

高溫超導機制之理論研究

中央研究院物理研究所 李定國

一、概說

自從高溫超導體發現[1,2]至今已 18 年，然而關於高溫超導發生的機制，以及這類材料的各種奇異性質的理論解釋，依然還沒有定論。近十年來，本研究組在這個問題進行了全面性的研究，本文將擇要介紹我們近年的研究成果。

高溫超導理論最大的困難，在於它是一個「強關聯電子系統」(strongly correlated electron system)。由於主要的傳輸現象發生在此類材料的 CuO_2 平面上，牽涉到銅的 d-軌域，這個軌域的電子雲分佈密度集中在較小的範圍內，因此若有兩個電子同時佔據 d-軌域，這兩個帶負電的粒子會靠得較近而互相排斥，這項的能量貢獻遠大於此系統的電子動能項以及其他交互作用 [3]，導致無法利用傳統的「微擾法」(perturbation method) 對此進行有效、系統性的近似。因此，數值方法成為研究這個問題的主流，所得到的結果也較可信 [4]。

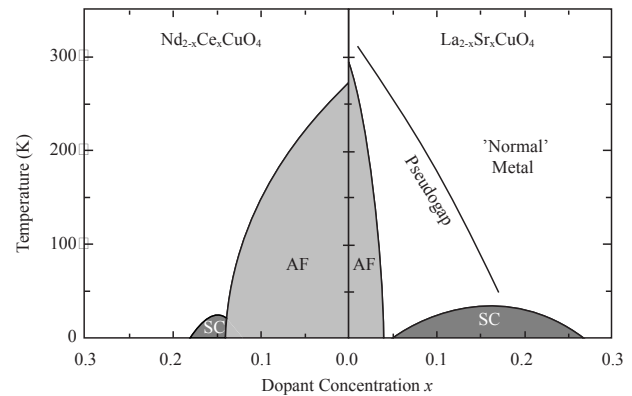
目前廣被接受的理論模型為二維正方晶格中的「t-J 類模型」(t-J-type models)，這個模型只考慮 d-電子動能及在最近鄰銅上的自旋之間的作用，其哈密頓量如下：

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} (\tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{j\sigma} + H.C.) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) \quad (1)$$

其中 $\langle i,j \rangle$ 表示 i 與 j 為最近鄰晶格點， $t_{ij} = t, t', t''$ ，當 i, j 分別為最近鄰、次近鄰、再次近鄰之晶格點時。 \vec{S}_j 是在 j 晶格點上的自旋。特別要注意的是，電子的躍遷項中：

$$\tilde{c}_{i\sigma} = c_{i\sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) \quad (2)$$

表示任何一個晶格點最多只能有一個電子。實驗以及能帶計算估計而得的各參數值： $J/t = 0.3$ ； $t'/t = -0.3, -0.2, -0.1$ 分別對應汞系、釷系、鑷系等電洞摻雜超導體； $t'/t = +0.1$ 為釷系電子摻雜超導體， t''/t 約為 -0.5 [5]。

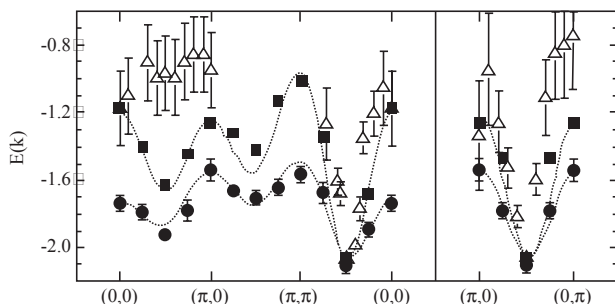


圖一 高溫超導體之實驗相圖，右側為摻雜電洞之鑷系材料，左側為摻雜電子之釷系材料。AF 表反鐵磁態，SC 為超導態。本圖取自文獻 [8]

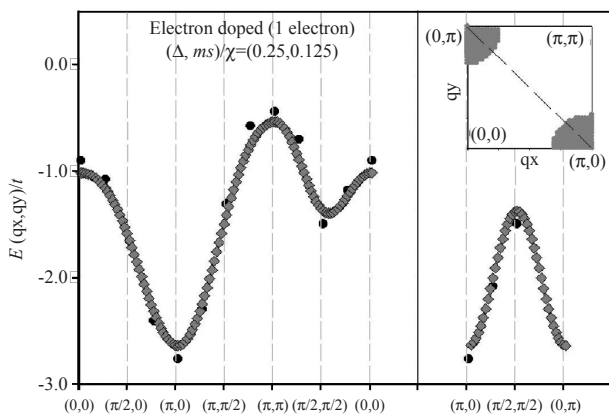
我們採用的方法為「變分蒙地卡羅法」(VMC, variational Monte-Carlo method) [5] 以及「Power-Lanczos 方法」[6]，模擬 CuO_2 平面上之電子行為。我們將由半填滿（每個晶格點一個電子）系統為起點，討論各種不同的摻雜濃度下的特性，以與圖一之實驗相圖 (phase diagram) [8]比較。

