

УДК 531.9; 536.42.1; 537.132.62

©1994

## ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ C $s + id$ ФАЗОЙ БОЗЕ-КОНДЕНСАТА В ТЕТРАГОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ

А.Я. Айзенберг, Ю.М. Гуфан

Методами феноменологической теории определены условия реализации анизотропной фазы Бозе-конденсата, предполагаемой в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ . Показано, что фазы, определяемые двумя однокомпонентными «магнитопассивными» параметрами порядка, могут быть магнитоактивными и стабилизировать антиферромагнитную структуру  $s + id$ . Фазовый переход в эти фазы непосредственно из нормальной может быть только переходом первого рода.

В последнее время в теоретических и экспериментальных работах появились утверждения, что состояние Бозе-конденсата в ряде высокотемпературных сверхпроводников не изотропно [1]. По различным экспериментальным данным (анизотропия щели [2], анизотропии времени релаксации ядерных спинов при различной ориентации поля [3,4], сдвиг Найта [5] и др.) утверждается, что состояние Бозе-конденсата в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  [4], а также в  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  [2] описывается волновой функцией  $\hat{\Delta} \sim s + id_{x^2-y^2}$ .

В этой записи подразумевается, что в основном состоянии Бозе-конденсата к волновой функции, описывающей обычное («тривиальное») спаривание в  $s$ -состояние пар, подмешивается волновая функция, описывающая синглетное спаривание в  $d$ -состояние. Орбитальная часть волновой функции пар в  $d$ -состоянии образует базы для того же одномерного представления тетрагонального класса симметрии упомянутых выше кристаллов  $D_{4h}$ , базис для которого образует линейная комбинация компонент симметричного тензора второго ранга  $u_{xx} - u_{yy}$ ,<sup>1</sup> причем оси  $x$  и  $y$  декартовой системы координат считаются направленными по осям симметрии второго порядка в кристалле,  $z \parallel C_4$ . В литературе также есть микроскопические обоснования того, что основное состояние должно быть  $s + id_{x^2-y^2}$  [1,3,7-9]. Однако в литературе нет анализа следующих вопросов.

1) Почему существуют фазы, описываемые двумя параметрами порядка (соответствующие волновые функции образуют базис для двух независимых представлений группы симметрии нормального состояния), в которых соотношение фаз Бозе-конденсатов разной природы

<sup>1</sup> Встречаются и утверждения, что экспериментально точно установить представление пока невозможно [6]; возможно, это  $d_{xy} \sim u_{xy}$ .

остается постоянным во всей области существования фазы независимо от величины взаимодействий и температуры? Из приводимых ниже вычислений видно, что этот эффект есть прямое следствие квантовой природы параметра порядка, точнее, градиентной инвариантности физических характеристик.

2) Какой вид имеет фазовая диаграмма Бозе-конденсата, содержащая  $s + id$  фазу? Каковы условия реализации этой фазы и возможности перехода в нее непосредственно из высокосимметричной?

Решение этих вопросов и есть предмет данной работы.

### 1. Симметрия параметра порядка и фазы, близкие по энергиям к $s + id_{x^2-y^2}$

Как и в работе [10], будем предполагать, что кристаллическое поле достаточно сильно, чтобы во флуктуационную волновую функцию Бозе-конденсата, определяемую согласно теории Ландау [11] для нормального состояния, вносили вклад только волновые функции, образующие базис для представлений  $A_{1g}$  и  $B_{1g}$  группы  $D_{4h}$  [12]. Тогда точечная группа  $L$ , определяющая симметрию параметра порядка в четырехмерном пространстве  $\varepsilon_4$  компонент параметра порядка [13,14], задается генераторами

$\eta$	$L$		
	$C_2^{x=y}$	$R$	$U_1(\alpha)$
$\eta_1$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix}$
$\eta_1^*$	$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix}$
$\eta_2$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix}$
$\eta_2^*$	$\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix}$

(1)

Здесь  $C_2^{x=y}$  — один из элементов кристаллографической группы, меняющей знак у функции  $d_{x^2-y^2}$ , коэффициент при которой в разложении волновой функции Бозе-конденсата

$$\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = \eta_1 s(\mathbf{k}) + \eta_2 d_{x^2-y^2}(\mathbf{k})$$

