КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 548.537

МАГНИТНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

А. А. Голуб, В. В. Кабанов, О. Ю. Маштаков

Открытые недавно [1] оксидные соединения, являющиеся сверхпроводниками с высокой T_c, обладают целым рядом интересных физических свойств, в частности антиферромагнитным упорядочением [2] в нормальном состоянии, которое резко исчезает при появлении дырок в плоскостях CuO_2. К настоящему времени эксперимент не дает достаточно четкой идентификации заполняемых дырками орбиталей (либо антисвязывающие $3d_{x^2-y^2}-p_{xy}$-орбитали, либо p_σ (p_π)-орбитали в плоскости xy). В этой работе на основе построения вариационной волновой функции изучаются различные типы двухчастичных возбуждений в ВТСП в зависимости от величины обменного взаимодействия J. При этом предполагается, что движение дырок связано с p_σ-состояниями.

Редуцированный гамильтониан, описывающий модель Эмери для p- и d-состояний, приводится в работах [3, 4] и с учетом разбиения на две подрешетки имеет вид [5]

$$H = H_t + H_J, \quad H_J = J \sum_{j \in A,\, \gamma} \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+2\hat{x}-\tau_\gamma},$$

$$H_t = 2t \sum_{j \in A} a^{+(1)}_{j\sigma} (1 + 2\mathbf{S}_j \sigma)\, a^{(1)}_{j\sigma'} + \frac{t}{2} \sum_{\gamma\gamma'\alpha\alpha'} \sum_{j \in A} a^{+(\alpha)}_{j\sigma} (1 + 2\mathbf{S}_{j+2\hat{x}-\tau_\gamma}\sigma) \times$$

$$\times\, a^{(\alpha')}_{j+\tau_{\gamma'}-\tau_\gamma \sigma} B_{\gamma\alpha} B_{\gamma'\alpha'}, \tag{1}$$

где

$$a^{+(\delta)}_{j\sigma} = \sum_{\alpha} B_{\alpha\delta} \hat{\mathbf{p}}^{+(\alpha)}_{j\sigma},$$

$$\hat{\mathbf{p}}^{+}_{j\sigma} = (p^{+}_{j+\hat{y}},\ p^{+}_{j-\hat{x}},\ p^{+}_{j-\hat{y}},\ p^{+}_{j+\hat{x}}),$$

$$\tau_1 = 2\hat{x} - 2\hat{y},\ \tau_2 = 4\hat{x},\ \tau_3 = 2\hat{x} + 2\hat{y},\ \tau_4 = 0,$$

σ_α — матрицы Паули, $p^{+}_{i\sigma}$ — операторы рождения дырок в оболочке кислорода, $\mathbf{S}_j$ — операторы спина на ионах меди. Матрица B, составленная из базисов неприводимых представлений группы, выписана в работе [5]. Для анализа биполяронного состояния дырок выбираем пробную функцию с фиксированным полным спином $[H, S_{\text{tot}}]=0$. Отметим, что феноменологически возбуждения такого типа рассматривались в [6]. Выбранная функция соответствует триплету и имеет следующий вид (оба спина направлены вверх):

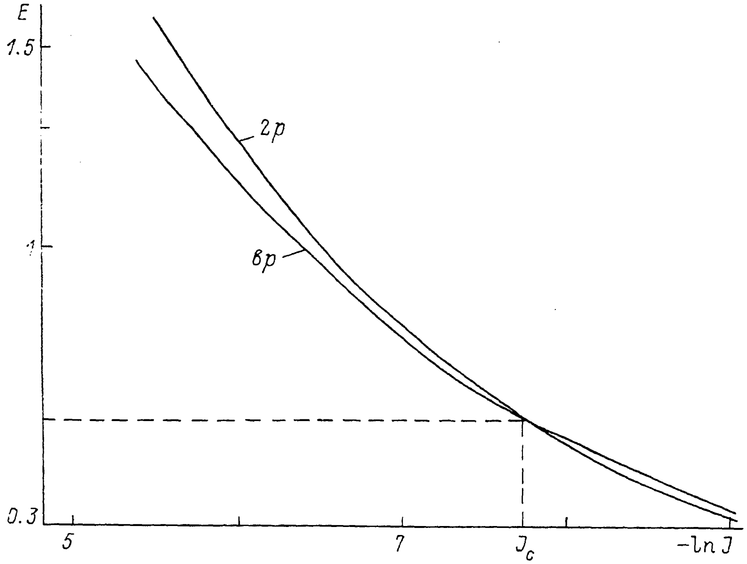
$$|\psi\rangle = \frac{\chi_0}{N_R} \sum_{j \leqslant N_R} f(\tau)\, \varphi^{+}_{j-\tau/2} \varphi^{+}_{j+\tau/2} \exp\left[-\frac{a\pi}{N_R}\left(|\mathbf{j}|^2 + \frac{\tau^2}{4}\right)\right] |G\rangle,$$

