

Hubbard 模型中 η 配对机制的 超对称和超导电性

苏 刚

葛墨林

(兰州大学物理系, 兰州 730000)

(南开数学研究所理论物理研究室, 天津 300071)

关键词 η 配对、量子力学超对称、超导电性、非对角长程有序

氧化物超导体的发现, 引起了人们对这类材料超导机理的探索。目前已有许多新的理论被提出, 这些模型大多涉及局域极限或巡游极限下的 Hubbard 模型^[1]。然而, 高维情形下的 Hubbard 模型迄今为止还没有找到其精确解, 因此基于 Hubbard 模型的那些理论的满意物理结论还没有获得。鉴于上述情况, 我们发现目前没有哪一种模型被人们普遍接受。最近, 杨振宁^[2]基于 3 维 Hubbard 模型提出了一个 η 配对机制。他认为, 动量为 k 的电子同动量为 $\pi-k$ 自旋相反的电子通过同格点库仑吸引作用在动量空间中可形成束缚对, 这些束缚对的相干长度比库柏对要小得多。通过 η 配对机制, 可以很容易地求得 Hubbard 模型的许多本征态, 而且可发现这些态都具有非对角长程有序 (ODLRO), 是一些亚稳态并存在能隙。我们认为, 这个工作的意义是重大的, 因为它第一次给出了 Hubbard 模型拥有 ODLRO 的本征态。由于 ODLRO 的出现表明该系统中存在着一个新的热力学相^[3], 因而可以预期通过 η 配对机制有可能在由 Hubbard 模型表征的费米子体系中出现超导相变。

文献[2]着重讨论了吸引势情形下的 Hubbard 模型, 并对强关联排斥极限情形的模型作了相应的说明。本文则从具有中等强度排斥势的 Hubbard 模型出发, 来研究该费米子系统哈密顿量的一些特性, 并讨论此系统出现超导相变的可能性。

按照文献[2], 我们给出系统的 Hubbard 哈密顿量

$$H = \sum_k \epsilon(k) (a_k^\dagger a_k + b_k^\dagger b_k) + 2W \sum_r \eta_r^\dagger \eta_r, \quad (1)$$

其中

$$\epsilon(k) = \epsilon(6 - \gamma_k), \quad \gamma_k = 2(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z), \quad (2)$$

$$\eta = \sum_r \eta_r = \sum_k \eta_k, \quad \eta_r = a_r b_r e^{-i\pi \cdot r}, \quad \eta_k = a_k b_{\pi-k}, \quad (3)$$

a_k 和 b_k 分别是自旋向上和向下电子的消灭算符。在本文的讨论中, 我们假定 $\epsilon > 0$, 同格点库仑势 $W > 0$ 。显然, (1) 式能很容易变回坐标空间

$$H = -\epsilon \sum_{\langle ij \rangle \sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} + 6\epsilon \sum_{i\sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma} + 2W \sum_i \eta_i^\dagger \eta_i, \quad (4)$$

这里 σ 是自旋指标, $C_{i\uparrow} = a_i$, $C_{i\downarrow} = b_i$, $\langle ij \rangle$ 表明求和遍及最近邻。(4) 式即是通常的 Hubbard 模型。

本文 1990 年 4 月 7 日收到。

由于文献[2]中算符 a, b 的对易关系取对易式或反对易式对最后的物理结果没有影响, 为了方便起见, 我们取 $C_{i\sigma}, C_{j\sigma}^\dagger$ 满足通常的费米子反对易关系, 即有

$$\{C_{i\sigma}, C_{j\sigma}^\dagger\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}. \quad (5)$$

另外, 从(3)式 η_i 算符的定义式中我们不难发现, $\eta_i, \eta_i^\dagger$ 满足准玻色子对易关系

$$[\eta_i, \eta_i^\dagger] = \delta_{ii}(1 - n_i), \quad (6)$$

其中 $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ 是格点 i 上电子的占据数。由于 η_i 算符的上述性质, 我们可将 η 粒子视为准玻色粒子来处理。

定义算符

$$Q_+ = q \sum_{i\sigma} \eta_i C_{i\sigma}^\dagger, \quad Q_- = q \sum_{i\sigma} \eta_i^\dagger C_{i\sigma}, \quad (7)$$

其中 q 为任意常数。在 q, W 和 ϵ 满足

$$q^2 = W = 6\epsilon \quad (8)$$

的条件下, 我们发现哈密顿量(4)式变为

$$H = H_{\text{ss}} - H', \quad (9)$$

其中

$$H_{\text{ss}} = \{Q_+, Q_-\}, \quad (10)$$

$$H' = \epsilon \sum_{\langle ij \rangle \sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} - 6\epsilon \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma}. \quad (11)$$

我们能很容易证明

$$\begin{aligned} \{Q_i, Q_k\} &= 2\delta_{ik}H_{\text{ss}}, \quad i, k = 1, 2, \\ [Q_i, H_{\text{ss}}] &= 0, \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $Q_1 = Q_+ + Q_-$, $Q_2 = i(Q_+ - Q_-)$ 。可以看出, (12)式不仅包含了对易关系而且还包含了反对易关系, 因而是一个简单的李超代数 (Lie Superalgebra)^[4]。于是, 满足(12)式的 H_{ss} 具有精确的量子力学超对称 (SSQM) 特性^[5], $Q_i (i = 1, 2)$ 是相应的超荷算符。从(7)式可知, 一个电子态能够转变为一个准玻色 η 粒子态, 反之亦然。因此, 一个电子态就是一个准玻色 η 粒子态的超伙伴 (Superpartner)。由于 H_{ss} 具有精确的量子力学超对称, 相应的 H 也就具有这种特性。然而, 可以证明由于 H' 的存在, H 的超对称存在着自发破缺。