есть  $\eta_2$ . Ядро гомоморфизма соответствующего представления группы симметрии задачи  $G = G_{cr} \otimes \hat{R} \otimes \hat{U}_1(\alpha)$  (кern) обозначим  $\mathcal{K}$ . Здесь  $G_{cr}$  — кристаллический класс;  $\hat{R} \equiv \{E, R\}$ ;  $R$  — операция инверсии времени;  $\hat{U}_1(\alpha) \equiv \{U_1(\alpha)\}$ ,  $U_1(\alpha)$  — элемент однопараметрической непрерывной группы градиентных преобразований. Согласно (1), целый рациональный базис инвариантов [14,15], составленный из компонент параметра порядка

$$\eta_1 = \xi_1 \exp(i\Omega_1 t), \quad \eta_2 = \xi_2 \exp(i\Omega_2 t),$$

имеет вид

$$J_1 = \xi_1^2, \quad J_2 = \xi_2^2, \quad J_3 = \xi_1^2 \xi_2^2 \cos 2\varphi, \quad (2)$$

причем  $\varphi \equiv \Omega_1 - \Omega_2$ .

Следовательно, потенциал Ландау, описывающий возможные однородные состояния соответствующего Бозе-конденсата, имеет вид [13,14]

$$\Phi(\eta_1, \eta_1^*, \eta_2, \eta_2^*) \equiv F(J_1, J_2, J_3) \quad (3)$$

и уравнения состояния представляются в виде условий

$$\begin{aligned} F_{,1} \cdot 2\xi_1 + F_{,3} \cdot 2\xi_1 \xi_2^2 \cos 2\varphi &= 0, \\ F_{,2} \cdot 2\xi_2 + F_{,3} \cdot 2\xi_1^2 \xi_2 \cos 2\varphi &= 0, \\ -F_{,3} \cdot 2\xi_1^2 \xi_2^2 \sin 2\varphi &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Симметрии возможных фаз определяются равенством нулю определителя [14]  $\det \|\partial J_k / \partial x_l\| = 0$ , где  $x_l = \{\xi_1, \xi_2, \varphi\}$ ,

$$-8\xi_1^3 \xi_2^3 \sin 2\varphi = 0. \quad (5)$$

Выше  $F_{,i}$  (так же как в дальнейшем  $F_{,jk}$ ) обозначают производную  $F$  по инварианту номер  $i$  (вторую производную по  $J_j$  и  $J_k$ ).

Следовательно, возможны шесть фаз: одна нормальная

$$1) \quad \xi_1 = \xi_2 = 0$$

и пять сверхпроводящих

$$2) \quad \xi_1 = 0, \quad F_{,2} = 0,$$

$$3) \quad \xi_2 = 0, \quad F_{,1} = 0,$$

$$4) \cos 2\varphi = -1 \ (\varphi = \pi/2), \quad F_{,1} - \xi_2^2 F_{,3} = 0, \quad F_{,2} - \xi_1^2 F_{,3} = 0,$$

$$5) \cos 2\varphi = +1 \ (\varphi = 0), \quad F_{,1} + \xi_2^2 F_{,3} = 0, \quad F_{,2} + \xi_1^2 F_{,3} = 0,$$

$$6) \quad \xi_1, \quad \xi_2, \quad \varphi \text{ — любой.} \quad (6)$$

Фазы 2) и 3), определяемые одним комплексным параметром порядка, как и должно быть [10], парамагнитны. Их симметрия

$$G_2 = \mathcal{K} \otimes \{C_2^{x=y} U_1(\pi), \quad RU_1(-2\Omega_2)\},$$

$$G_3 = \mathcal{K} \otimes \{C_2^{x=y}, \quad RU_1(-2\Omega_1)\}, \quad (7a)$$

где в скобках выписаны только генераторы фактор-группы  $G_3/\mathcal{K}$ . Низкотемпературные свойства этих фаз описаны в [10]. Еще одна парамагнитная фаза определяется симметрией

$$G_5 = \mathcal{K} \otimes \{E, \quad RU_1(-2\Omega_1)\}. \quad (7b)$$

Как видно из (6), несмотря на то что задача определяется двумя независимыми «парамагнитными» параметрами порядка, возможны две структуры Бозе-конденсата с постоянной, не зависящей от внешних условий разностью фаз между комплексными параметрами порядка,

