigma}^+ h_{i\sigma} h_{j\sigma}^+ h_{j\sigma} \\ &\quad + h_{i\sigma}^+ h_{i\sigma} h_{j\sigma}^+ h_{j\sigma}) \\ H_d &= -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (n_{i\bar{\sigma}} C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} + h, c) - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} n_{i\sigma} + U \sum_n n_{i\sigma} n_{i\beta} \\ &\quad - 2J'' \sum_{\langle ij \rangle} n_{i\sigma} n_{i\beta} n_{j\sigma} n_{j\beta} - J'' \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (h_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} h n_{j\bar{\sigma}} n_{j\sigma} + h, c) \\ H_{mix} &= -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (h_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} + n_{i\bar{\sigma}} C_{i\sigma}^+ h_{j\sigma} + h, c) \end{aligned} \quad (3)$$

作么正变换

$$H' = e^{iS} H e^{-iS} = H + i[S, H] + \dots \quad (4)$$

选 S , 使 H_{mix} 在最低阶的贡献为零, 即由下式

$$H_{mix} + i[S, H_h + H_d] = 0 \quad (5)$$

确定 S . 在大 U 近似下, 可得 S 的表示式为

$$S = \frac{-it}{U} \sum_{i, j, \sigma} (h_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}} - n_{i\bar{\sigma}} C_{i\sigma}^+ h_{j\sigma}) \quad (6)$$

只取一级近似, 忽略一切双占据态过程的贡献, 得等效哈密顿量为

$$\begin{aligned} H_{eff} &= -\delta t \sum_{i, j, \sigma} C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} - \mu \sum_{i, \sigma} C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} - (J - J'') \sum_{i, j} C_{i\alpha}^+ C_{j\beta} + (C_{i\beta} C_{j\sigma} + C_{j\beta} C_{i\alpha}) \\ &\quad - \frac{J''}{2} \sum_{ij} n_i \cdot n_j \end{aligned} \quad (7)$$

式中, δ 是掺杂量, 即偏离半满填充的空穴数. $J = 4t^2/U$, 代表反铁磁性交换作用.

进一步作傅里叶变换

$$\begin{aligned} C_{i\sigma}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} C_{\mathbf{k}\sigma}^+ \\ C_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} C_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned} \quad (8)$$

便得在 \vec{k} 表象中的等效哈密顿量为

$$\begin{aligned} H_{eff} &= H_0 + H' + H'' \\ H_0 &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) C_{\mathbf{k}\sigma}^+ C_{\mathbf{k}\sigma} \end{aligned}$$

$$H' = \frac{-4J_{eff}}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', q} \gamma_q C_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha}^{\dagger} C_{\vec{k}-\vec{q}, \beta}^{\dagger} (C_{\vec{k}, \beta} C_{\vec{k}, \alpha} + C_{\vec{k}, \beta} C_{\vec{k}, \alpha})$$

$$H'' = -\frac{2J''}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'+\vec{q}, \sigma} \gamma_q C_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}, \sigma} (C_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}\sigma} + C_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}\sigma}) \quad (9)$$

$$\text{式中, } \epsilon_k = -4\gamma_k t \delta, \quad \gamma_k = \frac{1}{4} \sum_{\pm \epsilon} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\epsilon}}, \quad J_{eff} = J - J'' \quad (10)$$

2 超导相变温度 T_C 与 δ 的关系

为了讨论 H_{eff} 的超导相, 我们采用文献[3]的做法, 考虑到在 Fermi 面附近, 电子对可能形成 Copper 对, 引进以下序参量

$$\Delta = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \gamma_k \langle C_{\vec{k}\alpha}^{\dagger} C_{\vec{k}\beta}^{\dagger} \rangle \quad (11)$$

$$P = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \gamma_k \langle C_{\vec{k}\alpha}^{\dagger} C_{\vec{k}\alpha} \rangle \quad (12)$$

容易验证, $\Delta = (\langle C_{i\alpha}^{\dagger} C_{j\beta}^{\dagger} \rangle - \langle C_{i\beta}^{\dagger} C_{j\alpha}^{\dagger} \rangle)$ 是 Copper 对密度的平均值. 如果 Δ 总是 $=0$, 表示不可能形成 Copper 对, 系统不处于超导相, 只有当 $\Delta \neq 0$ 时, 系统才处于超导相, 因此, 我们可以通过计算 Δ 的值来讨论 H_{eff} 的超导相区域. 序参量 P 代表有效能带加宽. 是表征系统的另一个重要的序参量.

