

# 费密液体和自旋液体的混合体——一种描述

## 高温超导体中电子状态的理论模式

熊诗杰

编者按:

本篇系特约稿,由著名超导专家赵忠贤教授审阅,特表谢意。作者熊诗杰,46岁,南京大学物理系研究员。1968年毕业于北京大学,1983年获得南京大学博士学位,1988-1990年先后在英国剑桥大学超导研究中心、美国体斯敦大学德克萨斯超导中心进行访问研究。1991年被国务院学位委员会及国家教委授予“有突出贡献的中国博士”荣誉称号,还被美、英等国名人中心收入三个国际名人录。已在国内外有影响学术刊物发表论文70余篇。

氧化物超导体的发现开辟了超导研究的新时期,同时也向理论物理学界提出了如何认识这类材料的新课题。其特异性不仅表现在高的超导转变温度上,还表现在正常态下诸如电导、热导、光导等一系列性质的反常上,突出地反映在所谓“掺杂”的过程中:无掺杂之前,它们不能超导,也不导电,是绝缘体,且具有反铁磁长程序。只要掺进少量的某种元素,(如在 $\text{La}_2\text{CuO}_4$ 中掺入Sr变为 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ),它们就从绝缘体变为导体,温度下降后能超导,反铁磁序也消失了。研究表明,掺入的杂质与原来元素的化合价不同(如前述的Sr是+2价,La是+3价),改变了化合物中的电子数,相当于掺入了有效的载流子(电子或空穴)。有的高温超导体的形成虽无上述掺杂过程,但有效载流子也可以通过改变某种元素的含量来加入,如 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ 中的x为0时它是绝缘体,当x为1时它是导体,且具有很高的超导转变温度。

对于为什么这一类材料在没掺杂以前是反铁磁绝缘体,现在已经有了明确的回答。让我们看一看这类材料所公有的 $\text{CuO}_2$ 原子平面(图1)。铜格点上的 $3d_{x^2-y^2}$ 轨道和氧格点上的一个 $2p$ 轨道对于导电是重要的。根据泡利不相容原理,每个格点最多只能容

纳两个电子,一个自旋向上,另一个自旋向下。在没有掺杂时,所有的氧格点都被两个电子占满,而每个铜格点上只有一个电子,处在“半占据”状态。在这样的平面上有两条通路可以产生电子的运动。一条是电子在氧格点之间跳动,另一条是电子通过铜格点的跳动。在没有掺杂时前一条通路是不起作用的,这是因为所有的氧格点都被电子占满,它们没有空余的地方来容纳跳过来的第三个电子。这样电子只有使用第二条通路,即通过铜格点来跳跃。但实际上这个过程也不能顺利完成,因为如果两个电子跳到同一个铜格点上,会产生很强的库仑排斥力,使电子的相互作用势能大大提高,而跳动电子的动能不足以克服这一相互作用势,因此只好呆立不动。这就是现在理论界十分重视的强关联效应的一种通俗的说法。进一步的计算又表明,相邻两个铜格点上的电子通过中间的氧格点的虚交换过程,形成反铁磁型的自旋耦合,即所谓超交换相互作用,使得铜格点上电子的自旋排列成如图1所示的反铁磁状态,这就是反铁磁绝缘体的由来。

至此,读者可能会提出一个问题,既然是强关联效应使 $\text{CuO}_2$ 平面变成绝缘体,那末在一般的金属之中,电子之间也存在这种互相排斥的关联效应,为什么就没有变成绝缘体呢?原来,这里有一个关联势能与电子动能相比较的强弱的问题。为解决这一问题,朗道早年创立了费密液体理论,指出,只要电子的动能比相互作用势能大很多,这种关联效应只不过给电子穿上了一层衣服,虽然显得笨一些(表现为有效质量加大),但仍能自由运动。朗道用“液体”这个词表达这种状态是极为形象的,说明这时的电子既不象气体分子那么自由,又不象固体分子那样不自由,而是介于两者之间。但对我们刚才所讲的 $\text{CuO}_2$ 平面,关联效应已经大过电子的平均动能,这时的电子就不仅是穿了件衣服,而是被“锁住”了。对这样的系统,费密液体理论就不能应用。另外在半满状态下,所有的氧轨道都是占满的,它们的状态都一样,形成的反铁磁键也都一样,这样就构成没有阻挫(frustration)的反铁磁体,所有铜格点上的自旋取向都是基本固定的,接近于奈尔(Néel)态,在实验上可测到反铁磁序。这与我们下面要讲到的自旋液体的状态不同。

对于掺杂如何破坏反铁磁序且使材料变成导体的,迄今理论界还存在许多截然不同的意见,但归纳起来主要有以下两种思路:一种认为,强关联效应自始

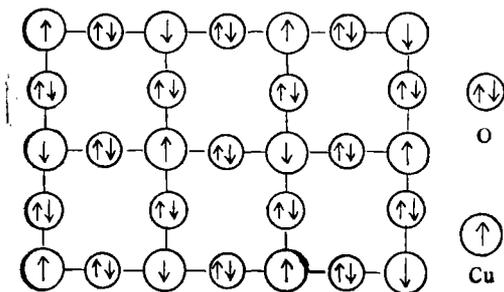


图1 半占据状态下的 $\text{CuO}_2$ 平面

至终都应处于首要地位, 既然没有掺杂时的强关联系统的电子状态已经知道了, 那末只要从这个状态出发, 而把掺杂作为一种修正的因素加进去也就行了. 另一种意见认为, 掺杂确实产生了原来所没有的类费密液体态, 因此可以从修正的费密液体理论出发, 而把强关联效应作为一种微扰来处理. 应该注意到的是, 由于实验事实的高度复杂性, 这两种途径都还不能在统一的框架下完全解释实验.