одна из которых с антиферромагнитной структурой. Симметрия этой фазы<sup>2</sup>

$$G_4 = \mathcal{K} \otimes \{U_1(2\Omega_1 - \pi)C_2^{x=y}R\}. \quad (7c)$$

Она и обсуждается в различных работах как наиболее вероятная структура для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ . Поскольку рассматриваются только функции, образующие базис для  $g$ -представлений  $D_{4h}$  (предполагается синглетное спаривание [10]), то термодинамические характеристики фаз 2) и 4) при низких температурах не отличаются и определяются линиями нулей в спектре элементарных возбуждений на поверхности Ферми при  $k_x^2 = k_y^2$ . Заметим также, что фаза 6) тоже магнитоактивная и характеризуется вектором с трансформационными свойствами ферромагнитного момента.

## 2. Фазовая диаграмма

Условия устойчивости каждой из фаз можно записать в общем виде

- 1)  $F_{,1} \geq 0, \quad F_{,2} \geq 0,$
- 2)  $(\xi_2^2 \geq 0), \quad F_{,22} \geq 0, \quad F_{,1} \geq \xi_2^2 |F_{,3}|,$
- 3)  $(\xi_1^2 \geq 0), \quad F_{,11} \geq 0, \quad F_{,2} \geq \xi_1^2 |F_{,3}|,$
- 4)  $(\xi_1^2 \geq 0, \xi_2^2 \geq 0), \quad F_{,3} \geq 0,$

$$\begin{aligned} & F_{,11}F_{,22} - (F_{,12} - F_{,3})^2 + \xi_1^2(-2F_{,11}F_{,23} + 2F_{,13}(F_{,12} - F_{,3})) + \\ & + \xi_2^2(-2F_{,13}F_{,22} + 2F_{,23}(F_{,12} - F_{,3})) + \xi_1^2\xi_2^2(2F_{,13}F_{,23} - 2F_{,33}(F_{,12} - F_{,3})) + \\ & + \xi_1^4(F_{,11}F_{,33} - F_{,13}^2) + \xi_2^4(F_{,22}F_{,33} - F_{,23}^2) \geq 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Для фазы 5) условия устойчивости можно получить из условий устойчивости фазы 4) заменой знака у всех производных по  $J_3$ . Из этих общих условий видно, что если  $\xi_1$  и  $\xi_2$  не малы, то для описания границ потери термодинамической устойчивости фаз необходимо рассматривать модель, в которой  $F_{,13} \neq 0$  и  $F_{,23} \neq 0$ . Однако при условиях, близких к условиям стабильности высокосимметричной фазы, топологически правильный вид фазовой диаграммы можно получить, ограничившись самой примитивной, но еще структурно устойчивой моделью

$$F = a_1 J_1 + a_2 J_1^2 + b_1 J_2 + b_2 J_2^2 + c_1 J_3 + c_2 J_3^2. \quad (9)$$

Здесь  $a_1, b_1, c_1$  по обычным правилам [16,17] определяют деформацию, а  $a_2, b_2, c_2$  определяют один модальный параметр нормальной формы  $F$  [16,17]. В силу глобальной минимальности неравновесного потенциала Ландау (9)  $a_2 > 0, b_2 > 0, c_2 > 0$ .

<sup>2</sup> Для задач описания свойств однородного Бозе-конденсата всегда можно выбрать «домен», в котором  $U_1(2\Omega_i) = E$ .