二、單電子與單電洞能譜

高溫超導材料在半填滿狀態下為反鐵磁 (antiferromagnetic) 絕緣體，(1)式將簡化為反鐵磁海森堡模型 (Heisenberg Model)。在此條件下我們找到的最佳波函數為一加入了反鐵磁長程序的 resonating-valence-bond (RVB) 波函數，所得之能量為每個最近鄰鍵 $-0.332J$ ，與目前所得之最佳的基態能量相差不到 1% [6]。以此波函數為起點，可以計算加入一個電子或電洞時，其動量與能量之間的色散關係 (dispersion relation) [6,7]，此結果可與角析光電子發射能譜 (angle-resolved photoemission, ARPES) 之實驗結果比較，驗證理論的正確性[8]。



圖二 8×8 晶格中單電洞之色散關係， $J/t=0.3$ ， $t'/t=-0.3$ ， $t''=0$ (圓圈) 與 $t''/t=0.2$ (方塊)，三角形為 ARPES 之實驗結果



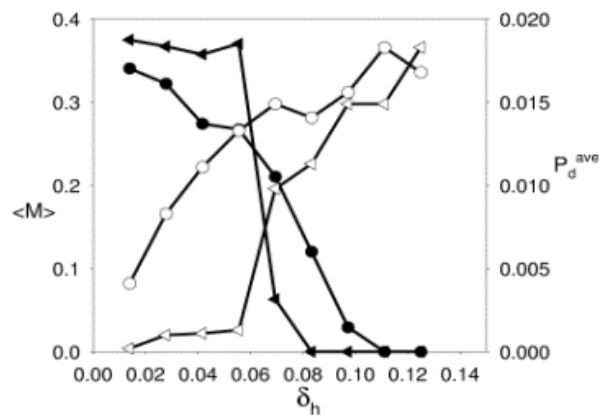
圖三 8×8 晶格中加入一個電子之色散關係，黑點為 VMC 模擬之結果，灰色方塊為平均場計算之結果

計算的結果如圖二(電洞)與圖三(電子)所示，計算所得之色散關係與實驗結果頗為吻合，特別值得注意的是頻寬與交互作用 J 的大小成正比，而非如一般弱作用系統與躍遷項 t 成正比。

另一個有趣的結果是，在單一電子/電洞的系統中，除了該載子的動量 q 之外，還有一個隱藏的量子數：從半填滿狀態，全部配對的電子中被打破的一個電子對的配對動量 q' ，若 $q=q'$ ，則為準粒子(quasi-particle)狀態，若 $q \neq q'$ ，則存在「自旋包」(spin bag)的低能量激發態 [9]。

三、反鐵磁與超導之一階相變

由圖一的相圖看來，在摻雜電洞的材料中，在摻雜濃度超過 5%，反鐵磁性完全消失後，才進入超導態。然而過去的理論研究中，在摻雜濃度低於 10%時，基態為超導與反鐵磁共存，這個結果明顯與實驗矛盾 [10]。



圖四 12×12 晶格中之反鐵磁長程序 $\langle M \rangle$ (實心) 以及超導強度 P_d^{ave} (空心)，分別對應 $t'=t''=0$ (圓圈) 以及 $t'/t=-0.3$ ， $t''/t=0.2$ (三角形)

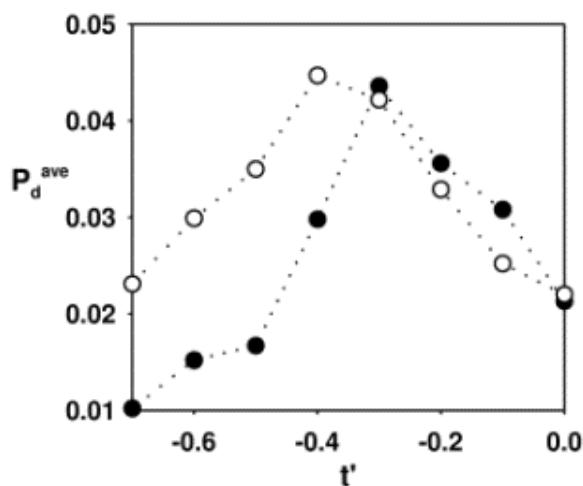
當 $t'/t=-0.3$ ， $t''/t=0.2$ 時，我們發現一個新的波函數可以在摻雜濃度小於 6%時得到較低的能量，這個波函數的特性是，不存在一個大的費米面(Fermi surface)，只在動量 $(\pi/2, \pi/2)$ 附近有一個小「費米包」(Fermi pocket)，此波函數有反鐵磁而超導強度極小；而在濃度大於 6%時，能量最低之波函數為傳統的 RVB 函數，只有超導而沒有反鐵磁(見圖四)，此為這兩個不同波函數隨摻雜濃度變化下所發生的一階相變(first order phase transition)，超導與反鐵磁並不共存 [11]。