作者亦曾提出掺杂后的电子态应是费密液体和自旋液体混合体的状态 (Mixture of Fermi Liquid and Spia Liquid), 认为: 这种材料的电子系统不是一个简单系统, 而是包含两个子系统, 在一个子系统内, 电子具有明显的费密液体的特征, 而在另一个子系统中, 强关联效应则占据首位. 但这两个子系统不是互相孤立的, 它们有机地融合在一起且互相影响, 这样就使得这样的电子系统既具有某些类似于费密液体的性质, 又具有另外的一些从费密液体的观点看来是不可思议的奇特性质.

如果空穴掺进  $\text{CuO}_2$  平面(也就是从  $\text{CuO}_2$  平面上取走一些电子), 那它们应进入什么位置呢? 实验表明, 它们主要处于氧的  $2p$  轨道上. 理论计算也表明, 空穴进入氧格点要比进入铜格点消耗更小的能量. 这样, 某些氧  $2p$  轨道就不是处于全满状态了, 电子(也就是空穴)就可在前述的第一个通道下在氧的  $2p$  轨道之间跳跃, 产生电子运动. 大家知道, 氧  $2p$  轨道上电子的关联效应比在铜的  $3d$  轨道上要小得多, 由于这些空穴(也就是电子)的运动不需要经过铜的轨道, 它们就可以避开强关联效应的影响, 从而形成类似于费密液体的子系统. 与此同时, 在铜的  $3d$  轨道上所原有的电子却仍然处在强关联效应的影响之下, 它们构成了第二个子系统. 但与原来不同的是, 这时在某些氧格点上有运动着的空穴通过, 切断了与其相邻的铜格点之间的反铁磁键, 从而在原本是完整的反铁磁体上形成了阻错. 通过变分计算和其他方法的验证表明, 只要空穴的浓度超过了某个临界值, 原来的反铁磁的奈尔状态就被切割成一个个孤立的自旋对, 在自旋对和自旋对之间, 不再存在反铁磁型的自旋耦合, 但在每个自旋对内部的两个自旋之间, 仍然存在这种耦合. 从量子力学的原理很容易知道, 这种特殊的阻错构型将使所有铜格点上的自旋都两两组合成独立的自旋单态 (Singlet), 它们的总体就是一种典型的量子自旋液体. 说它是一种“液体”, 是因为每个自旋对(自旋单态)作为一个整体, 是不表现出磁矩来的, 这就好象自旋的取向可以流动, 使得某一格点上的自旋取向不能确定的那样. 这时, 在第一个子系统内的运动的空穴, 只通过处于不同自旋单态之间的氧格点, 不通过每个自旋单态内部所跨过的氧格点. 由于自旋单态是非磁态, 它就不会对运动的空穴构成磁性阻力. 这样第一

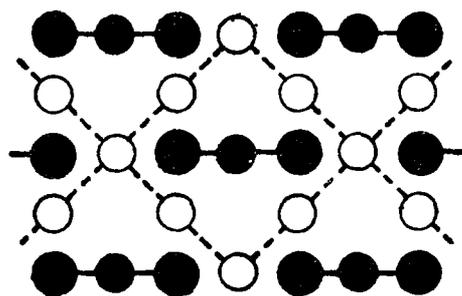


图2 混合体的一种拓扑构型. 虚线表示空穴运动途径, 实线表示自旋单态.

个子系统中的费密液体, 不但摆脱了强关联效应的控制, 而且摆脱了由于它具有自旋而要受到的反铁磁自旋背景对它的作用. 这后一点对它最终形成超导是至关重要的, 但在本篇文章中我们暂不讨论超导.

这样我们初步给出了费密液体和自旋液体是如何互相融合形成独特的混合体的物理图象. 在图2中我们给出了这种混合体的一种拓扑结构, 很容易证明它具有数量众多的等效的拓扑结构. 不同的拓扑结构之间可以互相转换, 这种转换提供了一种特殊的两种液体之间拓扑型的互作用.

对于电子掺杂的情况, 也可以得到类似的结果, 但由于  $\text{CuO}_2$  平面对于电子和空穴的非对称性, 得到的临界掺杂浓度是不同的. 这种非对称性, 已经被对  $\text{Nd-Ce-Cu-O}$  系统的研究所发现.

这样, 我们就能很好地解释为什么少量的掺杂会破坏反铁磁态, 而且使系统出现类似费密液体的性质. 计算出的临界掺杂浓度与实验测得的值相符合得很好. 如果考虑到两个子系统之间的特殊的互作用, 高温超导体的许多正常态下的反常性质都可以在这个框架下得到统一的解释.

这种同时考虑两种子系统的理论模式, 应能比只考虑一种子系统的理论模式具有更大的包容性, 也更符合实际情况. 当然, 要使这一模式进一步完备起来, 还有大量的工作要做, 特别是解析的和数值的工作. 这在高温超导研究中应是一个有意义的值得进一步探索的方向.

## 封面说明

### 太阳系外第一行星

环绕盾牌座 PSR 1829-10 脉冲星(快速自转的中子星)公转的“行星”, 被认为是在太阳系外发现的“第一行星”. 有关文章在 1991 年 7 月 25 日英国《自然》杂志发表后, 引起了天文学家们的广泛兴趣和注意. 该行星离脉冲星 1.2 亿公里, 公转速度约 42 公里/秒, 周期约 6 个地球月. 照片为从地球赤道附近(上)到人马、天蝎两星座银河最亮部分(下), PSR 1829-10 脉冲星及其“第一行星”位于圆圈所围的天区内。(卜德塔)