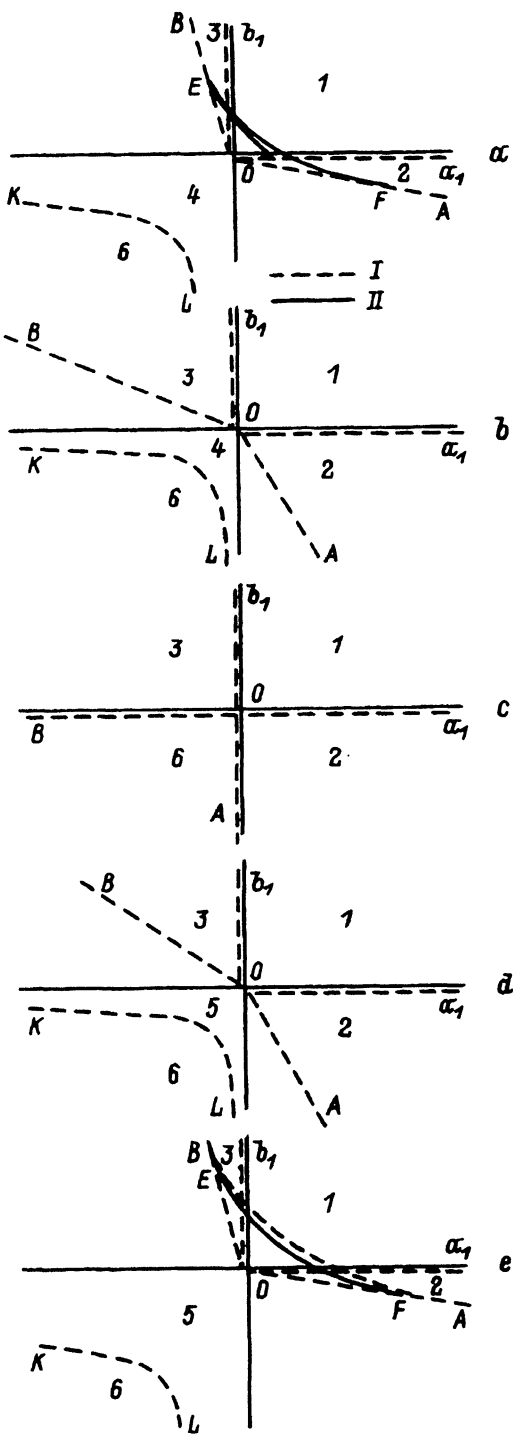


Рис. 1. Сечения фазовой диаграммы, соответствующей потенциалу (9), плоскостью  $c_1 = \text{const}$  при различных значениях  $c_1$ . Расположение фаз обозначено цифрами в соответствии с (6). I — границы областей устойчивости фаз, II — линии переходов первого рода.  
 $c_1 > 0, 4a_2b_2 - c_1^2 < 1$  (a);  
 $c_1 > 0, 4a_2b_2 - c_1^2 > 0$  (b);  
 $c_1 = 0$  (c);  
 $c_1 < 0, 4a_2b_2 - c_1^2 > 0$  (d);  
 $c_1 < 0, 4a_2b_2 - c_1^2 < 0$  (e).  
 Уравнения линий имеют следующий вид: прямая OA,  $a_1 = -(|c_1|/2b_2)b_1, b_1 < 0$ ; прямая OB,  $a_1 = -(2a_2/|c_1|)b_1, a_1 < 0$ ; гипербола KL,  $a_1b_1 = (2a_2b_2/c_2)c_1, a_1 < 0, b_1 < 0$ ; кривая EF задается параметрически

$$a_1 + 2a_2\xi_1^2 - c_1\xi_2^2 + 2c_2\xi_1^2\xi_2^4 = 0,$$

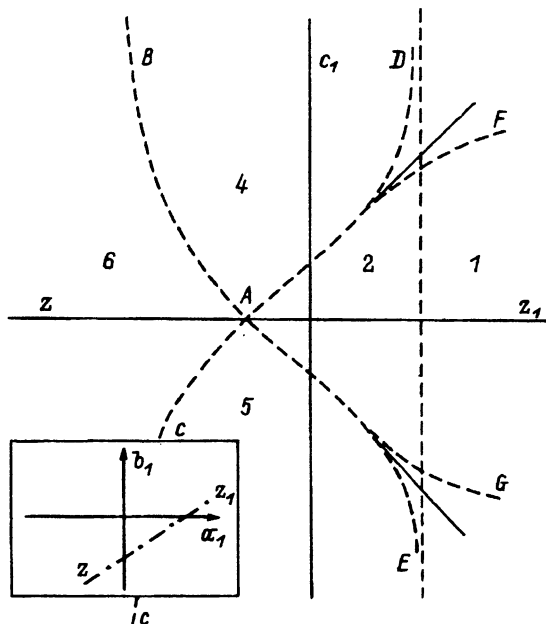
$$b_1 + 2b_2\xi_2^2 - c_1\xi_1^2 + 2c_2\xi_1^4\xi_2^2 = 0,$$