在這一部份的研究中，我們得到與實驗結果較吻合的相變摻雜濃度，並且解決了長久以來反鐵磁與超導態究竟是否共存的疑問。

四、超導態

在我們稍早的研究中， t - J 模型基態的超導強度似乎太小，無法解釋高溫超導材料的超導轉變溫度 [12]，這個結果至今仍有爭議 [13-15]。

由實驗上來看，較長距離的躍遷 t' 與 t'' 是必須的，因此要理解高溫超導的機制，這兩項是不能忽略的。當加入這兩項後，在 VMC 的結果中我們發現，如圖五所示，超導強度隨 $|t'|/t|$ 增加而增加，當 $t'/t=-0.3 \sim -0.4$ 時，超導強度達到最大比起 $t'=t''=0$ 時大了將近三倍，因此有機會可以解釋高溫超導機制。當 $|t'|$ 繼續增加，超導強度迅速下降 [16]，這個結果與第一原理計算及實驗吻合 [5]。



圖五 次近鄰躍遷項 t' 與超導強度的關係，所有的 $t''=-t'/2$ 。空心圓圈為 8×8 晶格，實心圓則為 12×12 晶格下的結果

這個結果主要來自於，引入 t' 與 t'' 後，費米面的形狀改變，使得電子佔據 RVB 超導能隙最大的 $(\pi, 0)$ 附近的動量機率大增之故。

五、結語

總結以上的結果，我們所得的結論如下：(一) 引入較長距離的躍遷 t' 與 t'' 是必要的，可以得到較高的超導強度，合於實驗的反鐵磁／超導相變以及單電子／電洞能譜；(二) 在 RVB 理論的架構下有機會解釋大部分的高溫超導材料性質；(三) 費米面形狀的變化扮演著關鍵的角色。

最後，我們要感謝所有的合作者，以及國科會長年來的經費支持、國家高速網路與計算中心提供計算資源，以及中央研究院的支援，使研究可以順利進行。

參考文獻

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B*, **64**, 189 (1986).
 [2] M. K. Wu, J. R. Asburn, C. J. Torng, P. H.

Hor, R. L. Meng, L. Geo, Z. J. Huang, Y. Q. Wang and C. W. Chu, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 908 (1987).

- [3] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 2794 (1987).
 [4] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 763 (1994).
 [5] E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen and O. K. Andersen, *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 047003 (2001).
 [6] T. K. Lee and C. T. Shih, *Phys. Rev. B*, **55**, 5983 (1997).
 [7] T. K. Lee, C.-M. Ho and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 067001 (2003).
 [8] A. Damascelli, Z. Hussain and Z.-X. Shen, *Rev. Mod. Phys.*, **75**, 473 (2003).
 [9] W.-C. Lee, T. K. Lee, C.-M. Ho and P. W. Leung, *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 057001 (2003).
 [10] T. K. Lee and S. Feng, *Phys. Rev. B*, **38**, 11809 (1988); A. Himeda and M. Ogata, *Phys. Rev. B*, **60**, R9935 (1999).
 [11] C. T. Shih, Y. C. Chen, C. P. Chou and T. K. Lee, cond-mat/0408422, submitted to *Phys. Rev. B*, (2004).
 [12] C. T. Shih, Y. C. Chen, H. Q. Lin, and T. K. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 1294 (1998).
 [13] S. Sorella, G. B. Martins, F. Becca, C. Gazza, L. Capriotti, A. Parola, and E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 117002 (2002).
 [14] T. K. Lee, C. T. Shih, Y. C. Chen and H. Q. Lin, *Phys. Rev. Lett.*, **89**, 279702 (2002).
 [15] S. Sorella, A. Parola, F. Becca, L. Capriotti, C. Gazza, E. Dagotto and G. Martins, *Phys. Rev. Lett.*, **89**, 279703 (2002).
 [16] C. T. Shih, T. K. Lee, R. Eder, C.-Y. Mou and Y. C. Chen, *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 227002 (2004).