$$\varphi^{+}_{i} = a^{+(1)}_{i\uparrow} \sqrt{1-z} - \sqrt{\frac{z}{2}}\, a^{+(1)}_{i\downarrow} b^{+}_{i} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{z}{2}} \sum_{\gamma\alpha} B_{\gamma\alpha} a^{+(\alpha)}_{i\downarrow} b^{+}_{i+2\hat{x}-\tau_\gamma},$$

$$f(\tau)=-f(-\tau),\quad f(\tau_1)\,f(\tau_2)=\frac{\tau_1\tau_2}{|\tau_1|\,|\tau_2|},\quad b_i^+=S_i^+,$$

$$b^+_{i+2\hat{x}}=\begin{cases} S^+_{i+2\hat{x}}, & i\leqslant N_R,\\ S^-_{i+2\hat{x}}, & i>N_R,\end{cases} \tag{2}$$

$z=0.46$; N_R — число спинов внутри круга радиуса $R=\sqrt{N_R/\pi}$ является, как и α, вариационным параметром модели, согласно которой возбуждение, сформированное двумя дырками, движется по ферромагнитному фону в круге радиуса R, окруженном неелевским вакуумом. Вектор $|G\rangle$ описывает выбранный здесь вакуум для спинов меди — ферромагнитный внутри круга радиуса R и антиферромагнитный вне его.



Зависимость полной энергии от обменной константы J (все величины выражены в единицах t, начало отсчета энергии -10.36).

Для анализа синглетного связанного состояния двух дырочных возбуждений, которые движутся по антиферромагнитному фону медной решетки, пробную функцию выберем в виде

$$|\psi_a\rangle=\frac{\tilde{\chi}_0}{\sqrt{2N}}\sum_{i\in A,\,\tau}F(\tau)\,\varphi^+_{i\uparrow}\varphi^+_{i+\tau\downarrow}\,|G\rangle,$$

$$\varphi^+_{i\uparrow}=\bar{z}_1 a^{+(1)}_{i\uparrow}+\bar{z}_2 a^{+(1)}_{i\downarrow}b^+_i+\xi\sum_{\gamma\gamma'\alpha}B_{\gamma\alpha}a^{+(\alpha)}_{i\uparrow}b^+_{i+\tau_{\gamma'}-\tau_\gamma}b^+_{i+2\hat{x}-\tau_\gamma},$$

$$\varphi^+_{i\downarrow}=\bar{z}_1\sum_{\gamma\alpha}B_{\gamma\alpha}a^{+(\alpha)}_{i+\tau_\gamma\downarrow}+\bar{z}_2\sum_{\gamma\alpha}B_{\gamma\alpha}a^{+(\alpha)}_{i+\tau_\gamma\uparrow}b^+_{i+2\hat{x}}+\xi\sum_{\gamma\gamma'\alpha}B_{\gamma\alpha}a^{+(\alpha)}_{i+\tau_\gamma\downarrow}b^+_{i+2\hat{x}-\tau_{\gamma'}+\tau_\gamma}b^+_{i+\tau_\gamma}, \tag{3}$$

где $\bar{z}_1^2+\bar{z}_2^2+16\xi^2=1$, $F(\tau)$ — неизвестная функция (мы полагаем ее аксиально-симметричной).