$$4(a_2 + c_2\xi_2^4)(b_2 + c_2\xi_1^4) - (4c_2\xi_1^2\xi_2^2 - c_1)^2 = 0,$$

в области изменения параметров  $\xi_1$  и  $\xi_2$

$$0 \leq \xi_1^4 \leq \frac{1}{c_2} \frac{c_1^2 - 4a_2b_2}{4a_2},$$

$$0 \leq \xi_2^4 \leq \frac{1}{c_2} \frac{c_1^2 - 4a_2b_2}{4b_2}.$$



**Рис. 2.** Сечение  $zz_1$  фазовой диаграммы потенциала (9) плоскостью, параллельной оси  $c_1$ .

Области устойчивости фаз обозначены аналогично рис. 1. 1 — справа от прямой  $ED$ , 2 — внутри  $DAE$ , 4 — внутри  $BAF$ , 5 — внутри  $CAG$ , 6 — слева от  $BAC$ .

В рамках потенциала (9) можно методами [14] проследить эволюцию фазовой диаграммы в пространстве коэффициентов наравновесного потенциала (9) при различных соотношениях между ними (рис. 1,2).

Как видим, сверхпроводящая фаза 4), если она реализуется в каком-либо веществе, только в одной единственной четырехфазной точке перехода второго рода  $a_1(p, T) = 0$ ,  $b_1(p, T) = 0$  может непосредственно граничить с нормальной фазой. Любое усложнение модели не может изменить этот феноменологический результат, так как он является прямым следствием соотношения симметрией фаз 4) и 1) [14]. Следовательно, соотношения (8) позволяют, измеряя различные аномалии термодинамических характеристик при фазовом переходе в сверхпроводящее состояние, установить, соответствуют ли они переходу в  $s+id$  состояние. В частности, если бы удалось из эксперимента установить вид зависимости  $a_1(p, T)$ ,  $b_1(p, T)$  и  $c_1(p, T)$ , то на основании (8) можно было бы заключить, должен ли быть непосредственный переход первого рода в фазу  $s+id$  или сначала должна возникнуть фаза  $s$  или  $d$ , как предполагается в [4].

## Список литературы

- [1] Dagotto E., Riera J. // High  $T_c$  Update. 1992. V. 6. N 22; Coffey D., Coffey L. // High  $T_c$  Update. 1992. V. 6. N 22; Hardy W.N. et al. // High  $T_c$  Update. 1993. V. 7. N 4; Arberg P. et al. // High  $T_c$  Update. 1993. V. 7. N 4; Shen Z.-X. et al. // High  $T_c$  Update. 1993. V. 7. N 5; Li Q.P. et al. // High  $T_c$  Update. 1993. V. 7. N 5. etc.
- [2] Shen Z.-X., Dessau D.S., Wells B.O. et al. // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70(10). P. 1553-1556.
- [3] Pines D. et al. // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 108-111; Monien H., Pines D. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 6297; Monien H., Pines D., Millis A. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 167.
- [4] Li Q.P., Jount R. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47(1). P. 530-533.
- [5] Annet J., Goldenfeld N., Renn S. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 2778.
- [6] Arfi B. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 523-525.
- [7] Kaplan S.G., Noh T.W., Sievers A.J. et al. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47(9). P. 5300-5315.
- [8] Arfi B., Bahlouly H., Pethick C.J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. P. 2206; Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 8959.
- [9] Micnas R., Ranninger J., Robaskievich S. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 16. P. 11653-11662; 1988. V. 37. N 16. P. 9410-9422; J. Phys. C. 1988. V. 21. P. 2145-2151.
- [10] Воловик Г.Е., Горьков Л.П. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88(4). С. 1412-1427.
- [11] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976. С. 584.
- [12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. С. 752.
- [13] Гуфан Ю.М. // ФТТ. 1971. Т. 13. № 1. С. 225.
- [14] Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. М.: Наука, 1982. С. 302.
- [15] Гуфан Ю.М., Сахненко В.П. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 7. С. 1915-1922.
- [16] Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и ее приложения. М.: Мир, 1980. С. 607.
- [17] Прохоров А.М., Гуфан Ю.М., Широков В.Б. и др. // ДАН СССР. 1984. Т. 277. № 6. С. 1369-1371.

Северо-Кавказский научный центр высшей школы  
Ростов-на-Дону

Поступило в Редакцию  
1 декабря 1993 г.