根据 SSQM 的一般理论^[4], H_{ss} 的基态能量是零。容易验证, 在(8)式的条件下 H 的本征态 ϕ_N 同时也是 H' 的本征态, 因而 H_{ss} 满足

$$H_{\text{ss}}\phi_N = 0. \quad (13)$$

显然, ϕ_N 是 H_{ss} 的基态波函数。由于 ϕ_N 拥有 ODLRO, 表明 ϕ_N 态即 H_{ss} 的基态中存在着一新的热力学相。在长波极限 ($k \rightarrow 0$) 下对精确半满 ($n_i = 1$) 系统而言 H 就是严格的 H_{ss} 。很显然, 此系统的电导率为零, 因而没有超导电性的可能。这也就是说, 对具有精确 SSQM 的系统来讲, 热力学相呈绝缘态, 不会有超导相变。 H_{ss} 的基态可能是准玻色 η 粒子的玻色凝结态。 H' 的出现使得 H 的超对称性自发破缺, 这意味着上述热力学绝缘相必然会发生相变, 进入到另一新的热力学相。我们认为, 这个新的热力学相可能就是超导相。也就是说, 系统从一绝缘相的基态发生相变后进入了超导基态。这种情形类似于 Wiegmann^[6] 的理论。 Wiegmann 曾经研究过强关联极限下的电子系统, 他发现表征系统的 Hubbard 模型满足超对称紧致 Abelian 规范理论, 当手征对称性破缺以后, 系统会发生一个相变进入超导态。由

此可见,上面的讨论与 Wiegmann 的结果定性相似,但不完全相同。至于如何将它们两者联系起来,还有一些问题尚未解决,这将留待以后再讨论。

如上所述,具有中强排斥势(满足条件(8))的 η 配对 Hubbard 系统的超对称性存在着自发破缺,系统因此能够进入一个新的热力学相——超导态。在平均场理论的框架下,我们不难给出超导相的基态波函数

$$\Phi_0 = \prod_k (u_k + v_k b_{\pi-k}^+ a_k^+) |\text{Vac}\rangle, \quad (14)$$

其中 u_k, v_k 是与动量有关的常数。容易验证,超导序参数 $\Delta = \sum_k \langle b_{\pi-k}^+ a_k^+ \rangle$ 在 Φ_0 态中不等于零,这说明源于 η 配对机制的超导电性在 Φ_0 态中存在,并且可证 Φ_0 也具有真正的 ODLRO。如果引入投影算符 P_N

$$P_N \exp(\eta^+) \equiv (\eta^+)^N, \quad (15)$$

我们会发现 H 的本征态 ϕ_N 将是 Φ_0 的一个投影态

$$\phi_N = \text{常数} \cdot P_N \Phi_0. \quad (16)$$

上式说明从 ϕ_N 态过渡到 Φ_0 态的相变是超导相变。另一方面,我们可以证明 ϕ_N 态中不会有源于 η 配对的超导电性,事实上

$$\Delta = \sum_k \phi_N^+ b_{\pi-k}^+ a_k^+ \phi_N = 0. \quad (17)$$

类似于 BCS 理论的计算,不难得到 Φ_0 态的转变温度

$$T_c = 2.3W \exp\left(\frac{1}{2\rho(0)W}\right), \quad (18)$$

其中 $\rho(0)$ 是态密度。显然,(18)式有一极大值 $T_c^{\max} = 6.25W$ 存在,此值比通常能够达到的温度大许多倍。在合适的参数值下,(18)式决定的 T_c 将比 BCS 理论的相应值大,这说明 η 配对机制可以用来解释超导体的高 T_c 特性。

以上我们研究了具有中强排斥势(满足(8)式)的 Hubbard 哈密顿系统在 η 配对机制下的量子力学超对称特性,发现此超对称存在着自发破缺,并能够使系统发生相变进入超导态。我们给出了具有 BCS 型的超导基态波函数,并讨论了此基态与哈密顿量本征态 ϕ_N 间的关系,发现 ϕ_N 态是该超导基态的一个投影态。此外,从本文还可看出,超导系统的本征态可能不是超导基态。

致谢: 作者感谢杨振宁教授的有益意见。

参 考 文 献

- [1] Anderson, P. W., *Science*, **235** (1987), 1196; Schrieffer, J. R. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **60** (1988), 944; Su, Z. B. et al., *Z. Phys.*, **B70** (1988), 131; Su, G., *Commun. Theor. Phys.*, **11** (1989), 401; etc.
- [2] Yang, C. N., *Phys. Rev. Lett.*, **63** (1989), 2144.
- [3] Yang, C. N., *Rev. Mod. Phys.*, **34** (1962), 694.
- [4] Gendenshtein, L. E. et al., *Sov. Phys. Usp.*, **28** (1985), 645.
- [5] 王育邠,葛墨林,大学物理中的前沿问题,兰州大学出版社,1987,70.
- [6] Wiegmann, P. B., *Phys. Rev. Lett.*, **60** (1988), 821.