Вычисления с использованием пробной функции (2) и аналогичной пробной функции для двух раздельных поляронов приводят к следующим выражениям:

$$E_{bp}=-10.36+6.05\,\frac{\alpha\exp(-\alpha)}{1-\exp(-\alpha)}\,\frac{1}{\sqrt{N_R}}+$$
$$+\frac{\alpha\,(1-\exp(-\alpha))}{N_R}\left(2.87+0.71\pi\ln\frac{N_R}{\alpha}\right)+4N_R J,$$

$$E_{2p}=-10.36+7.98\,\frac{\alpha\exp(-\alpha)}{1-\exp(-\alpha)}\,\frac{1}{\sqrt{N_R}}+4.43\,\frac{\alpha\,(1-\exp(-\alpha))}{N_R}+8N_R J. \tag{4}$$

Минимизация выражений (4) по α и N_R показывает, что область существования спинового биполярона, как это следует из рисунка, определяется условием $\bar{J}=J/t > \bar{J}_c=4.42\cdot 10^{-4}$. Следует отметить, что в пределе $J\to 0$ наиболее выгодным является делокализованное решение ($\alpha\to 0$, $f(\tau)\sim 1/\sqrt{N_R}$).

Для синглета с выбранной функцией $F(\tau)\sim \exp[-(\tau-\tau_0)^2/2\Delta^2]$ анализ проводился численно при малых $\bar{J}<0.3$. Он показал, что наиболее выгодным является случай $\tau_0=0$ (т. е. обе дырки находятся на атомах кислорода, окружающих узел медной подрешетки). С уменьшением J радиус этого состояния возрастает. Мы получили, что при $\bar{J}<\bar{J}_c=0.24$ связанного состояния не возникает, что, по-видимому, обусловлено выбором пробной функции в двухмагнонном приближении, в то время как при $J\to 0$ может возбуждаться много магнонов [4].

Таким образом, в работе показано, что в рамках изложенной модели возможно образование триплетных возбуждений поляронного типа (биполяронов), которые при уменьшении константы обмена J распадаются на отдельные поляроны. В области достаточно больших J образуется синглетное связанное состояние с волновой функцией вида (3). Радиус локализации состояния возрастает с уменьшением J.

Авторы благодарны Л. И. Глазману и А. С. Александрову за ценные критические замечания.

Список литературы

[1] Bednorz J. G., Muller K. A. // Z. Phys. B—Condensed Matter. 1986. V. 64. N 2. P. 189—193.
[2] Vaknin D. et al. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 26. P. 2802—2805.
[3] Zaanen J., Oles A. M. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 16. P. 9423—9438.
[4] Глазман Л. И., Иоселевич А. С. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. № 9. С. 464—467.
[5] Голуб А. А., Маштаков О. Ю., Котруцэ В. И. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 6. С. 2082—2087.
[6] Liu L. // Solid State Commun. 1988. V. 68. N 2. P. 269—270.

Отдел энергетической кибернетики
АН МССР
Кишинев

Поступило в Редакцию
6 апреля 1990 г.

УДК 537.312.8

© *Физика твердого тела, том 33, № 6, 1991*
Solid State Physics, vol. 33, N 6, 1991

АВТОМОДЕЛЬНЫЙ РЕЖИМ ЭВОЛЮЦИИ ТЕРМОМАГНИТНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

Н. А. Тайланов, С. Кучкаров

Вопрос о динамике развития тепловых и электромагнитных возмущений в сверхпроводниках, охлаждаемых при низких (4.2 K) температурах, неоднократно рассматривался в литературе [1]. В настоящее время в связи с открытием высокотемпературной сверхпроводимости приобрело актуальность изучение динамики развития термомагнитных возмущений сверхпроводящего состояния при азотных температурах.

В данной работе исследован автомодельный режим эволюции тепловых и электромагнитных возмущений в высокотемпературных сверхпроводниках.

Эволюция во времени тепловых T и электромагнитных E возмущений в сверхпроводящем состоянии определяется уравнением теплопроводности Максвелла