对等效哈密顿量(9)式作 Hartree-Fock 近似, 可得平均场近似的等效哈密顿量为

$$H_{eff} = \sum_{k\sigma} (\tilde{\epsilon}_k - \mu) C_{k\sigma}^{\dagger} C_{k\sigma} - 4J_{eff} \Delta \sum_{\vec{k}} \gamma_k (C_{\vec{k}\alpha}^{\dagger} C_{-\vec{k}\beta} + C_{-\vec{k}\beta} C_{\vec{k}\alpha}) \quad (13)$$

$$\text{式中 } \tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - 4J_{eff} \gamma_k P = -4(t\delta + J_{eff} P) \gamma_k \quad (14)$$

由(13)式可见, 在平均场近似下, 大 U 有掺杂的二维 Hubbard-Hirsch 模型的等效哈密顿量是典型的 BCS 型哈密顿量. 我们可以应用标准的玻戈留玻夫变换将它对角化, 得到准粒子能量为

$$E_k = \sqrt{(\tilde{\epsilon}_k - \mu)^2 + 16J_{eff}^2 \Delta^2 \gamma_k^2} \quad (15)$$

可见序参量 Δ 同时代表能隙大小. 因为准粒子激发的能隙 $= |4J_{eff} \Delta|$, $\Delta \neq 0$ 时, 系统处于超导相, 当 $\Delta(T) \rightarrow 0$ 时, Copper 对元激发将转变为正常电子激发, 系统发生超导相到正常相的相变, 由此可确定超导相变温度 T_C .

T_C, μ 和 P 满足以下联立方程组:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\tanh \beta E_k / 2}{E_k} \gamma_k^2 = \frac{1}{4J_{eff}}$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\tanh \beta E_k / 2}{E_k} (\tilde{\epsilon}_k - \mu) = \delta$$

$$-\frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{\tanh \beta E_k / 2}{E_k} \gamma_k (\tilde{\epsilon}_k - \mu) = P \quad (16)$$

式中, $\beta = 1/kT_C$, $E_k = |\tilde{\epsilon}_k - \mu|$.

对 \vec{k} 求和, 可用二维紧束缚能带论的近似态密度 $g(\epsilon)$ 进行积分:

$$g(\epsilon) = (2/\pi^2 W) \ln(4W/\epsilon) \quad (17)$$

其中, W 为能带半宽度.

$$W = 4(t\delta + J_{eff} P) = t(4\delta + P/t_f) \quad (18)$$

$$t_J = t/4J_{eff} = t/[4(\frac{4t^2}{U} - J'')] \quad (19)$$

是系统的重要参数, t_J 的值对于超导相是否出现有重要的影响. 我们用数值计算解联立方程组(16), 得 $T_c \sim \delta$ 的关系如图 1 所示.

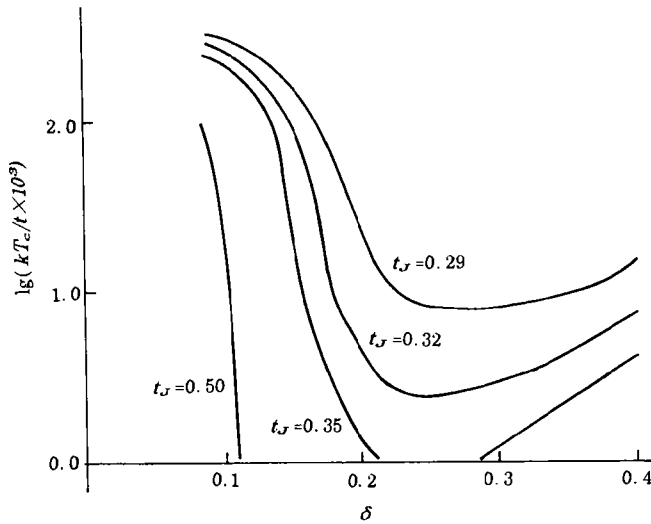


图 1 在各种 t_J 值下 T_c 与 δ 的关系

Fig. 1 The superconducting transition temperature T_c vs doping fraction δ at various choice of parameters $t_J = t/4J_{eff}$

由于 T_c 的变化范围很大, 我们取它们的对数, 即 $\lg[(kT_c/t) \times 10^3]$ 作为纵坐标, 而在此值 < 0 时, T_c 已减小 3 个数量级, 实际为零, 就不在图中画出.

3 讨论

从图中可见, t_J 较小时, 超导转变温度 T_c 较大, 超导相的区域也较大. 在 $\delta < 0.25$ 时, T_c 随 δ 的增加而减少. 当 t_J 增大时, T_c 迅速减小, 超导相的区域也迅速变小. 例如 $\delta = 0.11$ 时, 当 t_J 由 0.29 增大到 0.50 时, 相应的 T_c 就减小到 2 个数量级, $t_J = 0.50$ 时, 超导相的区域就很小了. $t_J > 0.90$ 时, 系统没有超导相. 由(19)式可见, 附加的双中心积分中的交换相互作用 J'' 是不利于超导相的形成. 但只要 J'' 比较小, t 足够大, 使 t_J 较小, 仍然可以形成超导相. 对于 Hubbard 模型 ($J'' = 0$), 如果 U/t 太大, 使 $t_J = U/16t > 0.90$, 也不可能形成超导相. 这表明, 在强关联电子系统中, 定域电子系统若能用 Hubbard-Hirsch 模型描述, 则只要有足够大的跃迁强度 t , 使 t_J 较小, 此电子系统就可以出现超导相. 在此模型中, 由于 $J = 4t^2/U$, 所以 t_J 不可能太小, 否则不满足大 U 的近似条件. 在 δ 较大时 ($\delta > 0.25$), 图中显示有较小的超导相区域, 值得注意, 其形成超导相的机制有待进一步研究. 在 δ 很小时, ($\delta < 0.05$), 平均场近似误差很大, 实际上 T_c 随 $\delta \rightarrow 0$ 而迅速 $\rightarrow 0$, 如文献[3]已指出的, 就不在此讨论了.

参 考 文 献

- 1 Hubbard J. Election correlations in nannow energy bands. Proc Roy Soc London, 1963, A276: 238
- 2 Nagaoka Y. Ferromagnetism in a narrow, almost half-filled band. Phys Rev, 1966, 147:392
- 3 Baskaran G, Zou Z, Anderson P W. The Resonating Valence Bond State and High- T_c Superconductivity A mean field theory, Solid State Commun, 1987,63:973
- 4 Hirsch J E. Metallic ferromagnetism in a single-band model. Phys Rev, 1989, B 40:2354
- 5 Gros C, Joynt R, Ric T M. Antiferromagnetic correlations in almost-localised Fermi liquids. Phys Rev, 1987, B 36:381

The Superconductivity of Hubbard-Hirsch Model

Liu Jinming Gong Di Kuang Zhiqiang*

Abstract By using a perturbative canonical transformation and mean field theory, the superconducting transition temperature as a function of the doping parameter for the Hubbard-Hirsch model is calculated. It is shown that superconductivity is possible as long as the hopping integral is large enough and that the superconductive region becomes smaller due to existing of exchange integral.

Keywords superconductivity, Hubbard-Hirsch model

* Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275